

Gemeinsamer Schlussbericht

GEO.KW

Kopplung des geothermischen Speicherpotenzials mit den wechselnden Anforderungen des urbanen Energiebedarfs zur effizienten Nutzung der regenerativen Energiequelle Grundwasser für die dezentrale Kälte- und Wärmebereitstellung in der Stadt

Das diesem Bericht zugrundeliegende Vorhaben wurde mit Mitteln des Bundesministeriums für Wirtschaft und Klima gefördert. Die Verantwortung für den Inhalt dieser Veröffentlichung liegt bei den Autoren.

Förderkennzeichen: 03ETW004 A/B/C

DOI: 10.14459/2022md1692003

Gefördert durch:



Bundesministerium
für Wirtschaft
und Klimaschutz

aufgrund eines Beschlusses
des Deutschen Bundestages

Inhaltsverzeichnis

I	KURZE DARSTELLUNG	9
I.1	AUFGABENSTELLUNG	9
I.2	VORAUSSETZUNGEN, UNTER DENEN DAS VORHABEN DURCHFÜHRT WURDE	9
I.2.1	<i>TUM-HYD & RKU: Relevante Vorarbeiten für das Projekt GEO.KW</i>	9
I.2.2	<i>TUM-ENS: Relevante Vorarbeiten für das Projekt GEO.KW</i>	11
I.2.3	<i>US-SGS: Relevante Vorarbeiten für das Projekt GEO.KW</i>	12
I.2.4	<i>BADW-LRZ: Relevante Vorarbeiten für das Projekt GEO.KW</i>	13
I.2.5	<i>SWM Services GmbH: Relevante Vorarbeiten für das Projekt GEO.KW</i>	14
I.3	PLANUNG UND ABLAUF DES VORHABENS	15
I.3.1	<i>Projektzeitraum und kostenneutrale Verlängerung</i>	15
I.3.2	<i>Ergänzung: Web-Applikation</i>	15
I.3.3	<i>Erreichen der Meilensteine und Projektziele</i>	16
I.3.4	<i>Projekt-Veranstaltungen</i>	17
I.3.5	<i>Weiterverbreitung der Projektinhalte</i>	17
I.4	WISSENSCHAFTLICHER UND TECHNISCHER STAND, AN DEN ANGEKNÜPFT WURDE	18
I.4.1	<i>Angabe bekannter Konstruktionen, Verfahren und Schutzrechte, die für die Durchführung des Vorhabens benutzt wurden</i>	21
I.4.2	<i>Angabe der verwendeten Fachliteratur sowie der benutzten Informations- und Dokumentationsdienste</i>	23
I.5	VERWENDETE DOKUMENTATIONSDIENSTE	36
I.6	ZUSAMMENARBEIT MIT ANDEREN STELLEN	36
I.6.1	<i>Assoziierte Projektpartner</i>	36
I.6.2	<i>Weitere Zusammenarbeit</i>	38
I.6.3	<i>Wissenschaftlicher Austausch</i>	40
II	EINGEHENDE DARSTELLUNG	41
II.1	VERWENDUNG DER ZUWENDUNG UND ERZIELTE ERGEBNISSE IM EINZELNEN, MIT GEGENÜBERSTELLUNG DER VORGEGEBENEN ZIELE	41
II.1.1	<i>Dynamische Modellierung des thermischen Transports im Grundwasser unter Berücksichtigung städtischer Infrastruktur (TUM-HYD)</i>	43
II.1.1	<i>Optimierte Planung des Stadtenergiesystems (TUM-ENS)</i>	70
II.1.2	<i>Kopplung des thermischen Transports im Grundwasser mit der Entwicklung des Stadtenergiesystems (US-SGS)</i>	91
II.1.3	<i>Optimierung, Parallelisierung und Portierung der Simulationsumgebung auf Hochleistungsrechner (BADW-LRZ)</i>	102
II.1.4	<i>Webapplikation als Frontend zur Nutzung der Ergebnisse</i>	107
II.1.5	<i>Optimierungsszenarien</i>	113
II.1.6	<i>Zusammenfassung der Ergebnisse und wichtigsten Erkenntnisse</i>	122
II.2	WICHTIGSTE POSITIONEN DES ZAHLENMÄßIGEN NACHWEISES	124
II.3	NOTWENDIGKEIT UND ANGEMESSENHEIT DER GELEISTETEN ARBEIT	124
II.4	VORAUSSICHTLICHER NUTZEN, INSBESONDERE VERWERTBARKEIT DES ERGEBNISSES IM SINNE DES FORTGESCHRIEBENEN VERWERTUNGSPANS	125
II.4.1	<i>Erfindungen, Schutzrechte</i>	126
II.4.2	<i>Wirtschaftliche Erfolgsaussichten</i>	126
II.4.3	<i>Wissenschaftliche und/oder technische Erfolgsaussichten</i>	128
II.4.4	<i>Wissenschaftliche und wirtschaftliche Anschlussfähigkeit</i>	129
II.5	WÄHREND DER DURCHFÜHRUNG DES VORHABENS DEM ZE BEKANNT GEWORDENEN FORTSCHRITT AUF DEM GEBIET DES VORHABENS BEI ANDEREN STELLEN	130
II.6	ERFOLGTE ODER GEPLANTE VERÖFFENTLICHUNGEN DES ERGEBNISSES	130

II.6.1	<i>Veröffentlichungen / Papers / Journals / Peer-reviewed Proceedings</i>	130
II.6.2	<i>Konferenzen / Projektvorstellungen / Workshops</i>	131
II.6.3	<i>Webseiten und -applikationen</i>	132
ANHANG		133
A.1	LITERATURVERZEICHNIS	133
A.2	AUFTRÄGE	136
A.2.1	<i>bitfactory</i>	136
A.2.2	<i>ENIANO GmbH</i>	136

Abbildungsverzeichnis

Abbildung 1: 3D-Untergrundmodell des Großraums München (oben), Grundwassertemperaturen (unten links) und grundwassererfüllte Mächtigkeit (verfügbarer Grundwasser-Volumenstrom, unten rechts) zum Zeitpunkt April 2014 in der Stadt München (Lehrstuhl Hydrogeologie/TUM, 2015). Auffällig ist hier die in der Stadt heterogene Verfügbarkeit des Grundwassers und der unterschiedlichen Temperaturen.	10
Abbildung 2: Beispiel Prozessflussdiagramm, das ein urbs-Modell darstellt. Hierbei werden benutzerdefinierte Güter (Gas, Wind, Strom...) ineinander durch verschiedene Technologien (CHP, Windturbine...) umgewandelt (Dorfner, 2016).	11
Abbildung 3: Schematische Darstellung des Softwarekonzeptes und des Funktionsumfangs der Kopplungs-bibliothek preCICE. preCICE kann mittels eines minimalinvasiven Adaptercodes von beliebigen Löserkomponenten angesprochen werden und stellt numerische Verfahren zur Datenabbildung zwischen nicht-konformen Diskretisierungen in Raum und Zeit, robuste und effiziente iterative Lösungsverfahren sowie skalierbare Kommunikationsroutinen zum Datenaustausch zwischen jeweils parallelen Simulationscodes zur Verfügung (Bungartz et al., 2016).	13
Abbildung 4: Bestehendes Dükersystem mit Einbauten für die Fernkälteleitung zur Kälteversorgung des BMW-FIZ als Beispiel für eine effektive Nutzung urbaner Strukturen bei der Energieversorgung (Arnold, 2006).	14
Abbildung 5: Dependencies der verwendeten Komponenten	23
Abbildung 6: a) Höhenlage der Quartärbasis aus dem GEPO-Projekt und b) Grundwassergleichenplan aus der Stichtagsmessung August 2014.	45
Abbildung 7: Stadtweite Datensätze der a) quartären Grundwassermächtigkeit, b) Grundwassertemperatur 1 m unter Grundwasserstand, c) Darcy Geschwindigkeit und d) des Flurabstands während der Stichtagsmessung im April 2014.	46
Abbildung 8: a) In der Modellierung berücksichtigte unterirdische Infrastruktur-Objekte mit angeschlossenen Dükern und b) berechnete monatliche Grundwasserneubildung, hier Mittelwerte für Juni.	49
Abbildung 9: a) Modellierter Sommer-Lufttemperatur 2 m über Grund um 4 Uhr morgens nach (Funk et al. 2014) und b) Oberflächenversiegelung.	50
Abbildung 10: Typische saisonale Schwankung der Grundwassertemperatur mit zunehmender Tiefe pro Monat über ein Jahr (Böttcher und Zosseder, 2022).	51
Abbildung 11: Ablauf der Erstellung des CAD-Modells mit a) Erstellung der Modellgeometrie, b) Partitionieren der Oberflächengewässer, c) Partitionieren der unterirdischen Infrastruktur und d) Partitionieren der Brunnen.	54
Abbildung 12: Detailansicht eines Infrastrukturelements mit Unterdükerung, hier U-Bahn-Tunnel mit Bahnhof	55
Abbildung 13: Exemplarische zweidimensionale Darstellung der Konvertierung einer Delaunay-Triangulation (schwarz) in den dualen Voronoi-Graphen (rot).	56
Abbildung 14: Nutzung der viskosen Schichten (grün) als Mittel, um die Geometrie einer Infrastruktur (Delaunay: gelb und Voronoi: blau transparent) und zusätzlich die Grenzfläche zwischen Quartär (pink) und Tertiär (hellblau) nach der Konvertierung zu erhalten.	58
Abbildung 15: Konvertierung des Tetraeder Netzes in ein Polyeder Netz durch die Berechnung des Voronoi-Diagramms am Beispiel eines Tunnel-Abschnitts und eines Brunnens.	59
Abbildung 16: Beispielhafte Zusammenfassung der in der Modellierung integrierten Einflüsse und Materialien.	60
Abbildung 17: Kontinuierliche (rot) und abschnittsweise lineare (violett) Rangbedingung der Isar.	63
Abbildung 18: Kopplungsschema und Datenaustausch zwischen PFLOTRAN und PEST.	64
Abbildung 19: Verteilung der Pilotpunkte (grün) auf halber Länge der Triangulationskanten zwischen den Messungen (blau) und am Modellrand, sowie bestehende Pumpversuchsauswertungen in Region 30.	66
Abbildung 20: Konvertierung der geologischen 3D-Modellierung (aus dem GeoPot Projekt der TUM-HYD) in k_f -Wert Bereiche und bevorzugte Werte.	66
Abbildung 21: Exemplarisches Ergebnis der Kalibrierung des quartären und tertiären k_f -Wertfelds vom Region 30.	67
Abbildung 22: IST-Zustand der Beispielregion mit allen bestehenden thermischen Nutzungen, inklusive ihrer Nutzungsart in Region 30.	68

Abbildung 23: Alle im Standort vor-optimierten hypothetischen Brunnenpaare der Beispielregion 30, die in der Optimierung berücksichtigt werden.	69
Abbildung 24: Unterteilung des Stadtgebiets in einzelne PFLOTRAN-Modelle zur gekoppelten Simulation bzw. Optimierung mit der Lage der Beispielregion 30.	70
Abbildung 25: Gebäudetypen in München - prozentual	71
Abbildung 26: Kumulierte jährliche Wärmenachfrage je Gebäude Münchens für das Jahr 2020	72
Abbildung 27: Kumulierte jährliche Wärmenachfrage je Gebäude Münchens für das Jahr 2050	72
Abbildung 28: Gesamtwärmenachfrage Münchens für ein Jahr	73
Abbildung 29: Gesamtwärmenachfrage Münchens für eine Woche im April	74
Abbildung 30: Kumulierte jährliche Kältenachfrage je Gebäude Münchens für das Jahr 2020	75
Abbildung 31: Kumulierte jährliche Kältenachfrage je Gebäude Münchens für das Jahr 2050	75
Abbildung 32: Die Gesamtkopplung	79
Abbildung 33: Neuer iterativer Optimierungsansatz für die Gesamtkopplung	80
Abbildung 34: Hinzufügen mehrerer neuer GWWP (links) im Vergleich zum Hinzufügen eines neuen GWWP (rechts) pro urbs-Region in einer äußeren Optimierungsiteration	81
Abbildung 35: Konzept für die Dekomposition des Gesamtproblems	82
Abbildung 36: Flexibilität bei der Erzeugung von urbs-Regionen aus Clustern	83
Abbildung 37: Erstellung von "must-link"-Einschränkungen	84
Abbildung 38: Clustering von Förderbrunnen mit dem eingeschränkten k-means-Algorithmus	85
Abbildung 39: Konkave Hüllen von Clustern	85
Abbildung 40: Erstellung von urbs-Regionen. Die Brunnen sind je nach Zugehörigkeit zu verschiedenen urbs-Regionen unterschiedlich gefärbt. Zusätzlich werden zur besseren Visualisierung konkave Hüllen von urbs-Regionen abgebildet.	86
Abbildung 41: Parallelisierungskonzept für urbs-Regionen	87
Abbildung 42: Optimales Brunnenlayout: (a) Brunnenpositionen durch Optimierungsiterationen. Förder- und Schluckbrunnen sind mit Kreisen bzw. Kreuzen dargestellt. Die Farben in der Legende stellen Optimierungsiterationen dar, wobei Dunkelblau und Gelb der ersten bzw. letzten Iteration (Lösung) entsprechen. (b) Grundwassertemperaturfeld und Brunnenstandorte für die anfängliche (links) und endgültige/optimale (rechts) Brunnenanordnung. (übernommen aus Halilovic, 2022))	88
Abbildung 43: Optimierung von Brunnenstandorten mit analytischen Modellen: Alle potenziellen Brunnenstandorte (oben) und die ausgewählten/optimalen Brunnenstandorte (unten)	90
Abbildung 44: Informationsfluss während der Simulations-Kopplung.	91
Abbildung 45: Zusammenspiel zwischen der inneren und der äußeren Iteration während des Kopplungsprozesses	95
Abbildung 46: Data Mapping	97
Abbildung 47: 1. Konzept zur Einteilung von urbs Regionen nach Rängen (Ranks)	100
Abbildung 48: Erste äußere Iteration (outer Iteration) in der Kopplung	100
Abbildung 49: Zweite äußere Iteration in der Kopplung	101
Abbildung 50: Dritte äußere Iteration in der Kopplung	101
Abbildung 51: Vierte äußere Iteration in der Kopplung	101
Abbildung 52: Endgültige Lösung des gekoppelten Problems	102
Abbildung 53: Grafische Darstellung der Laufzeit- und Effizienzmessungen von PFLOTRAN für die Test-Meshes auf SuperMUC-NG aus Tabelle 9	103
Abbildung 54: Evolution des internen Zeitschrittes dt (orange) und der in der Simulation verstrichenen Gesamtzeit $time$ (blau) für zwei verschiedene Konfigurationen. Links: Gewünschtes Verhalten mit bis kurz vor Simulationsende monoton ansteigendem Zeitschritt und schnellem Erreichen der angegebenen Endzeit. Rechts: Numerische Instabilität erzeugt ein Einbrechen des Zeitschritts und ein Stagnieren des Simulationsfortschrittes.	104
Abbildung 55: Evolution des internen Zeitschrittes dt (grün) und der in der Simulation verstrichenen Gesamtzeit $time$ (blau) für zwei verschiedene Modelle mit unterschiedlicher Brunnenpositionierung.	104
Abbildung 56: Temperatur- und Druckgradienten-Plots können helfen, problematische Stellen im Modell zu erfassen und Plausibilitäts-Checks für Abbildung 56: Temperatur- und Druckgradienten-Plots (links	

graduelle Skala, rechts Contour-Plot) können helfen, problematische Stellen im Modell zu erfassen und Plausibilitäts-Checks für das physikalische Modell erleichtern.	105
Abbildung 57: PEST workflow: Bis zum Erreichen eines Konvergenzkriteriums wird die PFLOTRAN Simulation mit stets verändernden Parameterfeld iteriert. Dazwischen laufen Unterstützungsskripte zur Formatierung und Zeitreihenanpassung.	106
Abbildung 58: Workflow der parallelen PEST-Kalibrierung	107
Abbildung 59: Startseite der Web-Applikation mit vier Kacheln zur Organisation der Hauptfunktionen.	108
Abbildung 60: Download oder Versand von Grundwasserdaten mittels Rechteck Auswahl.	109
Abbildung 61: Darstellung verschiedener Grundwasserganglinien mit Metadaten im Themenbereich "Messstellen".	110
Abbildung 62: Ergebnis einer Brunnenplanung mit einem Förderbrunnen und 3 Schluckbrunnen mit Bewertung der Machbarkeit.	112
Abbildung 63: Ergebnisse der Energiesystemoptimierung aggregiert für die Stadtteile Münchens.	113
Abbildung 64: REG-30 Modell Grundwassertemperatur im Basis-Szenario mit allen hypothetischen GWWP-Anlagen im Betrieb, dargestellt nach 120 Tagen (konstant 0.1 L/s und 5 K Erwärmung). Überblick für die gesamte Domain (links) und Detailansicht (rechts) jeweils abgebildet in einem Schnitt mittig durch den Grundwasserleiter auf 525 müNN.	118
Abbildung 65: REG-30 Modell Grundwassertemperaturen für die Einzel-Region-Optimierung an Tag 0, 60, 120, 180, 240 und 300.	121
Abbildung 66: REG-30 Modell Grundwassertemperaturen für das Null-Kosten-Szenario (a) und mit Kosten aus der Einzel-Region-Optimierung (b), dargestellt für Tag 360 im Schnitt auf Höhe 525 müNN.	122

Tabellenverzeichnis

Tabelle 1: Meilensteine im Projekt.	16
Tabelle 2: Projekte der TUM, in denen die detaillierten Grundlagendaten für die Grundwassersimulation in der Stadt München entwickelt wurden.	44
Tabelle 3: Annahmen der Datensatzbereinigung mit den für Brunnen und Anlagen genutzten Datenpunkten.	46
Tabelle 4: Relevante SALOME-NETGEN Parameter für das Generieren des delaunay-triangulierten Tetraeder Netzes.	57
Tabelle 5: Definition der Randbedingungen und Materialparameter für die integrierten Elemente und Einflüsse.	60
Tabelle 6: Angenommene Kosten für die Wärmeerzeugungsinfrastruktur	76
Tabelle 7: Angenommene Kosten für die Kälteerzeugungsinfrastruktur	78
Tabelle 8: Angenommene Kosten für die Strominfrastruktur	78
Tabelle 9: Laufzeit- und Effizienzmessungen von PFLOTRAN für die Test-Meshes auf SuperMUC-NG	103
Tabelle 10: Ergebnisse des gekoppelten Skalierungstests für PFLOTRAN anhand des REG-30 Modells separat dargestellt für die Gesamtlaufzeit, das Schreiben des VTK-Outputs und der Simulationszeit (Sim-Zeit).	114
Tabelle 11: Ergebnisse des gekoppelten Skalierungstests für urbs anhand des REG-30 Modells separat dargestellt für Tägliche (T) und Wöchentliche (W) Optimierungszeitschritte mit einer variierenden Anzahl von Grundwasserwärmepumpen (GWWP) pro Region. Die Laufzeiten des Linear Programming Solvers (Gurobi), des Wärmepumpen-Selektionsprozesses (Sel. WP), der Energie- und Volumenstromberechnung (Energie) und der kombinierten Gesamtkaufzeit (Total) sind ebenfalls separat aufgelistet.	114
Tabelle 12: REG-30 Modell; Anzahl der inneren Iterationen pro äußerer Iteration (A. Iter.) für die IQN-ILS-Kopplung und den direkten Austausch von Daten. Aufgrund der Modellgröße wurden die Simulationen nach 60 Minuten beendet und es wurde kein VTK-Output geschrieben.	116
Tabelle 13: REG-30 Modell; Anzahl der existierenden ("Exist."), hypothetischen ("Hyp.") und entfernten ("Entf.") GWWP-Anlagen zum Start der gekoppelten Optimierung und am Ende der Einzel-Regionen, Doppel-Regionen, Nicht-gekoppelten und Null-Kosten Test-Szenarien.	119
Tabelle 14: Zusammenfassung der Gesamtkosten und der Fördermittel	124
Tabelle 15: Vorstellung des Projektes auf Konferenzen, Veranstaltungen und Workshops	131

I Kurze Darstellung

I.1 Aufgabenstellung

Gesamtziel des Verbundvorhabens GEO.KW ist es, eine effizientere thermische Nutzung des Grundwassers als Energiequelle zu erreichen. Durch die Schaffung einer flexiblen Planungs- und Optimierungshilfe soll die Umsetzung von Anlagen zur thermischen Grundwassernutzung erleichtert und das Management dieser Energieressource optimiert werden, so dass eine Vernetzung der unterschiedlichen urban-spezifischen Verbraucher in der Stadt mit der Dynamik und dem Speicherpotenzial der Energiequelle umgesetzt wird. Damit ist es möglich, einen höheren Anteil des Kälte- und Wärmebedarfs in der Stadt durch die thermische Grundwassernutzung zu decken und den Primärenergiebedarf zu senken. Neben dem Einsatz von Grundwasserwärmepumpen trägt insbesondere die Substitution von konventioneller Kühlungstechnik durch eine vermehrte Grundwasserkühlung zur Einsparung von Primärenergie und der Limitierung von Treibhausgasemissionen bei. Dies soll im Projekt erreicht werden, indem eine detaillierte dynamische Simulation der Grundwasserströmung und des Wärmetransportes mit einem strategischen Optimierungstool zur Anlagenplanung verbunden wird, um maximale Synergien und damit Energieeinsparungen bei der Nutzung der oberflächennahen Geothermie am Beispiel der Stadt München zu erzielen. Die erarbeiteten Werkzeuge und Methoden sollen nach Erweiterungen oder Modifikationen auch auf andere urbane Räume anwendbar sein.

I.2 Voraussetzungen, unter denen das Vorhaben durchgeführt wurde

In den folgenden Abschnitten werden die für die einzelnen Partner relevanten fachlichen und wissenschaftlichen Vorarbeiten beschrieben, die zur Durchführung des Vorhabens entscheidend waren.

I.2.1 TUM-HYD & RKU: Relevante Vorarbeiten für das Projekt GEO.KW

Bei Vorarbeiten des Lehrstuhls für Hydrogeologie der Technischen Universität München (TUM-HYD) in Zusammenarbeit mit dem Bayerischen Landesamt für Umwelt und der Stadt München wurde im Projekt "Geothermisches Potenzial der Münchner Schotterebene (GEPO)" ein detailliertes Datenmodell für die Stadt München erarbeitet, das alle thermisch relevanten Parameter enthält (Kerl et al., 2012; Zosseder et al., 2013; Lehrstuhl Hydrogeologie/TUM, 2015) (Abbildung 1). Im Zuge dessen wurden über mehrere Jahre von allen relevanten Institutionen die Daten für München zusammengetragen, qualitätskontrolliert und ausgewertet. Dabei wurden u.a. über 30.000 Bohrdaten im städtischen Raum bearbeitet. Zudem wurden diese mit eigenen Feldmessungen ergänzt, wie etwa die Erfassung der Grundwasserhöhen und -temperaturen bei einer groß angelegten Stichtagsmessung. Um erstmals über die gesamte Stadtfläche eine detailgenaue Information über die Grundwasserverhältnisse zu bekommen, wurden dafür über 8.000 Grundwassermessstellen innerhalb einer Woche angefahren und die Grundwasserhöhen erfasst. Ebenfalls aufgenommen wurden sämtliche Informationen über die vorhandenen Grundwassernutzungen als auch relevante urbane Strukturelemente (Dükersysteme, Fernwärmeleitungen, U-Bahn, etc.), die das Grundwasser entweder thermisch oder hydraulisch beeinflussen können. Darüber hinaus wurde ein hochauflösendes, geologisches 3D-Modell erstellt, das den geologischen Untergrund in einem hohen Detaillierungsgrad beschreibt und eine ideale Grundlage für die Beschreibung des thermisch-hydraulischen Grundwasserdynamik liefert.

Um diese Daten zusammenzutragen, zu harmonisieren und um eine hohe Akzeptanz der Auswertungen und der Darstellung der Ergebnisse dieser Projekte zu erlangen, wurde im Projekt GEPO ein Arbeitskreis "Münchner Grundwasser" gegründet. Damit wurde erreicht, dass sich alle relevanten Akteure im Bereich der thermischen Grundwassernutzungen über die Daten sowie aktuelle Entwicklungen und Planungen austauschen, konstruktiv diskutieren und auf verschiedenen Handlungsebenen gemeinsame Strategien entwickeln. Der interdisziplinäre Arbeitskreis setzt sich derzeit aus Vertretern aus den Ministerien und Behörden (Landesamt, Wasserwirtschaftsamt), dem Umweltreferat, Baureferat, Planungsreferat und der Stadtentwässerung der Stadt München, den Stadtwerken München, dem Flughafen München und größerer Ingenieurbüros sowie Forschungseinrichtungen zusammen. Diese bereits initiierte thematische Zusammenarbeit wurde im Projekt GEO.KW genutzt und ausgebaut. Einige dieser Institutionen gehören auch unmittelbar zu den

potenziellen Nutzern der im Projekt GEO.KW zu entwickelnden Planungshilfen, so dass dieser Kreis dazu beigetragen hat, die Planungshilfen nutzerorientiert auszurichten, zu verbreiten und für breitgefächerte Interessensgruppen in die Anwendung zu bringen.

Im vom Lehrstuhl Hydrogeologie der TUM geleiteten EU-Interreg Projekt GRETA wurde eine Methodik entwickelt, um ein statisches, geothermisches Potenzial für die Nutzung von Grundwasserwärmepumpen quantitativ bestimmen zu können, welches zudem alle Anforderungen der aktuellen Genehmigungspraxis berücksichtigt (Zitat TAP-Paper).

Die in den Projekten GEPO erarbeitete detaillierte Datenbasis der relevanten geothermischen Parameter, die im Bodeninformationssystem des Bayerischen Landesamts für Umwelt implementiert und verfügbar gemacht wurde, machte es zusammen mit der im GRETA Projekt entwickelten Methoden möglich, in einem frühen Stadium, eine erste grobe, statische Abschätzung des geothermischen Potenzials für die Stadt München durchzuführen. Bei einer überschlägigen Betrachtung des Ist-Zustandes für die Stadt München konnte abgeschätzt werden, dass unter den gegebenen, standortabhängigen Verhältnissen insgesamt jährlich geschätzte 1,5 TWh Heizleistung und ca. 2 TWh Kühlleistung noch gänzlich ungenutzt durch eine thermische Grundwassernutzung zur Verfügung stehen würden. Über eine zeitlich und räumlich optimierte thermische Nutzung könnte dieses Potenzial zur Deckung des Energiebedarfs der Stadt verwendet und damit eine enorme Menge an Primärenergie und Treibhausgasemissionen eingespart werden.

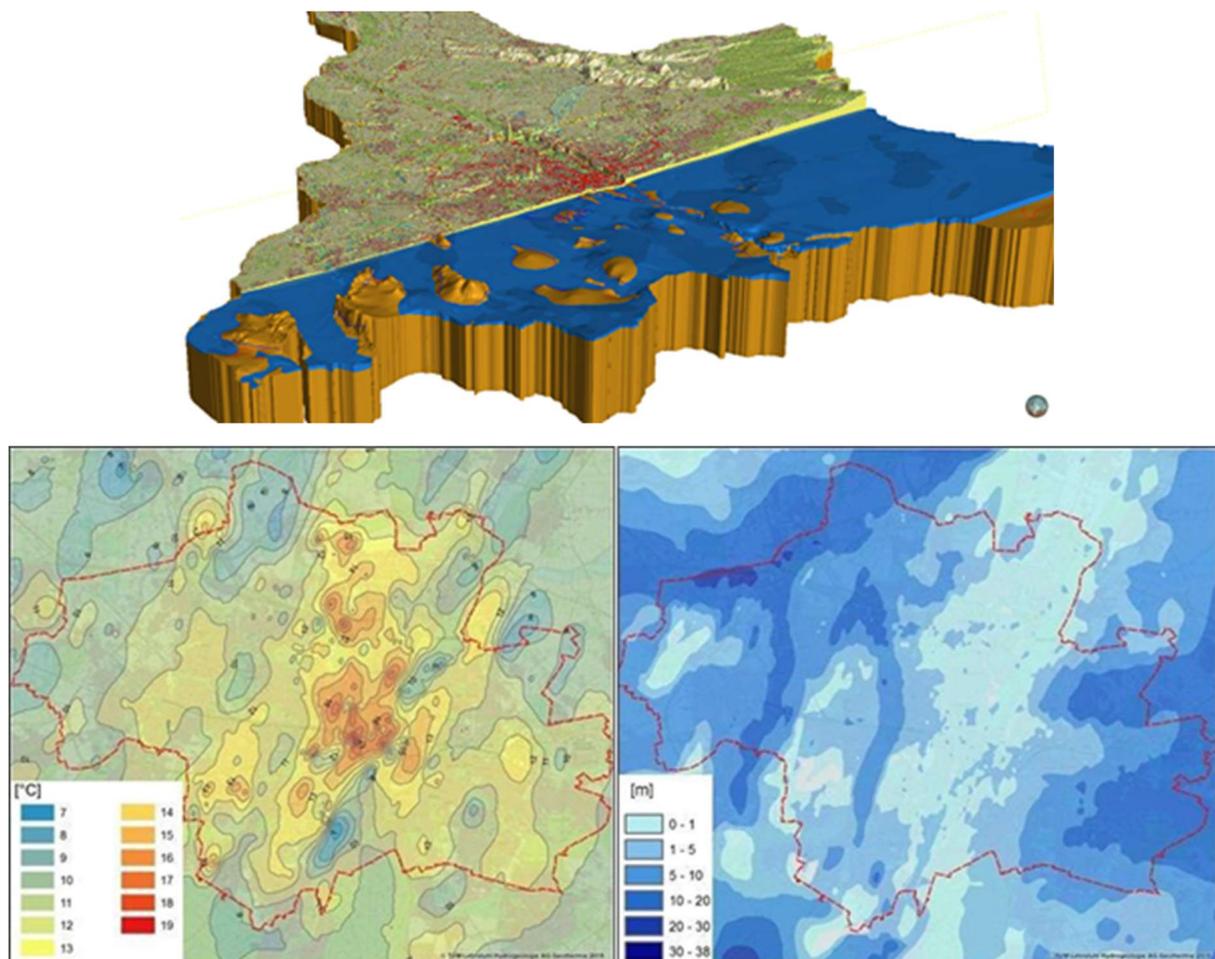


Abbildung 1: 3D-Untergrundmodell des Großraums München (oben), Grundwassertemperaturen (unten links) und grundwassererfüllte Mächtigkeit (verfügbarer Grundwasser-Volumenstrom, unten rechts) zum Zeitpunkt April 2014 in der Stadt München (Lehrstuhl Hydrogeologie/TUM, 2015). Auffällig ist hier die in der Stadt heterogene Verfügbarkeit des Grundwassers und der unterschiedlichen Temperaturen.

Durch diese Vorarbeiten steht dem Großraum München nun eine einzigartige detaillierte Datenbasis für Analysen zur Nutzung des oberflächennahen geothermischen Potenzials zur Verfügung. Diese wird im Projekt GEO.KW weiterverwendet, um von einer statischen Abschätzung zu einer dynamischen Betrachtungsweise des Potenzials zu kommen, somit erst eine realgetreue Prognose der Nutzung dieses Potenzials zu ermöglichen und Optimierungs- und Strategieszenarien zu erstellen, die für die kommunale Wärmeplanung genutzt werden können.

Mit den Ergebnissen aus den durchgeführten Vorarbeiten wurde bereits deutlich, dass der Raum München für eine Optimierung der thermischen Grundwassernutzung hervorragend als Standort geeignet ist, da dort die natürlichen Rahmenbedingungen für eine effiziente Nutzung der geothermischen Energiequelle in idealer Weise erfüllt sind und bereits vielfach genutzt werden.

Voraussetzung für eine Optimierung der bestehenden und zukünftigen Nutzung ist, dass sämtliche systemrelevanten und system-verändernden Randbedingungen, wie veränderte klimatische Bedingungen und Änderungen im Energiebedarf und der Energiequelle, sowie ihre Interaktionen untereinander berücksichtigt werden. Dazu gehören insbesondere folgende Faktoren:

- räumlich und zeitlich variabler Energiebedarf (Stadtentwicklung),
- bestehende und mögliche urbane Infrastruktur zur Nutzung des geothermischen Potenzials,
- konvektiver und diffusiver Wärmetransport im Grundwasser mit Integration der Wärmeerzeugung durch die städtische Infrastruktur (U-Bahn, Fernwärme, Abwasser, etc.) und den klimatischen Bedingungen.

1.2.2 TUM-ENS: Relevante Vorarbeiten für das Projekt GEO.KW

Für die Infrastrukturplanung wurden am Lehrstuhl für Erneuerbare und Nachhaltige Energiesysteme der Technischen Universität München (TUM-ENS) mehrere Optimierungswerkzeuge entwickelt. Eines davon ist *urbs*, ein lineares Optimierungsmodell zur kostenminimalen Dimensionierung und Einsatzplanung von Energieinfrastruktur (Richter, 2004; urbs, 2022). Ursprünglich für Städte entwickelt wurde es zwischenzeitlich für die Optimierung der Energieversorgung von einzelnen Haushalten (Huber et al., 2013) bis hin zu Kontinenten (Huber et al., 2012) eingesetzt. Es wird kontinuierlich weiterentwickelt und steht mittlerweile Open Source zur Verfügung. Es erlaubt durch Parametrisierung von generischen MIMO ("Multiple Input-Multiple Output") -Prozessschablonen die Repräsentation zahlreicher Technologien zur Umwandlung, zum Transport und zur Speicherung von Energie (siehe Abbildung 2). Mit Hilfe dieser Realisierung können vom Nutzer reale Umwandlungsprozesse in Kraftwerken nachgebildet oder Sektorkopplungen implementiert werden.

urbs ist in Python mit Hilfe von Pyomo und Pandas programmiert und öffentlich auf *GitHub* unter der GNU General Public License erhältlich. Da es mit jedem linearen Solver arbeiten kann, benötigt der Nutzer keine zusätzlichen Lizenzen, um das Modell zu benutzen. Im Rahmen dieses Projekts wurde eine Kopplung zwischen der Modellierung des Wärmetransports im Untergrund und der Optimierung entwickelt, um von beiden Modellen gestützt wesentlich präzisere Aussagen machen zu können.

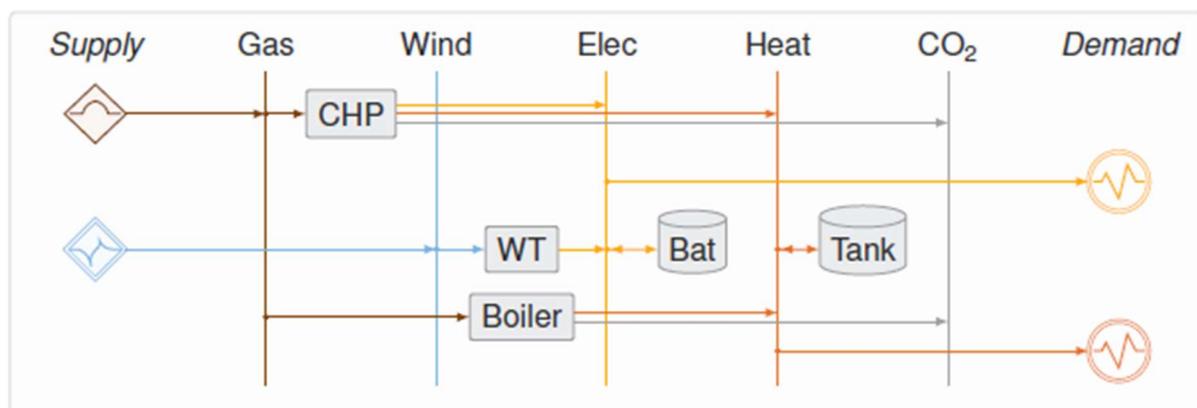


Abbildung 2: Beispiel Prozessflussdiagramm, das ein *urbs*-Modell darstellt. Hierbei werden benutzerdefinierte Güter (Gas, Wind, Strom...) ineinander durch verschiedene Technologien (CHP, Windturbine...) umgewandelt (Dorfner, 2016).

Zudem arbeitete TUM-ENS bereits an verschiedenen Projekten, die Erkenntnisse für das Projekt "GEO.KW" lieferten. Hauptsächlich zielten diese Projekte auf die Entwicklung neuer methodischer Ansätze sowie die Weiterentwicklung bestehender Methoden für adäquate und realitätsnahe Abbildung zukünftiger Energiesysteme in Modellen.

Im Projekt DecEnSys wurden mathematische Methoden für die Modellierung und Optimierung von Energiesystemen analysiert und weiterentwickelt. Ein Schwerpunkt lag dabei auf Dekompositionsmethoden, um detailreiche Energiesystemmodelle in annehmbarer Rechenzeit durchzuführen. Ein weiterer Schwerpunkt des Projekts war die Modellierung von Unsicherheit und deren Schnittstellen mit Dekompositionsmethoden. Die entwickelten Methoden wurden mit Hilfe neuer Schnittstellen implementiert, die es den Nutzern ermöglichen, auch eigene Modelle in das Dekompositionsframework einzubinden.

Im Projekt 4NEMO wurden zwei Hauptziele verfolgt. Erstens wurde die Integration von ökonomischen und gesellschaftlichen Faktoren und der mit ihnen verbundenen Ausprägungen von Unsicherheit in Energiemodellen verbessert. Zu diesem Zweck wurden die Energiemodelle der Projektpartner koordiniert weiterentwickelt. Zweitens sollte die Kohärenz, Vergleichbarkeit und Transparenz der Modelle erhöht werden. Systematische Modellvergleiche und -analysen unter Verwendung von im Projekt abgeleiteten Szenarien steigern das Verständnis für Spezialisierungsvorteile der Modelle. Insgesamt wurde durch das Projekt zu einer Verbesserung der Aussagekraft, Interpretierbarkeit und Vergleichbarkeit von Politikanalysen mittels Energiemodellen beigetragen.

Im Projekt eXtremOS wurde der Wert von Flexibilität im Kontext der europäischen Strommarktkopplung unter Berücksichtigung extremer technologischer, wirtschaftlicher und gesellschaftlicher Entwicklungen untersucht. Dafür wurden die bestimmenden Extrementwicklungen identifiziert, eine umfangreiche Datenbasis für Nachbarenergiesysteme aufgebaut, die bestehenden Modelle erweitert und anschließend Schlüsse aus verschiedenen Zukunftsbildern gezogen. Die örtliche Erweiterung der bestehenden Modelle war im Projekt von hoher Bedeutung, damit die Wechselwirkungen der Marktkopplung zwischen Deutschland und den Nachbarländern erfasst werden konnten. In dieser Hinsicht setzte TUM-ENS seine Kompetenzen im Bereich der linearen Optimierung ein und entwickelte eine flexible Dekompositionsumgebung, wodurch die hohen rechnerischen Herausforderungen der sich ergebenden Modellgrößen umgangen werden.

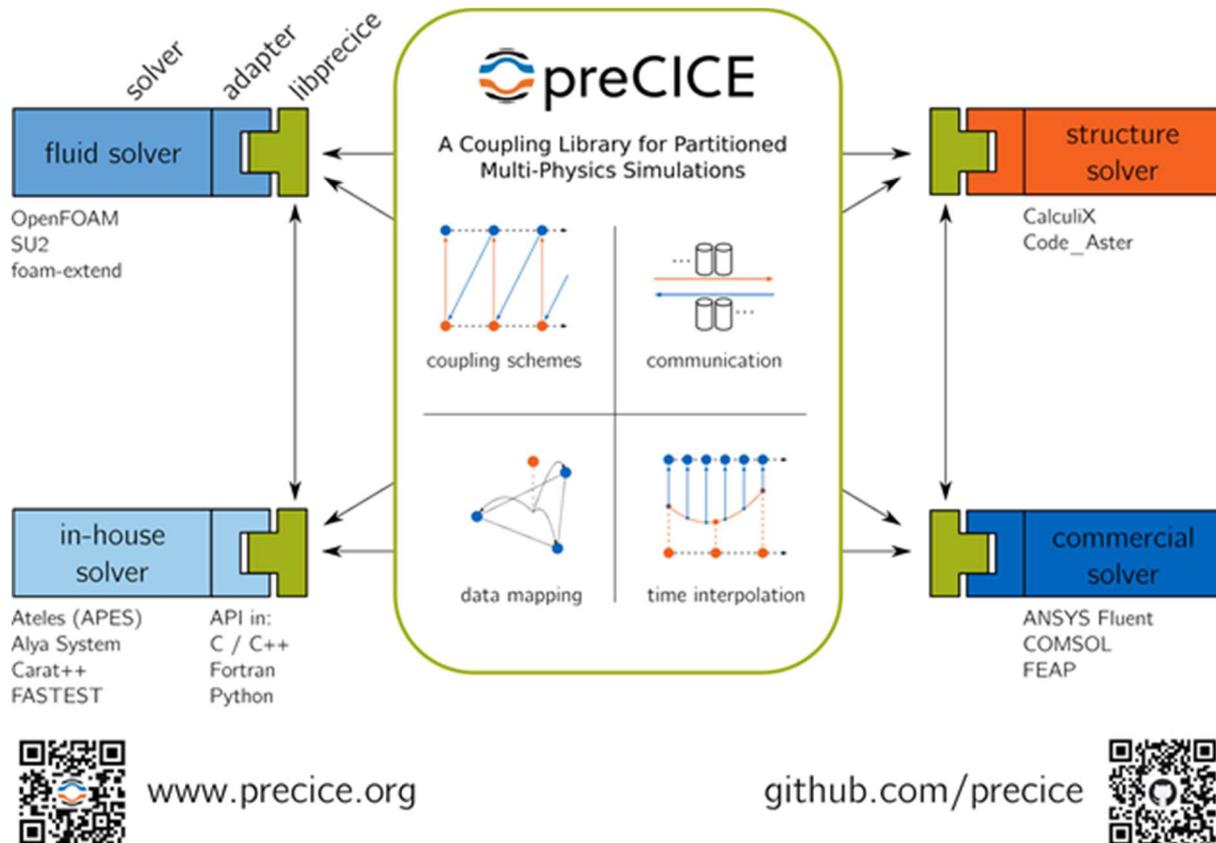
In den Projekten GAB (Geothermie-Allianz Bayern) und GeoFlex wurde der Wärmebedarf (Raumheizung und Trinkwarmwasser) von urbanen Gebieten mit Hilfe von Gray-Box-Modellen mit hoher räumlicher und zeitlicher Auflösung modelliert. Das entwickelte Simulationsmodell berechnet das dynamische thermische Verhalten eines Gebäudes mit einem RC-Modell, wobei R die Wärmeverluste an die Umgebung und C die Gesamtwärmekapazität des Gebäudes darstellt. Trinkwarmwasser und Benutzerverhalten werden mit probabilistischen Modellen simuliert. Das detaillierte Verständnis und die Simulation des Wärmebedarfs ermöglichen die Abschätzung der Auswirkungen von Energiesparstrategien und der zukünftigen Entwicklung des Wärmebedarfs.

1.2.3 US-SGS: Relevante Vorarbeiten für das Projekt GEO.KW

Beim Projektpartner US-SGS wurden im Bereich der gekoppelten Simulation auf der Basis mehrerer Softwarekomponenten (sogenannte partitionierte Mehrphysiksimulationen) umfangreiche Vorarbeiten in verschiedenen Anwendungsfeldern durchgeführt. Insbesondere wurde im Rahmen der DFG-Forschergruppe "FOR493 - Simulation von Fluid-Struktur-Wechselwirkungen" die Entwicklung der Kopplungsbibliothek preCICE initiiert, die bis heute in Kooperation mit dem Lehrstuhl für Wissenschaftliches Rechnen in der Informatik (Prof. Bungartz) an der TUM fortgeführt wird. preCICE stellt umfangreiche numerische, algorithmische und technische Verfahren zur Verfügung, um (i) Daten zwischen nicht-konformen räumlichen Diskretisierungen abzubilden, (ii) das gesamte gekoppelte System iterativ mit hoher Konvergenzgeschwindigkeit zu lösen, und (iii) skalierbaren Datenaustausch zwischen parallelisierten Softwarekomponenten zu ermöglichen. Die vierte Komponente, konsistente Kopplung höherer Ordnung in der Zeit, ist derzeit Gegenstand aktiver Forschung. Alle Komponenten von preCICE sind darauf ausgerichtet, minimal invasiv in bestehenden Simulationscodes bis hin zu Black-Box-Komponenten genutzt zu werden sowie eine hohe numerische und parallele Effizienz sicher zu stellen (Bungartz et al., 2016). Aktuell ist preCICE eine der Kernkomponenten im Projekt ExaFSA (Exascale Simulation of Fluid-Structure-Acoustic Interaction), das im Rahmen des DFG-

Schwerpunktprogramms 1648 "Software for Exascale Computing" unter Leitung von Prof. Mehl durchgeführt wird.

Daneben wurde in den letzten beiden Jahren eine Kooperation zwischen der Arbeitsgruppe von Prof. Mehl und der Gruppe von Prof. George Biros am Institute for Computational Engineering Sciences (ICES) der University of Texas in Austin initiiert. Im Rahmen dieser Kooperation wurden bestehende Komponenten zur inversen Simulation des Wachstums von bösartigen Gehirntumoren und zur Bildregistrierung in Bezug auf numerische Effizienz und parallele Skalierbarkeit optimiert sowie miteinander gekoppelt. Ähnlich wie im Projekt GEO.KW handelt es sich hierbei um komplexe Optimierungsprobleme mit durch partielle Differentialgleichungen beschriebenen Simulationen als Nebenbedingungen. Die Arbeit wurde auf der hoch kompetitiven Supercomputing Konferenz 2017 (SC17) angenommen und mit dem Best Student Paper Award ausgezeichnet (Gholami et al, 2017).



www.precice.org

github.com/precice



Abbildung 3: Schematische Darstellung des Softwarekonzeptes und des Funktionsumfangs der Kopplungs-bibliothek preCICE. preCICE kann mittels eines minimalinvasiven Adaptercodes von beliebigen Löserkomponenten angesprochen werden und stellt numerische Verfahren zur Datenabbildung zwischen nicht-konformen Diskretisierungen in Raum und Zeit, robuste und effiziente iterative Lösungsverfahren sowie skalierbare Kommunikationsroutinen zum Datenaustausch zwischen jeweils parallelen Simulationscodes zur Verfügung (Bungartz et al., 2016).

1.2.4 BADW-LRZ: Relevante Vorarbeiten für das Projekt GEO.KW

Die Portierung und speziell die Optimierung von Software auf Höchstleistungsrechnern erfordert tiefen Einblick in und detailliertes Verständnis der Arbeitsweise von Supercomputern und deren Prozessoren. Das Leibniz-Rechenzentrum besitzt umfangreiche Erfahrung in der Portierung und Optimierung von Codes auf die Hoch- und Höchstleistungsrechner am BADW-LRZ. Beispielhaft seien hier einige Codes genannt, die das BADW-LRZ maßgeblich portiert und optimiert hat:

- IPHIGENIE/CPMD: Im Rahmen dieses KONWIHR-Projekts wurde die Implementierung einer DFT/PMM-Multi-Skalenmethode im Programmpaket IPHIGENIE/CPMD für den HPC-Einsatz optimiert. (KONWIHR, 2018)
- SeisSol: "Ein Team aus Informatikern, Mathematikern und Geophysikern der Technischen Universität München (TUM) und der Ludwig-Maximilians-Universität München (LMU) hat – mit

Unterstützung durch das Leibniz-Rechenzentrum der Bayerischen Akademie der Wissenschaften (LRZ) – die an der LMU entstandene Erdbebensimulationssoftware SeisSol auf dem Höchstleistungsrechner SuperMUC des LRZ so effizient optimiert, dass die „magische“ Marke von einem Petaflop pro Sekunde geknackt wurde – einer Rechenleistung von einer Billion Rechenoperationen pro Sekunde.“ (TUM, 2018)

- Gadget: Durch Optimierungen konnte auf dem BADW-LRZ SuperMUC die größte Simulation des sichtbaren Universums durchgeführt werden. (Baruffa et al., 2018)

Das BADW-LRZ betreibt gemeinsam mit Intel, dem Hersteller der Prozessoren der Superrechner, das „Intel® Parallel Computing Center at LRZ“ (IPCC, 2014). Durch diese enge Partnerschaft erhält das BADW-LRZ frühen und tiefen Einblick in die Arbeitsweise der Prozessoren und kann dieses Wissen in die Optimierung und Portierung von Applikationen einbringen.

1.2.5 SWM Services GmbH: Relevante Vorarbeiten für das Projekt GEO.KW

Die Verfügbarkeit der geothermischen Ressource Grundwasser wird speziell in der Stadt durch viele Faktoren wie die raumgreifende Infrastruktur im Untergrund (z.B. U-Bahntunnels, Fernwärmeleitungen, etc.) oder anderweitige Grundwassernutzungen beeinflusst (Menburg et al., 2013). Diese Infrastrukturelemente können zum einen durch ihre Abwärme oder hydraulische Einflüsse den thermischen Grundwasserstrom beeinflussen und dadurch die standortspezifischen Voraussetzungen für eine Nutzung ändern. Auf der anderen Seite bieten gerade diese urbanen Strukturen die Möglichkeit eines erweiterten Potenzials der thermischen Grundwassernutzung. Ein Beispiel hierfür ist die Kühlung des Forschungs- und Innovationszentrums (FIZ) der BMW AG, das die Stadtwerke München geplant und umgesetzt haben. Um die erforderlichen 5 MW Kälteleistung effektiv zu decken, wurde eine Grundwassernutzung als Fernkälteversorgung geplant (Arnold, 2006). Jedoch wurde hier das Grundwasser zur thermischen Nutzung nicht über einen Grundwasserbrunnen gefördert, sondern es wurde dafür ein Dükersystem der U-Bahn synergetisch herangezogen (Abbildung 4). Um den Aufstau von Grundwasser im Anstrom des U-Bahnbauwerks zu vermeiden, läuft durch das Dükersystem ohne zusätzlichen Energieaufwand ein hoher Grundwasservolumenstrom. Dieser kann als Grundwasserkälte ohne Umwandlung als Endenergie für die Kühlung des Rechenzentrums genutzt werden und ist zudem wirtschaftlich umzusetzen. Lediglich für den Transport des Grundwassers muss noch ein wenig Fremdenergie aufgewendet werden (ca. 1/10 des Primärenergiebedarfs im Vergleich zu Kompressionskältemaschinen). Mit diesem System können nun jährlich ca. 10 Mio. kWh Strom eingespart werden. Durch die Einbindung von ca. 350 Dükieranlagen in München in ein optimiertes Management der thermischen Grundwassernutzung könnte dieses Potenzial auch an anderen Standorten ausgeschöpft werden.

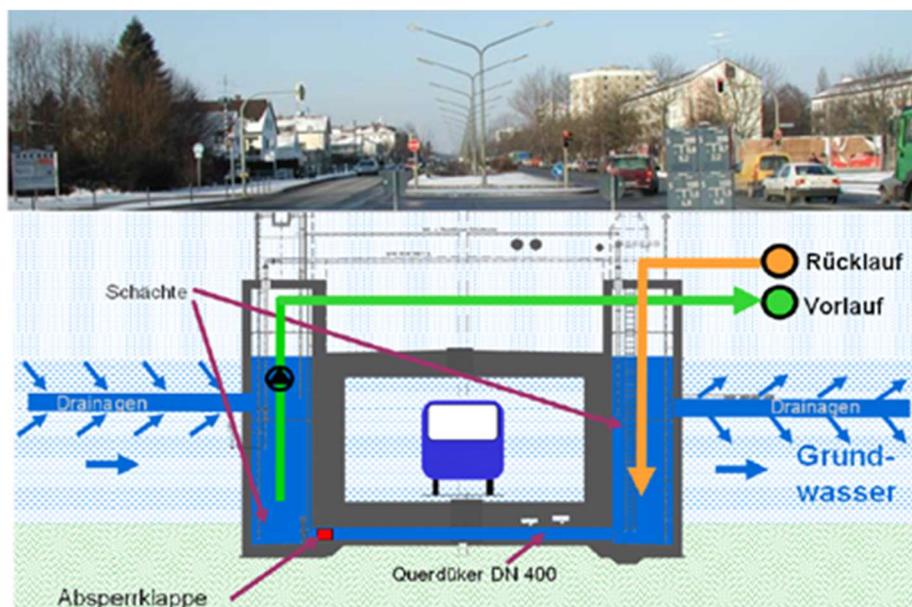


Abbildung 4: Bestehendes Dükersystem mit Einbauten für die Fernkälteleitung zur Kälteversorgung des BMW-FIZ als Beispiel für eine effektive Nutzung urbaner Strukturen bei der Energieversorgung (Arnold, 2006).

Als weiteres Beispiel für die besondere Rolle der urbanen Strukturen bei der städtischen Energieversorgung kann ein Projekt der Stadtwerke München GmbH angeführt werden, das sich mit der innovativen Beheizung von Treppen und Flächen bei Nahverkehrs-Haltestellen beschäftigt hat. Dieses Pilotprojekt hat an der Haltestelle Therese-Ghiese Allee in München nachgewiesen, dass sich das Grundwasser sehr effektiv einsetzen lässt, um die Flächen eis- und schneefrei zu halten. Gegenüber der konventionellen elektrischen Beheizung mit $170 \text{ kWh}/(\text{a}\cdot\text{m}^2)$ konnten hier über die thermische Grundwassernutzung mit ca. $17 \text{ kWh}/(\text{a}\cdot\text{m}^2)$ etwa 90% Primärenergie eingespart werden. In München gibt es weit über 100 U-Bahnhöfe und Haltestellen, die eis- und schneefrei gehalten werden müssen. Dies ist insbesondere von Bedeutung, da, wie weiter oben dargestellt, zum jetzigen Zeitpunkt durch die bestehenden Nutzungen ein Wärmeeintrag in das Grundwasser der Stadt München stattfindet.

Langfristig ist aus ökologischer und energetischer Sicht eine ausgeglichene Bilanz zwischen Energieeintrag und -austrag ins Grundwasser anzustreben. Dies fordert mittlerweile auch die wasserrechtliche Genehmigungsbehörde (Wasserwirtschaftsamt München). Durch die vermehrte Einbindung der urbanen Infrastruktur als Wärmesenke, wie beispielsweise der Bahnhöfe, kann das Speicherpotenzial des Grundwassers deutlich mehr genutzt, das Grundwasser thermisch saniert und auch die Nutzbarkeit des Grundwassers zu Kühlzwecken erhöht werden. Hierfür bedarf es allerdings einer ganzheitlichen, dynamischen Betrachtung des thermischen Grundwasserstroms über gekoppelte numerische Modelle als Planungshilfe, unter Einbindung der urbanen Infrastrukturelemente. Dies war bis jetzt noch nicht Stand der Technik und sollte im Projekt GEO.KW erarbeitet werden. Nach Stand der Forschung zu Projektbeginn waren zwar Simulationswerkzeuge für die einzelnen Aspekte verfügbar, es fehlten aber Konzepte und Methoden zur gekoppelten und iterativ rückgekoppelten Simulation aller Einflussfaktoren.

I.3 Planung und Ablauf des Vorhabens

I.3.1 Projektzeitraum und kostenneutrale Verlängerung

Das Projekt GEO.KW war zunächst auf drei Jahre, im Zeitraum 01.12.2018 bis 30.11.2021 geplant. Für die Beschreibung der durchgeführten Arbeiten (siehe II. Eingehende Darstellung).

Aufgrund von Verzögerungen durch Einschränkungen der projekt-internen Zusammenarbeit und des Austausches mit externen Stellen durch die Folgen der Coronapandemie, Ausarbeitung der Modellierung, Ausschreibung zur Erstellung der Web-Applikation sowie bei der Migration des Modells auf den SuperMuc wurde das Projekt mit Genehmigung des PTJ vom 28.09.2021 kostenneutral bis zum 31.03.2022 verlängert.

Die Projektverlängerung wurde auch genutzt, um einen nahtlosen Übergang von großen Teilen der Projektergebnisse, sowie die Weiterführung der Arbeiten in der praktischen Anwendung im Rahmen der kommunalen Wärmeplanung durch die Stadt München und die Stadtwerke München, sowie in der Genehmigungspraxis durch das Wasserwirtschaftsamt München als weiterer direkter Nutzer zu gewährleisten.

I.3.2 Ergänzung: Web-Applikation

Eine Web-Applikation als Nutzer-Plattform und -schnittstelle zur Darstellung des Potentials der oberflächennahen Geothermie, Planung von Anlagen und Erleichterung der Genehmigungspraxis in München war vorerst in der Gesamtvorhabensbeschreibung nicht explizit vorgesehen und wurde erst im Laufe des zweiten Projektjahres als Reaktion auf die in mehreren Projekttreffen festgestellten Bedürfnisse der potentiellen Anwender:innen des GEO.KW Modells ins Projektportfolio aufgenommen. Diese verstärkt die benutzerfreundliche Anwendung und verbessert die Weiterverbreitung der Projekt- bzw. Modellergebnisse an Kommunen, Energieversorger, Wasserwirtschaftsämter, Ingenieurbüros und andere interessierte Nutzergruppen.

Die ursprünglich vorgesehene Anpassung einer bestehenden, kommerziellen Software im Unterauftrag zur Erstellung des hydrogeologischen Modells musste nicht vorgenommen werden, da das thermisch-hydraulische Modell eigenständig und mit der kostenlosen Open-Source Software PFLOTRAN

umgesetzt werden konnte. Aus den hier aufgeführten Gründen wurde das vorgesehene Budget mit Bewilligung des PTJ vom 09.11.2020 für einen Unterauftrag zur Erstellung einer Web-Applikation umgewidmet.

In einem vorbereitenden Workshop erarbeiteten die Projektpartner zunächst mit der Firma bitfactory am 28.01.2021 die Leistungsbeschreibung für die Web-Applikation. Im Anschluss wurde die eigentliche Anwendung ausgeschrieben und am 10.06.2021 an die ENIANO GmbH vergeben. Diese hat die Web-Applikation in enger Zusammenarbeit mit den Projektpartner ausgearbeitet und nach mehreren Feedbackrunden mit den direkten Nutzer:innen von SWM, RKU und WWA München, sowie weiteren Interessensgruppen (z.B. Planungsreferat Stat München) erfolgreich fertiggestellt.

1.3.3 Erreichen der Meilensteine und Projektziele

Das Projektkonsortium erreichte erfolgreich das übergeordnete Projektziel der Erstellung eines Management- und Optimierungstools der thermischen Grundwassernutzung für die städtische Anwendung. Als untergeordnete Einschränkungen ist zu erwähnen, dass ein stadtweiter gekoppelter Modelllauf allerdings erst im Quartal II 2022 durchgeführt werden konnte, da die Validierung und die Bereinigung von Fehlern im hochaufgelösten, komplexen, stadtweiten hydraulisch-thermischen Modell deutlich mehr Zeit in Anspruch genommen hatten als ursprünglich geplant.

Darüber hinaus sind jedoch im Laufe des Projektes zusätzliche Szenarien für den Einsatz des Modells entstanden. So können beispielsweise die CO₂-Grenzen im Modell variiert werden, um Transformationspfade für zukünftige Entwicklungen des Energiesystems aufzuzeigen. Durch Variation der Vorgaben im rechtlichen Rahmen bei der Temperaturspreizung oder der Grenzen für die zugelassene Grundwassertemperatur kann der Einfluss auf die Anzahl benötigter Wärmepumpen sowie die möglichen CO₂-Einsparungen ermittelt werden.

Tabelle 1: Meilensteine im Projekt.

Meilenstein	Arbeitspaket	geplant	erreicht	Titel
M1	AP 1.1	30.11.2019	30.11.2019	Fachliches Konzept zur dynamischen Kopplung des/der Energiebedarf/ -infrastruktur und Energiequellen
M2	AP 2.1	31.05.2020	31.03.2022	Dynamisches thermisches Basis-Transportmodell der Großstadt München
M3	AP 4	31.05.2020	31.05.2020	Optimierte, Parallelisierte Simulationsumgebung
M4	AP 2.2	30.09.2020	31.03.2022	Dynamisches thermisches Transportmodell mit integrierter städtischer Infrastruktur
M5	AP 1.2	31.05.2021	31.03.2022	Realisation der technischen Kopplung
M6	AP 3.2	31.05.2021	31.03.2022	Energiebedarfs -und Infrastrukturmodell
M7	AP 1.3	30.11.2021	31.03.2022	Planungsinstrument und Prognosetool

Erläuterung zu Meilenstein M4: Dynamisches thermisches Transportmodell mit integrierter städtischer Infrastruktur

Im Zuge der Erarbeitung des dynamisch thermischen Basis-Transportmodells stellte es sich als nicht sinnvoll heraus, die relevante städtische Infrastruktur erst in einem späteren Schritt zu integrieren. Die Konsequenz hieraus wäre gewesen, dass durch die notwendigen komplexen Diskretisierungsprozesse ein gänzlich neuer Modellaufbau notwendig gewesen wäre. Die Vorgehensweise der stufenweisen

Erweiterung des Modells vom "Basismodell" zum "Modell mit integrierter Infrastruktur" wurde verworfen, da viel Entwicklungsarbeit in den komplexen Preprocessing- und Diskretisierungsprozessen mit der Open Source Model PFLOTRAN nötig waren und die direkte Diskretisierung mit bereits integrierter Infrastruktur zwar mehr Zeit in Anspruch nahm, aber sich als zielführender erwies.

Erläuterung zu Meilenstein M5: Realisation der technischen Kopplung

Die Verzögerung in diesem AP wird hauptsächlich durch die Komplexität der Gesamtkopplung verursacht. Das resultierende Optimierungsproblem der Kopplung zwischen einem Energiesystemmodell und einer numerischen Grundwassersimulation ist ein hochkomplexes Black-Box-Optimierungsproblem. Um dieses Problem effizient zu lösen, musste die Gesamtkopplung entsprechend mehrmals aktualisiert werden. Das resultierende Optimierungsproblem der Gesamtkopplung konnte aufgrund seiner Komplexität nicht mit bestehenden, etablierten Optimierungsmethoden gelöst werden, weshalb ein neuer Optimierungsansatz entwickelt werden musste. Die Entwicklung dieses neuen Ansatzes hat mehr Zeit in Anspruch genommen als geplant, da er mehrere Aspekte zur effizienten Lösung des Optimierungsproblems umfasst, z. B. den Umgang mit dem Black-Box-Teil oder der hohen Dimensionalität des Problems. Für den zweiten Aspekt wurde beispielsweise eine neue Dekompositionsmethode für das Energiemodell basierend auf einem Clustering-Algorithmus entwickelt. Dieser im Projekt neu entwickelte iterative Optimierungsansatz hat sich jedoch auf die Umsetzung der Gesamtkopplung ausgewirkt. Das bedeutet, dass es nicht ausreichte, nur Parameter zwischen Energiesystemmodell und Grundwassersimulation zu definieren und auszutauschen, sondern auch zu entscheiden, wie oft (zeitliche Komponente) und von wo (räumliche Komponente) diese Parameter ausgetauscht werden müssen. Die entsprechende Kopplungsstrategie konnte jedoch größtenteils parallel zu den Arbeiten am thermischen Transportmodell erarbeitet werden, so dass die Meilensteine M4 und M5 gleichzeitig erreicht werden konnten.

Erläuterung zu Meilenstein M6: Energiebedarfs- und Infrastrukturmodell

Die Verzögerung im Erreichen dieses Meilensteins liegt zum einen in der Datensammlung und ist zum anderen Verzögerungen und Änderungen durch andere Arbeitspakete, insbesondere den in M5 beschriebenen Änderungen geschuldet.

1.3.4 Projekt-Veranstaltungen

Das Projekt startete zunächst mit einem internen Kick-off am 24.01.2019 in München. Für das externe Kick-off nutzte das Projekt eine Zusammenarbeit mit dem ebenfalls am Lehrstuhl Hydrogeologie der TUM durchgeführten Projekt GEOPOT und konnte sich dadurch schon zu Beginn lokalen und regionalen Interessensgruppen vorstellen. Das III. GEOPOT-Statusseminar und die Auftaktveranstaltung von GEO.KW fanden gemeinsam am 28.05.2019 in München statt.

Im Laufe des Projektes wurden fünf Erfahrungsaustausche organisiert: ERFA1 22.11.2019, ERFA2 26.05.2020, ERFA3 27.11.2020, ERFA4 07.06.2021 und ERFA5 10.12.2021. Aufgrund der Coronapandemie konnten die meisten der Erfahrungsaustausche zwar nur online durchgeführt werden, dennoch wurden zahlreiche Vertreter:innen unterschiedlicher Interessensgruppen für die Teilnahme gewonnen. Neben den Projektpartnern nahmen Vertreter:innen des Wasserwirtschaftsamt München, des Forschungsinstituts fFE, des Bayerischen Ministeriums für Umwelt und Verbraucherschutz, des Bayerischen Ministeriums für Wirtschaft und Energie, und zusätzlich nicht ohnehin am Projekt beteiligte Referate und Abteilungen der Stadt München, der SWM und des Bayerischen Landesamt für Umwelt daran teil.

Das Projekt endete immer noch online mit der Abschlusskonferenz am 17.03.2022. Obwohl es bedauerlich war, das Projekt nicht mit einer persönlichen Veranstaltung aller Projektmitarbeiter:innen und Interessent:innen abschließen zu können, zeigte sich der Vorteil des Online-Formats in einer außergewöhnlich hohen Beteiligung und an Teilnehmer:innen, die sich von weit entfernten Institutionen wie CAU Kiel, dem Berliner Senat oder der GBA in Wien zuschalteten.

1.3.5 Weiterverbreitung der Projekthinhalte

Projekthinhalte und Ergebnisse wurden auf Projekt-Veranstaltungen, durch Präsentationen an Konferenzen und Workshops sowie Veröffentlichungen (siehe II.6.1 und II.6.2) verbreitet.

Die Projekt-Veranstaltungen (siehe I.3.4) förderten vor allem die Zusammenarbeit mit den lokalen Interessensgruppen aus München (Stadt, Stadtwerke, Wasserwirtschaftsamt), die als direkte Nutzer:innen vorgesehen sind. Im Rahmen eines sogenannten "Verstetigung-Prozesses" der Projektergebnisse konnten die Ergebnisse dann auch erfolgreich und nachhaltig in die kommunale Wärmeplanung der Stadt München und der SWM sowie in die wasserwirtschaftliche Genehmigungspraxis der Stadt München und des Wasserwirtschaftsamts München eingebracht werden. Dies konnte durch den Austausch in der projektbegleitenden Arbeitsgruppe mit vielen kommunalen und regionalen Vertreter:innen erreicht werden (siehe auch II.4.2, II.4.3 und II.4.4.).

Eine große Anzahl an Konferenzbeiträge und Teilnahme an Workshops (siehe II.6.2) richteten sich an breiter gefasste Nutzergruppen, wie Kommunen und Verbände mit ähnlichen Zielsetzungen, sowie Forschergruppen der beteiligten Fachgebiete Hydrogeologie, Energiesysteme, Supercomputing, Parallelisierung, u.a. Auch hier konnte ein hohes Interesse an den Projektergebnissen erreicht werden.

Im persönlichen Austausch wurden darüber hinaus spezielle Fragestellungen zur Freien Kühlung (Prof. Koenigsdorff, Hochschule Biberach) und Optimierungsmethoden (Prof. Bayer, Martin-Luther-Universität Halle-Wittenberg; Prof. Ulbrich, TU München; Prof. Piggott, Imperial College London) erörtert.

Durch die insgesamt weitreichende Verbreitung der Projektergebnisse konnte ein hohes Interesse an den Projektarbeiten geweckt werden, so dass konkrete Anfragen verschiedener kommunaler und regionaler Vertreter:innen an das Projektkonsortium gerichtet wurden (u.a. Berliner Senat, Stadt Augsburg, Stadt Wien), inwieweit die Projektergebnisse ganz oder teilweise auf diese Regionen übertragen werden könnten (siehe II.4). Die Projektleitung bearbeitet und diskutiert diese Anfragen derzeit intensiv.

I.4 Wissenschaftlicher und technischer Stand, an den angeknüpft wurde

Das nutzbare Potenzial der oberflächennahen Geothermie wurde bereits in einigen Projekten für spezielle Gebiete erhoben, wie zum Beispiel

- ThermoMap (<http://www.thermomap-project.eu/>)
- IOGI (http://www.lfu.bayern.de/geologie/geothermie_iog/index.htm)
- GEPO (<http://www.hydro.geo.tum.de/projects/gepo/>)
- ReGeoCities (<http://regeocities.eu/de/projekt-regeocities/>)
- GRETA (<http://www.alpine-space.eu/projects/greta/en/home>)
- GeoPlasma (<http://www.interreg-central.eu/Content.Node/GeoPLASMA-CE.html>)

Jedoch wurde dort das Potenzial stets statisch und meist ohne Berücksichtigung der bereits existierenden Nutzung dargestellt. Auch wurde in der Regel nur die Wärmenutzung betrachtet und kaum die Möglichkeit der Kälte- oder Speichernutzungen integriert. Zudem wurden die urbanen Räume in der Betrachtung aufgrund der dort auftretenden hohen Dynamik und komplexen Einflüsse oftmals ausgespart, approximativ oder nur in kleinen Ausschnitten betrachtet. Mögliche positive Beeinflussungen von Anlagen, Berücksichtigung von Infrastrukturelementen als Wärmesenken und räumliche Optimierungsanalysen wurden nicht in die bestehenden Untersuchungen eingebunden. Damit fehlt bislang die Möglichkeit, gerade in den Städten realistische Optimierungen und Prognosen, sowie energie-strategische Planungen für die Nutzung der oberflächennahen Geothermie auf einer größeren Skala, wie die Quartiersebene oder stadtweit, durchzuführen.

Das ebenfalls vom BMWi geförderte Projekt GeTIS (Geothermisches Informationssystem zur Bemessung, Modellierung, Bewertung und Genehmigung vernetzter geothermischer Energiesysteme auf Gebäude- und Stadtquartiersebene), mit Projektlaufzeit vom 01/2016 bis 12/2018 besteht aus einem Konsortium mit drei Partnern an der RWTH Aachen (Lehrstuhl für Energieeffizientes Bauen (E3D) (Koordination), Lehrstuhl für Geotechnik im Bauwesen (GIB) und Lehrstuhl für Bauinformatik & Geoinformationssysteme (gia)). Der Schwerpunkt dieses Projektes liegt in der Sammlung und Bereitstellung geologischer Informationen sowie Daten zur bereits vorhandenen Nutzung mit dem Ziel, die Genehmigungspraxis für neue geothermische Anlagen zu unterstützen. Dies soll unter Berücksichtigung neuer Entwicklungen (z.B. der europäischen INSPIRE-Richtlinie) geschehen. Die

Informationen sollen über ein Webportal basierend auf einer Geodatenbank zur Verfügung gestellt und mit Simulationen untermauert werden. Die Daten umfassen dabei auch Daten zu Gebäuden und oberirdischen Leitungs- und Verteilnetzen. Zentraler neuer Punkt bei der Simulation ist die Kopplung von Gebäude- und Quartiersmodellen mit dem Untergrund, beispielsweise der oberflächennahen Grundwasserströmung. Dabei soll unter anderem die Wechselwirkung von Systemen, die jahreszeitliche Regenerationsfähigkeit der Ressourcen sowie das Potential großvolumiger dezentraler Speichersysteme analysiert werden. Die Bereitstellung aller Daten inklusive der Simulationsdaten erfolgt über standardisierte Schnittstellen und Dienste wie Web Map Services. Die Modellregion (Düren) ist als eher ländlich einzustufen.

Das Projekt GEO.KW fokussierte sich im Gegensatz dazu stark auf den Planungsraum Großstadt mit speziellen wichtigen Infrastrukturkomponenten (U-Bahnbauwerke, Dükeranlagen, Fernwärmeleitungen, etc.). Dabei kann das Projekt GEO.KW auf eine bereits erhobene, detaillierte und großflächig aufgenommene Datenbasis zurückgreifen, die alle relevanten urbanen Strukturen und Untergrunddaten beinhaltet und auch die zeitliche Dynamik saisonal und langfristig auflöst. Diese Datenbasis wurde im landes-geförderten Vorgängerprojekt GEPO und den Datenportalen des LfU Bayern (BIS Bayern, Informationsoffensive Geothermie – IOGI) zusammengestellt. Die Erstellung und Aufbereitung der Datenbasis ist ein Teilaspekt des Projekts GeTIS, der im Projekt GEO.KW nicht betrachtet wird. Eine für die Genehmigungspraxis relevante Genauigkeit ist, speziell im ländlichen Raum, durch eine vereinfachte Datenbasis zu erreichen. Die besonderen Gegebenheiten einer Großstadt erfordern aber einen speziellen Detaillierungsgrad in der Simulation, damit alle Wärme- und Kälteeinträge im urbanen Raum quantifiziert und Synergieeffekte erkannt werden können. Ein weiteres wesentliches Unterscheidungsmerkmal zu GeTIS ist die Zielrichtung von GEO.KW, die über die Unterstützung von Genehmigungsprozessen hinausgeht: Durch die dynamische Kopplung der Energiequelle und des flexiblen Energiebedarfs sollte ein Tool zur strategischen Planung und Optimierung weitreichender Entscheidungen (z.B. Fernwärme versus oberflächennahe Geothermie für neue Quartiere, Platzierung neuer Rechenzentren als Kälteabnehmer) zur Verfügung gestellt werden. Dabei lag ein Fokus auf der Prognosefähigkeit des Management-Tools zur Entwicklung langfristiger Strategien zur Einbindung der regenerativen thermischen Grundwassernutzung in die Stadtentwicklung und Quartiersplanung. Bei dieser Thematik war auch zu beachten, die bestehenden oder geplanten Gebäude und Infrastrukturelemente als potenzielle Wärmesenken einzubinden, um Synergien zu erzeugen, das technische nutzbare Potenzial der Energiequelle zu erhöhen und Umwelteinflüsse zu verringern.

Aufgrund der verwandten Thematik, aber teilweise orthogonaler methodischer Zielsetzungen, ergaben sich bei der Umsetzung der Projektarbeitspakete einige Synergien mit dem Projekt GeTIS. So zielten die in den Projekten erhobenen Daten sowie die zugehörigen Simulationswerkzeuge auf unterschiedliche Umgebungsbedingungen ab (ländlich versus Großstadt) und unterschiedliche Anwendungssysteme (Erdfwärmesonden, Grundwasserwärmepumpe), so dass die entwickelten Methoden als Gesamtpaket eine hervorragende Basis für eine deutschlandweite Anwendung der Simulationswerkzeuge bilden. Darüber hinaus wurde während der Projektlaufzeit gemeinsam mit dem Projektteam von GeTIS evaluiert, wie GEO.KW und die in GeTIS entwickelten webbasierten Schnittstellen zur Darstellung der Ergebnisse für Planer angebunden werden können.

Modellierung und Simulation der Energiequelle. Die dynamische Verfügbarkeit des Grundwassers zur thermischen Nutzung kann über eine thermisch-hydraulische numerische Simulation abgebildet werden (z.B. FEFLOW, deltha-spring4, Moose-Framework). Um aber das nutzbare thermische Potenzial lokal und zeitlich realistisch abschätzen zu können, ist eine komplexe Simulation des Systems unter Berücksichtigung aller Einflussfaktoren erforderlich. Grundwasserströmung, Massen- und Wärmetransport im Untergrund sind hochkomplexe, vielfach voneinander abhängige Prozesse. Im aktuellen umwelttechnischen und geohydraulischen Kontext besteht die Notwendigkeit der Simulation und der Vorhersage dieser Prozesse. Hierzu werden 3D-Grundwasserströmungsmodelle eingesetzt. Die Grundwassermodellierung basiert auf drei Säulen: der Konzeptualisierung der Wirklichkeit, der Umsetzung in ein numerisches Modell sowie der Verwendung einer geeigneten Modellierungssoftware. Die Konzeptualisierung sowie die Umsetzung in ein numerisches Modell erforderten ein hohes hydraulisch-thermisches Fachwissen. Zudem muss die verwendete Software den Wärmetransport und die urbanen hydraulisch thermischen Randbedingungen adäquat umsetzen und integrieren können. Am Lehrstuhl Hydrogeologie wurde für die Wärmetransportmodellierung seit vielen Jahren die Software

FEFLOW (Finite Element subsurface FLOW simulation system, DHI-WASY GmbH) verwendet (Diersch, 2014). FEFLOW löst die maßgebenden Gleichungen für den Wärmetransport in porösen (Sedimente) und gestörten (Festgesteine) Medien auf Basis der Finite Elemente-Technologie für hochkomplexe Systeme. Zudem ist FEFLOW weit verbreitet und wird vielfach für die Wärmetransportmodellierung in der Praxis (z.B. in Ingenieurbüros) verwendet. FEFLOW lässt sich zudem sowohl auf Windows-Systemen als auch auf komplexen Linux-Clustern ausführen und es existierte ein umfangreiches öffentliches und dokumentiertes FEFLOW API (FEFLOW Interface Manager IFM), mit dem u.a. eine Code-Kopplungen auf DLL-Basis hätte realisiert werden können. Allerdings stellte sich die Verwendung der Software für die Kopplung im Projekt als nicht umsetzbar heraus, da ein vollständiger Zugang zum Source-Code notwendig gewesen wäre. Dies war bei der kommerziellen Software nicht möglich. Alternativ zu FEFLOW gab es für die Wärmetransportmodellierung im Projekt auch andere Software-Optionen (z.B. deltha-spring4, Moose-Framework, PFLOTRAN), die diskutiert wurden. Letztlich wurde für die Umsetzung der Projektziele die Open Source Software PFLOTRAN verwendet (siehe I.4.1).

Modellierung und Optimierung von Energiesystemen. Im Allgemeinen werden Energiesystem-Optimierungsmodelle (ESOM) verwendet, um zukünftige Energieszenarien auf verschiedenen Ebenen (Stadt, Land, Kontinent) zu analysieren und das so genannte Unit Commitment Problem zu lösen. Das Ziel ist in der Regel die Minimierung von Kosten und/oder CO₂-Emissionen bei gleichzeitiger Deckung des Energiebedarfs zu jedem Zeitpunkt. Die Eingaben für diese Modelle sind die vorhandene Energieinfrastruktur (installierte Technologien und ihre Kapazitäten), deren Kosten, Energiebedarf und verfügbare Technologien, die für die Installation berücksichtigt werden müssen. Die ESOM liefern dann Ergebnisse über den optimalen Technologiemix, d.h. wie viele neue Kapazitäten jeder Technologie installiert werden sollten und wie der resultierende Technologiemix betrieben werden sollte, um den bestehenden Energiebedarf zu decken.

Die resultierenden Optimierungsprobleme von ESOM sind normalerweise Optimierungsprobleme vom Typ linearer Programmierung (LP) oder gemischt-ganzzahliger linearer Programmierung (MILP). Diese Art von Problemen garantiert, dass die gefundene optimale Lösung ein globales Optimum ist, und es gab hierfür bereits zahlreiche effiziente Löser.

Kopplung Energiequelle und Energieträger. Für den Wärmesektor gingen die bestehenden ESOM in der Regel von konstanten COPs für Wärmepumpen aus (einschließlich GWWP, falls diese berücksichtigt werden). Ziel dieses Projekts war es jedoch, eine ESOM mit einer numerischen Grundwassersimulation zu koppeln, um unter anderem die Effizienzdarstellung von GWWPs in ESOM zu verbessern. Vor dem Projektstart wurden in keinem anderen Projekt solche Kopplungsschemata entwickelt, die als Referenz oder Grundlage für dieses Projekt verwendet werden könnten. Zu beachten ist auch, dass das resultierende Optimierungsproblem (Optimierung der Gesamtkopplung) kein LP- oder MILP-Problem mehr ist, sondern ein Black-Box-Optimierungsproblem.

Die Integration mehrerer Simulationsprogramme zu einer gekoppelten Simulationsumgebung unter Berücksichtigung aller relevanten (bidirektionalen) Wechselwirkungen war in anderen Bereichen wie zum Beispiel der Simulation von Fluid-Struktur-Wechselwirkungen weit verbreitet. Zur Stabilisierung und Konvergenzbeschleunigung wurden hier häufig quasi-Newton-Verfahren zur Lösung einer Kopplungs-Fixpunktgleichung eingesetzt. Dieser Ansatz ist sehr allgemein einsetzbar. Neuere Versionen dieser Methoden erlaubten auch die Nutzung massiv paralleler Hardware (Bungartz et al, 2014). Beim Projektpartner US-SGS war über einige Jahre die Bibliothek preCICE entwickelt worden, die Basisbausteine für die Kopplung unterschiedlicher Softwarekomponenten zur Verfügung stellte. Dazu gehörte insbesondere die technische Kommunikation mehrerer Codes, Datenabbildungsmethoden zur Verknüpfung unterschiedlicher räumlicher Diskretisierungen und die erwähnten quasi-Newton Verfahren zur effizienten numerischen Realisierung der Kopplung unter Verwendung von Black-Box-Lösern.

Die mathematische Optimierung der Systeme, deren Dynamik bestimmten partiellen Differentialgleichungen (PDE) unterliegt, ist in Literatur als „PDE-constrained optimization“ bezeichnet. Häufige Anwendungsbereiche dieser Problemklasse sind Parameterschätzung (Xun et al., 2013) und Formoptimierung von Bauteilen (Mohammadi und Pironneau, 2001). In der Vergangenheit waren ähnliche Ansätze auch im Projekt GEO.KW verwandten Gebieten erfolgreich angewandt worden (Haber

und Hanson, 2007; Effati et al., 2008). Allerdings sind solche Verfahren nicht für die Art der Black-Box Optimierung, insbesondere für eine Kopplung aus Optimierung und Simulation ohne extrem aufwändige Implementierung eines zusätzlichen adjungierten Löser nutzbar.

Parallelisierung/Infrastruktureinbindung. Obwohl je nach der Art des Gleichungssystems vielfältige Optimierungsverfahren vorhanden waren, war bekannt, dass die Vielzahl der Nebenbedingungen des Modells, die sich aus der Diskretisierung ergibt, in den meisten Fällen die Hilfe von Hochleistungsrechnern erfordert, um eine Lösung in einer vertretbaren Zeit zu erreichen. Komplexität und Genauigkeitsanforderungen einer gekoppelten zeitabhängigen Simulation von Grundwasserströmung mit Wärmetransport und der Entwicklung der Energieinfrastruktur sowie des Energiebedarfs erfordern einen technisch ausgereiften und effizienten parallelen Kopplungsalgorithmus, sowie den Einsatz von Hochleistungsrechnern. Am Leibniz-Rechenzentrum (BADW-LRZ) standen Hoch- und Höchstleistungsrechner zur Verfügung, die für parallele Berechnungen eingesetzt werden können. Das Linux Cluster8 mit über 16.000 cores und mehr als 32 TB RAM Speicher deckte mittlere HPC-Anforderungen ab, während der SuperMUC mit über 240.000 cores und über 500 TB RAM Speicher und einer Spitzenrechenleistung von 6.5 PFlop/s (damals Platz 14 der schnellsten Rechner der Welt, Rang 4 in Europa) höchste Anforderungen befriedigen konnte. Die Gruppe für Applikationsunterstützung am BADW-LRZ besaß langjährige Erfahrung mit Portierung, Parallelisierung und Optimierung von Codes.

Innerhalb des Projektkonsortiums standen sowohl ein Finite Elemente Programm zur Simulation von Grundwasserströmungen und des damit verbundenen Wärmetransports im porösen Untergrund (TUM-HYD), eine Methode zur Optimierung der Infrastrukturplanung unter Berücksichtigung der Nutzung von Geothermie (TUM-ENS), die relevanten Algorithmen zur Kopplung (US-SGS) und Performanceoptimierung (BADW-LRZ), als auch die notwendige Rechenkapazität (BADW-LRZ) zur Verfügung.

1.4.1 Angabe bekannter Konstruktionen, Verfahren und Schutzrechte, die für die Durchführung des Vorhabens benutzt wurden

PFLOTRAN. Die dynamische Verfügbarkeit des Grundwassers zur thermischen Nutzung wurde über eine thermisch-hydraulische numerische Simulation mit PFLOTRAN abgebildet (siehe www.pflotran.org). Um das nutzbare thermische Potenzial lokal und zeitlich realistisch abschätzen zu können, ist eine Simulation des Systems unter Berücksichtigung aller Einflussfaktoren erforderlich. Grundwasserströmung, Massen- und Wärmetransport im Untergrund sind hochkomplexe, vielfach voneinander abhängige Prozesse. Im aktuellen umwelttechnischen und geohydraulischen Kontext besteht die Notwendigkeit der Simulation und der Vorhersage dieser Prozesse. Hierzu werden 3D-Grundwasserströmungsmodelle eingesetzt. Die Grundwassermodellierung basiert auf drei Säulen: die Konzeptualisierung der Wirklichkeit, die Umsetzung in ein numerisches Modell sowie die Verwendung einer geeigneten Modellierungssoftware. Die Konzeptualisierung sowie die Umsetzung in ein numerisches Modell erfordern ein hohes hydraulisch-thermisches Fachwissen. Zudem muss die verwendete Software den Wärmetransport und die urbanen hydraulisch thermischen Randbedingungen adäquat umsetzen und integrieren können.

Für die Kopplung der Grundwassersimulation mit dem Energiesystemoptimierer war es allerdings entscheidend, dass Veränderungen im Quellcode vorgenommen werden können, weshalb besonders lizenzfreie Software mit offenem Code notwendig war. Eine weitere Voraussetzung war eine bereits nachgewiesene Skalierbarkeit auf Rechenclustern, inklusive einer bestehenden Entwicklung von parallel lesbarem Input und schreibbarem Output. Zusätzlich mussten alle zur Simulation von thermischen Grundwassernutzungen und den Quellen und Senken in einer urbanen Umgebung nötigen Randbedingungen bereits verfügbar sein. Diese grundsätzlichen Voraussetzungen hat die Software PFLOTRAN erfüllt. Der durchweg parallelisierte Code zur Simulation von Strömung- und reaktivem Transport im porösen Medium wird unter einer GNU (Lesser General Public) Lizenz frei veröffentlicht. PFLOTRAN stellte bereits seine gute parallele Performance auf vergleichbaren Clustern unter Beweis und ist zudem ausführlich und aktuell dokumentiert. Dies vereinfachte die Einarbeitung in die Software erheblich. Zusätzlich wird der Code von einer sehr aktiven Entwicklergruppe stetig verbessert und der schnelle Kontakt zur Entwicklergruppe ist bei Fragen zum Quellcode ebenfalls ein entscheidender Vorteil. PFLOTRAN nutzt den frei verfügbaren linearen Solver PETSc mit dem Message Passing

Interface (MPI), um eine hoch skalierbare parallele Performance auf Supercomputern zu erreichen und gleichzeitig open-source zu bleiben.

SALOME. Zur Konzeptualisierung und zur Netzgenerierung der numerischen Modelle wurde auf die Pre- und Post-Prozessierungsplattform SALOME zurückgegriffen. SALOME wird ebenfalls open-source unter einer LGPL-Lizenz veröffentlicht und läuft sowohl auf Windows als auch auf Linux Betriebssystemen. SALOME ist in C++ und Python geschrieben und bietet neben dem Graphical User Interface (GUI) auch ein vollumfängliches Terminal User Interface (TUI), in dem über Python 3 alle Schritte der Modellerstellung in Skripten automatisiert werden können. Der enthaltene CAD-Modeller wird ergänzt durch Netgen und GMSH-Plugins, die aufbauend auf den Geometrien eine Delaunay-Netzgenerierung ermöglichen. Neben SALOME wurde zum Export der Netze auf das von Moise Rousseau programmierte Salome-PFLOTRAN-Interface zurückgegriffen, über das die verschiedenen PFLOTRAN proprietären Netz-Formate aus SALOME exportiert werden können. Der zugehörige Code ist ebenfalls frei verfügbar und über Git zugänglich.

PEST. Model-Independent Parameter Estimation and Uncertainty Analysis. Das Software Paket PEST wurde zur automatisierten Kalibrierung der Grundwassermodelle genutzt. Hierfür wurde eine Kopplung von PEST++ in der Version 4.2.1 an PFLOTRAN entwickelt. PEST besteht des Weiteren aus verschiedenen Zusatzprogrammen zum Pre- und Post-Processing, wovon PANTHER zum Durchführen von parallelen Simulationen und TSPROC zum Abgleich von Zeitreihen verwendet wurde. Die PEST-Bibliothek wurde gewählt, da sie nicht intrusiv an verschiedenste Solver gekoppelt werden kann. Zudem bietet PEST bewährte und weithin angewendete Abläufe zur Kalibrierung von Grundwassermodellen.

urbs. Als Energiesystemoptimierer wird die am Lehrstuhl ENS entwickelte Software *urbs* verwendet. *urbs* ist in Python mit Hilfe von Pyomo und Pandas programmiert und öffentlich auf *GitHub* unter der GNU General Public License erhältlich. *urbs* ist ein lineares Optimierungsframework, was bedeutet, dass es als abstrakter Generator für lineare Optimierungsprobleme dient. Mit den vom Benutzer nach einem festen Schema vorgegebenen Eingangsdaten wird ein Optimierungsproblem aufgebaut, welches durch einen mathematischen Solver gelöst wird. Da es mit jedem linearen Solver arbeiten kann, benötigt der Nutzer keine zusätzlichen Lizenzen, um das Modell zu benutzen. Die Ergebnisse des Solvers werden anschließend für den Nutzer aufbereitet und an diesen ausgegeben. *urbs* wird im Allgemeinen für die Ausbau- und Einsatzplanung von Energiesystemen verwendet. Hierfür können Modelle auf unterschiedlicher räumlicher und zeitlicher Skala erstellt werden, deren Gesamtkosten oder CO₂-Emissionen minimiert werden sollen. Die Optimierung erfolgt dabei durch die Auswahl eines geeigneten Technologieportfolios, dessen Dimensionierung und der Bestimmung der optimalen Betriebsweise aus den vorgegebenen Möglichkeiten.

preCICE. Eine entscheidende Herausforderung im Projekt ist die Kopplung der beiden Codes. Hier wird ebenfalls auf schon bestehende Entwicklungen zurückgegriffen. Die Kopplungsbibliothek preCICE ist ein open-source Softwarewerkzeug zur technischen und mathematischen Verknüpfung mehrerer Softwarekomponenten zu einer größeren Simulations- oder Optimierungsumgebung. preCICE wurde über drei Generationen von Doktorand:innen des Lehrstuhls für Wissenschaftliches Rechnen in der Informatik an der TU München und der am Institut für parallele und verteilte Systeme (IPVS) an der Universität Stuttgart entwickelt. Die gesamte Entwicklung geschieht offen auf GitHub. preCICE ist lizenziert unter einer LGPLv3. Im vorliegenden Projekt wird preCICE genutzt, um die Datenkommunikation sowie die mathematische Kopplung zwischen PFLOTRAN und mehreren parallel ausgeführten Instanzen von *urbs* zu realisieren.

Hardware und Cloud am BADW-LRZ. Das LRZ stellt Hoch- und Höchstleistungsrechner zur Verfügung, die zur Ausführung hoch parallelisierter Codes in verschiedener Größenordnung geeignet sind. So decken die Segmente des Linux-Clusters (LRZ Linux-Clusters, 2022), bspw. der im Projekt verwendete CoolMUC-2 mit 22.736 Rechenkernen, mittlere HPC-Anforderungen ab, während der SuperMUC-NG (LRZ SuperMUC-NG, 2022) mit 311.040 cores und einer Spitzenleistung von 26.9 PetaFlops/s (bei Inbetriebnahme auf Platz 8 der größten Rechner der Welt) auch für sehr große Simulationen geeignet ist.

Das LRZ betreibt ebenfalls gemanagte Server (LRZ Server-Hosting, 2022) und eine Compute-Cloud (LRZ Compute-Cloud, 2022) zur Bereitstellung von Rechenkapazitäten für Kunden und kollaborierende

Wissenschaftler. Auch im Projekt GEO.KW wurde von diesem Service Gebrauch gemacht und eine virtuelle Maschine für Tests und die gemeinsame Softwareentwicklung genutzt.

Software am BADW-LRZ. Es wurde auf etablierte Strukturen des Code-Managements auf den Systemen des LRZs zurückgegriffen. So werden typische im wissenschaftlichen Bereich benötigte Software, Compiler, Bibliotheken und Tools auf den HPC-Systemen als sog. Module bereitgestellt. Dabei kann fertig kompilierter Code in verschiedenen Versionen und mit unterschiedlichen Dependencies (verwendeten Bibliotheken u.Ä.) geladen werden, d.h. durch Ausführen eines Kommandos werden die entsprechenden Pfade und Umgebungsvariablen so gesetzt, dass Compiler und Linker auf die richtige Version zugreifen (LRZ Environment, 2022).

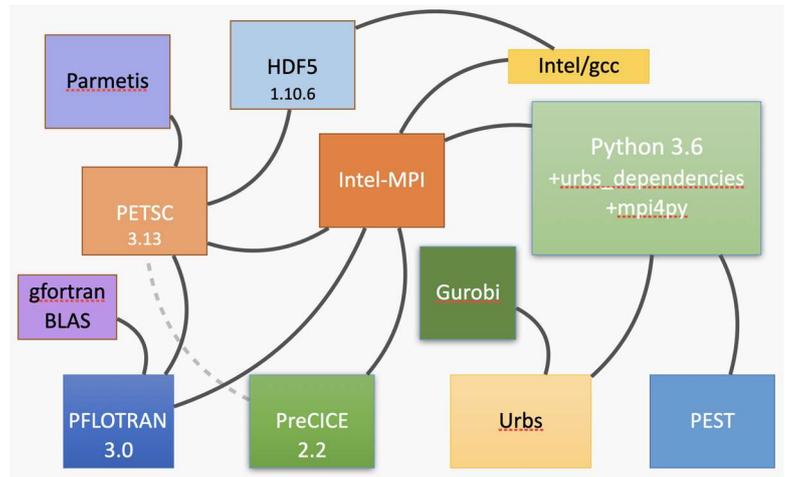


Abbildung 5: Dependencies der verwendeten Komponenten

So kann z.B. auf die für PFLOTRAN und preCICE benötigten Komponenten gcc, HDF5, boost, Eigen (Eigen, 2022), METIS/ParMETIS (ParMETIS, 2022), PETSc (PETSc, 2022), MPI u. a. zugegriffen werden. Wenn die notwendigen Dependencies nicht in der benötigten Version vorhanden sind, was aufgrund der regen Entwicklung an den Projekten preCICE und PFLOTRAN, die oft eine sehr aktuelle Version der Bibliotheken HDF5 oder PETSc für neu entwickelte Features benötigen, gelegentlich der Fall war, so können diese in Absprache mit dem Applikations-Team des LRZs nachgepflegt werden.

Zur Pflege und Wartung des Software-Stacks wird am LRZ das Package-Management-Tool Spack verwendet (Spack, 2022).

Eine neue Entwicklung, die im Projekt verwendet und vorangetrieben wurde, ist die Möglichkeit für Nutzer des Systems, eigene Spack-Instanzen auf den Systemen zu pflegen.

1.4.2 Angabe der verwendeten Fachliteratur sowie der benutzten Informations- und Dokumentationsdienste

Die für die Durchführung der Arbeiten relevante Fachliteratur wird als Bibliographie aufgelistet und in thematische Blöcke gegliedert, um die verschiedenen Forschungsbereiche abzubilden:

- PDE-basierte Optimierung (Kapitel II.1.2.4.1)
- Optimierung mit analytischen Modellen für Wärmefahnen von GWWP (Kapitel II.1.2.4.2)
- Energiesystemmodellierung
- Kopplung des thermischen Transports im Grundwasser mit der Entwicklung des Stadtenergiesystems (Kapitel II.1.3)
- Optimierungsszenarien (Kapitel II.1.6)
- Synthetische Simulation der Wärme- und Kältenachfrage
- Unterirdische Urbane Wärmeinseln
- Numerische Grundwassermodellierung
- Potentialermittlung für thermische Grundwassernutzung

PDE-basierte Optimierung (Kapitel II.1.2.4.1)

- Bouhlef, M. A., J. T. Hwang, N. Bartoli, R. Lafage, J. Morlier, J. R. Martins (2019): A python surrogate modeling framework with derivatives, *Advances in Engineering Software* 135, 102662. doi:10.1016/j.advengsoft.2019.03.005.
- Clyde, C. G., G. V. Madabhushi (1983): Spacing of wells for heat pumps, *Journal of Water Resources Planning and Management* 109, 203–212. doi:10.1061/(ASCE)0733-9496(1983)109:3(203).
- Funke, S. W., P. E. Farrell, M. D. Piggott (2014): Tidal turbine array optimisation using the adjoint approach, *Renewable Energy* 63, 658–673. doi:10.1016/j.renene.2013.09.031.
- Garcia-Gil, A., E. Vazquez-Sune, E. G. Schneider, J.A. Sanchez-Navarro, J. Mateo-Lazaro (2015): Relaxation factor for geothermal use development – criteria for a more fair and sustainable geothermal use of shallow energy resources, *Geothermics* 56, 128–137. doi:10.1016/j.geothermics.2015.04.003.
- Geuzaine, C., J.-F. Remacle, Gmsh (2009): A 3-d finite element mesh generator with built-in pre- and post-processing facilities, *International Journal for Numerical Methods in Engineering* 79, 1309–1331. doi:10.1002/nme.2579.
- Giles, M. B., N. A. Pierce (2000): An introduction to the adjoint approach to design, *Flow, Turbulence and Combustion* 65, 393–415, <https://link.springer.com/article/10.1023/a:1011430410075>. doi:10.1023/A:1011430410075.
- Hintermüller, M., M. Hinze, Moreau–Yosida (2009): Regularization in State Constrained Elliptic Control Problems: Error Estimates and Parameter Adjustment, *SIAM Journal on Numerical Analysis* 47, 1666–1683. doi:10.1137/080718735.
- Hinze, M., R. Pinnau, M. Ulbrich, S. Ulbrich (2008): Optimization with PDE constraints, volume 23, Springer Science & Business Media, <http://swbplus.bsz-bw.de/bsz288078012cov.htm>.
- Jin, R., W. Chen, A. Sudjianto (2005): An efficient algorithm for constructing optimal design of computer experiments, *Journal of Statistical Planning and Inference* 134, 268–287. doi:10.1016/j.jspi.2004.02.014.
- King, R. N., K. Dykes, P. Graf, P. E. Hamlington (2017): Optimization of wind plant layouts using an adjoint approach, *Wind Energy Science* 2, 115–131. doi:10.5194/wes-2-115-2017.
- Lo Russo, S., M. V. Civita (2009): Open-loop groundwater heat pumps development for large buildings: A case study, *Geothermics* 38, 335–345. doi:10.1016/j.geothermics.2008.12.009.
- Milnes, E., P. Perrochet (2013): Assessing the impact of thermal feedback and recycling in open-loop groundwater heat pump (GWHP) systems: a complementary design tool, *Hydrogeology Journal* 21, 505–514. doi:10.1007/s10040-012-0902-y.
- Mitsch, S., S. Funke, J. Dokken (2019): dolfin-adjoint 2018.1: automated adjoints for fenics and firedrake, *Journal of Open Source Software* 4, 1292. doi:10.21105/joss.01292.
- Muela Maya, S., A. Garcia-Gil, E. Garrido Schneider, M. Mejias Moreno, J. Epting, E. Vazquez-Suñe, M.A. Marazuola, J.A. Sanchez-Navarro (2018): An upscaling procedure for the optimal implementation of open-loop geothermal energy systems into hydrogeological models, *Journal of Hydrology* 563, 155–166. doi:10.1016/j.jhydrol.2018.05.057.
- Park, D. K., D. Kaown, K.-K. Lee (2020): Development of a simulation-optimization model for sustainable operation of groundwater heat pump system, *Renewable Energy* 145, 585–595. doi:10.1016/j.renene.2019.06.039
- Park, D., E. Lee, D. Kaown, S.-S. Lee, K.-K. Lee (2021): Determination of optimal well locations and pumping/injection rates for groundwater heat pump system, *Geothermics* 92, 102050. doi:10.1016/j.geothermics.2021.102050.

Wallwork, J., A. Angeloudis, N. Barral, L. Mackie, S. Kramer, M. Piggott (2022): Tidal Turbine Array Modelling using Goal-Oriented Mesh Adaptation, California Digital Library (CDL). doi:10.31223/x5h06b.

Yeniay, O. (2005): Penalty function methods for constrained optimization with genetic algorithms, *Mathematical and Computational Applications* 10, 45–56. URL: <https://www.mdpi.com/133758>. doi:10.3390/mca10010045.

Optimierung mit analytischen Modellen für Wärmefahnen von GWWP (Kapitel II.1.2.4.2)

Attard, G., P. Bayer, Y. Rossier, P. Blum, L. Eisenlohr (2020): A novel concept for managing thermal interference between geothermal systems in cities, *Renewable Energy* 145, 914–924. doi:10.1016/j.renene.2019.06.095.

Beck, M., P. Bayer, M. de Paly, J. Hecht-Mendez, A. Zell (2013): Geometric arrangement and operation mode adjustment in low-enthalpy geothermal borehole fields for heating, *Energy* 49, 434–443. doi:10.1016/j.energy.2012.10.060.

Böttcher, F., A. Casasso, G. Götzl, K. Zosseder (2019): TAP - thermal aquifer potential: A quantitative method to assess the spatial potential for the thermal use of groundwater, *Renewable Energy* 142, 85–95. doi:10.1016/j.renene.2019.04.086.

Epting, J., F. Böttcher, M. H. Mueller, A. García-Gil, K. Zosseder, P. Huggenberger (2020): City-scale solutions for the energy use of shallow urban subsurface resources – bridging the gap between theoretical and technical potentials, *Renewable Energy* 147, 751–763. doi:10.1016/j.renene.2019.09.021.

Gao, Q., X.-Z. Zhou, Y. Jiang, X.-L. Chen, Y.-Y. Yan (2013): Numerical simulation of the thermal interaction between pumping and injecting well groups, *Applied Thermal Engineering* 51, 10–19. doi:10.1016/j.applthermaleng.2012.09.017.

García-Gil, A., E. Vazquez-Sune, E. G. Schneider, J.A. Sanchez-Navarro, J. Mateo-Lazaro (2015): Relaxation factor for geothermal use development – criteria for a more fair and sustainable geothermal use of shallow energy resources, *Geothermics* 56, 128–137. doi:10.1016/j.geothermics.2015.04.003.

García-Gil, A., S. Muela Maya, E. Garrido Schneider, M. Mejias Moreno, E. Vazquez-Sune, M.A. Marazuela, J. Mateo Lazaro, J.A. Sanchez-Navarro (2019): Sustainability indicator for the prevention of potential thermal interferences between groundwater heat pump systems in urban aquifers, *Renewable Energy* 134, 14–24. doi:10.1016/j.renene.2018.11.002.

García Gil, A., E. A. Garrido Schneider, M. Mejias Moreno, J. C. Santamarta Cerezal (2022): Management and governance of shallow geothermal energy resources, *Shallow Geothermal Energy*, Springer, pp. 237–272.

Kinzelbach, W. (1987): *Numerische Methoden zur Modellierung des Transports von Schadstoffen im Grundwasser*, Oldenbourg, 1987.

Lo Russo, S., M. V. Civita (2009): Open-loop groundwater heat pumps development for large buildings: A case study, *Geothermics* 38, 335–345. doi:10.1016/j.geothermics.2008.12.009.

Marcotte, D., P. Pasquier, F. Sheriff, M. Bernier (2010): The importance of axial effects for borehole design of geothermal heat-pump systems, *Renewable Energy* 35, 763–770. doi:10.1016/j.renene.2009.09.015.

Milnes, E., P. Perrochet (2013): Assessing the impact of thermal feedback and recycling in open-loop groundwater heat pump (gwhp) systems: a complementary design tool, *Hydrogeology journal* 21, 505–514.

Park, D. K., D. Kaown, K.-K. Lee (2020): Development of a simulation-optimization model for sustainable operation of groundwater heat pump system, *Renewable Energy* 145, 585–595. doi:10.1016/j.renene.2019.06.039.

Pophillat, W., G. Attard, P. Bayer, J. Hecht-Méndez, P. Blum (2020): Analytical solutions for predicting thermal plumes of groundwater heat pump systems, *Renewable Energy* 147, 2696–2707. doi:10.1016/j.renene.2018.07.148.

Somogyi, V., V. Sebestyén, E. Domokos, A. Zseni, Z. Papp (2015): Thermal impact assessment with hydrodynamics and transport modeling, *Energy Conversion and Management* 104, 127–134. doi:10.1016/j.enconman.2015.04.045.

Umweltministerium Baden-Württemberg (2009): Arbeitshilfe zum Leitfaden zur Nutzung von Erdwärme mit Grundwasserwärmepumpen, 2009.

Zhou, Y.-z., Z.-f. Zhou (2009): Simulation of Thermal Transport in Aquifer: A GWHP System in Chengdu, China, *Journal of Hydrodynamics* 21, 647–657. doi:10.1016/S1001-6058(08)60196-1.

Energiesystemmodellierung

ALM (2020): Amtsblatt der Landeshauptstadt München - Nr. 9/2020, [online] <https://www.muenchen.de/rathaus/Stadtrecht/Amtsblatt.html>.

Bach, B., J. Werling, T. Ommen, M. Münster, J. M. Morales, B. Elmegaard (2016): Integration of large-scale heat pumps in the district heating systems of greater copenhagen, *Energy* 107, 321-334. doi:10.1016/j.energy.2016.04.029.

BDEW (2019): Entwicklung des Wärmeverbrauchs in Deutschland: Basisdaten und Einflussfaktoren, [online] <https://www.bdew.de/service/anwendungshilfen/fakten-und-argumente-entwicklung-des-waermeverbrauchs-deutschland/>.

BDEW (2020), Standardlastprofile Strom, [online] <https://www.bdew.de/energie/standardlastprofile-strom/>

BMWi (2019): Energieeffizienz in Zahlen: Entwicklungen und Trends in Deutschland 2019, https://www.bmwi.de/Redaktion/DE/Publikationen/Energie/energieeffizienz-in-zahlen-2019.pdf?__blob=publicationFile&v=72.

Böttcher, F., K. Davis, S. Halilovic, L. Odersky, V. Pauw, T. Schramm, K. Zosseder (2021): Optimising the thermal use of groundwater for a decentralized heating and cooling supply in the city of Munich, Germany, <https://doi.org/10.5194/egusphere-egu21-14929>. doi:10.5194/egusphere-egu21-14929.

Casasso, A., B. Piga, R. Sethi, J. Prestor, S. Pestotnik, M. Bottig, G. Goetzl, P. Zambelli, V. D'Alonzo, R. Vaccaro, P. Capodaglio, M. Olmedo, A. Baietto, C. Maragna, F. Böttcher, K. Zoesseder (2017): The GRETA project: the contribution of near-surface geothermal energy for the energetic self-sufficiency of Alpine regions, *Acque Sotteranee - Italian Journal of Groundwater* 6, doi:10.7343/as-2017-265.

Clyde, C. G., G. V. Madabhushi (1983): Spacing of wells for heat pumps, *Journal of Water Resources Planning and Management* 109, 203{212. doi:10.1061/(ASCE)0733-9496(1983)109:3(203).

Conrad, J., S. Greif (2019): Modelling Load Profiles of Heat Pumps, *Energies* 12, 766. doi:10.3390/en12040766.

DIN EN 14825:2016-10, Luftkonditionierer, Flüssigkeitskühlsätze und Wärmepumpen mit elektrisch angetriebenen Verdichtern zur Raumbeheizung und -kühlung - Prüfung und Leistungsbemessung unter Teillastbedingungen und Berechnung der saisonalen Arbeitszahl; Deutsche Fassung EN 14825:2016, 2016. doi:10.31030/2436322.

Dorfner, J. (2016): Open Source Modelling and Optimisation of Energy Infrastructure at Urban Scale, PhD Thesis, Technical University of Munich, Munich, 2016.

Dorfner, J. (2020): urbs: A linear optimisation model for distributed energy systems, [online] <https://github.com/tum-ens/urbs>

Fei, L., H. Pingfang (2012): Energy and exergy analysis of a ground water heat pump system, *Physics Procedia* 24, 169-175. doi:10.1016/j.phpro.2012.02.026.

Fischer, D., T. Wolf, J. Wapler, R. Hollinger, H. Madani (2017): Model-based exibility assessment of a residential heat pump pool, *Energy* 118, 853-864. doi:10.1016/j.energy.2016.10.111.

Gerhardt, N., F. Sandau, A. Scholz, H. Hahn, P. Scumacher, C. Sager, F. Bergk, C. Kämper, W. Knörr, J. Kräck, U. Lambrecht, O. Antoni, J. Hilpert, K. Merkel, T. Müller (2015): Interaktion EE-Strom, Wärme und Verkehr, https://www.iee.fraunhofer.de/content/dam/iee/energiesystemtechnik/de/Dokumente/Veroeffentlichung/en/2015/Interaktion_EEStrom_Waerme_Verkehr_Endbericht.pdf.

Günther, D., M. Miara, R. Langner, S. Helmling, J. Wapler (2014): WP Monitor Feldmessung von Wärmepumpenanlagen, <https://wp-monitoring.ise.fraunhofer.de/wp-monitor-plus/german/index/ergebnisse.html>.

Gurobi L. (2020): Optimization, Gurobi optimizer reference manual, [online] <http://www.gurobi.com>.

Heilek, C. (2015): Modellgestützte Optimierung des Neubaus und Einsatzes von Erzeugungsanlagen und Speichern für elektrische und thermische Energie im deutschen Energiesystem, PhD Thesis, Technical University of Munich, Munich, 2015.

Hesaraki, A., S. Holmberg, F. Haghighat (2015): Seasonal thermal energy storage with heat pumps and low temperatures in building projects. A comparative review, *Renewable and Sustainable Energy Reviews* 43, 1199-1213. doi:10.1016/j.rser.2014.12.002.

Icha, P., G. Kuhs (2020): Entwicklung der spezifischen Kohlendioxid-Emissionen des deutschen Strommix in den Jahren 1990 - 2019, <https://www.umweltbundesamt.de/publikationen/entwicklung-der-spezifischen-kohlendioxid-6>.

IWU (2016): TABULA Web Tool, [online] <http://webtool.building-typology.eu/#bd>, 2016.

Jarre, M., M. Noussan, M. Simonetti (2018): Primary energy consumption of heat pumps in high renewable share electricity mixes, *Energy Conversion and Management* 171, 1339-1351. doi:10.1016/j.enconman.2018.06.067.

Karlsson, M., A. Gebremedhin, S. Klugman, D. Henning, B. Moshfegh (2009): Regional energy system optimization – Potential for a regional heat market, *Applied Energy* 86, 441-451. doi:10.1016/j.apenergy.2008.09.012.

Kenkmann, T., T. Hesse, F. Hülsmann, C. Timpe, K. Hoppe (2017): Klimaschutzziel und -strategie München 2050, <https://www.oeko.de/publikationen/p-details/klimaschutzziel-und-strategie-muenchen-2050>.

Kim, J., Y. Nam (2016): A numerical study on system performance of groundwater heat pumps, *Energies* 9, 4. doi:10.3390/en9010004.

Kjaer Jensen, J., T. Ommen, L. Reinholdt, W. Brix Markussen, B. Elmegaard (2018): Heat pump COP, part 2: generalized COP estimation of heat pump processes, doi:10.18462/IIR.GL.2018.1386.

Kruse, J., O. Hennes, T. Wildgrube, D. Lencz, M. Hintermayer, M. Gierkink, J. Peter, S. Lorenczik: (2018): dena-Leitstudie Integrierte Energiewende: Teil B, 2018. https://www.dena.de/fileadmin/dena/Dokumente/Pdf/9261_dena-Leitstudie_Integrierte_Energiewende_lang.pdf.

LAK (2019): Länderarbeitskreis Energiebilanzen: Spezifische CO₂-Emissionen der Strom- und Wärmeerzeugung, [online] <http://www.lak-energiebilanzen.de/spezifische-co2-emissionen-der-strom-und-waermeerzeugung/>.

Lauf, T., M. Memmler, S. Schneider (2019): Emissionsbilanz erneuerbarer Energieträger: Bestimmung der vermiedenen Emissionen im Jahr 2018, [online]

https://www.umweltbundesamt.de/sites/default/files/medien/1410/publikationen/2019-11-07_cc-37-2019_emissionsbilanz-erneuerbarer-energien_2018.pdf.

Memmler, M., T. Lauf, S. Schneider (2018): Emissionsbilanz erneuerbarer Energieträger: Bestimmung der vermiedenen Emissionen im Jahr 2017, [online] <https://www.umweltbundesamt.de/publikationen/emissionsbilanz-erneuerbarer-energietraeger-2017>.

Miara, M., D. Günther, T. Kramer, T. Oltersdorf, J. Wapler (2011): Wärmepumpen Effizienz: Messtechnische Untersuchung von Wärmepumpenanlagen zur Analyse und Bewertung der Effizienz im realen Betrieb, https://wp-monitoring.ise.fraunhofer.de/wp-effizienz/download/wp_effizienz_endbericht_langfassung.pdf.

Milnes, E., P. Perrochet (2013): Assessing the impact of thermal feedback and recycling in open-loop groundwater heat pump (GWHP) systems: a complementary design tool, *Hydrogeology Journal* 21, 505-514. doi:10.1007/s10040-012-0902-y.

Molar-Cruz, A. (2019): A GIS-based gray-box approach for the estimation of heat demand at the urban scale, 38th International Energy Workshop, International Energy Agency, Paris, France, 2019.

Molar-Cruz, A. (2020): UrbanHeatPro, [online] <https://github.com/tum-ens/UrbanHeatPro>

Nolting, L., S. Steiger, A. Praktiknjo (2018): Assessing the validity of European labels for energy efficiency of heat pumps, *Journal of Building Engineering* 18, 476-486. doi:10.1016/j.jobe.2018.02.013.

Petrovic, S. N., K. B. Karlsson (2016): Residential heat pumps in the future danish energy system, *Energy* 114, 787-797. doi:10.1016/j.energy.2016.08.007.

Pieper, H., T. Ommen, J. Kjaer Jensen, B. Elmegaard, W. Brix Markussen (2020): Comparison of cop estimation methods for large-scale heat pumps used in energy planning, *Energy* 205, 117994. doi:10.1016/j.energy.2020.117994.

PIW, Planung und Installation: Wärmepumpen (2019): [online] https://www.stiebel-eltron.de/content/dam/ste/de/de/products/downloads/Planungsunterlagen/Planungshandbuch/Planungshandbuch_EE_Waermepumpen.pdf.

Quiggin, D., R. Buswell (2016): The implications of heat electrification on national electrical supply-demand balance under published 2050 energy scenarios, *Energy* 98, 253-270. doi:10.1016/j.energy.2015.11.060.

Ruhnau, O., L. Hirth, A. Praktiknjo (2019): Time series of heat demand and heat pump efficiency for energy system modeling, *Scientific data* 6, 189. doi:10.1038/s41597-019-0199-y.

Schlesinger, M., P. Hofer, A. Kemmler, A. Kirchner, S. Koziel, A. Ley, A. Piegsa, F. Seefeldt, S. Straßburg, K. Weinert, D. Lindenberger, A. Knaut, R. Malischek, S. Nick, T. Panke, S. Paulus, C. Tode, J. Wagner, C. Lutz, U. Lehr, P. Ulrich (2014): Entwicklung der Energiemärkte - Energiereferenzprognose, 2014, https://www.bmwi.de/Redaktion/DE/Publikationen/Studien/entwicklung-der-energiemaerkte-energiereferenzprognose-endbericht.pdf?__blob=publicationFile&v=7.

Siala, K., M. Y. Mahfouz (2019): Impact of the choice of regions on energy system models, *Energy Strategy Reviews* 25, 75-85. doi:10.1016/j.esr.2019.100362.

Staffell, I., D. Brett, N. Brandon, A. Hawkes (2012): A review of domestic heat pumps, *Energy & Environmental Science* 5, 9291. doi:10.1039/c2ee22653g.

Stoffregen, A., J. Hengstler, B. Reuter, O. Schuller (2017): Ökoeffizienzanalyse von Heiz- und Speichersystemen für private Haushalte, [online] https://www.energieatlas.bayern.de/file/pdf/2096/LfU_Oekoeffizienzanalyse_20170217_final.pdf.

SWM (2015): Fernwärme und Rücklauftemperatur in modernen Niedertemperaturnetzen, [online] <https://www.swm.de/dam/jcr:7821c04d-9a95-44bf-9edb-2792c8c89f28/broschuere-fernwaerme-ruecklauftemperatur.pdf>.

SWM (2020): Preisblatt Netzanschlüsse: der SWM Versorgungs GmbH, [online] <https://www.swm.de/dam/swm/dokumente/kundenservice/netzanschluss/preise-netzanschluesse.pdf>.

Tiator, I., M. Schenker (2014): Wärmepumpen, Wärmepumpenanlagen, 2., überarb. au. ed., Vogel, Würzburg, 2014.

Zhu, N., P. Hu, W. Wang, J. Yu, F. Lei (2015): Performance analysis of ground water-source heat pump system with improved control strategies for building retrofit, *Renewable Energy* 80, 324–330. doi:10.1016/j.renene.2015.02.021.

Zottl, A., R. Nordman, M. Miara (2012): Benchmarking method of seasonal performance, <http://sepemo.ehpa.org/deliverables/wp4/>.

Kopplung des thermischen Transports im Grundwasser mit der Entwicklung des Stadtenergiesystems (Kapitel II.1.3)

Balay, B., et al. (2022): PETSc Web page, [online] <https://petsc.org/>, 2022

Chourdakis, G., K. Davis, B. Rodenberg, et al. (2022): preCICE v2: A sustainable and user-friendly coupling library. *Open Res Europe* 2022, 2:51. doi: 10.12688/openreseurope.14445.2.

Hammond, G., P. Lichtner; R. Mills (2014): Evaluating the performance of parallel subsurface simulators: an illustrative example with pflotran, *Water Resources Research* 50, pp. 208–228, doi:10.1002/2012WR013483.

Keyes, D., et al. (2012): Multiphysics Simulations: Challenges and Opportunities. Tech. rep., Argonne National Laboratory, 2012.

Wagstaff, Kiri, Claire Cardie, Seth Rogers, Stefan Schrödl (2001): Constrained k-means clustering with background knowledge. *Icml*, vol. 1, pp. 577–584

Walker, H., P. Ni (2011): Anderson acceleration for fixed-point iterations, *SIAM Journal on Numerical Analysis* 49, pp. 1715–1735.

Optimierungsszenarien (Kapitel II.1.6)

Bogaers, A., et al. (2014): Quasi-Newton methods for implicit black-box FSI coupling, *Comput. Methods, Appl. Mech. Engrg.* 279, pp. 113–132, I S S N: 0045-7825, doi:10.1016/j.cma.2014.06. 033, doi: 10.1016/j.cma.2014.06.033.

Bogaers, A., et al. (2016): An evaluation of quasi-newton methods for application to FSI problems involving free surface flow and solid body contact, *Comput. Struct.* 173, pp. 71–83, doi: 10.1016/j.compstruc.2016.05.018.

Degroote, J., K-J. Bathe, J. Vierendeels (2009): Performance of a new partitioned procedure versus a monolithic procedure in fluid structure interaction, *Computers and Structures* 87.11-12, pp. 793–801, ISSN: 0045-7949, doi: 10.1016/j.compstruc.2008.11.013, <http://dx.doi.org/10.1016/j.compstruc.2008.11.013>.

Fang, H. R., Y. Saad, Y. (2009): Two classes of multiseccant methods for nonlinear acceleration, *Numerical Linear Algebra with Applications* 16.3, pp. 197–221, ISSN: 10705325, doi:10.1002/nla.617.

Haelterman, R., et al (2016): Improving the performance of the partitioned QN-ILS procedure for fluid-structure interaction problems: Filtering, *Computers and Structures* 171, pp. 9–17, ISSN: 00457949, doi:10.1016/j.compstruc.2016.04.001.

Lindner, F., et al. (2015): A comparison of various quasi-newton schemes for partitioned fluid-structure interaction, proceedings of the VI International Conference on Computational Methods for Coupled Problems in Science and Engineering, Venice, Italy, pp. 477–488.

Scheufele, K. (2018): Coupling Schemes and Inexact Newton for Multi-Physics and Coupled Optimization Problems, PhD thesis, Universität Stuttgart, 2018.

Spenske, T., N. Hosters, M. Behr (2020): A multi-vector interface quasi-Newton method with linear complexity for partitioned fluid-structure interaction, *Computer Methods in Applied Mechanics and Engineering* 361, ISSN: 00457825, doi:10.1016/j.cma.2019.112810, arXiv: 2001.07947.

Synthetische Simulation der Wärme- und Kältenachfrage

Andric, I., Gomes, N., Pina, A., Ferrão, P., Fournier, J., Lacarrière, B., Le Corre, O. (2016): Modeling the long-term effect of climate change on building heat demand: Case study on a district level. *Energy and Buildings*, 126, 77–93. doi:10.1016/j.enbuild.2016.04.082.

Andric, I., Pina, A., Ferrão, P., Fournier, J., Lacarrière, B., Le Corre, O. (2017): The impact of climate change on building heat demand in different climate types. *Energy and Buildings*, 149, 225–234. doi:10.1016/j.enbuild.2017.05.047.

Andric, I., Fournier, J., Lacarrière, B., Le Corre, O., Ferrão, P. (2018): The impact of global warming and building renovation measures on district heating system techno-economic parameters. *Energy*, 150, 926–937. doi:10.1016/j.energy.2018.03.027.

Araz Ashouri, Samira Fazlollahi., Michael J Benz., François Maréchal (2015): Particle Swarm Optimization and Kalman Filtering for Demand Prediction of Commercial Buildings

Bacher, P., Madsen, H. (2011): Identifying suitable models for the heat dynamics of buildings. *Energy and Buildings*, 43, 1511–1522. doi:10.1016/j.enbuild.2011.02.005.

Ballarini, I., Corrado, V., Madonna, F., Paduos, S., Ravasio, F. (2017): Energy refurbishment of the Italian residential building stock: energy and cost analysis through the application of the building typology. *Energy Policy*, 105, 148–160. doi:10.1016/j.enpol.2017.02.026.

Bastin, J.F., Clark, E., Elliott, T., Hart, S., van den Hoogen, J., Hordijk, I., Ma, H., Majumder, S., Manoli, G., Maschler, J., Mo, L., Routh, D., Yu, K., Zohner, C.M., Crowther, T.W. (2019): Understanding climate change from a global analysis of city analogues, *PloS one*, 14, e0217592. doi:10.1371/journal.pone.0217592.

Diefenbach, N., Loga, T., Stein, B. (2015): Szenarienanalysen und Monitoringkonzepte im Hinblick auf die langfristigen Klimaschutzziele im deutschen Wohngebäudebestand: Bericht im Rahmen des europäischen Projekts EPISCOPE, Institut Wohnen und Umwelt: Darmstadt, 2015.

Forschungsgesellschaft für Energiewirtschaft mbH (2018). *Wärmewende München 2040: Handlungsempfehlungen: Endbericht.*

GeoPortal München, [online] <https://stadt.muenchen.de/infos/geoportal-muenchen.html> [20.11.2020]

Hanke, J., Marczuk, M., Ruhnke, S., Eibler, L. (2019): *Demografiebericht München – Teil 2: Kleinräumige Bevölkerungsprognose 2017 bis 2040 für die Stadtbezirke*

Harb, H., Boyanov, N., Hernandez, L., Streblov, R., Müller, D. (2016): Development and validation of grey-box models for forecasting the thermal response of occupied buildings. *Energy and Buildings*, 117, 199–207. doi:10.1016/j.enbuild.2016.02.021.

IWU (2013): *Typology Approach for Building Stock Energy Assessment - Calculation Method*, Institut Wohnen und Umwelt GmbH (IWU), Darmstadt, 2013

IWU (2016): *TABULA Web Tool*, [online] <http://webtool.building-typology.eu/#bd>, 2016.

Jordan, U., Vajen, K. *Realistic* (2001): *Domestic Hot-Water Profiles in Different Time Scales.*

Kenkmann, T., Hesse, T., Hülsmann, F., Timpe, C., Hoppe, K. (2017): *Klimaschutzziel und -strategie München 2050: Endbericht: Öko-Institut e.V.*

McKenna, R., Merkel, E., Fehrenbach, D., Mehne, S., Fichtner, W. (2013): Energy efficiency in the German residential sector: A bottom-up building-stock-model-based analysis in the context of energy-political targets. *Building and Environment*, 62, 77–88. doi:<https://doi.org/10.1016/j.buildenv.2013.01.002>.

Park, H., Ruellan, M., Bouvet, A., Monmasson, E., Bennacer, R. (2011): Thermal parameter identification of simplified building model with electric appliance, 11th International Conference on Electrical Power Quality and Utilisation, Staff, I., Ed., IEEE: [Place of publication not identified], pp. 1–6. doi:10.1109/EPQU.2011.6128822.

Passer, A., Ouellet-Plamondon, C., Kenneally, P., John, V., Habert, G. (2016): The impact of future scenarios on building refurbishment strategies towards plus energy buildings. *Energy and Buildings*, 124, 153–163. doi:10.1016/j.enbuild.2016.04.008.

Schmid, T. (2018): Dynamische und kleinräumige Modellierung der aktuellen und zukünftigen Energienachfrage und Stromerzeugung aus Erneuerbaren Energien. PhD thesis, Technische Universität München, München

Shen, P. (2017): Impacts of climate change on U.S. building energy use by using downscaled hourly future weather data. *Energy and Buildings*, 134, 61–70. doi:10.1016/j.enbuild.2016.09.028.

Sperber, E., Frey, U., Bertsch, V. (2020): Reduced-order models for assessing demand response with heat pumps – Insights from the German energy system. *Energy and Buildings*, 223, 110144. doi:<https://doi.org/10.1016/j.enbuild.2020.110144>.

Statistische Ämter des Bundes und der Länder (Hrsg.) (2015): ZENSUS2011 - Zensusatlas. Bevölkerungszahl. Online verfügbar unter <https://atlas.zensus2011.de/>, zuletzt aktualisiert am 06.08.2020, zuletzt geprüft am 20.11.2020.

Unterirdische Urbane Wärmeinseln

Becker, D., & Epting, J. (2021): Thermischer Einfluss urbaner Untergrundstrukturen auf die Grundwassertemperaturen im Kanton Basel-Stadt. *Grundwasser*, 26(3), 269–288. <https://doi.org/10.1007/s00767-021-00483-1>

Benz, S. A., Bayer, P., Menberg, K., Jung, S., & Blum, P. (2015): Spatial resolution of anthropogenic heat fluxes into urban aquifers. *Science of the Total Environment*, 524–525, 427–439. <https://doi.org/10.1016/j.scitotenv.2015.04.003>

Benz, S. A., Bayer, P., & Blum, P. (2017): Identifying anthropogenic anomalies in air, surface and groundwater temperatures in Germany. *Science of the Total Environment*, 584–585, 145–153. <https://doi.org/10.1016/j.scitotenv.2017.01.139>

Benz, S. A., Bayer, P., Blum, P., Hamamoto, H., Arimoto, H., & Taniguchi, M. (2018): Comparing anthropogenic heat input and heat accumulation in the subsurface of Osaka, Japan. *Science of the Total Environment*, 643, 1127–1136. <https://doi.org/10.1016/j.scitotenv.2018.06.253>

Bidarmaghz, A., Choudhary, R., Soga, K., Kessler, H., Terrington, R. L., & Thorpe, S. (2019): Influence of geology and hydrogeology on heat rejection from residential basements in urban areas. *Tunnelling and Underground Space Technology*, 92 (August), 103068. <https://doi.org/10.1016/j.tust.2019.103068>

Çomakli, K., Yüksel, B., & Çomakli, Ö. (2004): Evaluation of energy and exergy losses in district heating network. *Applied Thermal Engineering*, 24(7), 1009–1017. <https://doi.org/10.1016/j.applthermaleng.2003.11.014>

Dohr, F. (2011): Grundwassertemperaturen München: Messungen 2009 - 2010. München.

Epting, J., Händel, F., & Huggenberger, P. (2013): Thermal management of an unconsolidated shallow urban groundwater body. *Hydrology and Earth System Sciences*, 17(5), 1851–1869. <https://doi.org/10.5194/hess-17-1851-2013>

- Epting, Jannis, & Huggenberger, P. (2013): Unraveling the heat island effect observed in urban groundwater bodies - Definition of a potential natural state. *Journal of Hydrology*, 501, 193–204. <https://doi.org/10.1016/j.jhydrol.2013.08.002>
- Epting, J., Böttcher, F., Mueller, M. H., García-Gil, A., Zosseder, K., & Huggenberger, P. (2020): City-scale solutions for the energy use of shallow urban subsurface resources – Bridging the gap between theoretical and technical potentials. *Renewable Energy*, 147. <https://doi.org/10.1016/j.renene.2019.09.021>
- Farr, G. J., Patton, A. M., Boon, D. P., James, D. R., Williams, B., & Schofield, D. I. (2017): Mapping shallow urban groundwater temperatures, a case study from Cardiff, UK. *Quarterly Journal of Engineering Geology and Hydrogeology*, 50(2), 187–198. <https://doi.org/10.1144/qjgegh2016-058>
- Funk, D., Groß, G., & Trute, P. (2014): Stadtklimaanalyse Landeshauptstadt München. Landeshauptstadt München - Referat für Gesundheit und Umwelt. Munich.
- Li, X., Zhou, Y., Yu, S., Jia, G., Li, H., & Li, W. (2019): Urban heat island impacts on building energy consumption: A review of approaches and findings. *Energy*, 174, 407–419. <https://doi.org/10.1016/j.energy.2019.02.183>
- Menberg, K., Bayer, P., Zosseder, K., Rumohr, S., & Blum, P. (2013): Subsurface urban heat islands in German cities. *Science of the Total Environment*, 442, 123–133. <https://doi.org/10.1016/j.scitotenv.2012.10.043>
- Menberg, K., Blum, P., Schaffitel, A., & Bayer, P. (2013): Long-term evolution of anthropogenic heat fluxes into a subsurface urban heat island. *Environmental Science and Technology*, 47(17), 9747–9755. <https://doi.org/10.1021/es401546u>
- Mühlbacher, G., Koßmann, M., Sedlmeier, K., & Winderlich, K. (2020): Stadtklimatische Untersuchungen der sommerlichen Temperaturverhältnisse und des Tagesgangs des Regionalwindes („Alpines Pumpen“) in München. Offenbach am Main.
- Oke, T. R. (1982): The energetic basis of the urban heat island. *Quarterly Journal of the Royal Meteorological Society*, 108(455), 1–24.
- Rivera, J. A., Blum, P., & Bayer, P. (2017): Increased ground temperatures in urban areas: Estimation of the technical geothermal potential. *Renewable Energy*, 103, 388–400. <https://doi.org/10.1016/j.renene.2016.11.005>
- Sami, S. M., & Maltais, H. (2000): On transient heat losses from buried district heating pipes. *International Journal of Energy Research*, 24(15), 1311–1334. [https://doi.org/10.1002/1099-114X\(200012\)24:15<1311::AID-ER648>3.0.CO;2-Q](https://doi.org/10.1002/1099-114X(200012)24:15<1311::AID-ER648>3.0.CO;2-Q)
- Taniguchi, M., Uemura, T., & Sakura, Y. (2005): Effects of urbanization and groundwater flow on subsurface temperature in three megacities in Japan. *Journal of Geophysics and Engineering*, 2(4), 320–325. <https://doi.org/10.1088/1742-2132/2/4/S04>
- Tissen, C., Benz, S. A., Menberg, K., Bayer, P., & Blum, P. (2019): Groundwater temperature anomalies in Central Europe. *Environmental Research Letters*, 14(December 2016), 104012. <https://doi.org/10.1088/1748-9326/ab4240>
- Visser, P. W., Kooi, H., Bense, V., & Boerma, E. (2020): Impacts of progressive urban expansion on subsurface temperatures in the city of Amsterdam (The Netherlands). *Hydrogeology Journal*, 28(5), 1755–1772. <https://doi.org/10.1007/s10040-020-02150-w>
- Zhu, K., Blum, P., Ferguson, G., Balke, K.-D., & Bayer, P. (2010): The geothermal potential of urban heat islands. *Environmental Research Letters*, 5(4), 6. <https://doi.org/10.1088/1748-9326/5/4/044002>
- Zhu, K., Bayer, P., Grathwohl, P., & Blum, P. (2015): Groundwater temperature evolution in the subsurface urban heat island of Cologne, Germany. *Hydrological Processes*, 29(6), 965–978. <https://doi.org/10.1002/hyp.10209>

Numerische Grundwassermodellierung

Al-Khoury, R. (2012): Computational modeling of Shallow Geothermal Systems. (Jochen Bundschuh & M. C. Suárez Arriaga, Eds.), Multiphysics Modeling (1st ed., Vol. 4). Boca Raton: Taylor & Francis Group. <https://doi.org/10.1037/13620-021>

Bear, J., & Cheng, A. (2010): Modeling Groudwater flow and contaminant transport. In Theory and Applications of Transport in Porous Media (p. 850). Heidelberg: Springer Science & Business Media. <https://doi.org/10.1007/978-1-4020-6682-5>

Bundschuh, J., & Suarez, M. (2010): Introduction to the Numerical Modeling of Groundwater and Geothermal systems (Vol. 2). London: Taylor & Francis Group.

Diersch, H. J. G., Bauer, D., Heidemann, W., Ruhaak, W., & Schätzl, P. (2011): Finite element modeling of borehole heat exchanger systems. Part 1. Fundamentals. Computers and Geosciences, 37(8), 1122–1135. <https://doi.org/10.1016/j.cageo.2010.08.003>

Doherty, J. E. (2015): Calibration and uncertainty analysis for complex environmental models. Brisbane, Australia: Watermark Numerical Computing.

Doherty, J., Brebber, L., & Whyte, P. (2017): PEST: Model-Independent Parameter Estimation. Corinda, Australia. Retrieved from <https://www.epa.gov/sites/production/files/documents/PESTMAN.PDF>

Eymard, R., T. Gallouët, R. Herbin (2000): Volume Methods. J. L. Lions; Philippe Ciarlet. Solution of Equation in n (Part 3), Techniques of Scientific Computing (Part 3), 7, Elsevier, pp.713-1020, Handbook of Numerical Analysis, 9780444503503. 10.1016/S1570-8659(00)07005-8 hal-02100732v2, <https://hal.archives-ouvertes.fr/hal-02100732v2/document>

Gaston, D., Newman, C., Hansen, G., & Lebrun-Grandié, D. (2009): MOOSE: A parallel computational framework for coupled systems of nonlinear equations. Nuclear Engineering and Design, 239(10), 1768–1778. <https://doi.org/10.1016/j.nucengdes.2009.05.021>

Kumar, C. P. (2012): Groundwater Modelling Software – Capabilities and Limitations. Journal of Environmental Science, Toxicology and Food Technology, 1(2), 46–57. <https://doi.org/10.9790/2402-0124657>

Podgorney, R., Huang, H., & Gaston, D. (2010): Massively parallel fully couoped implicit modelling of coupled thermal-hydrological-mechanical processes for enhanced geothermal system reservoirs. In PROCEEDINGS, Thirty-Fifth Workshop on Geothermal Reservoir Engineering (p. 14). Stanford, California: Stanford University. Retrieved from <http://www.inl.gov/technicalpublications/Documents/4460711.pdf%5Cnpapers2://publication/uuid/B91D9697-06EE-423D-A0D8-8D5962999595>

Potentialermittlung für thermische Grundwassernutzung

Alcaraz, M., Garcia-Gil, A., Vazquez-Sune, E., & Velasco, V. (2016): Use rights markets for shallow geothermal energy management. Applied Energy, 172, 34–46. <https://doi.org/10.1016/j.apenergy.2016.03.071>

Alcaraz, M., García-Gil, A., Vázquez-Suñé, E., Velasco, V., Garcia-Gil, A., Vazquez-Sune, E., & Velasco, V. (2016): Advection and dispersion heat transport mechanisms in the quantification of shallow geothermal resources and associated environmental impacts. Science of the Total Environment, 543, 536–546. <https://doi.org/10.1016/j.scitotenv.2015.11.022>

Arola, T., Eskola, L., Hellen, J., & Korkka-Niemi, K. (2014): Mapping the low enthalpy geothermal potential of shallow Quaternary aquifers in Finland. Geothermal Energy, 2(1), 9. <https://doi.org/10.1186/s40517-014-0009-x>

- Banks, D. (2009): Thermogeological assessment of open-loop well-doublet schemes: A review and synthesis of analytical approaches. *Hydrogeology Journal*, 17(5), 1149–1155. <https://doi.org/10.1007/s10040-008-0427-6>
- Bayer, P., Attard, G., Blum, P., & Menberg, K. (2019): The geothermal potential of cities. *Renewable and Sustainable Energy Reviews*, 106(February), 17–30. <https://doi.org/10.1016/J.RSER.2019.02.019>
- Bezelgues, S., Martin, J., Schomburgk, S., Monnot, P., Nguyen-the, D., Nguyen, D., Le Brun M., Desplan, A. (2010): Geothermal Potential of Shallow Aquifers: Decision-Aid Tool for Heat-Pump Installation. In *World Geothermal Congress* (p. 9). Bali, Indonesia.
- Busby, J., Lewis, M., Reeves, H., & Lawley, R. (2009): Initial geological considerations before installing ground source heat pump systems. *Quarterly Journal of Engineering Geology and Hydrogeology*, 42(3), 295–306. <https://doi.org/10.1144/1470-9236/08-092>
- Casasso, A., & Sethi, R. (2015): Modelling thermal recycling occurring in groundwater heat pumps (GWHPs). *Renewable Energy*, 77, 86–93. <https://doi.org/10.1016/j.renene.2014.12.003>
- Casasso, A., & Sethi, R. (2017): Assessment and mapping of the shallow geothermal potential in the province of Cuneo (Piedmont, NW Italy). *Renewable Energy*, 102, 306–315. <https://doi.org/10.1016/j.renene.2016.10.045>
- Clyde, C., & Madabhushi, G. (1983): Spacing of wells for heat pumps. *Journal of Water Resources Planning and Management*, 109(07), 203–212. [https://doi.org/10.1061/\(ASCE\)0733-9496\(1983\)109:3\(203\)](https://doi.org/10.1061/(ASCE)0733-9496(1983)109:3(203))
- Fraunhofer IWES/IBP. (2017): *Wärmewende 2030. Schlüsseltechnologien zur Erreichung der mittel- und langfristigen Klimaschutzziele im Gebäudesektor*. Kassel.
- Fry, V. A. (2009): Lessons from London: regulation of open-loop ground source heat pumps in central London. *Quarterly Journal of Engineering Geology and Hydrogeology*, 42(3), 325–334. <https://doi.org/10.1144/1470-9236/08-087>
- Galgaro, A., & Cultrera, M. (2013): Thermal short circuit on groundwater heat pump. *Applied Thermal Engineering*, 57(1–2), 107–115. <https://doi.org/10.1016/j.applthermaleng.2013.03.011>
- García-Gil, A., Vázquez-Suñe, E., Alcaraz, M. M., Juan, A. S., Sánchez-Navarro, J. Á., Montlleó, M., Rodríguez, G., Lao, J. J. (2015): GIS-supported mapping of low-temperature geothermal potential taking groundwater flow into account. *Renewable Energy*, 77, 268–278. <https://doi.org/10.1016/j.renene.2014.11.096>
- García-Gil, A., Vázquez-Suñe, E., Schneider, E. G., Sánchez-Navarro, J. Á., & Mateo-Lázaro, J. (2015): Relaxation factor for geothermal use development - Criteria for a more fair and sustainable geothermal use of shallow energy resources. *Geothermics*, 56, 128–137. <https://doi.org/10.1016/j.geothermics.2015.04.003>
- Jacob, C. E. (1946): Drawdown test to determine effective radius of artesian well. *Proc. Am. Soc. Civ. Eng.*, 72(5), 629–646.
- Javandel, I., & Tsang, C. -F. (1986): Capture-Zone Type Curves: A Tool for Aquifer Cleanup. *Groundwater*, 24(5), 616–625. <https://doi.org/10.1111/j.1745-6584.1986.tb03710.x>
- Lee, J. Y., Won, J. H., & Hahn, J. S. (2006): Evaluation of Hydrogeologic conditions for groundwater heat pumps: Analysis with data from national groundwater monitoring stations. *Geosciences Journal*, 10(1), 91–99. <https://doi.org/10.1007/BF02910336>
- Lippmann, M. J., & Tsang, C. F. (1980): Groundwater Use for Cooling-Associated Aquifer Temperature Changes. *Groundwater*, 18(5), 452–458. <https://doi.org/10.1111/j.1745-6584.1980.tb03420.x>
- Logan, J. (1964): Estimating transmissibility from routine production tests of water wells. *Ground Water*, 2, 35–37. <https://doi.org/10.1111/j.1745-6584.1964.tb01744.x>

Milenic, D., Vasiljevic, P., & Vranjes, A. (2010): Criteria for use of groundwater as renewable energy source in geothermal heat pump systems for building heating/cooling purposes. *Energy and Buildings*, 42(5), 649–657. <https://doi.org/10.1016/j.enbuild.2009.11.002>

Milnes, E., & Perrochet, P. (2013): Assessing the impact of thermal feedback and recycling in open-loop groundwater heat pump (GWHP) systems: a complementary design tool. *Hydrogeology Journal*, 21(2), 505–514. <https://doi.org/10.1007/s10040-012-0902-y>

Misstear, B. D. R., Banks, D., & Clarke, L. (2017): *Water Wells and Boreholes* (2nd ed.). Hoboken, NJ: Wiley-Blackwell.

Misstear, B. D. R., & Beeson, S. (2000): Using operational data to estimate the reliable yields of water-supply wells. *Hydrogeology Journal*, 8(2), 177–187. <https://doi.org/10.1007/s100400050004>

Möderl, M., Sitzenfrei, R., & Rauch, W. (2010): Empirical equation for spacing of groundwater heat pump systems. In *Proceedings of the World Environmental & Water Resources Congress 2010: Challenges of Change* (pp. 688–697). Rhode Island: ASCE.

Muñoz, M., Garat, P., Flores-Aqueveque, V., Vargas, G., Rebolledo, S., Sepúlveda, S., Daniele, L., Morata, D., Parada, M. Á. (2015): Estimating low-enthalpy geothermal energy potential for district heating in Santiago basin-Chile (33.5°S). *Renewable Energy*, 76, 186–195. <https://doi.org/10.1016/j.renene.2014.11.019>

Ondreka, J., Rüsgen, M. I., Stober, I., & Czurda, K. (2007): GIS-supported mapping of shallow geothermal potential of representative areas in south-western Germany-Possibilities and limitations. *Renewable Energy*, 32(13), 2186–2200. <https://doi.org/10.1016/j.renene.2006.11.009>

Prestor, J., Szócs, T., Rman, N., Nádor, A., Černák, R., Lapanje, A., Götzl, G. (2015): Benchmarking - Indicators of Sustainability of Thermal Groundwater Management. *World Geothermal Congress 2015* (p. 12). Melbourne, Australia.

Rauch, W., & Stegner, U. (2004): Das thermische Nutzungspotential von oberflächennahen Aquiferen aus wasserwirtschaftlicher Sicht. *Gas- Und Wasserfach. Wasser, Abwasser*, 145(5), 318–325.

Rybach, L. (2015): Classification of geothermal resources by potential. *Geothermal Energy Science*, 3(1), 13–17. <https://doi.org/10.5194/gtes-3-13-2015>

Schiel, K., Baume, O., Caruso, G., & Leopold, U. (2016): GIS-based modelling of shallow geothermal energy potential for CO₂emission mitigation in urban areas. *Renewable Energy*, 86, 1023–1036. <https://doi.org/10.1016/j.renene.2015.09.017>

Self, S. J., Reddy, B. V., & Rosen, M. A. (2013): Geothermal heat pump systems: Status review and comparison with other heating options. *Applied Energy*, 101, 341–348. <https://doi.org/10.1016/j.apenergy.2012.01.048>

Shook, G. M. (2001): Predicting thermal breakthrough in heterogeneous media from tracer tests. *Geothermics*, 30(6), 573–589. [https://doi.org/10.1016/S0375-6505\(01\)00015-3](https://doi.org/10.1016/S0375-6505(01)00015-3)

Stauffer, F., Bayer, P., Blum, P., Molina-Giraldo, N., & Kinzelbach, W. (2014): *Thermal Use of Shallow Groundwater*. Boca Raton: Taylor & Francis Group.

Urich, C., Sitzenfrei, R., Möderl, M., & Rauch, W. (2010): Einfluss der Siedlungsstruktur auf das thermische Nutzungspotential von oberflächennahen Aquiferen. *Osterreichische Wasser- Und Abfallwirtschaft*, 62(5), 113–119. <https://doi.org/10.1007/s00506-010-0188-z>

van der Gun, J., Aureli, A., & Merla, A. (2016): Enhancing groundwater governance by making the linkage with multiple uses of the subsurface space and other subsurface resources. *Water (Switzerland)*, 8(6). <https://doi.org/10.3390/w8060222>

Simulationsdaten

Davis, Kyle; Schulte, Miriam, 2022, "COM-4 model to replicate simulation results for the GEO.KW project", <https://doi.org/10.18419/darus-3185>, DaRUS, V1

Davis, Kyle; Schulte, Miriam, 2022, "REG-30 model to replicate simulation results for the GEO.KW project", <https://doi.org/10.18419/darus-3195>, DaRUS, V1

I.5 Verwendete Dokumentationsdienste

Im folgenden Abschnitt wird auf Dokumentations- und Kollaborations-Tools, Gitlab und Confluence, die am LRZ gehostet und im Projekt verwendet wurden, eingegangen.

Confluence

Das LRZ hostet für den internen Gebrauch und für wissenschaftliche Projekte, die im Haus betreut werden, die Wissensmanagement-Plattform Confluence, einer von Atlassian entwickelten Software, die auf dem Wiki-Prinzip basiert. Dadurch können alle Projektmitarbeiter jederzeit die Web-Dokumentation des Projektfortschrittes einsehen und editieren. Für das Projekt GeoKW wurde ein eigener Bereich im LRZ-Confluence eingerichtet, wo projektbezogene Informationen hinterlegt und gepflegt wurden (<https://confluence.lrz.de/display/GEOK/Geo.KW>). Dort wurden Meeting-Protokolle und Brainstorming-Ergebnisse festgehalten, ebenso wie Kurzanleitungen zu technischen Themen.

Gitlab

Im Projekt entwickelte Codes, wie Skripte, Konfigurationsdateien und angepasste Versionen der frei verfügbaren Software wurden im Kollaborations- und Versionsmanagement-Tool Gitlab hinterlegt (<https://gitlab.lrz.de/geo.kw-coders>). Das LRZ hostet eine umfangreiche Gitlab-Ultimate Instanz mit weitreichenden Möglichkeiten für Studenten, Universitätsmitarbeiter und Projektpartner. Die organisierte Zusammenarbeit und Synchronisation wird dadurch ebenso ermöglicht, wie die Dokumentation und das mittelfristige Archivieren des im Projekt entwickelten Know-Hows

I.6 Zusammenarbeit mit anderen Stellen

Innerhalb des Projekts und auch über die Projektlaufzeit hinaus wurden viele gewinnbringende Kooperationen mit verschiedenen Akteuren aufgebaut und gepflegt. Dieses Kapitel beschreibt die Zusammenarbeit und gliedert sich in den Austausch, der mit den assoziierten Partnern und weiteren Stellen stattgefunden hat.

I.6.1 Assoziierte Projektpartner

Im Folgenden wird die Zusammenarbeit mit den assoziierten Partnern beschrieben. Sie gliedert sich hauptsächlich nach den ausgetauschten Datensätzen, die für den erfolgreichen Abschluss des Projekts wichtig waren.

Landeshauptstadt München: Referat für Klimaschutz und Umwelt (vormals RGU- Referat für Umwlet und Gesundheit)

Da es sich beim RKU der Landeshauptstadt München um einen assoziierten Projektpartner handelt, war der Datenaustausch rechtlich im Vorfeld geregelt. Die im Folgenden aufgeführten Datensätze konnten daher im Rahmen der geschlossenen Kooperationsvereinbarung direkt ausgetauscht werden.

- **Öltanks:** Zur Bestimmung der aktuellen Wärme-Infrastruktur der Stadt München wurden Informationen bzgl. der installierten Ölheizungen benötigt. Hierfür wurden die beim RKU vorhandenen Daten zu genehmigten Öltanks verwendet.
- **Thermische Grundwassernutzungen:** Da im RKU auch das Wasserrecht als untere Wasserbehörde verankert ist, werden Genehmigungen von neuen Anlagen direkt im RKU durchgeführt. Aus diesem Grund pflegt das Wasserrecht eine Datenbank der genehmigten Anlagen. Diese Datenbank wurde benötigt, um einen Abgleich mit weiteren bestehenden

Datenbanken über Grundwassernutzungen an anderen Stellen (WWA München und LfU) durchzuführen. Eine detaillierte Beschreibung der weiteren Verwendung ist in Kapitel II.1.1.1.2 gegeben.

- **Grundwasserganglinien:** Das RKU hat sukzessive ein stadtweites Monitoring System der Grundwasserstände aufgebaut. Die so gesammelten historischen Verläufe von Grundwasserständen sind essentiell für eine hydraulische Kalibrierung der Grundwassermodelle. Da alle Daten zentral in einer Datenbank organisiert sind, konnte ein vollständiger Export durchgeführt werden. Die weitere Verwendung ist in Kapitel II.1.1.1.1 näher beschrieben.
- **Grundwassertemperatur-Zeitreihen:** Innerhalb des bereits erwähnten Monitoring Systems am RKU werden auch kontinuierlich Grundwassertemperaturen gemessen. Diese Temperaturen dienen ebenfalls der Kalibrierung von Grundwassermodellen hinsichtlich des Wärmetransports. Sie wurden außerdem genutzt, um die bestehende unterirdische urbane Wärmeinsel im Stadtgebiet genauer zu untersuchen. Die Verwendung der Daten ist in Kapitel II.1.1.1.5 genauer beschrieben.
- **Badewassertemperaturen:** Das RKU ist verpflichtet, eine regelmäßige Untersuchung der Wasserqualität in den Münchner Badeseen gemäß den Vorgaben der Bayerischen Badegewässerverordnung durchzuführen. Hierbei wird auch die Wassertemperatur aufgezeichnet. Da die Badegewässer im Stadtgebiet im Allgemeinen stark mit dem Grundwasser kommunizieren, kann die Wassertemperatur direkt als Randbedingung in das Modell integriert werden. Die Einbindung der Oberflächengewässer wird in Kapitel II.1.1.1.6 näher erläutert.
- **Stadtklimaanalyse und Klimafunktionskarte:** Im Auftrag des RKU wurde eine Analyse der stadtklimatischen Zusammenhänge durchgeführt, um bioklimatisch belastete Siedlungsräume (Wirkungsräume) und Kaltluft produzierende, unbebaute und vegetations geprägte Flächen (Ausgleichsräume) zu identifizieren. Um parallelen von der Oberfläche zum Untergrund hinsichtlich der urbanen Wärmeinsel ziehen zu können, wurden die Ergebnisse der Studie in die im Projekt durchgeführte Analyse integriert. Insbesondere wurde die Simulation der stadtweiten Lufttemperatur genutzt, um sie mit der Grundwassertemperatur zu korrelieren.

Zudem hat das RKU Anforderungen an die Modellierung, Kopplung sowie die GEO.KW-Web App erarbeitet und Rückmeldung zur praktischen Verwendung gegeben, die bei der Ausgestaltung der jeweiligen Werkzeuge berücksichtigt wurden.

Stadtwerke München

Da es sich bei den Stadtwerken ebenfalls um einen assoziierten Projektpartner handelt, war der Datenaustausch rechtlich im Vorfeld geregelt. Die meisten der aufgeführten Datensätze konnten daher im Rahmen der geschlossenen Kooperationsvereinbarung direkt ausgetauscht werden.

- **Fernwärme- und Fernkältenetz:** Die Stadtwerke halten als Betreiber des Fernwärmenetzes und Fernkältenetzes auch Geodaten zur Lage und Beschaffenheit der Netze vor. Sowohl zum Aufbau des stadtweiten Energiesystemmodells als auch zur Analyse der unterirdischen urbanen Wärmeinsel konnten die Daten genutzt werden. Da der Datenbesitzer in dem Fall der Netze allerdings die SWM Infrastruktur GmbH & Co. KG ist, musste für diese Daten eine separate Vertraulichkeitserklärung verhandelt werden.
- **Modell München:** Im Zuge der Verstetigung der Projekthinhalte findet derzeit eine Integration der Projektergebnisse in das „Modell München“ statt, das zur strategischen Energieplanung von Seiten der SWM benutzt wird. Zukünftig ist auch eine Kopplung des Grundwassermodells an das Modell München der SWM geplant. Bei dem Modell München handelt es sich genauer um ein Analysewerkzeug, das bei den Stadtwerken gepflegt wird und auch in der kommunalen Wärmeplanung und der integrierten Quartiersplanung der Stadt eingesetzt werden soll. Mittels einer Multi-Agenten Simulation können verschiedene Szenarien einer zukünftigen Entwicklung der stadtweiten Wärme- und Kälteversorgung untersucht werden. Daher wurde früh im Projekt eine Kooperation mit dem Entwicklerteam des Model Münchens aufgebaut, um einen späteren Datenaustausch einfacher bewerkstelligen zu können.

- **Grundwassertemperatur Zeitreihen:** Da von den SWM große thermische Nutzungen betrieben werden, ist oft auch ein Monitoring des Betriebs notwendig. Diese Temperaturen können für die Kalibrierung von Grundwassermodellen herangezogen werden. Sie wurden außerdem genutzt, um die bestehende unterirdische urbane Wärmeinsel im Stadtgebiet genauer zu verstehen. Die Verwendung der Daten ist in Kapitel II.1.1.1.5 genauer beschrieben.
- **Isar Pegelraten:** Zur Definition der thermischen Randbedingung standen sowohl Messungen der Wassertemperatur an den genannten Pegeln als auch Temperaturmessungen der SWM am Isarwerkkanal vor dem HKW Süd, der Isar auf gleicher Höhe, der Isar auf Höhe des Deutschen Museums und der Isar auf Höhe des Mlk Einlaufbauwerks zur Verfügung. Eine detaillierte Beschreibung der weiteren Verwendung ist in Kapitel II.1.1.1.6 gegeben.

Analog zum Rku haben auch die SWM Anforderungen an die Modellierung, Kopplung sowie die GEO.KW-Web App eingebracht und Rückmeldung zur praktischen Verwendung in ihrem Arbeitsfeld gegeben, die bei der Ausgestaltung der jeweiligen Werkzeuge berücksichtigt wurden.

Bayerisches Landesamt für Umwelt (LfU)

- **BIS Auszug:** Im geologischen Landesamt werden zentral für Bayern alle geologischen Daten inkl. der Daten zu thermischen Nutzungen gesammelt. Diese Datenbank wurde benötigt, um einen Abgleich mit weiteren bestehenden Datenbanken über Grundwassernutzungen an anderen Stellen (Rku und WWA) durchzuführen. Eine detaillierte Beschreibung der weiteren Verwendung ist in Kapitel II.1.1.1.2 gegeben.

Mit dem LfU wurden ebenfalls Anwendungsfälle für die GEO.KW Web-App diskutiert und Schnittstellen identifiziert, die größtenteils berücksichtigt werden konnten und für weiterführende Anwendung der Projektergebnisse in Zukunft weiterentwickelt werden können.

1.6.2 Weitere Zusammenarbeit

Landeshauptstadt München - Planungsreferat (PLAN)

Datenaustausch mit Landeshauptstadt München, PLAN: Zu Beginn des Projektes befand sich die Erstellung des Energienutzungsplanes der Stadt München im Abschluss. Deswegen wurde sowohl von Seiten der Projektpartner als auch von den zuständigen Personen im Stadtplanungsreferat ein Datenaustausch angestrebt, um die Energieplanung Münchens auf möglichst konsistenten Daten aufzubauen. Trotz der gemeinsamen Anstrengung und intensiver Kommunikation untereinander und mit den zuständigen Stellen konnte ein Datenaustausch aufgrund rechtlicher Hürden nicht realisiert werden. Durch den weiteren ständigen projektbegleitenden Austausch ist trotzdem ein Wissenstransfer zu den Projektfortschritten gegeben gewesen. Auch PLAN hat mehrmals hilfreiche Anforderungen und Rückmeldung für die Anwendung und Integration der Projektergebnisse in das Arbeitsfeld von PLAN geben können.

Eniano GmbH (Energiesystemmodellierung)

Datenerstellung Eniano GmbH: Aufgrund der rechtlichen Hürden zum Austausch der Daten des Energienutzungsplans (ENP) der Landeshauptstadt München musste die Erzeugungsinfrastruktur für die Stadt München selbst aufgrund der vorhandenen Datenbasis erstellt werden. Hierbei wurde auf das Wissen und die Erfahrung der Eniano GmbH zurückgegriffen, welche mit existierenden Algorithmen und den Eingangsdaten aus dem Projekt die stadtweite Verteilung der Heizsystemtechnologien synthetisch erzeugen konnten. Die Eniano GmbH hat zudem viel Erfahrung mit der städtischen IT-Infrastruktur, die sehr hilfreich im Projekt eingesetzt werden konnte, um zu gewährleisten, dass die Projektergebnisse auch direkt in die städtische Anwendung überführt werden können. Die Eniano GmbH war zudem verantwortlich für die Umsetzung der GEO.KW Web-App.

Wasserwirtschaftsamt München (WWA München)

Datenaustausch mit dem Wasserwirtschaftsamt zu thermischen Nutzungen: Große thermische Grundwassernutzungen, die gemäß der Eigenüberwachungsverordnung (EÜV) ein Monitoring betreiben müssen, berichten regelmäßig Entnahmedaten an das WWA München. Diese Daten

zusammen mit den Stammdaten der thermischen Nutzungen aus dem Brunnenkataster des WWA wurden dem Projekt GEO.KW zur Verfügung gestellt.

Analog zum RKU und der SWM hat auch das WWA München Anforderungen an die Modellierung, Kopplung sowie die GEO.KW-Web App formuliert und wertvolle Rückmeldung zur praktischen Verwendung der Projektergebnisse im Rahmen der Genehmigungspraxis für die thermische Grundwassernutzung gegeben. Diese wurden bei der Ausgestaltung der jeweiligen Werkzeuge berücksichtigt und stellen einen wesentlichen Aspekt bei der GEO.KW Web-App dar. Das WWA München hat auch ein dreijähriges regional finanziertes Anschlussprojekt gestartet, um die Projektergebnisse in die Praxis zu überführen (siehe auch II.4).

bitfactory (Klickdummy und Konzeption der Webapp)

Die bitfactory GmbH wurde im Projekt mit der Konzeptentwicklung für die GEO.KW-Webapp und dem Aufbau eines Klick-Prototypen beauftragt. Hierfür wurde ein Workshop ausgerichtet und die Workshop Inhalte wurden von der bitfactory entsprechend ausgewertet. Auf Basis der Ergebnisse konnte eine detaillierte Ausschreibung des Entwicklungsauftrags für die Webapp erstellt werden.

Die bitfactory GmbH wurde im Projekt mit der Konzeptentwicklung für die GEO.KW-Webapp und dem Aufbau eines Klick-Prototypen beauftragt. Hierfür wurde ein Workshop ausgerichtet und die Workshop Inhalte wurden von der bitfactory entsprechend ausgewertet. Auf Basis der Ergebnisse konnte eine detaillierte Ausschreibung des Entwicklungsauftrags für die Webapp erstellt werden.

Arbeitsgruppe Fortführung der Projektergebnisse (Verstetigung)

TUM-HYD, LHM, SWM, WWA-München und auch PLAN haben erfolgreich in der „AG Verstetigung“ an der Weiterführung der Projektergebnisse, insbesondere des erstellten Modells und der Web-Applikation nach Projektende gearbeitet. Wie bereits erwähnt sind am WWA-München hierfür 2 Projektstellen geschaffen worden, die sich mit der weiteren Inwertsetzung der Projektergebnisse beschäftigen. Zusätzlich wurde am RKU eine unbesfristete Stelle in der kommunalen Wärmeplanung geschaffen, die als Schnittstelle zum Wasserrecht und zum WWA-München die zukünftige Entwicklung der thermischen Grundwassernutzung aufbauend auf den Projektergebnissen strategisch einbindet und praktisch im integrierten Quartiersansatz verankert. Zudem wurde auch, wie oben erwähnt, die Integrierung der Projektergebnisse in das Modell München der SWM begonnen.

Deutsches Zentrum für Luft- und Raumfahrt, Oberpfaffenhofen (DLR)

Vom DLR wurde eine hochaufgelöste (0,5m Raster) Kartierung der Oberflächenversiegelung von München auf Basis von Satellitendaten (WorldView-2 sensor, aufgenommen am 12. July und 2. Oktober 2011) zur Berechnung der Grundwasserneubildung zur Verfügung gestellt.

Münchner Stadtentwässerung (MSE)

Die MSE stellte dem Projekt Niederschlagsdaten aus Messstationen in der Stadt zur Berechnung der Grundwasserneubildung bereit.

Deutscher Wetterdienst (DWD)

Vom DWD wurden RADOLAN Niederschlagsdaten zur Berechnung der Grundwasserneubildung sowie Messungen der Bodentemperatur zur Berechnung der oberflächlichen Temperaturschwankungen und die Studie „Stadtklimatische Untersuchungen der sommerlichen Temperaturverhältnisse und des Tagesgangs des Regionalwindes („Alpines Pumpen“) in München“ im Projekt verwendet.

Forschungszentrum Jülich

Die flächendifferenzierte Grundwasserneubildung wurde durch das Forschungszentrum Jülich mit dem Wasserhaushaltsmodell mGROWA (Herrmann et al., 2013; Herrmann et al., 2015) ermittelt und bereitgestellt.

I.6.3 Wissenschaftlicher Austausch

- **Prof. Dr. Michael Ulbrich** (TU München, Lehrstuhl für Mathematische Optimierung): Bei dem Treffen mit Prof. Ulbrich wurde der PDE-basierte Optimierungsansatz zur Bestimmung optimaler Brunnenlayouts für GWWP diskutiert.
- **Prof. Matthew Piggott und Stephan Kramer** (Department of Earth Science & Engineering, Imperial College London): Smajil Halilovic war 2021 für drei Monate als Gastwissenschaftler am Imperial College. Während seines Aufenthalts arbeitete er zusammen mit einer Forschungsgruppe des "Department of Earth Science & Engineering" an der Entwicklung eines PDE-basierten Ansatzes für die Optimierung von Brunnenlayouts für GWWP. Infolgedessen wurde bereits eine gemeinsame Publikation in einer Fachzeitschrift veröffentlicht.
- **Prof. Dr. Peter Bayer** (Fachbereich Angewandte Geologie, Martin-Luther-Universität Halle-Wittenberg): In dem Treffen mit Prof. Bayer wurden zwei entwickelte Optimierungsansätze für die Brunnenauslegung von GWWP (PDE beschränkt und basierend auf analytischen Formeln) vorgestellt und diskutiert.
- **Prof. Dr.-Ing. Roland Koenigsdorff** (Hochschule Biberach): bei der Implementierung der freien Kühlung mit Grundwasserwärmepumpen wurde Prof. Koenigsdorff für eine detaillierte Erläuterung zur grundsätzlichen Funktionsweise kontaktiert.
- **GeoLab / Spack Team / Cloud Team am BAD-LRZ** Absprachen zur Entwicklung der Kopplung, zur Verbesserung der parallelen Performance, zur Softwareinstallation und zur Einreichung des HPC-Projektantrags
- **preCICE** Anfrage zur Kopplung von PFLOTRAN und einem Solver zur Simulation von Biofilm Wachstum und eventuelle Kooperation (Utah, USA)

II Eingehende Darstellung

II.1 Verwendung der Zuwendung und erzielte Ergebnisse im Einzelnen, mit Gegenüberstellung der vorgegebenen Ziele

Das Projekt GEO.KW wurde in vier Arbeitspaketen ausgeführt. Über ein weiteres Arbeitspaket (AP 0 Projektmanagement und Kommunikation) koordinierte TUM-HYD das Gesamtprojekt. Im Folgenden werden die Arbeiten, Methoden und Datengrundlagen in den einzelnen Arbeitspaketen ausführlich beschrieben. Im Anschluss werden außerdem die Ergebnisse und wichtigsten Erkenntnisse zusammenfasst.

Die Hauptziele des Projekts sind dabei:

- Ausweitung des technisch nutzbaren Potenzials „Grundwasser“ durch Synergieeffekte mit der Optimierung der dezentralen thermischen Grundwassernutzung durch den systematischen, dynamischen Abgleich von Energieverbraucher und Energiequelle und die Nutzung des Grundwassers als saisonalen Speicher bei gleichzeitiger Verringerung der Umwelteinflüsse.
- Steigerung der Effektivität der thermischen Grundwassernutzung durch die Integration von urbanen Infrastrukturen zur Unterstützung der Energiequellennutzung oder als zusätzliche Wärmesenke.
- Bereitstellung von räumlich detailliert aufgelöstem Know-how für eine effizientere Wärme- und Kälteversorgung auf dezentraler, quartiersbezogener und stadtweiter Ebene für Stadtwerke, Planungsbüros und Genehmigungsbehörden.
- Entwicklung von zukunftsorientierten, quartiersbezogenen Strategien zur effizienten Nutzung des Grundwassers als Energiequelle durch Erstellung von Prognosen unter Berücksichtigung aller relevanten dynamischen Aspekte im urbanen Raum.

Im Weiteren werden die Teilziele der einzelnen Projektpartner aufgeführt:

Die TUM-HYD hat im Projekt als Teilziele:

- ein fachliches Konzept zur Kopplung des thermischen Wärmetransports im Grundwasser mit Energiebedarfs- und Infrastrukturmodellen zu erstellen. Dabei sollen alle notwendigen Parameter und Randbedingungen, sowie ihre für die Kopplung notwendige zeitliche und räumliche Auflösung definiert werden.
→ Dieses Teilziel wurde erreicht. Das entwickelte Konzept berücksichtigt alle notwendigen Punkte und bringt auch die räumlichen und zeitlichen Unterschiede aus den zwei verschiedenen Ansätzen zur Berechnung (Simulation und Optimierung) in Einklang.
- ein großflächiges, detailgenaues Modell des thermischen Grundwassertransports für das Pilotgebiet München aufzubauen, um positive und negative Wechselwirkungen von Anlagen und die potenzielle saisonale Energiespeicherkapazität des Grundwasserkörpers erfassen zu können.
→ Dieses Teilziel wurde erreicht. Im Detail wurde zusätzlich ein Framework entwickelt, in dem es möglich ist, auch Teilgebiete räumlich höher aufzulösen als das stadtweite Modell und die Modelle automatisiert zu erstellen, um detailgenaue Simulationen des Temperaturfeldes durchführen zu können.
- die Integration bzw. Kopplung aller relevanten städtischen Infrastrukturelemente in das/mit dem detailgetreuen numerischen Modell, um ihren Einfluss auf den Wärmetransport und ihre möglichen positiven Effekte für eine spätere Optimierungsbetrachtung der thermischen Grundwassernutzung berücksichtigen zu können.
→ Dieses Teilziel wurde größtenteils mit der Integration der unterdükerten unterirdischen Infrastrukturen ins Modell erreicht. Durch die Berücksichtigung im Modell kann der hydraulische und thermische Einfluss der Untergrundstrukturen untersucht werden. Dieser Einfluss wird auch in der späteren Optimierungsbetrachtung integriert. Ein Umbau der bestehenden Düker zu thermischen Nutzungen während der Optimierung wurde in der Kopplung allerdings nicht realisiert.

- die Simulation von Szenarien zur Optimierung der thermischen Grundwassernutzung auf Quartiers- bzw. Stadtebene.
→ Dieses Ziel wurde nur in Teilen erreicht. Es wurden stadtweite Grundwassermodelle aufgebaut, getestet und kalibriert. Eine vollständige stadtweite Optimierung der thermischen Grundwassernutzung konnte allerdings aufgrund von den aufgezeigten Verzögerungen durch den unvorhersehbaren Mehraufwand nicht mehr in der Projektlaufzeit durchgeführt werden (siehe I.3). Dies wird voraussichtlich in der Fortführung der Projektergebnisse durch das RKU und WWA-München durchgeführt.
- die Entwicklung eines Planungsinstrument und Prognosetool zur Optimierung der der thermischen Grundwassernutzung
→ Dieses Teilziel wurde mit der Entwicklung der GEO.KW Web-App im Projekt erreicht. Wie in Kapitel II.1.5 detailliert beschrieben, wurde auf Basis von intensiven Abstimmungs- und Feedbackgesprächen eine Web-App entwickelt, die die Projektergebnisse in der Praxis verfügbar macht.

Die TUM-ENS hat im Projekt als Teilziele:

- die Rolle der Wärmepumpen im Kontext von zukünftiger Wärmeversorgung in Städten und deren Zusammenspiel mit Grundwasserfluss zu untersuchen.
→ Dieses Teilziel wurde größtenteils erreicht. Die Rolle der Wärmepumpe für die Wärmeversorgung konnte bereits in Teilgebieten der Stadt untersucht werden. Aufgrund der Komplexität des Problems und der daraus resultierenden Verzögerungen im Projektfortschritt konnte die gesamte Stadt allerdings noch nicht untersucht werden.
- die Entwicklung eines Frameworks, das eine optimale städtische Infrastrukturplanung im Bereich Energie für den Großraum München in Bezug auf den bestehenden Stand sowie die zukünftigen Entwicklungen des Energiebedarfs ermöglicht. Die Nutzung des Grundwassers zur Wärme- und Kältebereitstellung in hoher räumlicher und zeitlicher Auflösung ist ein Ergebnis dieser Analyse.
→ Dieses Teilziel wurde vollumfänglich erreicht. Das im Projekt erstellte Framework ist vollumfänglich in der Lage, das Energiesystem Münchens gekoppelt an die Grundwassersimulation in hoher räumlicher und zeitlicher Auflösung zu optimieren.
- die Optimierungswerkzeuge zur Infrastrukturplanung werden um komplexe Nebenbedingungen zur Beschreibung der Hydrodynamik ergänzt.
→ Dieses Teilziel wurde vollumfänglich erreicht. Komplexe Randbedingungen zur Beschreibung der Grundwasserströmung und des Wärmetransports werden mit Hilfe des Kopplungsschemas in Optimierungswerkzeuge für die Infrastrukturplanung integriert.
- die Parallelisierung der Optimierungswerkzeuge und deren Einsatz auf Hochleistungsrechnern.
→ Dieses Teilziel wurde vollumfänglich erreicht. Mit Hilfe der Kopplungssoftware preCICE ist eine Parallelisierung des Optimierungsframeworks und dadurch der Einsatz auf dem SuperMUC-NG und allen weiteren Hochleistungsrechnern möglich.
- die Vorlage einer neuen Infrastrukturplanung unter Berücksichtigung der Grundwasserdynamik.
→ Dieses Teilziel wurde größtenteils erreicht. Die Infrastrukturplanung konnte bereits für Teilgebiete der Stadt erstellt werden. Aufgrund der Komplexität des Problems und der daraus resultierenden Verzögerungen im Projektfortschritt konnte die gesamte Stadt allerdings noch nicht untersucht werden.

Die US-SGS hat im Projekt als Teilziele:

- Grundsätzliches Verständnis der mathematischen Grundlagen der Kopplung eines umfangreichen Infrastruktur Planungs- und Optimierungstools mit Nebenbedingungen aus der Simulation von Strömungs- und Transportprozessen
→ Teilziel wurde erreicht.
- Formulierung des gekoppelten Optimierungsproblems sowie seiner Optimalitätsbedingungen
→ Teilziel wurde erreicht
- Identifizierung eines geeigneten iterativen Lösungsalgorithmus
→ Teilziel wurde erreicht

- Erkenntnisse zu geeigneten numerischen Verfahren für die vorliegende Problemklasse 'Hybrid kontinuierlich-diskrete Optimierung mit partiellen Differentialgleichungen als Nebenbedingungen'
→ Teilziel wurde erreicht, weitere Optimierungsmöglichkeiten wurden für zukünftige Entwicklungen identifiziert.
- Entwicklung einer Softwareumgebung für das simulationsbasierte Planungs- und Management-Tool auf Basis der von den Projektpartnern entwickelten Komponenten
→ Teilziel wurde erreicht.
- Portierung der rechenintensiven Teilkomponenten der Softwareumgebung auf Hochleistungsrechner (in Kooperation mit BADW-LRZ)
→ Teilziel wurde erreicht.

Das Leibniz-Rechenzentrum hat im Projekt folgende Teilziele:

- Portierung der rechenintensiven Teilkomponenten der Softwareumgebung auf Höchstleistungsrechner,
→ Teilziel wurde erreicht.
- Erprobung rechnerübergreifender Modellkopplung,
→ Teilziel wurde erreicht
- die Parallelisierung und Optimierung der Modellierungs- und Planungswerkzeuge und deren Einsatz auf Höchstleistungsrechnern,
→ Teilziel wurde gemäß den Einschränkungen innerhalb der Modellierungen erreicht.
- die Erprobung des Einsatzes von Höchstleistungsrechnern für die angewandte Infrastrukturplanung.
→ Teilziel wurde zum Teil erreicht gemäß den Einschränkungen aus den anderen Arbeitspaketen (Durchführung von Simulationen für Teilgebiete).

Die folgenden Kapitel enthalten für die verschiedenen Arbeitspakete eine eingehende Darstellung der durchgeführten Arbeiten und Entwicklungen im Projekt. Im Detail werden untergliedert:

- II.1.1: Dynamische Modellierung des thermischen Transports im Grundwasser unter Berücksichtigung städtischer Infrastruktur
- II.1.2: Optimierte Planung des Stadtenergiesystems
- II.1.3: Kopplung des thermischen Transports im Grundwasser mit der Entwicklung des Stadtenergiesystems
- II.1.4: Optimierung, Parallelisierung und Portierung der Simulationsumgebung auf Hochleistungsrechner
- II.1.5: Web-Applikation als Frontend zur Nutzung der Ergebnisse
- II.1.6: Projektmanagement und Kommunikation
- II.1.7: Zusammenfassung der Ergebnisse und wichtigsten Erkenntnisse

II.1.1 Dynamische Modellierung des thermischen Transports im Grundwasser unter Berücksichtigung städtischer Infrastruktur (TUM-HYD)

Die numerische Simulation von Strömung und Wärmetransport ist das grundlegende Werkzeug zur Prognose der hydraulischen und thermischen Vorgänge im Grundwasserleiter. Speziell zur Abbildung von dynamischen Vorgängen im Zusammenspiel mit den Wärmequellen und -senken des urbanen Raums sind numerische Simulationen das am besten geeignete Mittel, um den Einfluss von thermischen Grundwassernutzungen zu prognostizieren. In den folgenden Kapiteln wird vorgestellt, welche Voraussetzungen gegeben waren und welche Grundlagen geschaffen wurden, um eine dynamische und dreidimensionale Simulation von Strömung und Wärmetransport im Grundwasser durchführen zu können. Darauf aufbauend wird beschrieben, wie diese Basisdaten in die Modellerstellung eingehen, um zunächst ein konzeptionelles Modell und im Weiteren ein numerisches Modell zu erhalten. Abschließend wird auf die Kalibrierung der Modelle eingegangen, die dann in der thermisch-hydraulischen Simulation des IST-Zustands mündet, welcher die Basis für eine gekoppelte Optimierung ist.

II.1.1.1 Eingangsdaten für die thermisch-hydraulische Grundwassersimulation

Voraussetzung für ein realitätsnahes, großräumiges Grundwassermodell für die Stadt ist eine detaillierte und hochaufgelöste Erfassung der Grundlagendaten in hoher Qualität. Vor allem im Bereich der hydrogeologischen Grundlagen wurden diese Daten bereits in zahlreichen Projekten am Lehrstuhl für Hydrogeologie der TUM für den Großraum München erarbeitet (siehe Tabelle 2). Diese meist statischen Eingangsdaten werden im Folgenden zwei Kapitel zur Geologie und Hydrogeologie näher vorgestellt. Daran anschließend werden die zusätzlich erarbeiteten Grundlagendaten präsentiert, die für eine zeitlich aufgelöste Simulation und die Integration der urbanen Infrastruktur Voraussetzung waren.

Tabelle 2: Projekte der TUM, in denen die detaillierten Grundlagendaten für die Grundwassersimulation in der Stadt München entwickelt wurden.

GEPO – Erstellung einer Datengrundlage für die Abschätzung des geothermischen Potenzials im oberflächennahen Untergrund des quartären Grundwasserleiters des Großraum Münchens		
Fördergeber Bayer. StMUV	Fördersumme: ~ 840.000 €	Laufzeit: 4 Jahre (2012-2015)
GeoPot - Parameterbestimmung für die Abschätzung der geologischen Nutzungspotenziale in der Planungsregion 14 und im tertiären Untergrund des Großraums München		
Fördergeber Bayer. StMUV	Fördersumme: ~1.485.000 €	Laufzeit: 4 Jahre (2016-2019)
GRETA - Near-surface Geothermal Resources in the Territory of the Alpine Space		
Fördergeber EU-Interreg ASP	Fördersumme: ~321.000 € (Anteil TUM)	Laufzeit: 4 Jahre (2015-2018)

II.1.1.1.1 Hydrogeologische Basisdaten des Münchener Untergrunds

Die Landeshauptstadt liegt auf der sogenannten Münchener Schotterebene, einem ausgedehnten Kieskörper, der hauptsächlich im Quartär während den letzten Eiszeiten, i.e. Riß und Würm, auf einem tertiären Paläorelief abgelagert wurde (siehe Abbildung 6a). Da die Schotter in einem fluvio-glazialen Milieu von den Alpen kommend sedimentiert wurden, fällt die Geländeoberfläche der Ebene ca 0.5% nach Norden ab. Die unterlagernde tertiäre Basis weist diese Neigung nicht auf, weshalb die Mächtigkeit der Schotter von Süden nach Norden tendenziell abnimmt. Der Kies besitzt im Allgemeinen einen geringen Anteil an bindigem Material, i.e. Ton oder Schluff, und weist daher eine sehr gute hydraulische Durchlässigkeit auf. Das Grundwasser in den quartären Schottern bildet das oberste Grundwasserstockwerk und fließt entsprechend des hydraulischen Gradienten Richtung Norden bzw. Nord-Osten. Im Stadtgebiet beeinflusst zusätzlich die Isar, als maßgeblicher Vorfluter in der Schotterebene, die Fließrichtung des Grundwassers im Quartär (siehe Abbildung 6).

Der Grundwasserspiegel im Stadtgebiet liegt bei durchschnittlich 7,5 Metern unter der Geländeoberkante. Dieser sogenannte Flurabstand ist im Süden durch die größere Mächtigkeit der quartären Kiese tendenziell höher als im Norden. Im Norden von München kann durch das beginnende Auskeilen der Kiese das Grundwasser bereits in 1-2 Metern unter Gelände angetroffen werden (siehe Abbildung 7d). Der quartäre Schotter wird von tertiären Sanden, Schluffen und Tonen unterlagert, die in heterogener Wechsellagerung meist den Grundwasserstauer bilden und so das oberste Grundwasserstockwerk gegenüber tieferliegenden tertiären Grundwasserstockwerken abgrenzen. Diese tieferliegenden Reservoirs werden wasserrechtlich geschützt, weshalb ein Durchteufen der ersten stauenden Schicht nur in Ausnahmefällen gestattet wird.

Der quartäre Grundwasserleiter ist daher der Zielhorizont für den Bau von Brunnenanlagen für die thermische Grundwassernutzung und somit auch der Horizont, in dem Grundwassermodelle detailliert

aufgelöst werden müssen, um die thermische und hydraulische Dynamik simulieren zu können. Grundlage für die untere Berandung des Grundwasserleiters ist somit der Übergang von quartären in die tertiäre Schichtfolge. Diese sogenannte Quartärbasis wurde im GEPO-Projekt, vgl. Tabelle 2, aus ca. 48.000 plausibilitätsgeprüften Schichtenverzeichnissen für die gesamte Schotterebene interpoliert und wird für die Modellerstellung in einer Auflösung von 10 m x 10 m genutzt (siehe Abbildung 6a).

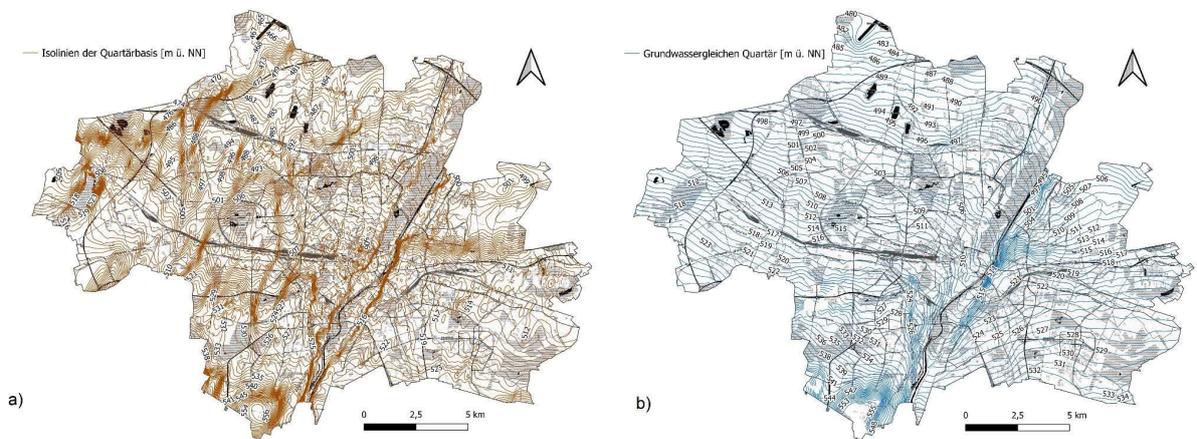


Abbildung 6: a) Höhenlage der Quartärbasis aus dem GEPO-Projekt und b) Grundwassergleichenplan aus der Stichtagsmessung August 2014.

Zusätzlich zur Kartierung der Quartärbasis wurde im April 2014 im Rahmen des GEPO-Projekts eine großangelegte Stichtagsmessung durchgeführt, bei der sowohl der Grundwasserstand als auch die Temperatur an über 6.000 Messstellen im quartären Grundwasserleiter gemessen wurden (siehe Abbildung 6 und Abbildung 7b)). Die erhobenen Grundwasserstände bilden die Datenbasis für eine spätere Kalibrierung der Modelle (siehe Kap. II.1.1.4).

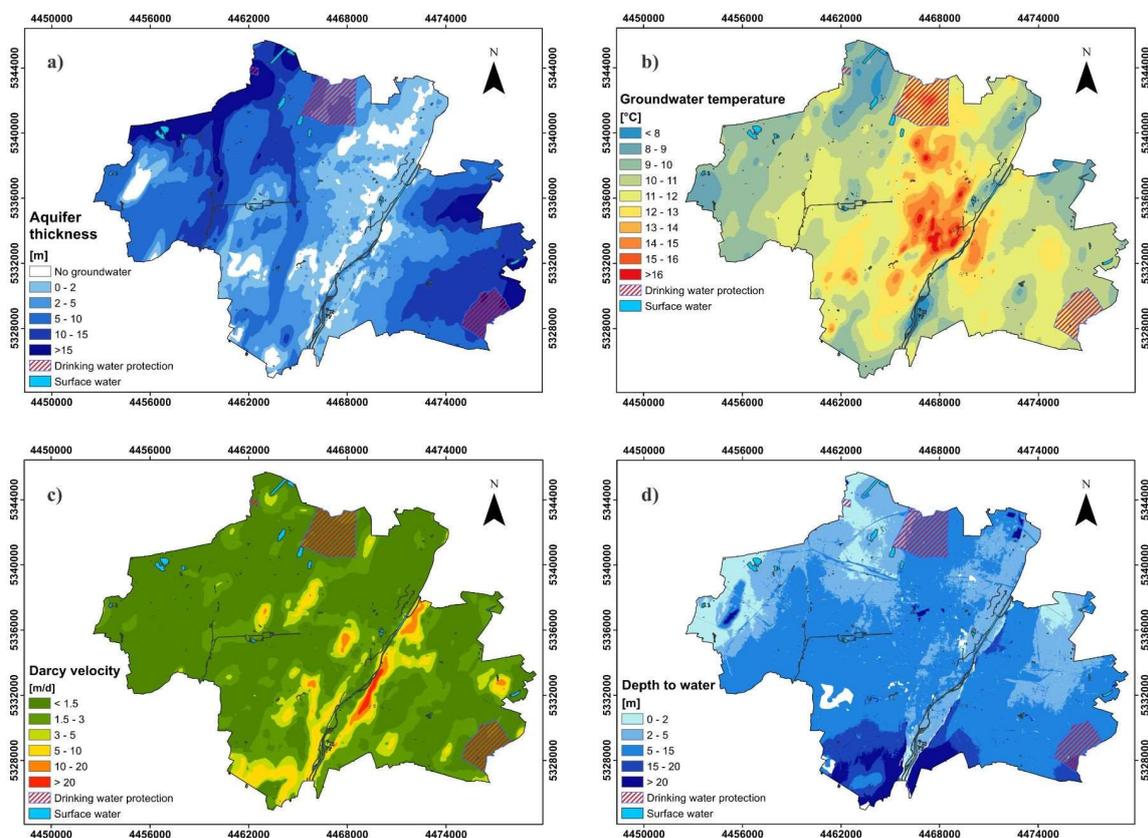


Abbildung 7: Stadtweite Datensätze der a) quartären Grundwassermächtigkeit, b) Grundwassertemperatur 1 m unter Grundwasserstand, c) Darcy Geschwindigkeit und d) des Flurabstands während der Stichtagsmessung im April 2014.

Neben der Momentaufnahme der räumlichen Grundwasserdynamik, die durch die Stichtagsmessung gegeben ist, sind auch Kenntnisse über die hydraulische Durchlässigkeit als Zielparameter bei der hydraulischen Kalibrierung nötig. Um eine qualitativ hochwertige Datenbasis zu schaffen, sind aufwändige Feldversuche, sogenannte Pumpversuche, notwendig. Diese sind historisch oft unzureichend ausgewertet oder dokumentiert worden, weshalb im GEPO- und dem nachfolgenden GeoPot-Projekt die existierenden Datengrundlagen in den Archiven gesichtet und aufgearbeitet wurden. So standen für die hydraulische Kalibrierung zusätzlich über 500 Durchlässigkeitsbeiwerte zur Verfügung.

II.1.1.1.2 Bestehende Grundwassernutzungen

Für die zeitlich aufgelöste Simulation des IST-Zustands wurden alle bestehenden Grundwassernutzungen im Stadtgebiet gesichtet, aufbereitet und ein einheitlicher Datensatz erstellt, der alle Informationen für eine Modellerstellung und spätere Parametrisierung enthält. Unter Grundwassernutzungen fallen neben thermischen Nutzungen auch allgemeine Wasserentnahmen ohne Wiedereinleitung, wie z.B. Brauchwasserbrunnen.

Ein initialer Schritt bei der Aufbereitung der Daten war das Zusammenführen von Datenpunkten aus verschiedenen Datenbanken. Für die Brunnenstandorte und generelle Metadaten zu den Anlagen stand das Brunnenkataster des Wasserwirtschaftsamts München, das Archiv des Referats für Klima und Umweltschutz der Stadt München und das zentrale Bodeninformationssystem (BIS) des bayerischen Landesamts für Umwelt (LfU) zur Verfügung. Da thermische Grundwassernutzungen typischerweise aus einem oder mehreren Förderbrunnen (FB) und einem oder mehreren Schluckbrunnen (SB) bestehen, musste grundlegend sichergestellt werden, dass die Brunnen fehlerfrei zu Anlagen zusammengefasst sind und mindestens je ein Förder- und ein Schluckbrunnen vorhanden ist. Da der Bezug zwischen Brunnen und Anlagen nur im BIS hinterlegt ist, mussten die Beziehungen für die neuen Datensätze aus dem Archiv des RKUs und dem Brunnenkataster nachgezogen werden. Zudem mussten Anlagen ohne Brunnenzuweisung et vice versa sowie Duplikate bereinigt werden. Für Anlagen bei denen keine Vervollständigung der Brunnen (mind. 1 FB und 1 SB) aus den vereinigten Datensätzen möglich war, wurde der jeweils fehlende Brunnen künstlich erstellt. Vor allem bei älteren Anlagen, deren Genehmigung schon länger als die Einführung der heutigen IT-Infrastruktur und Datenhaltung im BIS zurückliegt, wurden die Schluckbrunnen häufig nicht mit aufgenommen. In solchen Fällen wurde gemäß der Grundwasserfließrichtung auf dem betreffenden Flurstück der Anlage ein Schluckbrunnen an der Grenze im Abstrom erstellt. Hierfür wurden die gängigen Abstandsflächen von 3 m zur Flurstücksgrenze und 3 m zu Gebäuden eingehalten und dementsprechend ein Standort gewählt, der in maximaler Entfernung zum bestehenden Förderbrunnen liegt. Für fehlende Förderbrunnen wurde entsprechend im Zustrom unter den gleichen Rahmenbedingungen ein Brunnen erstellt. Durch die getroffenen Annahmen konnte der grundlegende Datensatz der Brunnenstandorte und ihrer Verknüpfung zu Anlagen komplettiert werden und final zum Stichtag, dem 01.08.2021, 2705 Anlagen mit insgesamt 5893 Brunnen in der Simulation berücksichtigt werden.

Tabelle 3: Annahmen der Datensatzbereinigung mit den für Brunnen und Anlagen genutzten Datenpunkten.

Objekt	Datenpunkt	Datenquelle	Aufbereitung/ Annahme
Brunnen	Koordinaten der Brunnenstandorte	Brunnenkataster, BIS, RKU-Archiv	Bei fehlenden Brunnen (mind. FB/SB Paar pro Anlage): Erstellen eines synthetischen Brunnens gemäß Grundwasserfließrichtung und 3m Abstandsflächen zu Flurstücksgrenze und Gebäuden

Objekt	Datenpunkt	Datenquelle	Aufbereitung/ Annahme
	Tiefenlage der Filterstrecke	BIS	Bei fehlendem Wert: Verfilterung von Grundwasserstand (GEPO) bis 1m über Quartärbasis
	Ausbau-durchmesser	BIS, RKU-Archiv	Bei fehlendem Wert: Standarddurchmesser 6" bzw. 152mm
Anlage	Genehmigte Jahresentnahme	BIS	Verwendung zur Plausibilitätsprüfung bei der Erstellung der Lastkurve
	Temperatur-spreizung	BIS	Bei fehlendem Wert: konstant 5K für Heiz- und Kühlanlagen
	Beziehung Anlage zu Brunnen	Brunnenkataster, BIS, RKU-Archiv	Erstellung synthetischer Anlagen bei fehlenden Beziehungen
	Heiz- oder Kühlleistung	BIS	Verwendung zur Plausibilitätsprüfung bei der Erstellung der Lastkurve
	Nutzungsart	Brunnenkataster, BIS, RKU-Archiv	Verwendung bei der Erstellung der Lastkurve
	Entnahme für Heiz- oder Kühlbetrieb	BIS	Verwendung zur Plausibilitätsprüfung bei der Erstellung der Lastkurve
Last-kurven	Jahresberichte EÜV-Anlagen	WWA-München	Digitalisierung, Plausibilitätsprüfung, Aggregieren auf Referenzlast pro Jahr
	Wärmebedarfs Simulation	ENP-München	Abgleich von Anlagendaten und Wärmelasten der Gebäude auf dem Flurstück zur Abschätzung der Versorgung

Im nächsten Schritt wurden die Voraussetzungen geschaffen, die existierenden Anlagen in eine zeitlich aufgelöste Simulation zu integrieren. Hierfür müssen allen Brunnen gemäß ihres Typs Zeitreihen der Pumpraten und bei Schluckbrunnen auch Zeitreihen zur Einleittemperatur als Randbedingung hinterlegt werden. Dazu wurden für alle Anlagen Lastprofile erstellt. Bei EÜV-pflichtigen Anlagen wurden die abgegebenen Jahresberichte verwendet. Diese beinhalten in sehr unterschiedlicher Qualität Angaben zu monatlichen Entnahmen und Förder- bzw. Einleittemperaturen. Die Daten aus den Jahresberichten wurden daher bei der manuellen Digitalisierung, die in Teilen ebenfalls im Projekt durchgeführt wurde, zusätzlich auf Plausibilität geprüft. Da die Lasten bei diesen Anlagen z.T. sehr variabel ausfallen, wurde für die Parametrisierung von Simulationen, die in der Zukunft liegen, jeweils mittlere Jahres-Referenzlastprofile berechnet.

Bei kleineren thermischen Nutzungen, für die gewöhnlich keine Monitoring Daten vorliegen, wurde ein Lastprofil aus dem Wärmebedarf der Gebäude auf dem Flurstück abgeleitet. Der Wärmebedarf wurde den Ergebnissen der gebäudescharfen stadtweiten Wärmebedarfssimulation entnommen, die in GEO.KW vom Lehrstuhl ENS durchgeführt wurde und auf den Daten des Energienutzungsplans München basiert. Das sich durch die aggregierten Gebäudelasten auf dem Flurstück ergebende Lastprofil wurde im Anschluss anhand verschiedener Angaben zur Anlagengröße und Betriebsweise auf Plausibilität geprüft. Als erster Datenpunkt wurde die genehmigte Jahresentnahme verwendet, um Lasten zu reduzieren, die die genehmigte Entnahme überschritten haben. Bei Flurstücken, auf denen

mehrere beheizte Gebäude existieren, wird somit davon ausgegangen, dass nicht alle Gebäude durch die Anlage versorgt werden. Falls nur ein Gebäude auf dem Flurstück existiert, kann es sich auch um ein bivalent betriebenes System handeln oder es wird nur ein bestimmter Gebäudeteil versorgt. Neben der Jahresentnahme wurden auch Angaben zur Heiz- oder Kühlleistung oder zur Entnahme für den Heiz- oder Kühlbetrieb für die Reduktion der Lasten unter das entsprechende Limit verwendet. Für den Fall, dass in den Metadaten der Anlage kein Wert für eine Plausibilitätskontrolle zur Verfügung steht, wurde die Versorgung auf das kleinste Gebäude auf dem Flurstück beschränkt und zudem ein Abgleich mit der technisch möglichen Entnahmerate, die sich aus der TAP-Methode berechnet, durchgeführt (siehe Böttcher et al., 2019).

Analog zum Wärmebedarf wurde auch der Kältebedarf gebäudescharf für ganz München simuliert. Je nach Nutzungsart der Anlage, i.e. heizen, kühlen oder kombiniert, wurde auf den jeweiligen Datensatz zurückgegriffen. Im kombinierten Fall für heizen und kühlen wurden die Lasten summiert, um die entsprechenden Pumpraten zu berechnen. Die zwischen Heizfall und Kühlfall schwankende Temperaturspreizung wurde als Zeitreihe gemäß dem Verhältnis der Lastanteile zu einer Mischtemperaturdifferenz verrechnet. Die einzelnen für die Modellerstellung und Parametrisierung relevanten Datenpunkte sind in Tabelle 3 aufgelistet.

II.1.1.1.3 Unterirdische Infrastruktur und Düker

Da der quartäre Grundwasserleiter, wie in Kapitel II.1.1.1 dargestellt, relativ flach unter Gelände liegt, binden tiefgeschossige Gebäude, Abwasserkanäle und U-Bahn, S-Bahn oder Straßentunnel häufig die gesättigte Zone ein und behindern die natürliche Grundwasserströmung. Je nach Tiefenlage kann die unterirdische Gebäudestruktur den Grundwasserleiter auch komplett absperren, wodurch sich ein Aufstau im Zustrom bildet. Um diesen Aufstau zu reduzieren, sind bei Gebäuden mit besonders hohem Aufstau Potenzial sogenannte Düker verbaut. Düker bestehen typischerweise aus horizontalen Drainagerohren, die das Grundwasser im Anstrom in einem zentralen Schacht fassen. Vom Schacht im Zustrom leiten Rohre das Grundwasser auf die gegenüberliegende Seite des Gebäudes zu einem baugleichen Schacht, von dem aus das Wasser wieder in den Grundwasserleiter infiltriert wird. Sowohl die Gebäude als auch die Düker können einen signifikanten Einfluss auf das Strömungsfeld haben und müssen daher in der Grundwassermodellierung berücksichtigt werden.

Da zu Beginn Projektes nur ein grober Datensatz zu tiefliegenden Gebäuden vorhanden war, wurde dieser bereinigt und um bekannte unterdükerte Bauwerke ergänzt. Somit sind alle Düker in der Datenbank auch einem Gebäude zugeordnet und es existiert sowohl ein Einlass-, als auch ein Auslassbauwerk. Da häufig Annahmen zur Tiefenlage der Gründungssohle gemacht werden mussten, sind nur Gebäude berücksichtigt worden, bei denen durch ihre Bauweise eine vollständige Absperrung des quartären Grundwasserleiters zweifelsfrei vorliegt. Dies ist zum Beispiel für Tunnel, die in Deckelbauweise errichtet wurden und vollständig ins Tertiär einbinden der Fall. Damit konnte auf eine aufwändige Recherche der Bauwerks ober- und unterkanten verzichtet werden, denn die Bauwerke werden im Modell über die komplette Mächtigkeit der quartären Sedimente ausgehend von der Geländeoberkante bis zur Quartärbasis räumlich eingebunden.

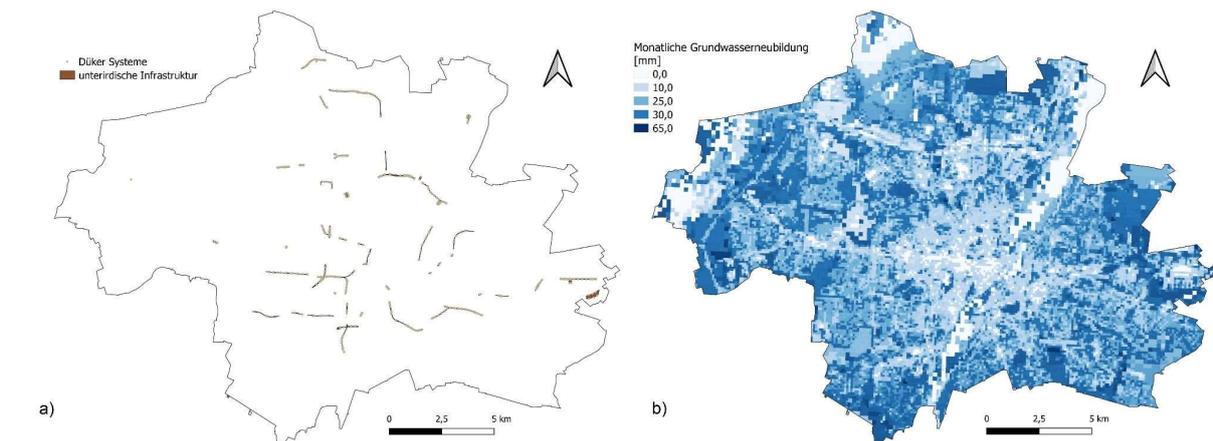


Abbildung 8: a) In der Modellierung berücksichtigte unterirdische Infrastruktur-Objekte mit angeschlossenen Dükern und b) berechnete monatliche Grundwasserneubildung, hier Mittelwerte für Juni.

Des Weiteren wurden auch bei der Tiefenlage und Länge der Dükerdrainagen Annahmen getroffen und auf eine aufwändige Recherche verzichtet. Da die Drainagerohre für eine maximale hydraulische Wirkung gewöhnlich nahe der Quartärbasis eingebaut werden, wird für die Modellintegration angenommen, dass die Drainagen jeweils 1 m über der Quartärbasis liegen und jeweils eine konstante Länge von 5 m besitzen. Somit ist ein stadtweiter Datensatz von 52 unterirdischen Gebäudestrukturen und 383 Dükersystemen mit jeweils einem Einlass und einem Auslass erarbeitet worden, der in der Modellerstellung integriert wird (siehe Abbildung 8). Zusätzlich zur generellen Funktion der Düker für den hydraulischen Ausgleich, werden die Fassungen auch gelegentlich als Förder- und Schluckbrunnen für thermische Nutzungen verwendet. In diesem Fall werden die Einlass- und Auslassschächte zu Brunnen umfunktioniert und entsprechend in der Modellierung integriert. Diese erweiterte thermische Nutzung der Düker existiert bei 48 Schächten.

II.1.1.1.4 Grundwasserneubildung

Die Grundwasserneubildung ist ein wichtiger Faktor auch für die thermische Regeneration des oberflächennahen Grundwasserleiters. Sie beeinflusst den Wärmetransport durch die ungesättigte Zone, da sie sowohl den abwärts gerichteten advektiven Transport von warmem oder kaltem Niederschlagswasser definiert als auch über die Sättigung der vadosen Zone ihre thermischen Eigenschaften des Bodens steuert. Besonders im urbanen Raum, der durch eine kleinräumig variable und zum Teil sehr starke Oberflächenversiegelung gekennzeichnet ist, ist auch die Grundwasserneubildung sehr heterogen.

Für die transiente Simulation wurde durch das Forschungszentrum Jülich die flächendifferenzierte Grundwasserneubildung mit dem Wasserhaushaltsmodell mGROWA (Herrmann et al., 2013; Herrmann et al., 2015) ermittelt und bereitgestellt. mGROWA verwendet als Eingangsdaten Klima, Landnutzung, Topographie, Bodenkarte sowie Geologische Karten. In mGROWA wird zunächst der Gesamtabfluss in täglicher Auflösung auf Basis der jeweiligen Niederschlagsmenge und der berechneten tatsächlichen Verdunstung bilanziert. Dabei werden die Wasserspeicherung und die Sickerbewegung in bis zu 5 Bodenschichten sowie ggf. möglicher kapillarer Aufstieg aus dem Grundwasser berücksichtigt. Die berechneten Tageswerte werden nachfolgend auf längere Zeiträume aggregiert (hier 1990-2020). Nachfolgend wird der Gesamtabfluss in die Abflusskomponenten Direktabfluss und Grundwasserneubildung aufgeteilt. Die errechnete Netto-Grundwasserneubildung aus mGROWA basiert auf an DWD-Stationsdaten validierten Klimamonatsmitteln für den Niederschlag sowie täglichen Verdunstungsdaten.

II.1.1.1.5 Oberflächentemperatureinfluss

Neben der Grundwasserneubildung wirkt sich insbesondere die Temperatur an der Geländeoberfläche entscheidend auf die thermischen Verhältnisse im Grundwasserleiter aus (siehe Abbildung 9a). Für die Definition der Oberflächentemperatur und die Erforschung der Einflüsse auf die unterirdische urbane Wärmeinsel wurde innerhalb des Projekts eine aufwendige statistische Analyse durchgeführt, die bereits Open-Access veröffentlicht wurde (siehe Böttcher und Zosseder, 2022). Die Ergebnisse der Studie werden hier im Folgenden verkürzt dargestellt.

Grundsätzlich werden für die Definition der oberen Temperatur-Randbedingung im Modell zwei relevante Phänomene berücksichtigt. Zum einen existiert ein räumlich stark variabler Temperatureinfluss der urbanen Wärmeinsel. Er wird hauptsächlich durch den Versiegelungsgrad gesteuert, der den diffusen Wärmeeintrag verschiedenster anthropogener Wärmequellen und Einflüsse als Summenparameter geeignet zusammenfasst (siehe Abbildung 9b). Zum anderen muss der zeitlich signifikante Einfluss der saisonalen Temperaturschwankungen berücksichtigt werden. Während einem Jahreszyklus propagiert ein warmer Impuls aus dem Sommer und ein kalter Impuls aus dem Winter von der Oberfläche ausgehen in den Untergrund. Die Amplitude der dabei entstehenden Schwingung wird mit zunehmender Tiefe immer stärker gedämpft, wobei sich zusätzlich die Phase des Signals immer weiter verschiebt (siehe Abbildung 10). Durch die Intensität der Dämpfung und Phasenverschiebung können durch Passive-Heat-Tracing Methoden Rückschlüsse auf die Temperaturleitfähigkeit des Untergrunds gezogen werden.

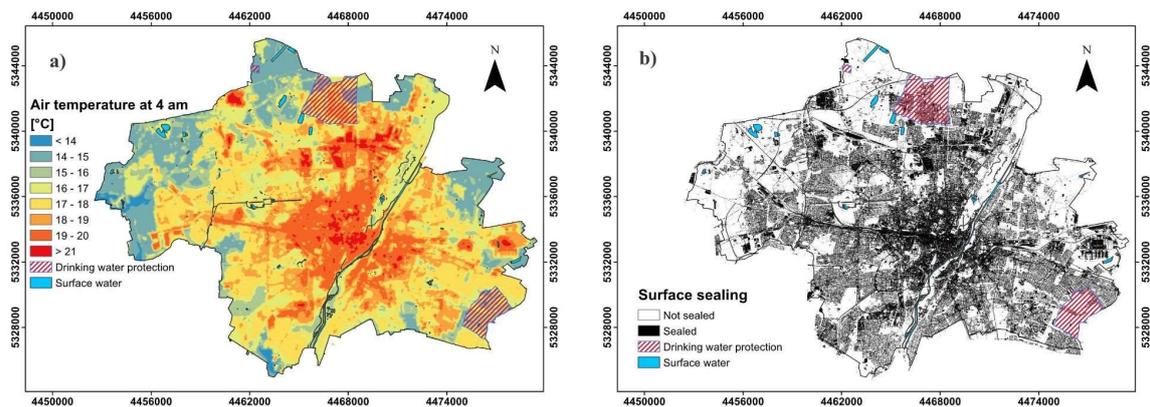


Abbildung 9: a) Modellierter Sommer-Lufttemperatur 2 m über Grund um 4 Uhr morgens nach (Funk et al. 2014) und b) Oberflächenversiegelung.

Im Stadtgebiet standen für die statistische Analyse des Einflusses der Oberflächentemperatur 71 mehrjährige Temperaturzeitreihen zur Verfügung, die in unterschiedlichen Tiefen gemessen wurden. Aus den Zeitreihen wurde durch additive Dekomposition die saisonale Komponente extrahiert und die jeweilige Dämpfung und Phasenverschiebung in der entsprechenden Messtiefe ermittelt. Durch den entstandenen Datensatz konnte so auf zwei unabhängige Arten eine mittlere Temperaturleitfähigkeit von $1.2 \times 10^{-6} \text{ m}^2\text{s}^{-1}$ für das wassergesättigte poröse Medium statistisch berechnet werden. Die Temperaturleitfähigkeit wurde anschließend mit der Porosität und der Temperaturleitfähigkeit von Wasser rückgerechnet, um mit der spezifischen Wärmekapazität von Kalkstein - dem hauptsächlich in der Schotterebene abgelagerten Gestein - die Wärmeleitfähigkeit des porösen Mediums in der numerischen Simulation zu definieren. Dieses Vorgehen wurde gewählt, da die spezifische Wärmekapazität gegenüber der Wärmeleitfähigkeit eine geringere Schwankungsbreite aufweist und auch in der thermisch-hydraulischen Simulation der weniger sensitive Parameter ist. Durch die Ermittlung der Temperaturleitfähigkeit kann auch die saisonale Schwankung der Temperatur nahe der Geländeoberfläche berechnet werden, womit die zeitliche Variabilität der oberen Temperatur-Randbedingung gegeben ist (siehe Abbildung 10).

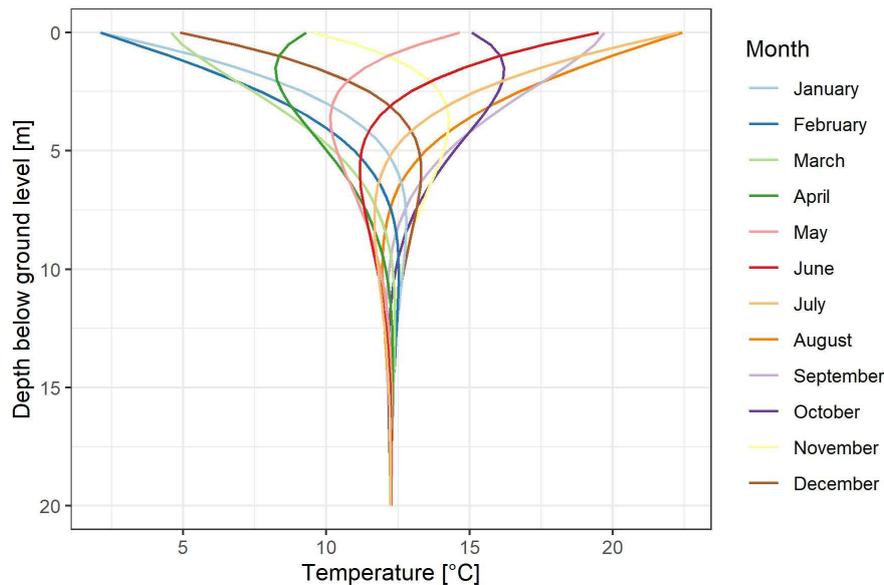


Abbildung 10: Typische saisonale Schwankung der Grundwassertemperatur mit zunehmender Tiefe pro Monat über ein Jahr (Böttcher und Zosseder, 2022).

Als räumlicher Effekt wurde der Einfluss der urbanen Wärmeinsel in der Randbedingung integriert. Dazu stand ein Datensatz von 752 Tiefentemperaturprofilen zur Verfügung, anhand derer sowohl neun anthropogene als auch vier natürliche Faktoren auf ihren Einfluss hinsichtlich der Temperaturentwicklung im Untergrund getestet wurden. Die statistische Analyse ergab, dass die Oberflächenversiegelung den dominanten und treibenden Faktor bei der Entwicklung der unterirdischen urbanen Wärmeinsel für München darstellt. Zudem konnte durch eine Regressionsanalyse ein funktionaler Zusammenhang abgeschätzt werden, der beschreibt, wie hoch die Erwärmung des Untergrunds bei den jeweiligen Versiegelungsgraden ausfällt. Da die verwendete Versiegelungskartierung des DLR mit einer Auflösung von 0,5 x 0,5 m sehr hoch aufgelöst ist, wurde weiter untersucht, inwiefern die Versiegelung räumlich aggregiert werden muss, um den Einfluss auf die Grundwassertemperatur bestmöglich abzubilden. Mittels Aggregationsfläche und Regressionsfunktion wurde die Oberflächenversiegelung in Temperaturen umgerechnet. Die Temperaturen erklären 48% der Varianz in den Grundwassertemperaturen der Tiefentemperaturprofile und beschreiben somit für ein stadtweites Grundwassermodell die durch die urbane Wärmeinsel induzierten Effekte mit einer zufriedenstellenden Genauigkeit. Die übrige nicht erklärte Varianz entfällt zu großen Teilen auf hydrogeologische Parameter, wie Grundwassermächtigkeit, Flurabstand und Darcy Geschwindigkeit, deren Einfluss in der numerischen Simulation selbst berechnet wird und daher noch berücksichtigt wird. In der Parametrisierung des Modells werden abschließend die räumlich unterschiedlichen absoluten Temperaturniveaus mit der saisonalen Temperaturschwankung verrechnet, um die obere Temperatur-Randbedingung sowohl zeitlich als auch räumlich zu definieren.

Die räumliche Definition wird in der finalen Parametrisierung des Modells nicht nur an der Oberfläche genutzt, sondern auch an der seitlichen Berandung im Zustrom. Denn auch das Grundwasser, das seitlich in das Modell einströmt, ist bereits durch die Oberflächentemperatur beeinflusst gewesen. Um daher auch den saisonal abhängigen Gradienten der Temperaturverteilung in der Tiefe zu integrieren, wurden die Zellen der Zustrom Randbedingung jeweils mit der zeitlichen Variation in der entsprechenden Tiefenlage der Zelle beaufschlagt. Auf diese Weise tritt das Grundwasser bereits mit dem anzunehmenden Gradienten für die Verteilung des Tiefentemperaturprofils in die Simulation ein.

II.1.1.1.6 Oberflächengewässer

Der quartäre Grundwasserleiter steht besonders in Gegenden mit geringem Flurabstand häufig in hydraulischem und thermischem Kontakt mit Oberflächengewässern. Bereits im GEPO-Projekt wurden die Gewässer im Stadtgebiet hinsichtlich ihrer Beschaffenheit klassifiziert, da viele künstlich angelegte Gewässer in einem abgedichteten Bett liegen und daher nicht in einem signifikanten Maß mit dem Grundwasser in Verbindung stehen. Für die Modellerstellung wurden deshalb die im Stadtgebiet

gelegenen Teile des Nordmünchner Kanalsystems, die Stadtbäche und angelegte Seen, wie z.B. in Westpark, Ostpark und Riem, nicht berücksichtigt.

Im Stadtgebiet existieren aber auch große, mittlerweile als Badeseen genutzte Baggerseen, die sehr stark mit dem Grundwasser kommunizieren. Hier ist vor allem die sogenannte Dreiseenplatte, bestehend aus Lerchenauer See, Fasaneriesee und Feldmochinger See relevant, da die Baggerseen in besiedeltem Gebiet liegen und daher thermische Grundwassernutzungen beeinflussen können. Die Seen sind im Mittel etwa 5 m tief, besitzen keinen Oberflächenzufluss und werden daher ausschließlich von Grundwasser gespeist. Die räumlichen Umgriffe der Oberflächengewässer wurden dem OpenStreetMap Datensatz entnommen. Da die Seen als Badegewässer im Rahmen der bayerischen Badegewässerverordnung regelmäßig hinsichtlich ihrer Wasserqualität kontrolliert werden, konnten wir für alle in der Modellierung integrierten Oberflächengewässer auf die hierbei gemessenen Wassertemperaturen und den Wasserstand des jeweiligen Badegewässerprofils zurückgreifen. Somit basiert die Simulation des thermischen Einflusses auf das Grundwasser bei der Infiltration des Seewassers in das Grundwasser auf den Messwerten des RKU aus den Jahren 2008-2020. Für Simulationen, die in der Zukunft liegen, wurde über ein 5-jähriges Mittel ein Referenzjahr berechnet.

Die Isar als hydraulisch wichtigstes Fließgewässer interagiert meist stark mit dem Grundwasser und bildet im Allgemeinen den Vorfluter für das quartäre Grundwasser in der Münchener Schotterebene. Kleinräumig können sich diese Verhältnisse allerdings auch umkehren und es existieren Bereiche, wie z.B. der Rückstau am Oberföhringer Wehr, die stark von der Abflusssdynamik der Isar gesteuert sind. Die Messwerte zum Wasserstand wurden von 2 Pegeln des Gewässerkundlichen Dienstes in Baierbrunn und in Bogenhausen bezogen. Zwischen den Pegeln wurde auf Basis des DGM2 entlang des Isarlaufs interpoliert, um eine kontinuierliche hydraulische Randbedingung für die gesamte Berandung des Modells zu erhalten. Zur Definition der thermischen Randbedingung standen sowohl Messungen der Wassertemperatur an den genannten Pegeln als auch Temperaturmessungen der SWM am Isarwerkkanal vor dem HKW Süd, der Isar auf gleicher Höhe, der Isar auf Höhe des Deutschen Museums und der Isar auf Höhe des Mlk Einlaufbauwerks zur Verfügung. Die Zeitreihen wurden zwischen den Messstellen linear interpoliert, um eine kontinuierliche Parametrisierung der thermischen Randbedingung entlang des gesamten Isarlaufs zu erhalten. Für Simulationen, die die Zukunft abbilden, wurden analog zur hydraulischen Randbedingung die 5-jährigen Mittelwerte zu einer Temperaturganglinie für ein Referenzjahr aggregiert.

II.1.1.2 Konzeptuelle Modellerstellung

In den folgenden Abschnitten wird die Integration der räumlichen Elemente im Modellaufbau behandelt. Darauf aufbauend wird die Parametrisierung des Modells und die Zuweisung der Randbedingungen beschrieben.

Die konzeptuellen CAD-Modelle wurden mit dem frei verfügbaren Software Paket SALOME erstellt. SALOME bietet eine Vielzahl verschiedener Funktionen zum Generieren und Verschneiden von Oberflächen und Volumen, die zudem über Python APIs zur automatisierten Modellerstellung mit Hilfe einer Datenbankverknüpfung genutzt werden können. Im Projekt wurden hierfür die in Kapitel II.1.1.1 aufgeführten Datensätze in einem Postgres Datenbankserver organisiert, von dem aus die für die jeweilige Domain relevanten Elemente zur Modellerstellung automatisiert exportiert werden können. Nach dem Export der Inputdaten läuft die anschließende CAD-Modell Generierung ebenfalls automatisiert über Python Skripte ab.

II.1.1.2.1 Hydrogeologischer Modellaufbau

In initialen Schritt des Modellaufbaus werden die Flächen erstellt, die das Modell geologisch und räumlich begrenzen. Wie in Kapitel II.1.1.1 beschrieben, wurden die quartären Schotter von der Geländeoberkante bis zur Quartär-Tertiär-Grenze ins Modell eingebunden. Die Geländeoberfläche wurde hierfür dem digitalen Geländemodell DGM2 entnommen und für den Schichtübergang zwischen Quartär und Tertiär wurde die im GEPO-Projekt interpolierte Quartärbasis genutzt.

In SALOME mussten deshalb große unregelmäßige Flächen erstellt werden. Hierfür wurden die Raster Pixel der Modellregion mit X-, Y- und Z-Koordinaten als Knoten in SALOME importiert und anschließend

zu einer geglätteten Oberfläche interpoliert. Da sich die Oberfläche aus Bezier Teilen zusammensetzt, die mittels B-Splines angepasst werden, ist die Anzahl der Punkte begrenzt, die für die zeitlich effiziente Erstellung einer Oberfläche benutzt werden können. Die Raster Pixel wurden deshalb in Kacheln unterteilt, um die Anzahl der Knoten pro Kachel einschränken zu können. Zusätzlich konnte die Interpolation der einzelnen Kacheln getrennt voneinander durchgeführt und daher auch parallelisiert werden. Nach der Oberflächenerstellung werden die quadratischen Kacheln wieder zusammengesetzt und bilden so die relevanten Flächen im Modell (siehe Abbildung 11a).

Anschließend wurden die Geländeoberfläche und die Quartärbasis zu einem Volumen zusammengefügt und mit der seitlichen Modellgrenze beschnitten. Für die Erstellung der Tertiären Schicht wurde die Fläche der Quartärbasis nach unten extrudiert. Die Mächtigkeit der integrierten Tertiären Schicht kann variabel eingestellt werden, wurde aber für die Modelle mit konstant 30 m festgelegt, da thermische Beeinflussungen von Nutzungen selten tiefer ins Tertiär eindringen. Wie Abbildung 6a zeigt, ist die Integration des Tertiärs für eine stadtweite Modellierung nötig, da es Bereiche mit tertiären Hochs gibt, in denen die quartären Schotter kein Grundwasser führen. Daher ist zum einen für eine spätere Stabilität der numerischen Simulation und zum anderen zur Berücksichtigung der hydraulischen Auswirkungen der Tertiären Hochlagen eine Integration der Tertiären Schicht in der Modellierung erforderlich.

Wie im Kapitel II.1.1.1.5 beschrieben, wird in der Simulation auch der Einfluss der saisonalen Schwankung der Oberflächentemperatur berücksichtigt. Da der Flurabstand und die Grundwasserneubildung stadtweit stark variiert und das Grundwasser somit der Oberflächentemperatur unterschiedlich stark ausgesetzt ist, muss auch die ungesättigte Zone in der Modellierung aufgelöst werden. Durch Ansätze, die einen Energieeintrag und Zustrom direkt an der Grundwasseroberfläche annehmen, wird der Wärmetransport in der ungesättigten Zone oft stark vereinfacht und auch der Einfluss von Grundwasserspiegelschwankungen meist nicht berücksichtigt. Diese Vereinfachungen können in der Simulation die Regeneration von Temperaturanomalien verfälschen, die durch thermische Nutzungen entstehen. Der Energieaustausch mit der Oberfläche ist vor allem in Gebieten mit geringem Flurabstand ein signifikanter regenerierender Einfluss, der bei fehlender Integration zu übermäßig konservativen Simulationsergebnissen führt. Daher wurde in der Modellierung die Geländeoberfläche als obere Berandung gewählt und die ungesättigte Zone vollständig aufgelöst.

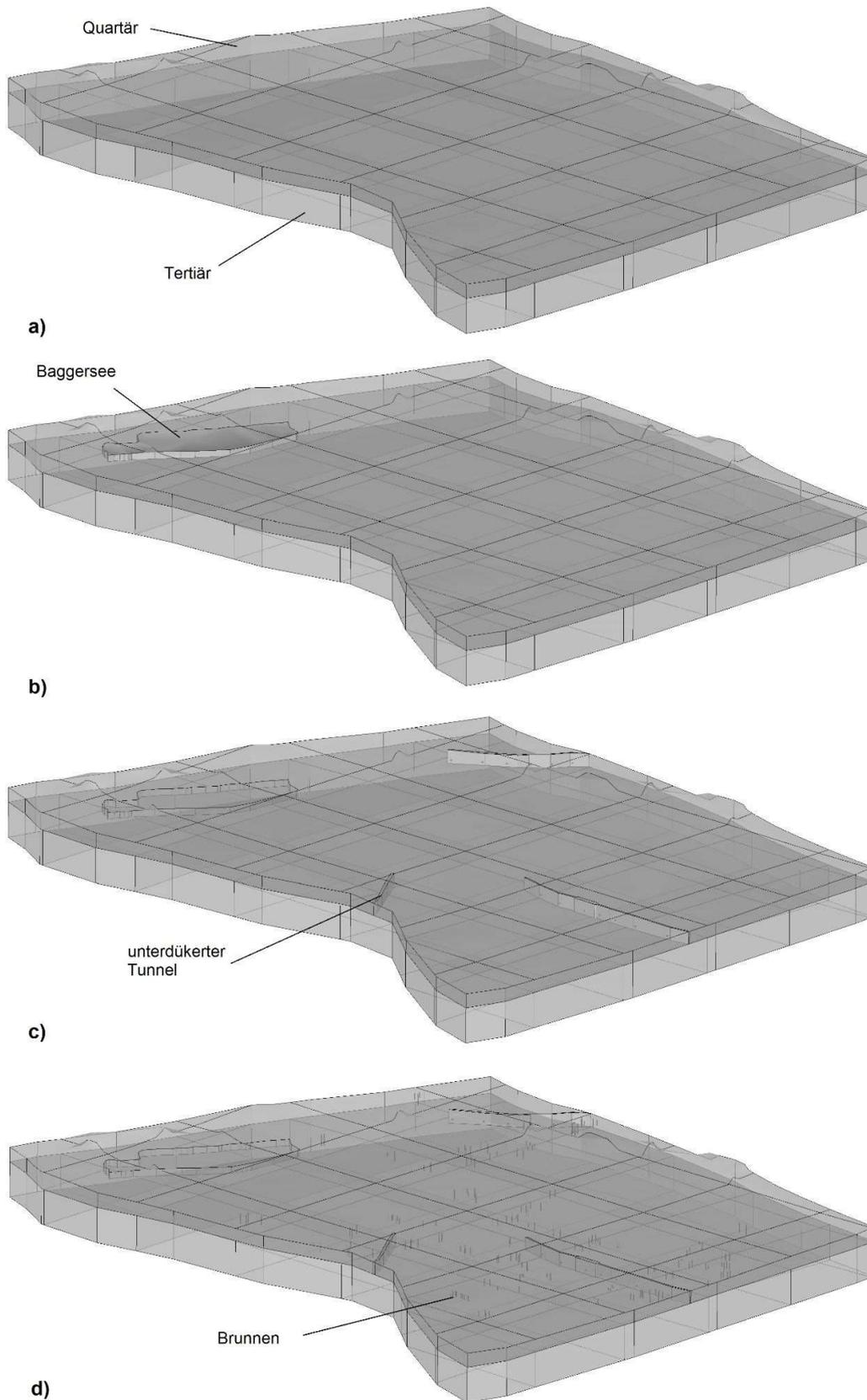


Abbildung 11: Ablauf der Erstellung des CAD-Modells mit a) Erstellung der Modellgeometrie, b) Partitionieren der Oberflächengewässer, c) Partitionieren der unterirdischen Infrastruktur und d) Partitionieren der Brunnen.

II.1.1.2.2 Integration der relevanten Systemkomponenten

Ausgehend von dem zuvor beschriebenen geologischen CAD-Modell wurden die für die Modellierung relevanten Elemente durch Partitionieren mit dem bestehenden Volumen verschmolzen. Gemäß Anzahl und Komplexität wurden zunächst Oberflächengewässer, dann unterirdische Infrastrukturelemente und abschließend Brunnen in das Modell integriert.

Um das stark mit dem Grundwasser interagierenden Oberflächengewässer (Baggersee) ins Modell einzubinden, wurde vor der Erstellung der geglätteten Geländeoberfläche zunächst das DGM im Bereich der Oberflächengewässer bearbeitet. Wie in Kapitel II.1.1.1.6 dargestellt, standen für die relativ konstanten Wasserspiegel präzise gemessene Höhen aus den Badegewässerprofilen zur Verfügung. Diese konstanten Höhen wurden in der Fläche des Gewässers ins DGM integriert, um vorhandene Ungenauigkeiten und Artefakte im Geländemodell zu verbessern. Des Weiteren sind in den Badegewässerprofilen durchschnittliche Wassertiefen gegeben, die jeweils für die Bestimmung der Wasserkörper in die Tiefe verwendet wurden (siehe Abbildung 11b). Die Umgriffe der Gewässer stammen aus dem frei zugänglichen OpenStreetMap Datensatz und wurden für die Modellierung überarbeitet und vereinfacht, da z.B. Inseln nicht integriert wurden, da diese auch nicht relevant für die Modellierungen sind.

Unterirdische Infrastrukturen wurden, wie in Kapitel II.1.1.1.3 beschrieben, aus einem speziell im Projekt erstellten Datensatz generiert und in der Tiefe über die komplette Mächtigkeit der quartären Schicht ins Modell eingebettet (siehe Abbildung 11c). Dazu wurden nur die Infrastrukturelemente berücksichtigt, von denen ein relevanter hydraulischer Einfluss zu erwarten ist. Alle Infrastrukturen sind daher mit Dükern ausgestattet, die ebenfalls in das CAD-Modell integriert wurden. Der Durchfluss durch die Düker wird in der Modellierung geometrisch aufgelöst. Folglich wurden die Dükerrohre, die den oberstromigen mit dem abstromigen Infrastrukturteil verbinden, vereinfacht in den Körper der Infrastruktur eingebettet. Die kartographische Lage der Düker an der jeweiligen Infrastruktur ist dabei bekannt. Wie in Kapitel II.1.1.1.3 aufgezeigt, wurden aber für die Einbautiefe und Dimensionierung der Düker Annahmen getroffen. Einlass und Auslass des Dükers wurden jeweils 1 m über der Quartärbasis angesetzt und die hydraulisch wirksame Fläche des Dükers wurde als 5 m langes und 1 m hohes Rechteck in die Wandung der Infrastruktur eingebettet (siehe Abbildung 12). Des Weiteren wurde zur Abschätzung der Strömung des Wassers im Dükerrohr auf ein aufwendiges Lösen mittels Navier-Stokes oder Hagen-Poiseuille Gleichung verzichtet und stattdessen vereinfacht in PFLOTRAN die Darcy-Strömung mit sehr hohen Durchlässigkeiten implementiert. Wenn das Düker-Paar anstelle des hydraulischen Ausgleichs für eine thermische Nutzung verwendet wird, ist das Dükerrohr, das Oberstrom und Abstrom verbindet, nicht ins CAD-Modell integriert worden. Es wurden lediglich die Einlass- und Auslassrechtecke realisiert, denen im Anschluss die jeweiligen Randbedingungen der Brunnen, i.e. Pumprate und Einleittemperatur, zugewiesen wurden.

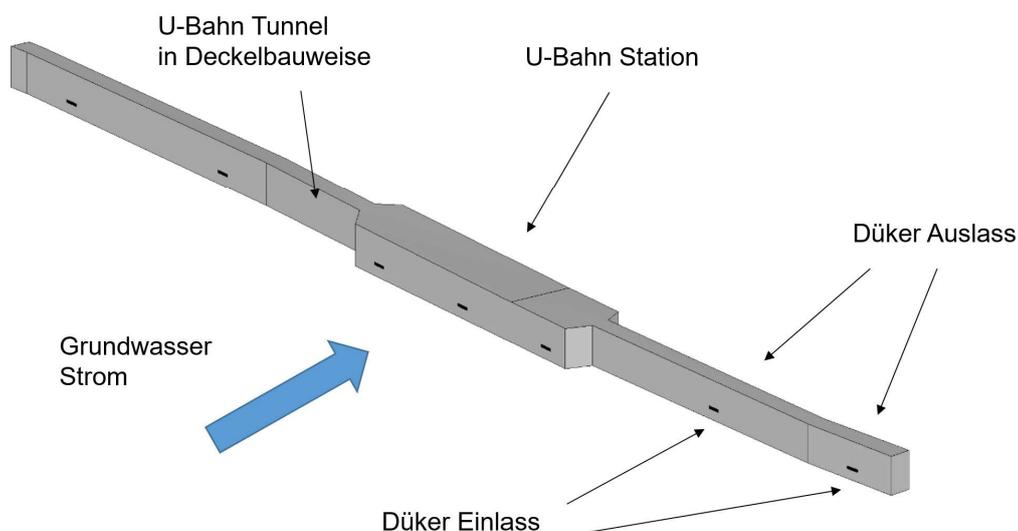


Abbildung 12: Detailansicht eines Infrastrukturelements mit Unterdükerung, hier U-Bahn-Tunnel mit Bahnhof

Im letzten Schritt wurden die Brunnen ins Modell integriert. Dazu wurden im CAD-Modell die Filterstrecken der Brunnen vereinfacht als rechteckige Säulen eingebettet (siehe Abbildung 11d). Durch die Datenbankintegration sind Oberkante und Unterkante des Filterrohrs sowie der Ausbaudurchmesser, falls bekannt, berücksichtigt worden. Wie in Kapitel II.1.1.1.2 beschrieben, sind sowohl existierende thermische Nutzungen als auch Brauchwasserbrunnen für die Simulation des IST-Zustands verwendet worden. Bei der Modellerstellung für die Optimierungsszenarien sind zusätzlich auch die hypothetischen Brunnenpaare integriert worden (siehe Kap. II.1.1.6). Für den Ausbau der hypothetischen Brunnen in der Optimierung und bei fehlenden Werten für existierende Brunnen sind jeweils plausible Annahmen getroffen worden. Für den Brunnenbau wurde ein vollständiger Ausbau angesetzt, d.h. die Oberkante der Filterstrecke wurde mit dem Grundwasserstand aus der GEPO-Stichtagsmessung gleichgesetzt und die Unterkante wurde 1 m über die Quartärbasis gelegt. Für den Brunnendurchmesser wurde ein üblicher Bohrdurchmesser von 300 mm angenommen. Mit der geometrischen Integration der Brunnen werden alle relevanten Rahmenbedingungen entsprechend der Datenverfügbarkeit ins Modell gebracht und die vereinfachten Geometrien können anschließend einfach parametrisiert werden. Nachdem das CAD-Modell mit allen Komponenten erstellt wurde, folgt im nächsten Schritt die Netzgenerierung auf Basis der geometrischen Objekte. Die Netzerstellung ist Thema des folgenden Kapitels.

II.1.1.3 Numerische Modellerstellung

Auf Basis des CAD-Modells erfolgt die Netzgenerierung und somit die Transformation des konzeptuellen Modells in ein numerisches Modell. Da die Simulation mit einem Finite-Volumen Code (PFLOTTRAN) durchgeführt wurde, ergaben sich dadurch Anforderungen an die Diskretisierung des Netzes. Bei Simulationen mit der Finite-Volumen Methode (FVM) wird die Präzision des Ergebnisses entscheidend von der Orthogonalität des Netzes beeinflusst. Netze sind orthogonal, wenn die Verbindungslinie von benachbarten Zell-Zentren die gemeinsame Fläche senkrecht schneidet. Daher wurde im Projekt für die Netzgenerierung in zwei Phasen unterteilt. Zunächst ist ein Netz mittels Delaunay Triangulation generiert worden. Durch langjährig etablierte 3D-, tetraeder-basierte Netzgeneratoren, wie das verwendete NETGEN, ist es möglich Netze für komplexe Geometrien unbeaufsichtigt und automatisch erstellen. Im zweiten Schritt wurde aus dem Delaunay-triangulierten Netz der duale Graph gebildet und so das Voronoi-Diagramm berechnet. Dies geschieht indem auf jeder Tetraeder-Kante die Mittelsenkrechte errichtet wird und bis zum Schnittpunkt mit den jeweils benachbarten Mittelsenkrechten gezeichnet wird. Das entstehende Polyeder-Netz ist somit per Definition orthogonal (siehe Abbildung 13).

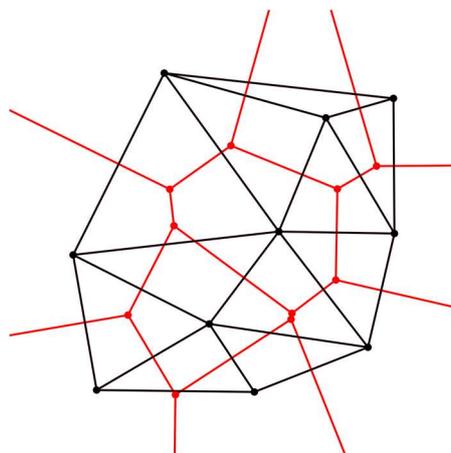


Abbildung 13: Exemplarische zweidimensionale Darstellung der Konvertierung einer Delaunay-Triangulation (schwarz) in den dualen Voronoi-Graphen (rot).

II.1.1.3.1 Delaunay Netzgenerierung

Wie eingangs erwähnt, wurde zunächst mit Hilfe der NETGEN Integration in SALOME ein Tetraeder-Netz generiert. Hierfür sind diverse Einstellungen zu Netzaufbau und lokaler Netzverfeinerung integriert und verwendet worden (siehe Tabelle 4).

Tabelle 4: Relevante SALOME-NETGEN Parameter für das Generieren des delaunay-triangulierten Tetraeder Netzes.

Objekt	Einstellung	Standardwert	Beschreibung
Geologische Schichten	maximale quartäre Zellgröße	5	Globale Verfeinerung der quartären Schicht
	maximale tertiäre Zellgröße	10	Globale Verfeinerung der tertiären Schicht
	Lokale Verfeinerung der Grenzen	3	Verfeinerung der vertikalen Ränder des Modells zur Repräsentation zeitlich stark variabler Randbedingungen
	Einbindung paralleler Grenzschichten an der Q/T Grenze	1	Einzug einer parallelen Grenzschicht, um das Beschneiden von Voronoi-Grenzen zu vermeiden
Gewässer	Lokale Verfeinerung der Oberfläche	1	Verfeinerung der Oberfläche zur Repräsentation der saisonalen Wassertemperaturschwankung
	Lokale Verfeinerung des Körpers	3	Verfeinerung des Wasservolumens zur Repräsentation der saisonalen Wassertemperaturschwankung
Infrastruktur	Lokale Verfeinerung des Infrastruktur Körpers	3	Verfeinerung des undurchlässigen Volumens zur Repräsentation des hydraulisch-thermischen Einflusses
	Einbindung paralleler Grenzschichten	1	Einzug einer parallelen Grenzschicht, um das Beschneiden von Voronoi-Grenzen zu vermeiden
	Lokale Verfeinerung des Düker Körpers	1	Verfeinerung des durchlässigen Düker-Rohres zur Repräsentation des hydraulisch-thermischen Einflusses
Brunnen	maximale Zellgröße der Brunnen	0.3	Globale Verfeinerung des Hexaeder-Gitters der Brunnen
	Lokale Verfeinerung um den Körper des Brunnens	0.3	Verfeinerung der Brunnen zur Repräsentation von variablen hydraulisch-thermischen Einflüssen

Neben den allgemein gebräuchlichen Einstellungen zur lokalen Netzverfeinerungen, die nötig sind, um die Einflüsse zeitlich variabler Randbedingungen oder steile Gradienten präzise in der Simulation abzubilden, sind auch Einstellungen integriert worden, die die anschließende Voronoi-Konvertierung vereinfachen und eine sinnvolle Netzgenerierung ermöglichen. Nach dem Konvertieren des Tetraeder Netzes in das Voronoi-Diagramm sollten die in Kapitel II.1.1.2.2 beschriebenen Geometrien der

wichtigen Modellelemente in ihrer Form und Größe weitestgehend erhalten bleiben. Dies ist jedoch bei der Konvertierung eines einheitlichen Tetraeder-Netzes nicht gegeben (siehe Abbildung 13). Darum wurden bei der Delaunay Triangulation in SALOME zusätzliche Hypothesen hinzugefügt, um die internen Modellgeometrien weitestgehend zu erhalten. Dazu wurden an den internen Grenzflächen sogenannte viskose Schichten eingezogen, die das zweidimensionale triangulierte Gitter auf der entsprechenden Grenzfläche rechtwinklig zur Fläche extrudiert und so eine Schicht Dreiecksprismen einzieht. Nach der Voronoi-Konvertierung verläuft die Grenzfläche der Polyeder folglich zwischen den Dreiecksprismen und die durch das CAD-Modell definierte Grenzfläche bleibt auch im Polyeder-Netz erhalten (siehe Abbildung 14). Viskose Schichten wurden, wie in Tabelle 4 aufgeführt, zur Abbildung der Quartär-Tertiär-Grenze und der Infrastruktur Grenzen genutzt. Für Oberflächengewässer wurden keine zusätzlichen Schichten eingezogen, da die Tiefe der Gewässer, wie in Kapitel II.1.1.1.6 beschrieben, vereinfacht auf Basis eines Mittelwerts definiert wurde und daher eine präzise Abbildung der Geometrie nicht erforderlich war.

Die Größen der in Tabelle 4 angegebenen Standardwerte beruhen auf Tests, bei denen die nötige Verfeinerung für eine ausreichend präzise Simulation der zeitlich und räumlich dynamischen Vorgänge im Modell ermittelt wurde. Dies ist jeweils ein Kompromiss zwischen Performanz der Simulation und der Präzision, die auf der großen Skala eines stadtweiten Grundwassermodells erreicht werden kann.

II.1.1.3.2 Voronoi Konvertierung

Das Tetraeder-Netz wurde anschließend aus SALOME exportiert und mit Vorpalite aus der Geogram Bibliothek in den dualen Voronoi-Graphen konvertiert (siehe Abbildung 15). Dafür wurde das von Moise Rousseau (Rousseau, o. D.) erstellte und frei auf GitHub veröffentlichte SALOME-Voronoi Interface genutzt. Aufgrund der zum Teil komplexen Geometrien weist Vorpalite Flächen der Polyeder nicht korrekt zu. Daher wurde im Projekt ein zusätzlicher post-processing Schritt entwickelt, um die fehlenden Flächen zu identifizieren und anschließend die Zuweisung zu korrigieren. Da die numerischen Modelle meist mehrere Millionen Zellen beinhalten, wurde dieser Arbeitsschritt parallelisiert, um die ansonsten lange Berechnungszeit zu reduzieren. Nachdem das Polyeder-Netz erstellt und prozessiert wurde, wird es wieder in SALOME importiert, um die Regionen für die Zuweisung von Randbedingungen zu definieren und den abschließenden Export in das PFLOTTRAN Netz-Format durchzuführen.

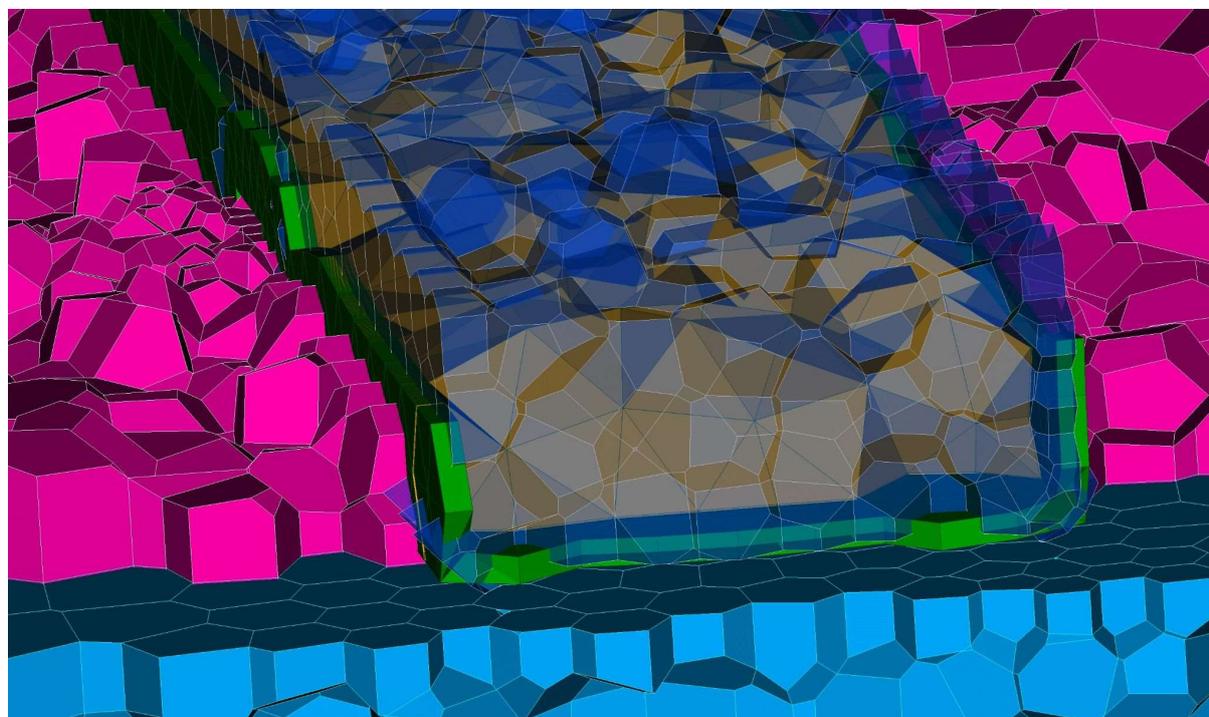


Abbildung 14: Nutzung der viskosen Schichten (grün) als Mittel, um die Geometrie einer Infrastruktur (Delaunay: gelb und Voronoi: blau transparent) und zusätzlich die Grenzfläche zwischen Quartär (pink) und Tertiär (hellblau) nach der Konvertierung zu erhalten.

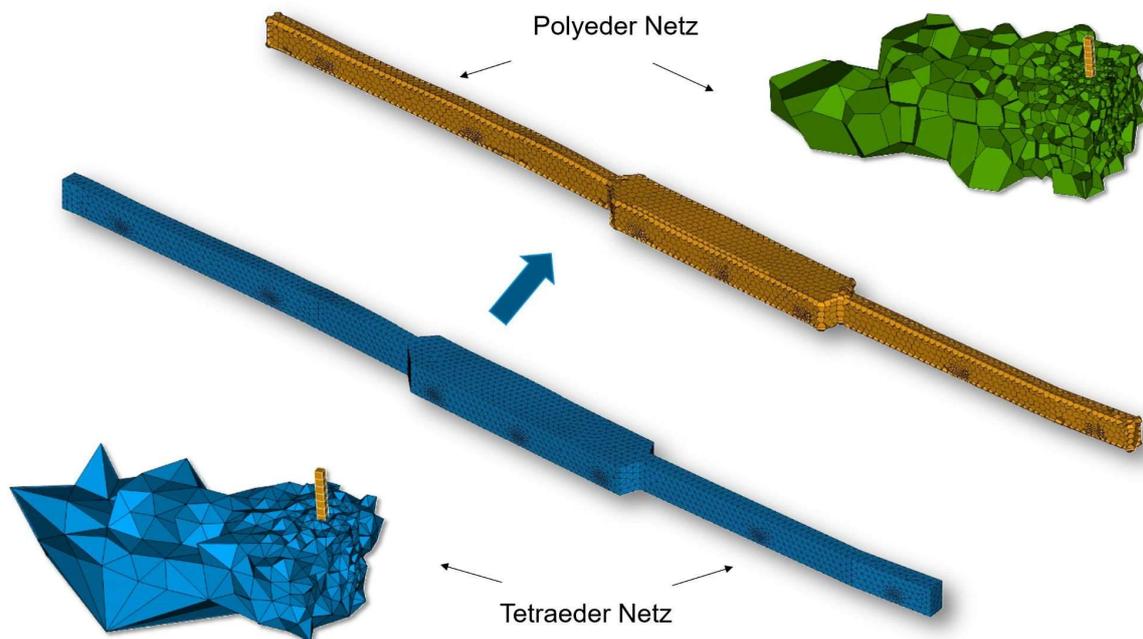


Abbildung 15: Konvertierung des Tetraeder Netzes in ein Polyeder Netz durch die Berechnung des Voronoi-Diagramms am Beispiel eines Tunnel-Abschnitts und eines Brunnens.

II.1.1.3.3 Export des Polyeder-Netzes für PFLOTRAN

Für den Export des numerischen Modells aus SALOME konnte ebenfalls auf eine existierende von Moise Rousseau (Rousseau, o. D.) entwickelte Softwarelösung zurückgegriffen werden. Das SALOME-Plugin führt den Export in die entsprechend von PFLOTRAN lesbaren Netz-Formate durch und ist, wie schon das Voronoi-Interface, auch frei auf GitHub beziehbar.

Das Polyeder-Netz wird zur Simulation in PFLOTRAN in das unstrukturierte explizite Netz Format geschrieben. In diesem Format wird das Netz über eine Zell-Liste und eine Zell-Verbindungs-Liste beschrieben. Die Liste der Zellen enthält die Koordinaten (x, y, z) der Zentren und die Zell-Volumina. In der Verbindungsliste sind die IDs der zwei benachbarten Zellen, die Zentren der Verbindungsflächen (x, y, z) und der Flächeninhalt der Polyeder-Fläche gegeben. PFLOTRAN bietet noch andere Netz Formate, allerdings kann nur im unstrukturiert expliziten Format mit beliebig komplexen Polyedern gearbeitet werden, weshalb auch für die spätere Kopplung mit der Energiesystemoptimierung ausschließlich mit diesem Netz-Format gearbeitet wurde.

Zusätzlich zum eigentlichen Netz wurden in den jeweiligen Modellen auch die zuvor beschriebenen Gruppen im Datei-Format für unstrukturierte, explizit definierte Regionen exportiert. Hierbei bestehen Regionen, die die Ausdehnung von Volumen definieren, aus einer Liste der zugeordneten Zell-IDs und Regionen, die Grenzflächen definieren, aus Listen mit Zell-IDs, Koordinaten der Flächen Zentren und Flächeninhalt. Über die jeweiligen Regionen-Dateien können in der Simulation Randbedingungen und Materialeigenschaften zugewiesen werden. Damit sind in PFLOTRAN alle räumlichen Informationen vorhanden, die für eine Simulation benötigt werden.

II.1.1.3.4 Zeitliche Diskretisierung

PFLOTRAN verwendet ein implizites (Rückwärts-)Euler-Verfahren, das auf einer Newton-Krylov Iteration basiert. Das bedeutet, dass die Zeitschritte während einer Simulation adaptiv angepasst werden und lediglich die initiale und maximale Zeitschrittlänge angegeben werden muss. Zur Abbildung der Dynamik wurde für alle durchgeführten Simulationen die maximale Zeitschrittlänge auf 10 Tage begrenzt. Für die späteren gekoppelten Simulationen wurden die relevanten Informationen ebenfalls in einem 10-Tages Intervall ausgetauscht.

II.1.1.3.5 Definition der Randbedingungen und Materialparameter

Nachdem die Netzerstellung abgeschlossen wurde, können den jeweiligen Regionen eines Modells Randbedingungen und Materialeigenschaften zugewiesen werden, um alle relevanten Umwelteinflüsse einzubinden (siehe Abbildung 16). Dazu wurden die in Kapitel II.1.1.1 beschriebenen Eingangsdaten verwendet. Im Folgenden wird dargelegt, wie die Daten in der Simulation integriert wurden.

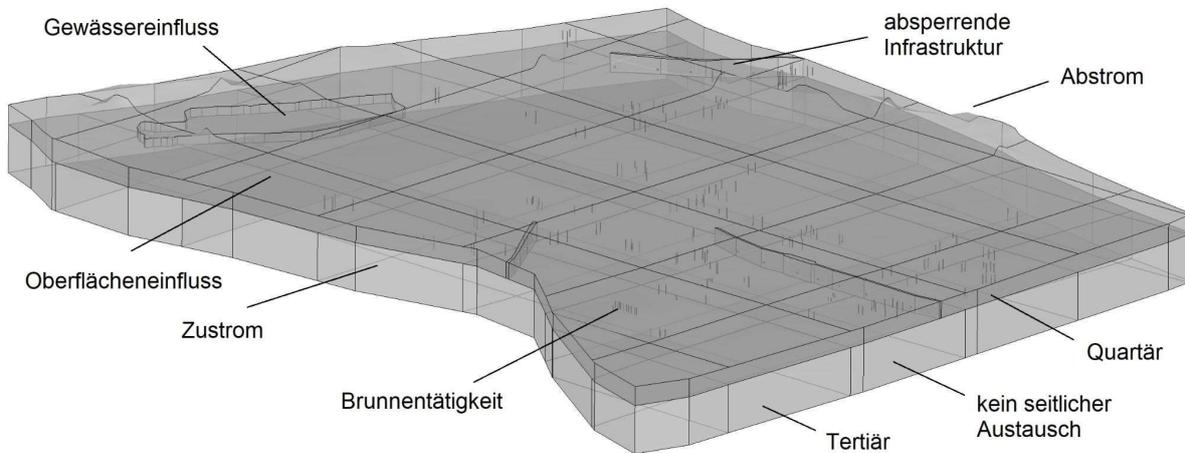


Abbildung 16: Beispielhafte Zusammenfassung der in der Modellierung integrierten Einflüsse und Materialien.

Zu Beginn werden die unterschiedlichen Materialien definiert, in die sich das Modell räumlich gliedert. Wie in Kapitel II.1.1.2 beschrieben, werden Quartär, Tertiär, Gewässer, Düker und Infrastrukturen ins Modell integriert und folglich mit verschiedenen Eigenschaften belegt. Dazu wurden für Porosität, Dichte und spezifische Wärmekapazität bei Quartär und Tertiär mittlere Werte aus dem GEPO-Abschlussbericht verwendet. Bei der Wärmeleitfähigkeit wurde, wie im Kapitel II.1.1.1.5 gezeigt, der aus den statistischen Ergebnissen des Passive Heat-Tracing über die Porosität berechnete Wert für die feste Phase verwendet. Dieser Wert wurde sowohl für das Quartär als auch für das Tertiär verwendet. Für die Dispersivität wurde ein für quartären Kies mittels Tracer-Versuch in München erhobener Wert global für alle Materialien konstant gesetzt (siehe Zosseder 2007). Bei Gewässer und Düker-Rohr Körpern wurden jeweils die Parameter für Wasser bei 10 °C gesetzt und eine synthetische Porosität von 0.99 % und eine idealisierte sehr hohe Permeabilität gesetzt. Dies ist eine vereinfachende Annahme, die für die zu simulierende stadtweite Skala getroffen wurde, da zugunsten der Performanz auf eine weitere Modellkopplung verzichtet wurde. In den Körpern wird weiterhin Darcy-Strömung im porösen Medium berechnet. Zur Abbildung unterirdischer Infrastruktur wurden die Materialparameter von Beton verwendet und eine synthetische Porosität von 0.0 % und eine idealisierte sehr niedrige Permeabilität gesetzt, um hydraulisch absperrend zu wirken. Die einzelnen Parameter sind in Tabelle 5 zusammengefasst.

Tabelle 5: Definition der Randbedingungen und Materialparameter für die integrierten Elemente und Einflüsse.

Objekt	Randbedingung / Materialeigenschaft	Wert	Beschreibung
Quartär	Porosität	0,25	mittlerer Kennwert aus geotechnischen Untersuchungen
	Dichte	2.8e3	mittlerer Kennwert aus geotechnischen Untersuchungen
	spez. Wärmekapazität	1.0e3	mittlerer Kennwert aus geotechnischen Untersuchungen
	Wärmeleitfähigkeit	0.5	mittlerer Kennwert aus statistischem Passive Heat-Tracing

Objekt	Randbedingung / Materialeigenschaft	Wert	Beschreibung
	Dispersivität	10	Standardwert
	Permeabilität	variabel	Vertikales Anisotropie-Verhältnis von 0,1
Tertiär	Porosität	0,20	mittlerer Kennwert aus geotechnischen Untersuchungen
	Dichte	2.8e3	mittlerer Kennwert aus geotechnischen Untersuchungen
	Wärmekapazität	1.0e3	mittlerer Kennwert aus geotechnischen Untersuchungen
	Wärmeleitfähigkeit	0.5	mittlerer Kennwert aus statistischem Passive Heat-Tracing
	Dispersivität	10	Standardwert
	Permeabilität	variabel	Vertikales Anisotropie-Verhältnis von 0,1
Oberfläche	Hydraulisch: Neumann	Monats-Zeitreihe	Grundwasserneubildung in mm/y
	Thermisch: Dirichlet	10-Tage Zeitreihe	saisonale Temperaturschwankung mit urbanem Wärmeinseleffekt
Zustrom	Hydraulisch: Dirichlet	Konstant	Festpotential aus dem GEPO-Gleichenplan
	Thermisch: Dirichlet Hydrostatisch	10-Tage Zeitreihe	Tiefenabhängig zugewiesene Zeitreihe aus dem mittleren Temperaturprofil
Abstrom	Hydraulisch: Dirichlet Hydrostatisch	Konstant	Festpotential aus dem GEPO-Gleichenplan
Gewässer	Porosität	0,99	idealisiert nur flüssige Phase
	Dichte	1,0e2	Stoffkennwert Wasser bei 10°C
	Wärmekapazität	4,2e3	Stoffkennwert Wasser bei 10°C
	Wärmeleitfähigkeit	0,6	Stoffkennwert Wasser bei 10°C
	Dispersivität	10	Standardwert
	Permeabilität	1e-6	idealisierter hoher Wert
	Hydraulisch: Dirichlet Hydrostatisch	Konstant	Wasserstand aus dem Badegewässerprofil
	Thermisch: Dirichlet	10-Tage Zeitreihe	Wassertemperatur aus den Badewasserkontrollen
Infrastruktur	Porosität	0,00	idealisiert nur feste Phase
	Dichte	2,4e2	Materialkennwert Beton
	Wärmekapazität	1,0e3	Materialkennwert Beton

Objekt	Randbedingung / Materialeigenschaft	Wert	Beschreibung
	Wärmeleitfähigkeit	2,1	Materialkennwert Beton
	Dispersivität	5	Standardwert
	Permeabilität	1e-20	idealisiert niedriger Wert
Düker-Rohr	Porosität	0,99	idealisiert nur flüssige Phase
	Dichte	1,0e2	Stoffkennwert Wasser bei 10°C
	Wärmekapazität	4,2e3	Stoffkennwert Wasser bei 10°C
	Wärmeleitfähigkeit	0,6	Stoffkennwert Wasser bei 10°C
	Dispersivität	10	Standardwert
	Permeabilität	1e-6	idealisiert hoher Wert
Brunnen	Hydraulisch: Skalierte volumetrische Rate	10-Tage Zeitreihe	Extraktions- oder Injektions-Pumpraten, die über Brunnenzellen abhängig von der Permeabilität der Zellen skaliert werden.
	Thermisch: Dirichlet	10-Tage Zeitreihe	Bei Injektion absolute Einleittemperatur abhängig von der Pump-Mischtemperatur und der Temperaturspreizung

Neben den Materialien werden Randbedingungen zugewiesen, um die in Abbildung 16 zusammengefassten Einflüsse abzubilden. An der Geländeoberfläche wurden mosaikartig Regionen gebildet, die gleiche Grundwasserneubildungsraten und Temperaturniveaus haben, um die räumlich-zeitliche Variation zu integrieren. Dazu wurden die in Kapitel II.1.1.1.4 beschriebenen Grundwasserneubildungsraten über eine Neumann Randbedingung zugewiesen und die in Kapitel II.1.1.1.5 beschriebenen Oberflächentemperaturen über eine Dirichlet-Randbedingung zugewiesen. Des Weiteren wurden die über das mittlere Temperaturprofil des Bodens berechneten tiefenabhängigen Temperaturschwankungen genutzt, um die thermische Dirichlet-Randbedingung für den Zustrom tiefenzoniert zugewiesen. Hydraulisch wurde der Zustrom mit einer hydrostatischen Dirichlet-Randbedingung definiert. In PFLOTRAN kann bei dieser Randbedingung an einer seitlichen Modellgrenze eine konstante Höhe des Grundwasserstands angegeben werden. Im 3D Raum berechnet der Code intern die sich auf Basis des hydrostatischen Drucks ergebenden Drücke pro Zellfläche. Als Grundwasserspiegel wurden im Zustrom und im Abstrom jeweils die konstanten Werte aus den räumlich interpolierten Werten der GEPO-Stichtagsmessung verwendet. An den Modellgrenzen, die senkrecht zu Grundwasserstromlinien gezogen wurden, ist keine Randbedingung gesetzt worden und es findet somit über diese Grenzen auch kein Transport statt.

Bei den integrierten stehenden Gewässern wurde, wie in Kapitel II.1.1.1.6 beschrieben, hydraulisch die hydrostatische Randbedingung gleich dem eingemessenen Wasserspiegel gesetzt und thermisch die Wassertemperatur. Beide Messwerte stammen aus den Messprogrammen zur Badewasserqualität des jeweiligen Sees. Bei der Isar ist die hydraulische Integration etwas komplexer, da sie als Fließgewässer ein gewisses Gefälle aufweist, das im Detail räumlich nicht dokumentiert ist. Deshalb wurde zur Abbildung des Gefälles auf eine Kombination aus Pegelmessungen und DGM-Profil zurückgegriffen, um die Randbedingung kontinuierlich über den gesamten Isarlauf hinweg definieren zu können. Im Detail wurden für die unterschiedlichen Skalenniveaus zwei Methoden zur Integration entwickelt (siehe Abbildung 17). Zunächst wurde das kleinräumig sehr variable DGM-Profil mittels LOWESS (Locally Weighted Scatterplot Smoothing) Line geglättet und anschließend mit der Profillinie aus dem GEPO-Grundwassergleichenplan verglichen. Für die Definition der Dirichlet Randbedingung sind entlang des Flusslaufs jeweils die niedriger liegenden Werte gewählt worden. Hier wurde die Annahme getroffen,

dass auf der Skala des großräumig interpolierten Grundwassergleichenplans im Nahbereich der Isar durch die Kriging-Interpolation Überschätzungen des Grundwasserstands vorhanden sein können. Des Weiteren wurde angenommen, dass bei niedrig liegendem Grundwasserstand vermutlich die hydraulische Anbindung der Isar nicht sehr gut ist und daher Grundwasserstände niedriger als Isarwasserstände sein können.

Die sich so ergebende kontinuierliche Randbedingung kann in PFLOTRAN allerdings nicht als hydrostatische Randbedingung gesetzt werden, da sich der Wasserspiegel durchgängig ändert und so kein hydrostatischer Gradient für eine Region berechnet werden kann. Es kann lediglich ein kartographisches Datum mit Gradienten definiert werden, weshalb homogene Teilabschnitte definiert werden müssen, um diese Randbedingungen sinnvoll nutzen zu können. Dies wurde über Regressionsschätzungen von abschnittswisen linearen Funktionen realisiert, die Homogenbereiche durch Geraden abbilden und so über Datum und Gradient einheitlich in einer Region hydrostatisch definieren können (siehe Abbildung 17). Da bei der kontinuierlichen Dirichlet-Randbedingung zwar die Auflösung höher ist, aber für jede Zelle ein eigener hydrostatisch vor-prozessierter Zelldruck gesetzt werden muss, ist sie eher für kleinere numerische Modelle geeignet, die eine geringere Zellenanzahl an dieser Modellgrenze besitzen. In der abschnittswisen hydrostatischen Randbedingung müssen die Werte nur pro linearer Region gesetzt werden, weshalb sie sich auch für größere Modelle eignet.

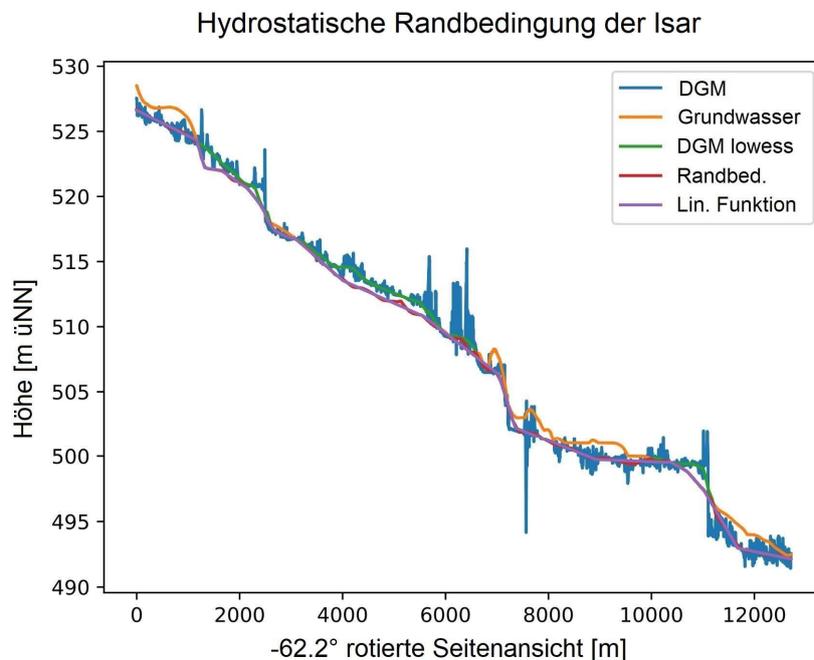


Abbildung 17: Kontinuierliche (rot) und abschnittswise lineare (violett) Randbedingung der Isar.

II.1.1.4 Modellkalibrierung

Ein wichtiger Schritt zur präzisen Simulation des IST-Zustands ist die Kalibrierung der numerischen Modelle. Im Projekt wurde für PFLOTRAN eine Kopplung zur Kalibriersoftware PEST von Grund auf neu entwickelt. Der Aufbau und Funktionsumfang dieser Kopplung wird im folgenden Kapitel beschrieben. Daran anschließend wird die Methodik zur hydraulischen Kalibrierung in einem weiteren Kapitel behandelt.

II.1.1.4.1 Kopplung von PFLOTRAN und PEST

PEST (Parameter ESTimation) ist eine Bibliothek aus Programmen, die speziell zur Kalibrierung von Grundwassermodellen entwickelt wurde. Im Projekt wurde der Optimierer PEST-GLM aus PEST++ in der Version 4.2.1 genutzt. PEST ist in besonderem Maße geeignet, da es nicht in den Code des Lösers, hier PFLOTRAN, eingreift und somit vom Simulationscode unabhängig läuft. In der Kopplung werden die Simulationsergebnisse ausgelesen und an PEST übergeben, damit der Abgleich mit Echtwelt-

Messungen stattfinden kann, auf die kalibriert werden soll. Damit PEST in der Lage ist, Einfluss auf die Simulationsergebnisse auszuüben, werden sensitive Parameter, wie z.B. Permeabilität, definiert, die von PEST verändert werden können. Da für jeden Parameter in einer gradienten-basierten Optimierungs-Iteration ein (Forward Difference) bis zwei (Central Difference) Simulationen durchgeführt werden müssen, um den Einfluss bzw. Gradienten des Parameters zu bestimmen, müssen für ein kontinuierliches räumliches Ergebnis, wie dem Permeabilitätsfeld, in der Optimierung zunächst die Freiheitsgrade reduziert werden. PEST löst dieses Problem mit dem sogenannten Pilotpunkt Ansatz. Hierbei werden diskrete Punkte im Modell verteilt, an denen PEST die Permeabilitätswerte optimiert, um die Echtwelt-Messungen in der Simulation möglichst nachzubilden. Um den gesamten Raum des Permeabilitätsfelds in der Simulation zu parametrisieren, wird zwischen den Pilotpunkten entsprechend interpoliert (siehe Abbildung 18).

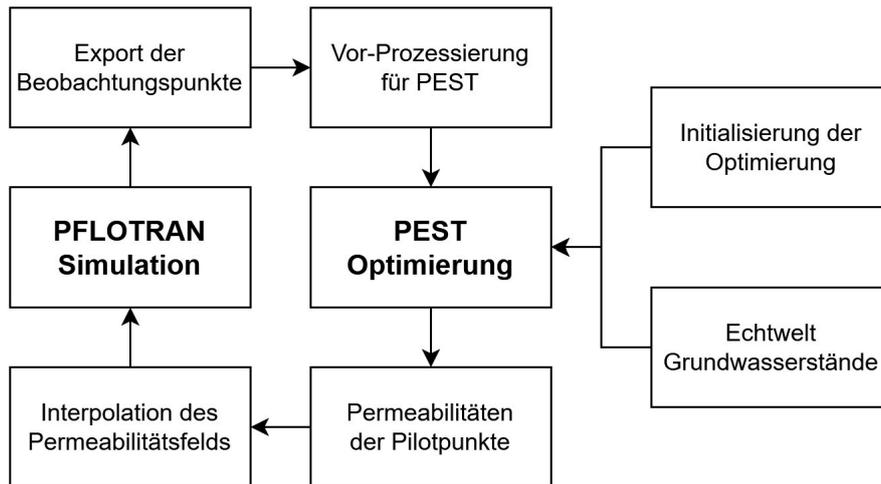


Abbildung 18: Kopplungsschema und Datenaustausch zwischen PFLOTTRAN und PEST.

Neben der Entwicklung eines performanten Datenflusses zwischen PFLOTTRAN und PEST mussten zunächst im Vorfeld einige Schritte zur Initialisierung des PEST-Optimierungsproblems durchgeführt werden. Dabei wurde eine automatische Erstellung der PEST-Eingabedatei programmiert, um sowohl die Kontrolleinstellungen als auch alle übrigen relevanten Daten, i.e. Parameter Gruppen, Parameter Daten, Beobachtungsdaten, File Verlinkungen und vorausgehende Informationen, in die Datei zu schreiben. Da im Stadtgebiet meist schon Messungen oder Versuchsauswertungen zu den zu kalibrierenden Parametern vorlagen, wurde die Kalibrierung mit Tikhonov Regularisierung durchgeführt. Dadurch kann für jeden Parameter ein bevorzugter Wert angegeben werden. Anschließend wird die Abweichung von dem bevorzugten Wert während der Minimierung der Optimierungsfunktion bestraft, wodurch Abweichungen verringert werden und das inverse schlecht gestellte Problem weiter konkretisiert wird. Die detaillierte Ermittlung der bevorzugten Werte und der Variationsgrenzen, sowie die räumliche Anordnung der Pilotpunkte, die bei der Kalibrierung des Permeabilitätsfelds eingesetzt wurden, wird im Kapitel II.1.1.4.3 näher beschrieben. Während der Initialisierung wird ebenfalls das Programm TSPROC für das Problem vorbereitet. TSPROC ist ein Programm der PEST-Bibliothek mit dem Zeitreihen für PEST verarbeitet werden können. Es wurde in der Kalibrierung genutzt, um auch mit zeitlich abhängigen Beobachtungsdaten transient kalibrieren zu können.

Nachdem das Optimierungsproblem mit allen Steuerungsdateien vorbereitet wurde, musste der performante Datenaustausch zwischen den Codes entwickelt werden. Hier ist besonders die Interpolation des Permeabilitätsfelds ein Arbeitsschritt, der bei großen Modellen viel Rechenleistung in Anspruch nimmt, da für jede Zelle des Modells ein Permeabilitätswert interpoliert und geschrieben werden muss. Um diesen Prozess zu beschleunigen, wurde eine MPI-parallelisierte Radial-Basis-Funktion (RBF) Interpolation programmiert.

Die Berechnung der RBF ist aufgrund der vergleichsweise wenigen Pilotpunkte rechnerisch einfach. Die Berechnung der interpolierten Werte für die Zellen des PFLOTTRAN Netzes benötigt allerdings sehr viel Speicher, um die Interpolationsmatrix vorzuhalten. Um Berechnungszeit und Speicherbedarf zu reduzieren, wurde daher der Schritt der Interpolation parallelisiert. Hierfür ist das PFLOTTRAN Netz

uniform über alle verfügbaren Prozessoren verteilt worden, weshalb lediglich eine kleinere Interpolation für den jeweils partitionierten Bereich des Netzes durchgeführt werden musste. Der Aufbau einer großen Interpolationsmatrix wird so umgangen. Nach dem Interpolieren der Partitionen können die Werte für das gesamte Netz wieder zusammengefügt werden.

Da zur Berechnung der Gradienten während der Kalibrierung eine Vielzahl von PFLOTRAN Simulationen nötig sind, war es ebenfalls erforderlich, die PFLOTRAN Simulationen in einer Optimierungs-Iteration parallel ablaufen zu lassen. Dazu bietet PEST das Programm PANTHER, in dem die parallelen Läufe des gekoppelten Modells gemanagt werden. Die besondere Herausforderung bestand darin, diese Umgebung auf dem Hochleistungsrechner des LRZ zu implementieren. Hierbei mussten die Netzwerkinformationen der Compute-Nodes des Clusters in das mit TCP/IP arbeitende Schema des PANTHER Managers transferiert werden. Die Funktionalität wurde mit Hilfe des Application Support Team am LRZ entwickelt und erfolgreich getestet, sodass eine verteilte und parallele Simulation der PFLOTRAN Modelle über eine beliebige Anzahl von Compute-Nodes hinweg möglich wurde.

II.1.1.4.2 Hydraulische Kalibrierung anhand der Permeabilität

Wie bereits erwähnt, ist die räumlich Kalibrierung des Permeabilitätsfelds der zentrale Schritt in der hydraulischen Kalibrierung eines Grundwassermodells. Dies wird im Folgenden beispielhaft an der PFLOTRAN Modellregion 30 illustriert (siehe Abbildung 24). Da in den stadtweiten Grundwassermodellen die gemessenen Grundwasserstände zum Teil räumlich sehr stark geclustert sind und in großer Zahl vorliegen, war es zunächst wichtig eine Methode zu entwickeln, die Pilotpunkte möglichst sparsam räumlich angeordnet ohne PEST die nötige Flexibilität zur räumlichen Beeinflussung der Permeabilität zu nehmen. Dafür müssen in Gegenden mit dichter geclusterten Grundwasserstandmessungen auch die Pilotpunkte dichter gesetzt werden, da hier auch eine eventuell vorhandene Dynamik in der Grundwasserströmung besser durch Messungen erfasst wird. Die räumliche Verteilung der Pilotpunkt erfolgte deshalb in drei Schritten. Zunächst wurden an den Knoten der konvexen Hülle der Modellgrenze Pilotpunkte gesetzt, um den Umgriff des Modells bis zu den Rändern kontrollieren zu können. Anschließend wurde mit den vorhandenen Messungen im Modellgebiet eine 2D-Delaunay-Triangulation durchgeführt und bei jeder Kante auf halber Strecke zwischen den Messungen ein Pilotpunkt gesetzt (siehe Abbildung 19). Da die so entstehende Anordnung zu teils sehr nahe beieinanderliegenden Pilotpunkten führt, wurden Punkte, deren Abstand ein gewisses Limit unterschreitet, wieder entfernt.

In einem finalen Schritt wurde die Pilotpunkt Verteilung noch um die vorhandenen Daten zur hydraulischen Durchlässigkeit aus Pumpversuchsauswertungen ergänzt. Gewöhnlich werden Pumpversuchsauswertungen, also in Feldversuchen ermittelte Permeabilitäten, als zuvor bekannte Information in PEST berücksichtigt. Das bedeutet, dass der Wert am entsprechenden Punkt in der Interpolation unveränderlich ist. Die am Lehrstuhl für Hydrogeologie erhobene Datenbasis der Pumpversuchsauswertungen ließ allerdings einen alternativen Ansatz zu. Da Pumpversuche vergleichsweise aufwändige Feldversuche sind, werden sie auch qualitativ sehr unterschiedlich durchgeführt. Zusätzlich können, je nach Art der Versuchsdurchführung, auch mehrere Methoden zur Auswertung genutzt werden. In der Projektdatenbank sind die Ergebnisse für alle bei dem jeweiligen Pumpversuch möglichen Auswertungen hinterlegt. Die unterschiedlichen Methoden führen zum Teil auch zu leicht unterschiedlichen Ergebnissen, wodurch oft mehrere Permeabilitäten an einer Messstelle zur Verfügung stehen. Zusätzlich wurden die Pumpversuche und Auswertemethoden mit einem eigens entwickelten Qualitäts-Ranking System klassifiziert und konnten so entsprechend gewichtet bzw. mit Unsicherheiten beaufschlagt werden. Die Pumpversuchsauswertungen stellen daher keine festen Messwerte mehr dar, sondern konnten, wie bei regulären Pilotpunkten, mit einer Schwankungsbreite und einem bevorzugten Wert belegt werden. Nachdem auch die Pumpversuchsauswertungen zum Pilotpunktfeld hinzugefügt wurden, ist die räumliche Anordnung abgeschlossen (siehe Abbildung 19).

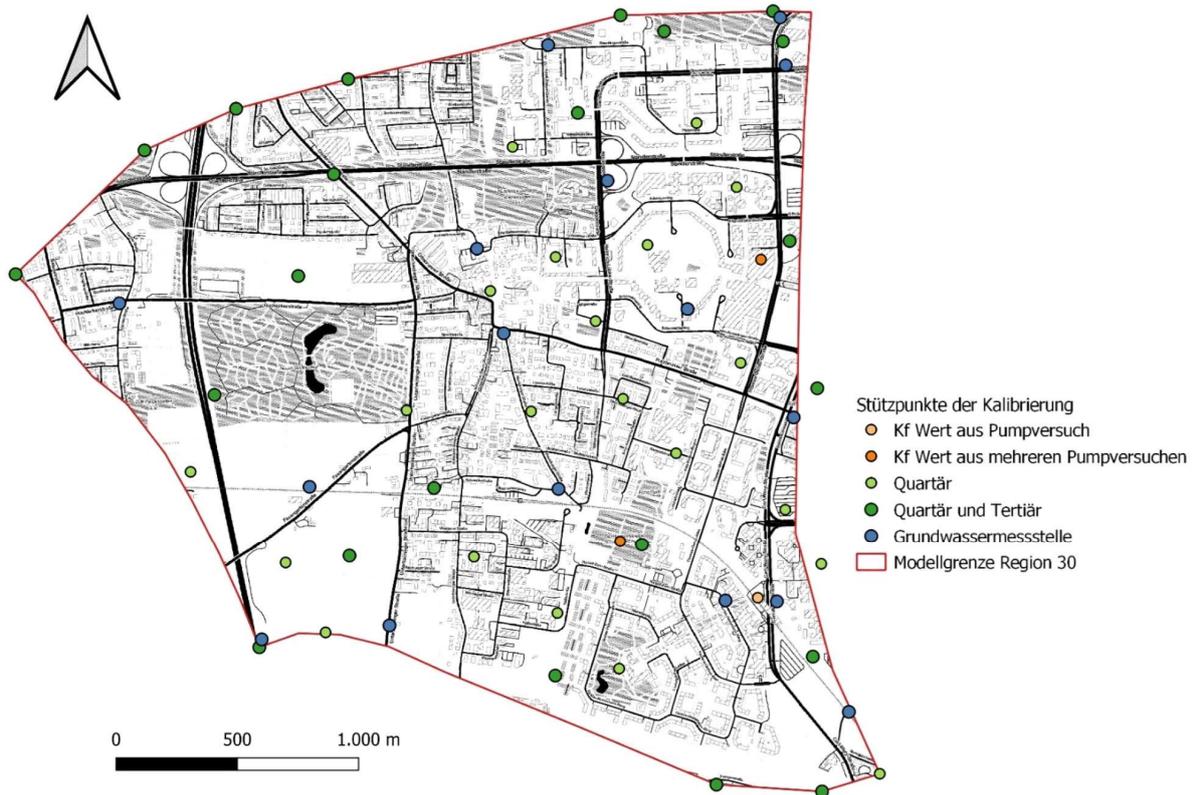


Abbildung 19: Verteilung der Pilotpunkte (grün) auf halber Länge der Triangulationskanten zwischen den Messungen (blau) und am Modellrand, sowie bestehende Pumpversuchsauswertungen in Region 30.

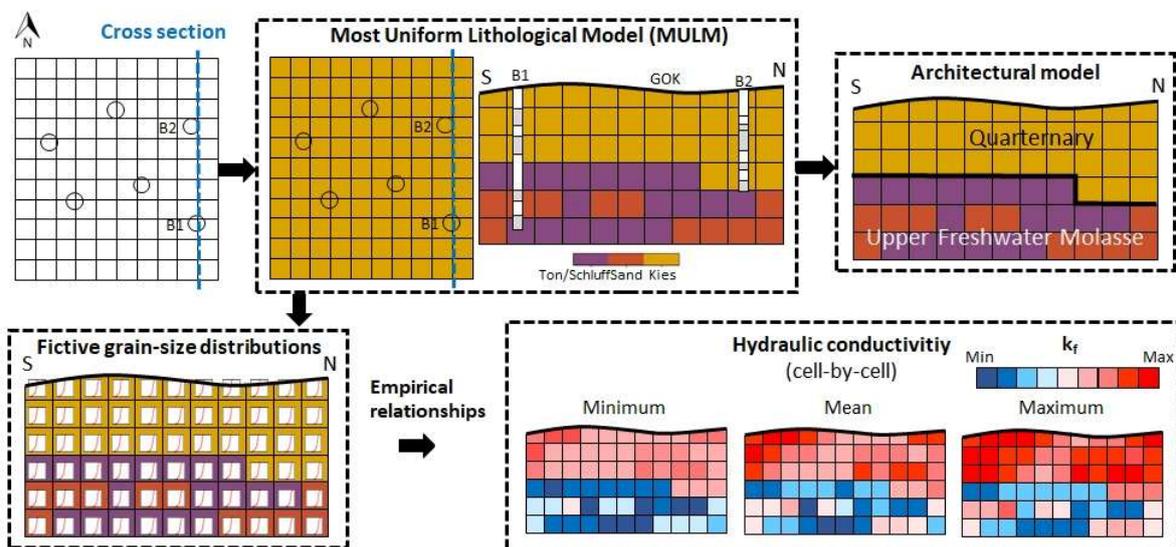


Abbildung 20: Konvertierung der geologischen 3D-Modellierung (aus dem GeoPot Projekt der TUM-HYD) in k_f -Wert Bereiche und bevorzugte Werte.

Nachdem die Positionen der Pilotpunkte definiert wurden, musste für die regulären Pilotpunkte die zulässige Schwankungsbreite und der bevorzugte Wert definiert werden. Dazu wurden Informationen aus dem im Projekt GeoPOT entwickelten geologischen 3D-Modell genutzt. Das geologische Modell beschreibt einheitliche Lithologien, die auf Basis von geologischen Gesteinsansprachen aus mehr als 20.000 Bohrungen interpoliert wurden (siehe Albarran-Ordas, 2022). Auf Basis der Lithologien wurden fiktive Kornsummenkurven erstellt und anschließend über bestehende empirische Zusammenhänge in

hydraulische Durchlässigkeiten konvertiert. Je nach Gültigkeitsbereich der 13 berücksichtigten empirischen Funktionen sind dann für jede Zelle des geologischen Modells mehrere Durchlässigkeiten geschätzt worden. Da die Permeabilitäten in der Kalibrierung nur zweidimensional angepasst werden, konnten in dem Modell mit 100 m x 100 m x 1 m Auflösung zusätzlich mehrere untereinanderliegende Zellen aggregiert werden, um die gesamte Variation der hydraulischen Durchlässigkeit der quartären Schicht zu ermitteln. Aus dem Datensatz wurde am Standort jedes Pilotpunkts abschließend das geometrische Mittel als bevorzugter Wert und das globale Minimum bzw. Maximum aus der Sammlung aller empirischen Ergebnisse und quartären Zellen zur Definition der Schwankungsbreite genutzt.

Da das geologische 3D-Modell neben dem Quartär auch die Lithologien des Tertiärs umfasst, konnte dieselbe Methodik für eine festgelegte Tiefe des Tertiärs unter der Schichtgrenze durchgeführt werden. Somit war es möglich die Permeabilitäten von Quartär und Tertiär unabhängig voneinander zu kalibrieren und gemäß der geologischen Beschaffenheit des Tertiärs auch hydraulische Fenster im Tertiär mit zu berücksichtigen (siehe Abbildung 21). Da der Beitrag der tertiären Permeabilitäten zur Kalibrierung der quartären Grundwasserstände allerdings generell geringer ist, wurde das tertiäre Pilotpunktfeld auch mit Hilfe eines größeren minimalen Abstandslimits stärker ausgedünnt als das quartäre Pilotpunktfeld (siehe Abbildung 20).

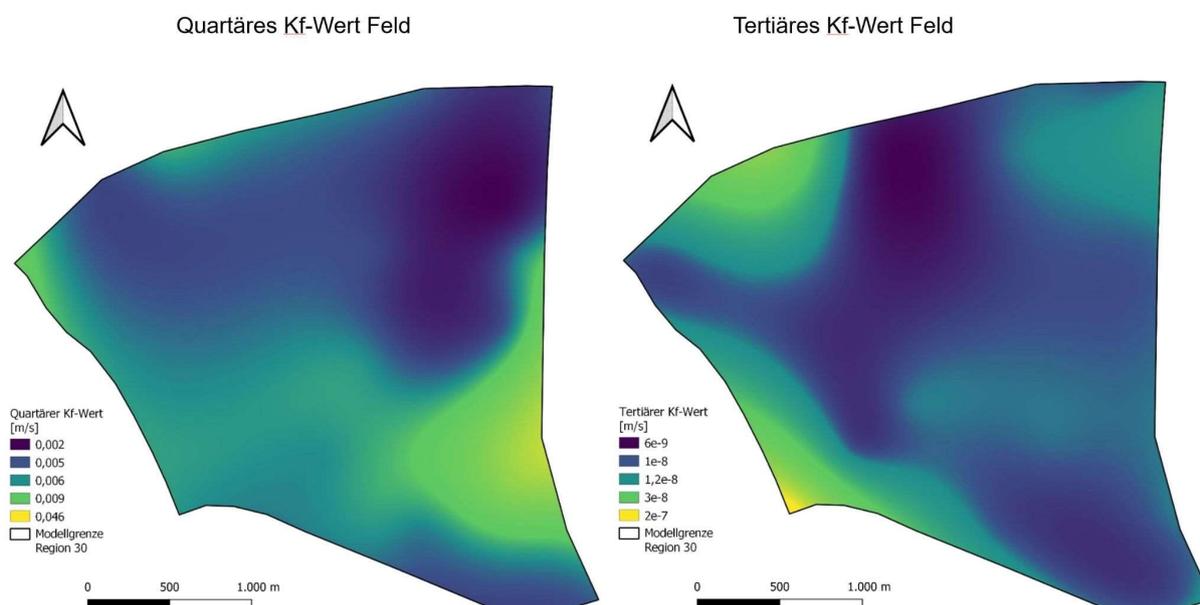


Abbildung 21: Exemplarisches Ergebnis der Kalibrierung des quartären und tertiären k_f -Wertfelds vom Region 30.

II.1.1.4.3 Hydraulische Kalibrierung der Randbedingungen

Zusätzlich zum Permeabilitätsfeld sind die Simulationsergebnisse stark abhängig von den hydraulischen Randbedingungen. Den Haupteinfluss haben bei der klassischen Parametrisierung, i.e. ohne die Anwesenheit der Isar an einer Modellgrenze, die hydrostatischen Randbedingungen im Zustrom und im Abstrom. Der räumliche Verlauf dieser Grenzen orientiert sich an den Grundwassergleichen der GEPO-Stichtagsmessung und gibt damit schon einen signifikanten Anteil des großräumigen hydraulischen Einflusses vor. Für die hydrostatische Randbedingung wird, wie in Kapitel II.1.1.3.5 beschrieben, die Höhe des Grundwasserstands und ein räumlicher Gradient in der PFLOTRAN Eingabedatei definiert. Hieraus ergeben sich pro hydrostatische Region drei Kalibrierparameter, i.e. Druckspiegelhöhe, Gradient in X-Richtung und Gradient in Y-Richtung.

PEST kann diese Werte über sogenannte Template Files direkt in der PFLOTRAN-Eingabedatei verändern und so in der Kalibrierung berücksichtigen. In den kalibrierten Modellen wurden die besten Ergebnisse erzielt, wenn initial eine Kalibrierung der Randbedingungen durchgeführt wurde und anschließend mit den kalibrierten Werten das Permeabilitätsfeld räumlich kalibriert wurde.

II.1.1.5 Modellierung des IST-Zustands

Für die stadtweite Modellierung des IST-Zustands wurden zwei große Grundwassermodelle erstellt. Ein Modell östlich der Isar und ein Modell westlich der Isar. Dies ist hydrogeologisch sinnvoll, da die Isar für das quartäre Grundwasser den Vorfluter darstellt und somit auch kein signifikanter Austausch von quartärem Grundwasser über die Isar hinweg stattfindet (siehe Kap. II.1.1.1). Als hydraulische Ausgangsbedingung wurde der im GEPO-Projekt gemessene mittlere Niedrigwasserstand verwendet. Diese stellen auch den geeigneten Bemessungswasserstand für eine thermische Grundwassernutzung dar. Das Modell wurde zuvor hydraulisch stationär mittels Anpassung der Randbedingungen und des Permeabilitätsfelds auf diesen Grundwasserstand kalibriert (siehe Kap. II.1.1.4). Abbildung 22 zeigt dazu den IST-Zustand der Beispielregion westlich der Isar mit allen bestehenden thermischen Nutzungen, inklusive ihrer Nutzungsart.

Thermisch wurde die aus der GEPO-Stichtagsmessung interpolierte Grundwassertemperatur für das absolute Niveau des initialen Temperaturfelds verwendet und entsprechend der mittleren Schwankung der Grundwassertemperatur tiefenabhängig berechnet (siehe Kap. II.1.1.1.5). Anschließend wurde die Simulation thermisch-hydraulisch transient bis zu einem quasi-stationären Zustand durchgeführt. Hierbei wurden die absoluten Einleittemperaturen der Schluckbrunnen iterativ aus den Temperaturen der in der Anlage vorhandenen Förderbrunnen und der hinterlegten Temperaturspreizung der Anlage berechnet (siehe Kap. II.1.1.1.2.).

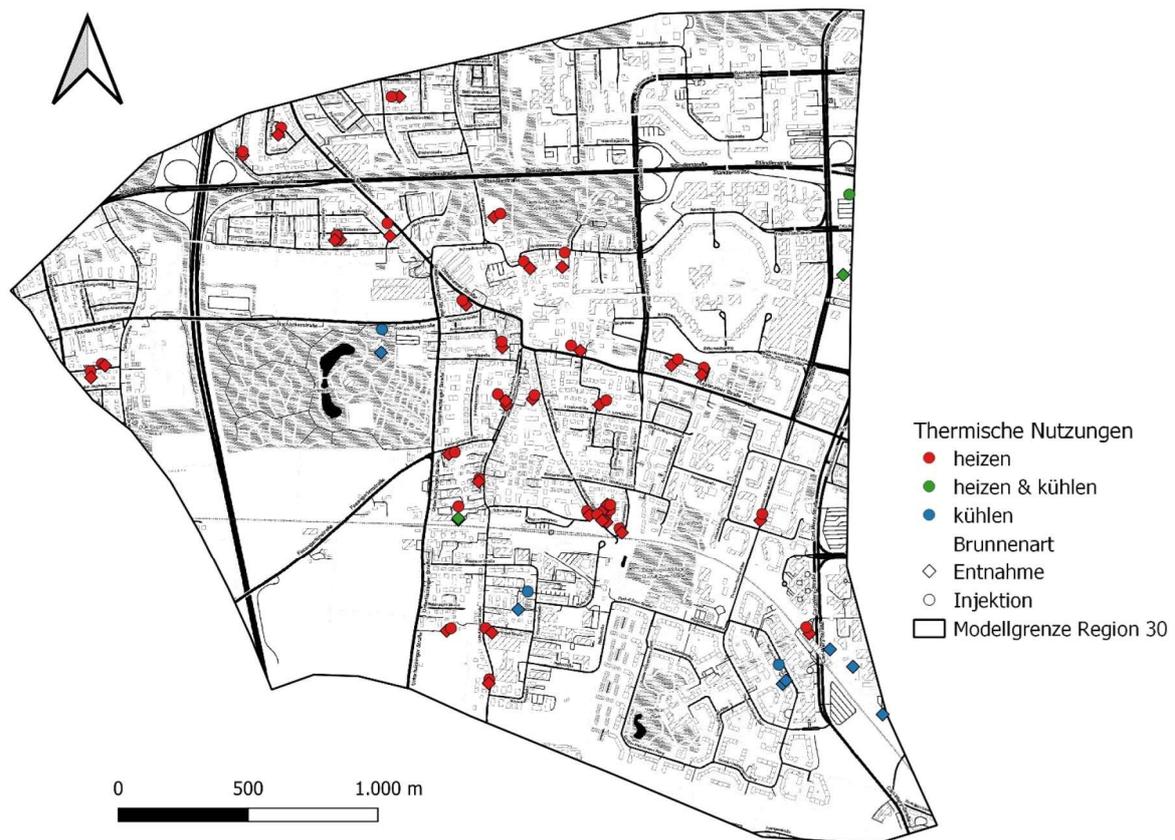


Abbildung 22: IST-Zustand der Beispielregion mit allen bestehenden thermischen Nutzungen, inklusive ihrer Nutzungsart in Region 30.

II.1.1.6 Modellierung der Optimierungsszenarien

In der stadtweiten Optimierung der thermischen Grundwassernutzung in München werden 98.853 hypothetische Anlagen mit jeweils einem Förderbrunnen und einem Schluckbrunnen berücksichtigt. Die Brunnen wurden je Flurstück, auf dem Gebäuden mit Wärme- oder Kältebelastung existieren, positioniert und entsprechend der in Kapitel II.1.1.2.2 beschriebenen Methodik ins Modell implementiert. Da in einer dicht bebauten Nachbarschaft mit kleinen Flurstücken, die Positionen der Brunnen zueinander

entscheidend für ihren nachhaltigen Betrieb sein können, wurde im Vorfeld eine Optimierung der Brunnenstandorte auf dem Flurstück durchgeführt. Hierbei wurden die Brunnen so angeordnet, dass Schluckbrunnen im Abstrom befindliche Förderbrunnen geringstmöglich beeinflussen (siehe Abbildung 23). Details zur Methodik sind in Kapitel II.1.3.3 beschrieben.

Da in der Optimierung ein Zukunftsszenario für das Jahr 2050 untersucht wurde, mussten im Projekt auch Prognosen zur Grundwassertemperatur erstellt werden. Hierfür wurde auf eine Studie aus dem GRETA-Projekt zurückgegriffen, in der die langjährigen Aufzeichnungen der Bodentemperatur des DWD genutzt wurden, um bestehende Trends zu analysieren. Auf Basis aller in Süddeutschland erhobenen Messwerte konnte eine über die letzten Dekaden konstante Erwärmung der Bodentemperatur von 0,4 °C pro Dekade festgestellt werden. Dieser Trend wurde auch für die Entwicklung der Münchener Grundwassertemperatur angenommen, um die Prognose für das Jahr 2050 zu simulieren. Es kann jedoch angenommen werden, dass es sich um eine konservative Schätzung handelt, da der steigende Trend der letzten Jahre und die Dynamik in einer urbanen Wärmeinsel nicht berücksichtigt wurden.

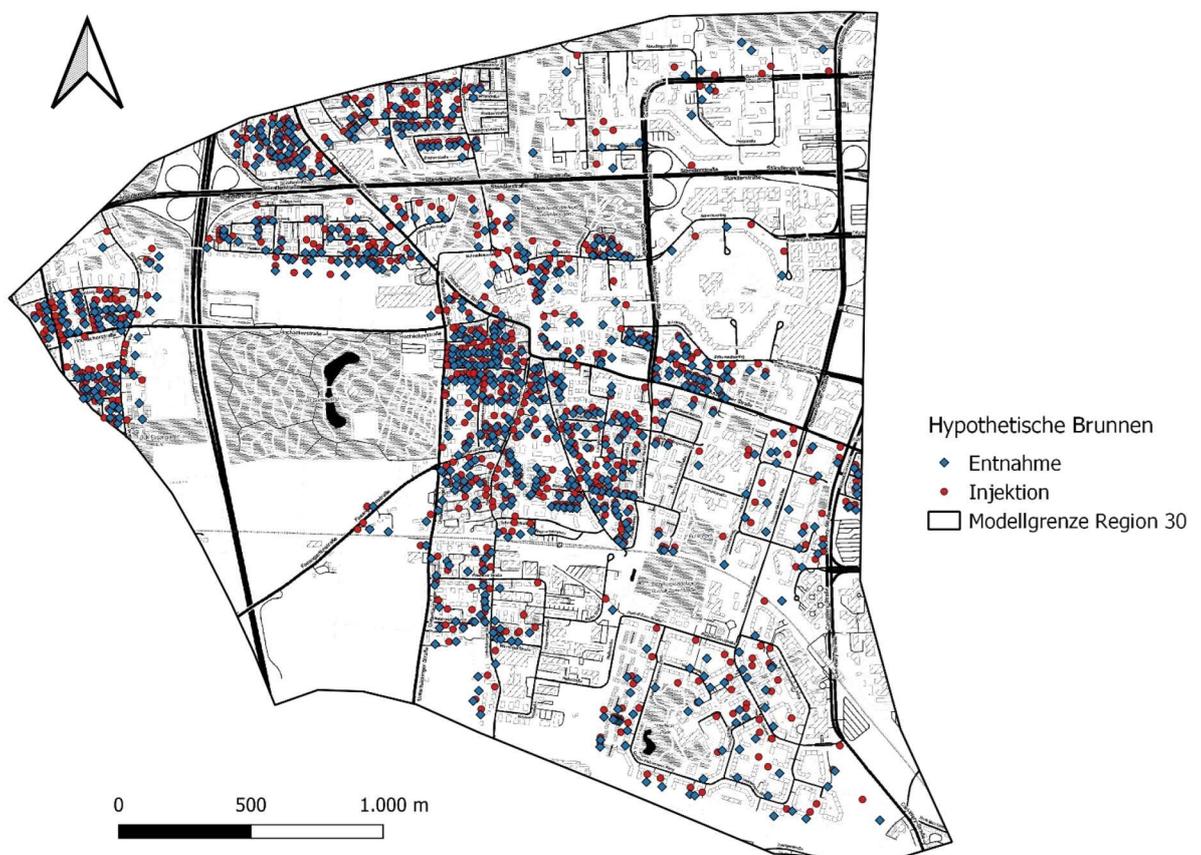


Abbildung 23: Alle im Standort vor-optimierten hypothetischen Brunnenpaare der Beispielregion 30, die in der Optimierung berücksichtigt werden.

Für die stadtweite gekoppelte Energiesystemoptimierung konnten aufgrund des Rechenaufwands nicht die großskaligen Grundwassermodelle links und rechts der Isar genutzt werden. Daher ist das Stadtgebiet in 31 kleinere PFLOTRAN-Modelle unterteilt worden (siehe Abbildung 24). Die Optimierung wird dann jeweils pro PFLOTRAN-Modell durchgeführt wie in Kapitel II.1.1.9 beschrieben. Die Abgrenzung der Gebiete ist seitlich entlang der Grundwasserstromlinien und ober- sowie unterhalb entlang der Grundwassergleichen der Stichtagsmessung von 2014 durchgeführt worden. Durch die seitliche Abgrenzung entlang der Stromlinien wird sichergestellt, dass eine thermische Beeinflussung über die seitlichen Ränder hinweg in angrenzende Regionen minimiert wird. Im Abstrom hingegen wird die thermische Beeinflussung auf die nächstgelegene Region allerdings erheblich sein. Deshalb müssen für eine stadtweite Optimierung die oberstromig gelegenen Regionen zuerst optimiert werden. Aus dem resultierenden Temperaturfeld wird am jeweilig abstromig gelegenen Modellrand die Temperatur

extrahiert und zeitlich sowie räumlich auf die im Zustrom liegende Randbedingung des darauffolgenden Modells projiziert. Somit wird Information der sich ändernden Temperatur an das jeweils im abstrom gelegene PFLOTRAN-Modell weitergegeben. In Abbildung 24 wäre folglich ein beispielhafter Optimierungsablauf eine nacheinander ausgeführte gekoppelte Simulation von Modell 10, 29 und final 5. Dadurch wird die Weitergabe des Temperaturfelds bei großräumig Richtung Norden fließenden Grundwasser sichergestellt.

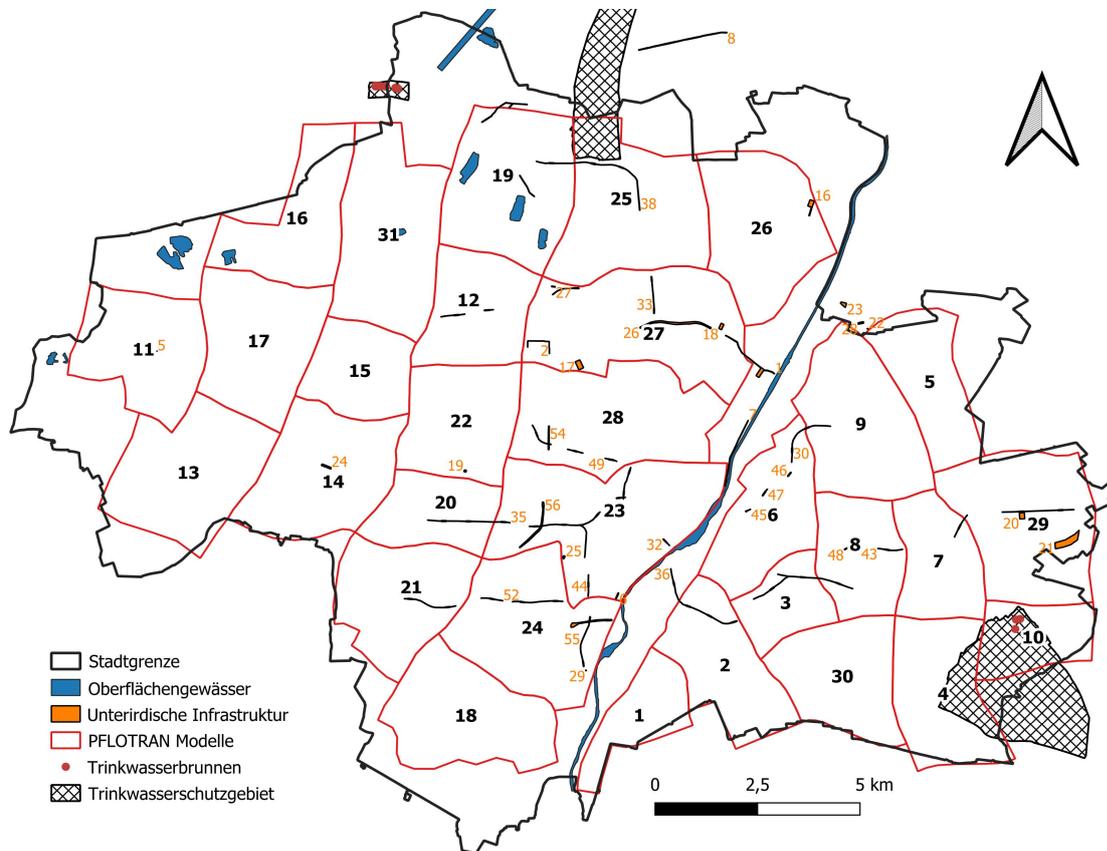


Abbildung 24: Unterteilung des Stadtgebiets in einzelne PFLOTRAN-Modelle zur gekoppelten Simulation bzw. Optimierung mit der Lage der Beispielregion 30.

Optimierte Planung des Stadtenergiesystems (TUM-ENS)

Für die nachhaltige und kostenoptimale Planung von und das Aufzeigen von Transformationspfaden der Energiesysteme auf internationaler, nationaler, aber vor allem auch lokaler Ebene ist die Energiesystemmodellierung unabdinglich. Basierend auf den zur Verfügung gestellten Eingangsdaten kann mit dem Energiesystemmodell eine optimale Ausbau- und Einsatzplanung verschiedenster Erzeugungstechnologien jedes Energiesektors erstellt werden. Durch die Herausforderungen und steigenden Komplexitäten, welche die Energiewende im Allgemeinen und die Wärmewende im Speziellen mit sich bringt, können die einzelnen Sektoren nicht mehr getrennt analysiert werden, sondern müssen gekoppelt betrachtet werden. Insbesondere durch den Fokus auf die (Grundwasser-) Wärmepumpe, welche wie kaum eine andere Technologie die Sektor-Kopplung vorantreibt, ist diese Betrachtung unabdingbar. In diesem Projekt wird zusätzlich noch die Kopplung des Grundwassers als Energiequelle für die Grundwasserwärmepumpe betrachtet. Da dies die Kopplung der Grundwassersimulation mit der Energiesystemoptimierung erfordert, mussten diverse Aspekte des für die Modellierung vorgesehenen Optimierungsframeworks urbs überarbeitet werden. Die hierfür notwendigen Schritte zur Erstellung des Energiesystemmodells, zur Anpassung des Optimierungsansatzes und zur Durchführung der Modellierung werden im Folgenden ausführlich beschrieben.

II.1.1.7 Modul Energiebedarf

Zu Beginn der Entwicklung des Energiesystemmodells für die Stadt München stand die Erstellung des Energiebedarfs. Da sich während des ersten Projektjahres abzeichnete, dass ein Datenaustausch mit der Stadt München, aber auch mit den Stadtwerken hinsichtlich Nachfragezeitreihen nicht verwirklichen lässt, musste auf die Simulation von Lastkurven zurückgegriffen werden. Hierfür wurden zunächst je Energieträger stündliche Zeitreihen als Lastprofile angestrebt. Allerdings wurde die zeitliche Auflösung der Nachfragezeitreihen auf tägliche Zeitschritte reduziert, da mit einer höheren zeitlichen Auflösung das gekoppelte Optimierungsproblem nicht lösbar gewesen wäre. Stattdessen wurde, um im Einklang mit der regionalen Auflösung der Grundwassersimulation zu sein, eine hohe örtliche Auflösung der Nachfragezeitreihen präferiert. Nachdem unterschiedliche Ansätze getestet wurden, ist als räumliche Auflösung für die Energiesystemmodellierung die Flurstückebene gewählt worden. Die unterschiedlichen Vorgehensweisen zur Erstellung der Wärme-, Kälte- und Strombedarfszeitreihen wird im Weiteren unterteilt nach den Sektoren geschildert.

II.1.1.7.1 Wärmebedarf

Für die Modellierung der Wärmenachfrageprofile wird das am Lehrstuhl ENS entwickelte Tool UrbanHeatPro (Molar-Cruz und Hamacher, 2019) verwendet. Hiermit kann für eine vordefinierte Liste an Gebäuden jeweils ein synthetisches Raumwärme- und Warmwasserlastprofile erzeugt werden. Die Berechnung geschieht basierend auf einem RC-Modell unter Berücksichtigung von Aktivitäten in und Nutzung von den Gebäuden. Dafür müssen verschiedene Gebäudeeigenschaften, wie die Nutzung des Gebäudes, das Gebäudealter, die zu beheizende Fläche und die Anzahl der Bewohner, als Eingangsdaten zur Verfügung stehen. Falls die Daten nicht für die einzelnen Gebäude vorhanden sind, werden sie basierend auf statistischen Werten des Gebäudebestands der Stadt München in der Simulation erzeugt. Für die Bestimmung der räumlichen Gebäudeeingangsdaten wurde hauptsächlich auf Daten von OpenStreetMap (Open Street Maps, 2018) zurückgegriffen, welche mit Daten des Zensus 2011 (Statistische Ämter des Bundes und der Länder, 2020) und des GeoDatenService Bayerns (GeoDatenService Bayern, o. D.) validiert, korrigiert und ergänzt wurden.

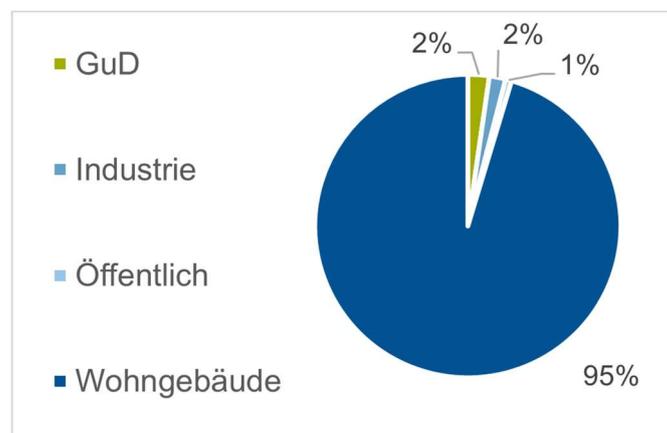


Abbildung 25: Gebäudetypen in München - prozentual

Der basierend auf diesen Daten prozentuale Anteil der vier Nutzungstypen Wohngebäude, Öffentliches Gebäude, Industrielle Nutzung und Gebäude des Gewerbe- und Dienstleistungssektors (GuD) am Gebäudebestand Münchens ist in Abbildung 25 zu sehen. Deutlich erkennbar ist der Löwenanteil der Wohngebäude am Gebäudebestand von insgesamt 127.750 Gebäuden. Um die unterschiedlichen Eigenschaften der verschiedenen Wohngebäude besser modellieren zu können, werden diese noch in Alters- und Größenklassen unterteilt, welche vom TABULA (IWU, 2019; IWU, 2013) definiert wurden. Die Klassen für die Unterteilung der Größe sind Einfamilienhaus (MFH), Reihenhaus (TH), Mehrfamilienhaus (MFH) und Wohnblock (AB). Die Altersklassen repräsentieren wichtige Entwicklungsstufen im Gebäudebau und fassen Baujahre mit gleichem Entwicklungsstand zusammen. Auf Basis des genannten Gebäudebestands, der statistischen Daten und Temperaturkurven für Umgebungstemperatur werden in UrbanHeatPro die synthetischen Lastprofile je Gebäude generiert.

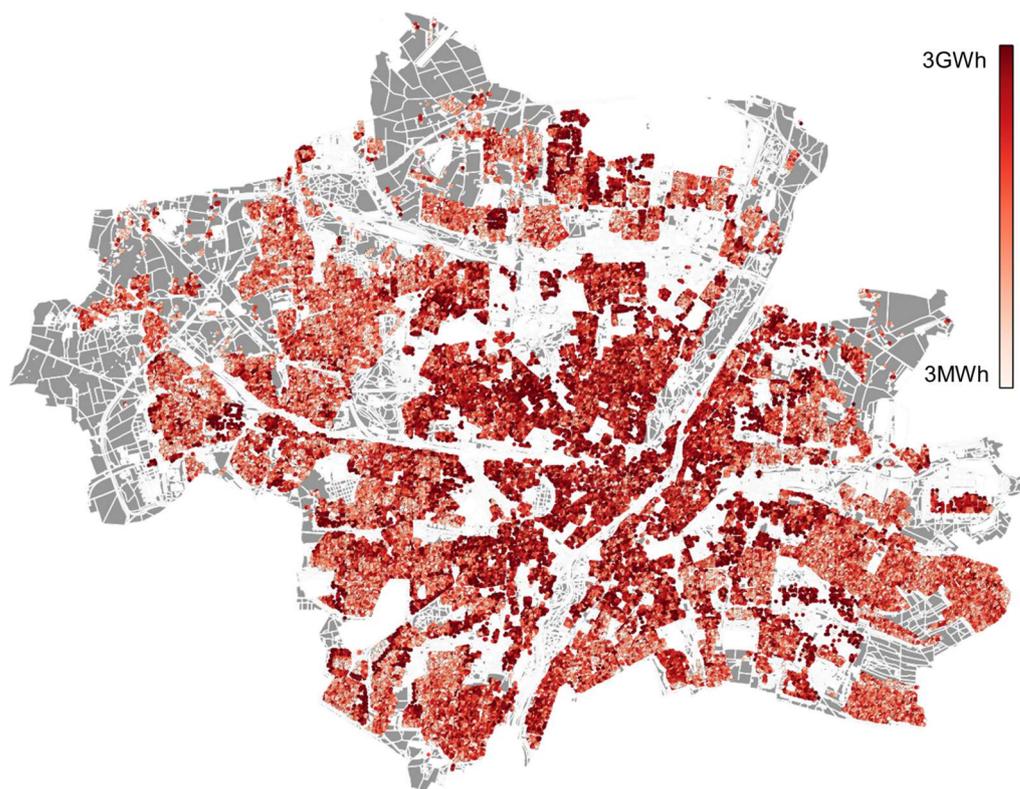


Abbildung 26: Kumulierte jährliche Wärmenachfrage je Gebäude Münchens für das Jahr 2020

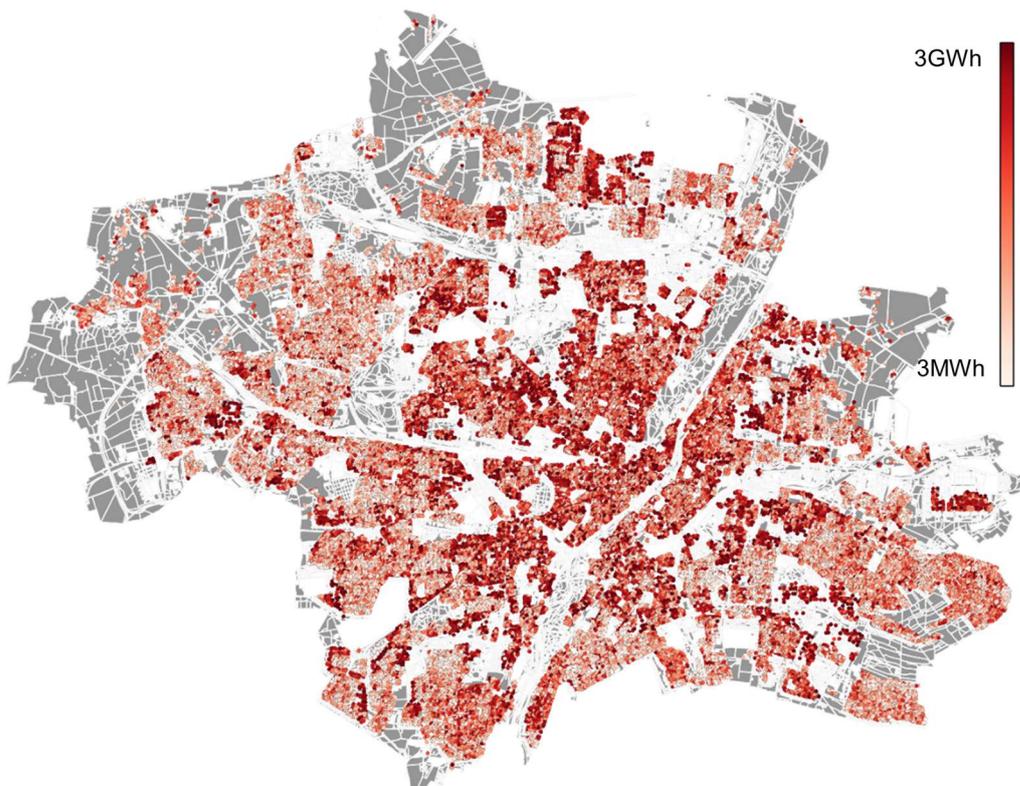


Abbildung 27: Kumulierte jährliche Wärmenachfrage je Gebäude Münchens für das Jahr 2050

Das Ergebnis von UrbanHeatPro für die Gesamtwärmenachfrage Münchens im Jahr 2020 ist in Abbildung 28 für das ganze Jahr und in Abbildung 29 für eine exemplarische Woche zu sehen. Bei der Darstellung des Jahresverlaufs in Abbildung 28 ist die jahreszeitliche Schwankung deutlich zu

erkennen. Vor allem die Raumwärmenachfrage geht in den Sommermonaten mit hoher Außentemperatur fast komplett zurück. In Abbildung 29 ist nochmals die Temperaturabhängigkeit der Nachfrage über einzelnen Tagen verdeutlicht. Zudem ist bei der Warmwassernachfrage die tageszeitliche Schwankung erkennbar, welche auf die Besonderheiten des Bedarfs, wie zum Beispiel das morgendliche Duschen, zurückzuführen ist. Aufgrund der Eigenschaften normaler Heizsysteme, sowohl Raumwärme als auch Warmwasser gleichermaßen bereit zu stellen, wird im Weiteren auf eine Unterscheidung der beiden Wärmebedarfe verzichtet und nur eine akkumulierte Zeitreihe für die Wärmenachfrage in der Modellierung verwendet. Die hieraus resultierende Unschärfe in der Modellierung wurde aufgrund der besseren Lösbarkeit des Optimierungsproblems durch diese Annahme in Kauf genommen.

Ergänzend zur zeitlichen Darstellung ist in Abbildung 26 die räumliche Verteilung der jährlichen Wärmenachfrage jedes Gebäudes über die Stadt München im Jahr 2020 zu sehen. Im Vergleich dazu ist die durch eine Anpassung der Umgebungstemperatur in UrbanHeatPro erstellte Wärmenachfrage für das Jahr 2050 deutlich geringer (vgl. Abbildung 27). Mit dieser Nachfrageprognose für 2050 ist es möglich, auch die zukünftigen Synergien zwischen Wärme- und Kälteversorgung in der Stadt zu untersuchen.

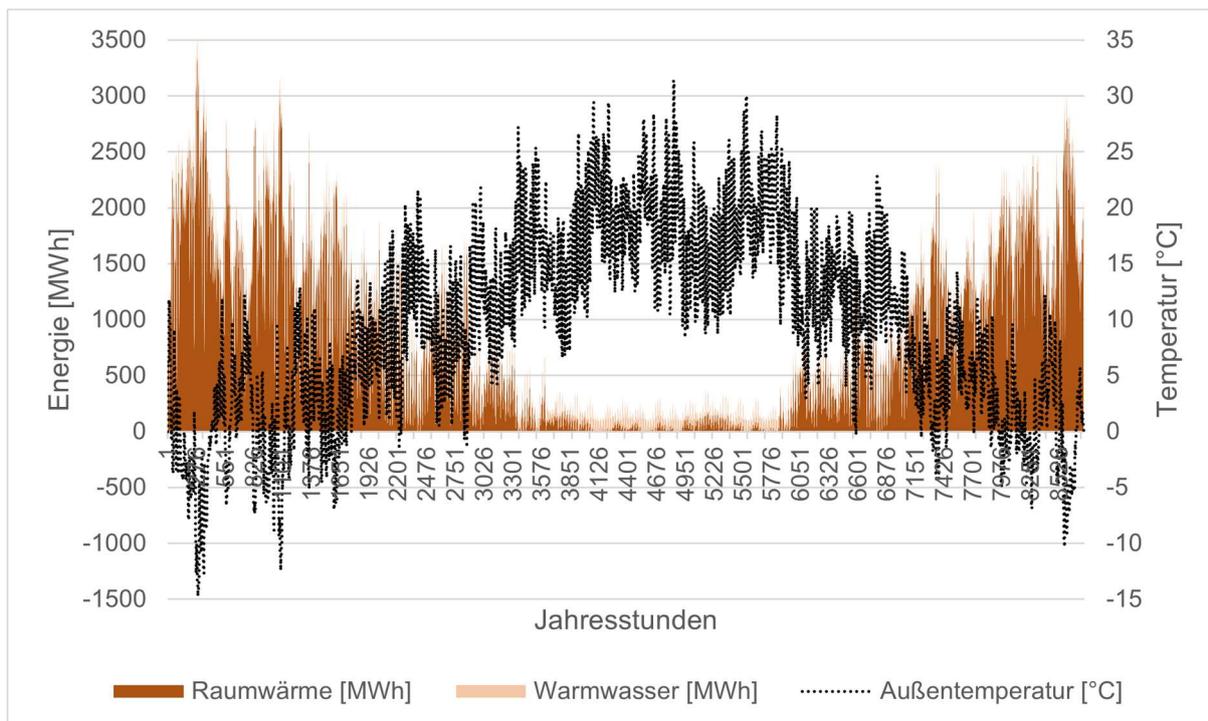


Abbildung 28: Gesamtwärmenachfrage Münchens für ein Jahr

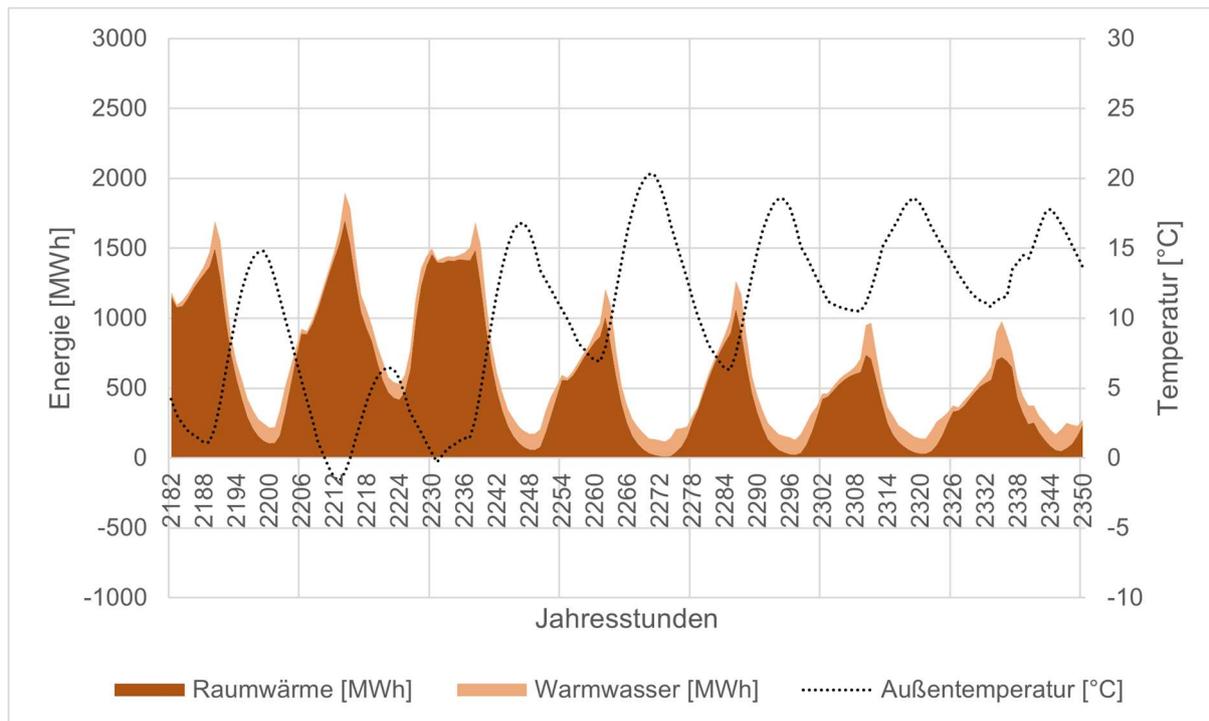


Abbildung 29: Gesamtwärmenachfrage Münchens für eine Woche im April

Das Ergebnis von UrbanHeatPro ist eine stündliche Zeitreihe für ein Jahr. Für die Modellierung werden die stündlichen Zeitreihen zu täglichen Zeitreihen akkumuliert. Dadurch wird bei der Optimierung die tägliche Schwankung in der Nachfrage vernachlässigt. Diese Vereinfachung ist im Wärmesektor aufgrund der Trägheit der Systeme nur von geringem Einfluss und trägt, wie bereits erwähnt, essentiell zur Lösbarkeit des gekoppelten Optimierungsproblems bei. Außerdem werden bei der Erstellung der Modelle alle Nachfragezeitreihen von Gebäuden, welche auf demselben Flurstück verortet sind, zu einer Zeitreihe aufsummiert.

II.1.1.7.2 Kältenachfrage

Neben der Wärmenachfrage wird für die Modellierung auch die Kältenachfrage berücksichtigt. Derzeit spielt diese in München nur eine untergeordnete Rolle. Aufgrund der zu erwartenden klimatischen Veränderungen wird der Kühlbedarf in Zukunft an Bedeutung gewinnen, wodurch sich vermehrt die Möglichkeit von Synergien zwischen der Wärme- und Kälteversorgung mit dem Grundwasser als saisonale Speicherlösung bieten wird. Für eine optimale Planung des zukünftigen Energiesystems der Stadt ist es deshalb unerlässlich auch den Kältesektor und somit die Kältenachfrage in der Modellierung zu berücksichtigen.

Für die Erstellung der Kältenachfrage wurde das Tool UrbanHeatPro an die Kältenachfrageberechnung angepasst. Zur besseren Unterscheidung zwischen der ursprünglichen Version für die Wärme- und der angepassten Kältenachfrageberechnung wurde das neue Tool UrbanColdPro genannt. Die Eingangsparameter für UrbanColdPro gleichen denen für UrbanHeatPro, wobei vordefinierte Gebäudeeigenschaften an die Kältenutzung angepasst werden mussten. Hierfür wurden die Werte der DIN-Normen (DIN e.V., 2018) benutzt.

Die Ergebnisse der synthetischen Lastprofilerstellung für München sind in den Abbildung 29 und Abbildung 30 zu sehen. Der Anstieg der Kühlnachfrage zwischen den Jahren 2020 und 2050 ist auch hier klar ersichtlich. Auch wenn derzeit nicht alle Gebäude einen Kühlbedarf haben, wurde dieser basierend auf den getroffenen Annahmen für jedes einzelne Gebäude bestimmt. Für die Modellierung werden die Lastkurven wie die Wärmebedarfszeitreihen auf tägliche Zeitschritte und Flurstücke zusammengefasst. Anschließend wird aus den berechneten Kühllastgängen über eine Zufallsverteilung nur ein geringer Prozentsatz in die gekoppelten Optimierungsmodelle übernommen, um der realen Verteilung des Kühlbedarfs zu entsprechen.

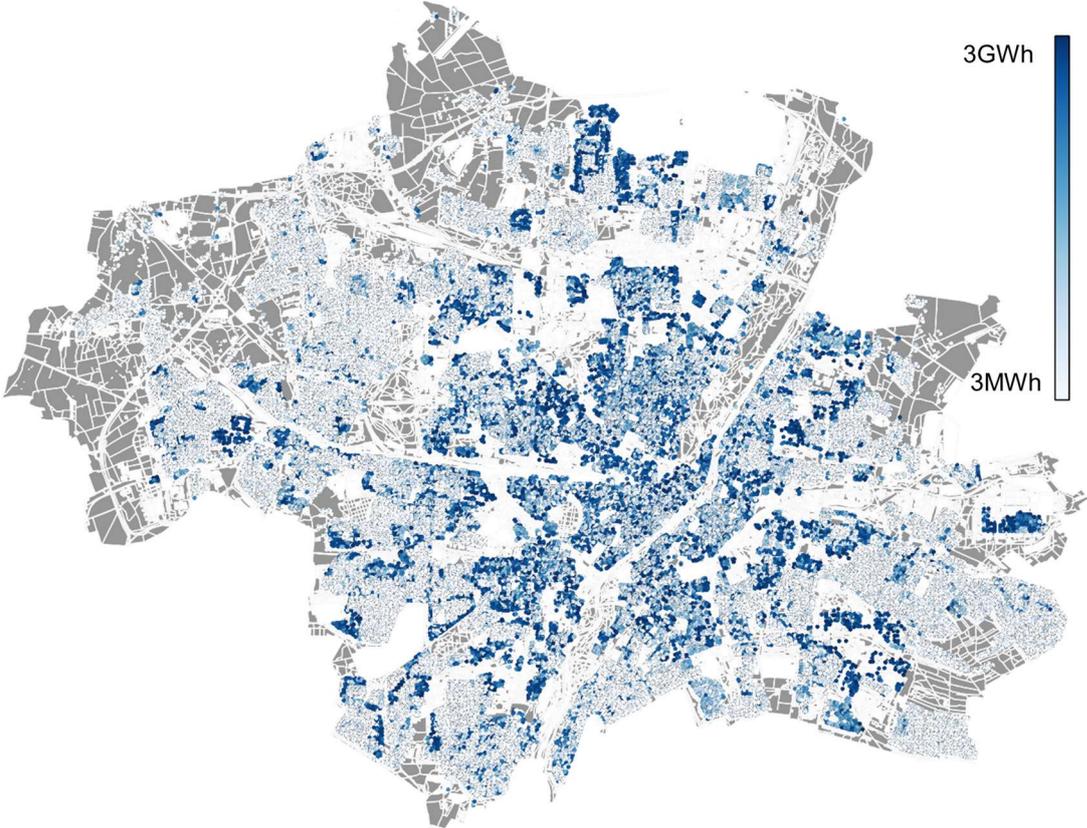


Abbildung 30: Kumulierte jährliche Kältenachfrage je Gebäude Münchens für das Jahr 2020

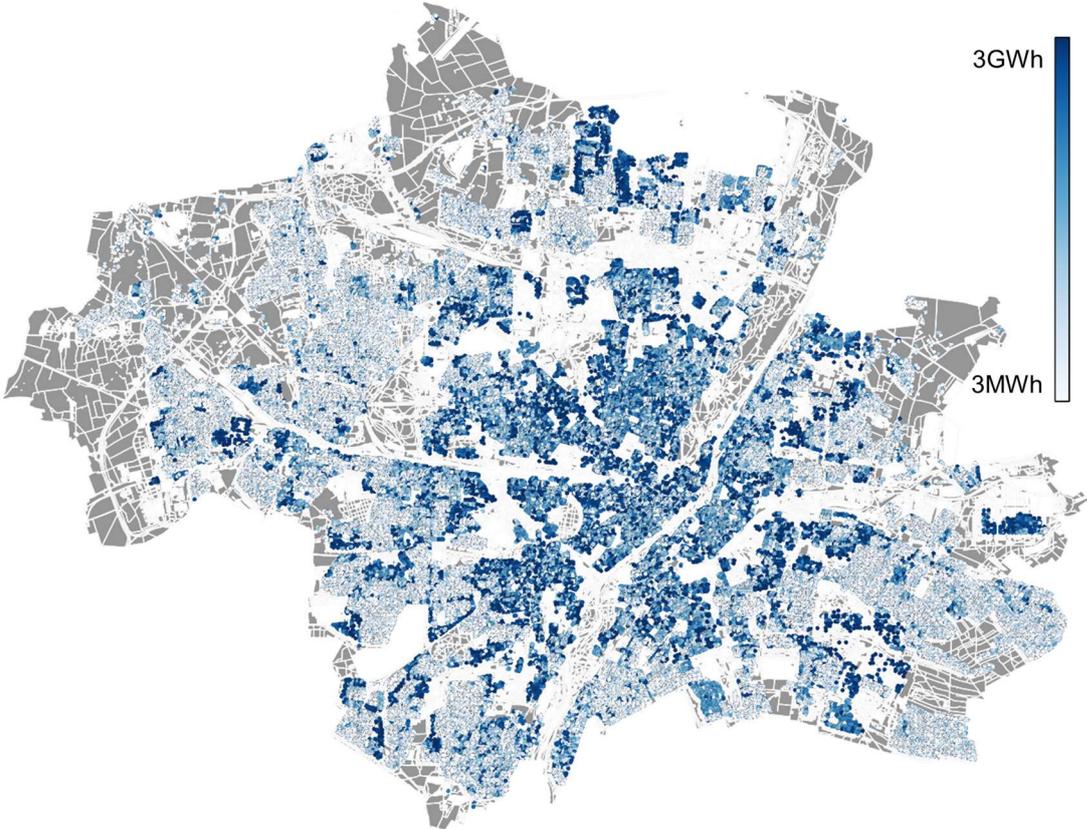


Abbildung 31: Kumulierte jährliche Kältenachfrage je Gebäude Münchens für das Jahr 2050

II.1.1.7.3 Stromnachfrage

Die synthetische Berechnung der Stromnachfrage ist deutlich aufwändiger als dies für Wärme- bzw. Kältebedarf der Fall ist. Deswegen wurde für die Erstellung der Stromnachfrage Münchens auf Standardlastprofilen des Bundesverbands der Energie- und Wasserwirtschaft e.V. (BDEW, 2021) zurückgegriffen. Diese sind jeweils für unterschiedliche Gebäudetypen stündlich für Typ-Tage definiert und können durch entsprechende Gewichtungen an die einzelnen Gebäude Münchens angepasst werden. Hierbei wird die für jedes Gebäude definierte Einwohnerzahl und Anzahl an Wohnungen berücksichtigt, um ein entsprechendes Lastprofil auszuwählen und daraus die Stromlast für das Gebäude zusammenzustellen.

II.1.1.8 Erzeugungsinfrastruktur

Die Erzeugungsinfrastruktur innerhalb der Stadt München ist – vor allem im Wärmesektor – sehr divers und zeichnet sich durch viele dezentrale Erzeuger aus. Um aussagekräftige Ergebnisse des Optimierungsmodells zu gewährleisten, müssen akkurate Eingangsdaten benutzt werden. Der zu Projektbeginn erhoffte Datenaustausch mit den Stadtwerken München und mit der Stadt München und die Nutzung der Daten des Energienutzungsplans Münchens konnte – wie bereits im Modul Energiebedarf erwähnt – aufgrund diverser rechtlicher und organisatorischer Hürden nicht durchgeführt werden. Deshalb musste für die Verteilung der Erzeugungsdaten auf andere Rohdaten und öffentlich verfügbare Daten zurückgegriffen werden.

Da, wie im Modul Energiebedarf beschrieben, die Flurstückebene als räumliche Auflösung für die Energiesystemmodellierung gewählt wurde, mussten auch die Erzeugungsinfrastrukturen auf dieser Ebene definiert werden. Wiederum unter Berücksichtigung der Größe und Komplexität des gekoppelten Optimierungsproblems wurde entschieden, die lineare Implementierung des verwendeten Optimierungsframeworks urbs nicht abzuändern und stattdessen gewissen Unschärfen in den Modellergebnissen, welche durch fehlende binären oder gemischt-ganzzahligen Optimierungsvariablen in den Nebenbedingungen zu Blockinvestitionen oder unsteten Effizienzkurven entstehen, in Kauf zu nehmen.

Die zu modellierenden Technologien wurden zum einen auf die in München vorhandenen Technologien und zum anderen auf die zu untersuchenden Technologien hin ausgewählt. Die einzelnen Technologien werden im Folgenden wieder getrennt nach den Sektoren erläutert.

II.1.1.8.1 Wärmeerzeuger

Da der Fokus dieses Projekts auf der Grundwasserwärmepumpe liegt, war diese auch Schwerpunkt der Modellerstellung und Modellierung selbst. Um weitere mögliche Entwicklung hin zu dezentralen, regenerativen Heizsystemen zu modellieren, wurden neben der Grundwasserwärmepumpen auch die Luftwärmepumpe und die Pelletheizung berücksichtigt. Zur Unterstützung steht ebenfalls die Solarthermie als Ausbauoption zur Verfügung. Für die Modellierung der existierenden Infrastruktur wurden Ölheizungen, Gasheizungen und der Anschluss an das Fernwärmenetz integriert. In Tabelle 6 sind die Technologien mit ihren jeweiligen Kosten aufgelistet. Die Kosten wurden aus verschiedenen Quellen zusammengetragen. Zu beachten ist, dass die Kosten für dezentrale Erzeuger je Einsatzort und Betrieb sehr stark variieren können, weshalb die hier angegebenen Werte nur eine Annäherung an die Realität darstellen.

Tabelle 6: Angenommene Kosten für die Wärmeerzeugungsinfrastruktur

Technologie	Investitionskosten [€/MW]	Fixkosten [€/MW a]	Variable Kosten [€/MWh]	Bezugskosten [€/MWh]
Ölheizung	639.302,52	23.470,76	4,62	63,00
Gaskessel	799.617,65	35.498,44	0,79	63,00
Grundwasserwärmepumpe	-	41.523,85	52,90	-
Luftwärmepumpe	1.500.000,00	5.000,00	-	-

Fernwärmeanschluss	366.044,00	57.791,32	-	84,30
Pelletheizung	1.588.963,26	44.822,16	0,70	54,00
Solarthermie	1.000.000,00	-	-	-

Für die Grundwasserwärmepumpe werden die Kosten in der Modellerstellung spezifisch für jeden Standort bestimmt. Dazu wurde für jedes Flurstück eine theoretische Grundwasserwärmepumpe anhand der in den synthetischen Lastprofilen bestimmten Spitzenleistung ausgelegt. Für diese theoretische Leistung werden zu den Kosten für die Wärmepumpe selbst, die Kosten für die Wasserpumpe, die zu verlegenden Rohrleitungen und die Installationskosten addiert. Außerdem wird für jedes Flurstück die spezifische Grundwassertiefe ausgelesen und damit die Bohrtiefe abgeschätzt. Dadurch können auch die Bohrkosten spezifisch für jedes Grundstück in die Kostenstruktur aufgenommen werden.

Die Kosten für den beim Betrieb der Wärmepumpen notwendigen Strom werden bei den Stromerzeugern berücksichtigt und tauchen deswegen in Tabelle 6 nicht unter den Bezugskosten auf.

Das Fernwärmenetz bzw. der Fernwärmenetzausbau werden im Modell nicht berücksichtigt. Nur Gebäude, welche bereits in einem Fernwärmeversorgungsgebiet liegen, haben einen Fernwärmeanschluss oder können diesen ausbauen. Nur durch die dezentrale Modellierung des Fernwärmenetzes ist die Entkopplung der Optimierungsprobleme möglich. Dadurch ist allerdings keine globale Obergrenze für den Bezug von Fernwärme gesetzt. Dies könnte theoretisch zu einer in der Realität nicht deckbaren Fernwärmenachfrage führen. Die Ergebnisse der Modellierung müssen hinsichtlich dieser Thematik überprüft werden.

Um zu verhindern, dass das Modell eine unrealistisch große Solarthermieranlage zur Deckung der Wärmenachfrage nutzen kann, ist die Fläche der Solarthermieranlage auf einen Teil der Gebäudegrundfläche je Flurstück begrenzt. Somit kann nur die vorhandene Dachfläche der Gebäude je Flurstück für die Installation von Solarthermieranlagen genutzt werden.

Zur Speicherung der erzeugten Wärme wird dem Modell ein Warmwasserspeicher zur Verfügung gestellt. Die installierte Größe des Speichers resultiert aus den Wärmebedarfssimulationen mit UrbanHeatPro. Außerdem kann das Modell den Wärmespeicher für entsprechende Kosten ausbauen, falls dies einen optimalen Betrieb der Erzeugungstechnologien ermöglicht.

II.1.1.8.2 Kälteerzeuger

Um die Synergien zwischen Kälte- und Wärmeerzeugung bei der Grundwasserwärmepumpe im Modell darstellen zu können und um die definierte Kältenachfrage decken zu können, wurden in dem Modell neben den Heizsystemen auch Kälteerzeuger definiert. Aufgrund der derzeitigen noch geringen bzw. kaum vorhandenen Verbreitung unterschiedlicher Technologien wurden hier nur die Durchlaufkühlung der Wärmepumpe und als Konkurrenztechnologie eine alternative Klimatisierung definiert. Die Investitionskosten der Durchlaufkühlung sind die Kosten für die Erweiterung der Grundwasserwärmepumpe um einen Wärmetauscher. Im Modell ist festgelegt, dass nur Flurstücke, welche eine Grundwasserwärmepumpe installiert oder ausgebaut haben, die Durchlaufkühlung nutzen können. Falls das Grundstück keine Grundwasserwärmepumpe installiert hat, muss die alternative Klimatisierung zur Deckung der Kühlnachfrage benutzt werden. In Tabelle 7 ist zu sehen, dass die Kosten für die beiden Kälteerzeuger gleich sind. Aufgrund der schlechten Datenverfügbarkeit und weiten Streuung der zur Verfügung stehenden Daten zu Klimageräten wird die Klimatisierung ausschließlich als Alternative zur Durchlaufkühlung implementiert. Durch ihren besseren Wirkungsgrad wird in der Optimierung, falls möglich, die Durchlaufkühlung immer der alternativen Klimatisierung vorgezogen. Im Ergebnis sind die Kosten der alternativen Klimatisierung somit nur eingeschränkt aussagekräftig. Da der Fokus des Modells auf den Einfluss des Energiesystems auf das Grundwasser liegt, ist diese Einschränkung von geringer Bedeutung.

Tabelle 7: Angenommene Kosten für die Kälteerzeugungsinfrastruktur

Technologie	Investitionskosten [€/MW]	Fixkosten [€/MW a]	Variable Kosten [€/MWh]	Kosten	Bezugskosten [€/MWh]
Durchlaufkühlung	166.095	41.524		52,9	0,0
Klimatisierung	166.095	41.524		52,9	0,0

II.1.1.8.3 Strombezugs

Auch bei der Modellierung des Strombezugs wurde das Stromnetz zur Reduzierung der Komplexität und besseren Lösbarkeit des Optimierungsproblems vernachlässigt. Im Modell wurde der Strombezug bzw. die Stromerzeugung somit nur dezentral für die einzelnen Flurstücke betrachtet. Dem Modell stehen eine Photovoltaik, deren Fläche entsprechend der Solarthermieanlagen beschränkt ist und ein Netzanschluss zur Deckung des Strombedarfs zur Verfügung. Der Netzanschluss wird zweigeteilt modelliert, um die Möglichkeit des Wärmestrombezugs für die Wärmepumpen zu berücksichtigen.

Durch die Berücksichtigung der Photovoltaikanlagen wird vor allem die Konkurrenz dieser zu den Solarthermieanlagen untersucht, da erstens beide freie (Dach-)Flächen benötigen, welche gerade in einer Stadt stark limitiert sind. Und zweitens beide nachhaltige Wärmeenergie ermöglichen: die Solarthermieanlage direkt und die PV-Anlage über den Betrieb der Wärmepumpen.

Zur Speicherung des Stroms hat das Modell die Möglichkeit, einen Batteriespeicher zu installieren. Hinsichtlich der täglich schwankenden PV-Erzeugung kann über den Batteriespeicher die Möglichkeit eines dauerhaften Betriebs der Wärmepumpen mit solar erzeugtem Strom untersucht werden.

Tabelle 8: Angenommene Kosten für die Strominfrastruktur

Technologie	Investitionskosten [€/MW]	Fixkosten [€/MW a]	Variable Kosten [€/MWh]	Bezugskosten [€/MWh]
Photovoltaik	1.309.000	39.270	0,0	0,0
Strombezug	0	300	0,0	30,0
Wärmestrombezug	0	300	0,0	12,0

Die in diesem Abschnitt beschriebenen Datengrundlagen und die im nächsten Abschnitt beschriebenen Definitionen der Regionen werden in einem automatisierten Tool eingelesen, um anschließend für jede Region einen Eingangsdatensatz für das Optimierungsframework urbs zu erstellen. Dadurch ist es möglich bei Änderungen in der Datengrundlage innerhalb kurzer Zeit die Eingangsdatensätze zu aktualisieren.

II.1.1.9 Gekoppelter Optimierungsansatz

Die Optimierung der Gesamtkopplung (siehe Abbildung 32) eines Energiesystemoptimierungsmodells (urbs) und eines Grundwassersimulationsmodells (PFLOTTRAN) stellt ein sogenanntes HEB-Optimierungsproblem dar. Das bedeutet, dass das Optimierungsproblem hochdimensional ist (große Anzahl von Optimierungsvariablen), dass teure Evaluierungen notwendig sind (jede Evaluierung ist eine rechenintensive numerische Grundwassersimulation) und dass es sich um ein Black-Box-Problem

handelt (die Grundwassersimulation ist aus Sicht des Optimierers eine "Black-Box"). Daher wurden die folgenden Strategien entwickelt, um das Problem in einer sinnvollen Zeit zu lösen:

- ein neuer Optimierungsansatz,
- Problemdekomposition und
- Parallelisierungsverfahren.

Alle diese Strategien sollen sich gegenseitig unterstützen und zusammenwirken. So nutzt der neue Optimierungsansatz die Idee kleinerer Modelle (Regionen), die sich aus der Dekomposition des Problems ergeben, und umgekehrt ist die Dekomposition auf das Konzept des neuen Optimierungsansatzes zugeschnitten.

II.1.1.9.1 Neuer (iterativer) Optimierungsansatz

Das Standardmodell für die Optimierung von Energiesystemen, d. h. das ursprüngliche urbs, ist ein lineares Optimierungsproblem (auch bekannt als lineare Programmierung), das dazu dient, einen optimalen Technologiemix zu finden, d. h. zwischen GWWP und anderen konkurrierenden Technologien zu wählen. Bei dieser Art von Problem handelt es sich um ein White-Box-Optimierungsproblem, bei dem alle Nebenbedingungen der Optimierung und die Zielfunktion für den Optimierer "sichtbar" sind. Um das Black-Box-Optimierungsproblem, das sich aus der Kopplung mit einer numerischen Grundwassersimulation ergibt, zu berücksichtigen, wurde der Standard urbs erweitert. So werden beispielsweise die aus PFLOTRAN-Simulationen gewonnenen Daten verwendet, um die Effizienzen der GWWP in urbs-Modellen zu aktualisieren und die gesetzlichen Rahmenbedingungen bei der Installation einer neuen GWWP zu überprüfen. Darüber hinaus beinhaltet die urbs-Erweiterung (siehe Abbildung 32) einen neuen Optimierungsansatz für die Gesamtkopplung, der die Komplexität des zugrundeliegenden HEB-Problems erheblich reduziert.

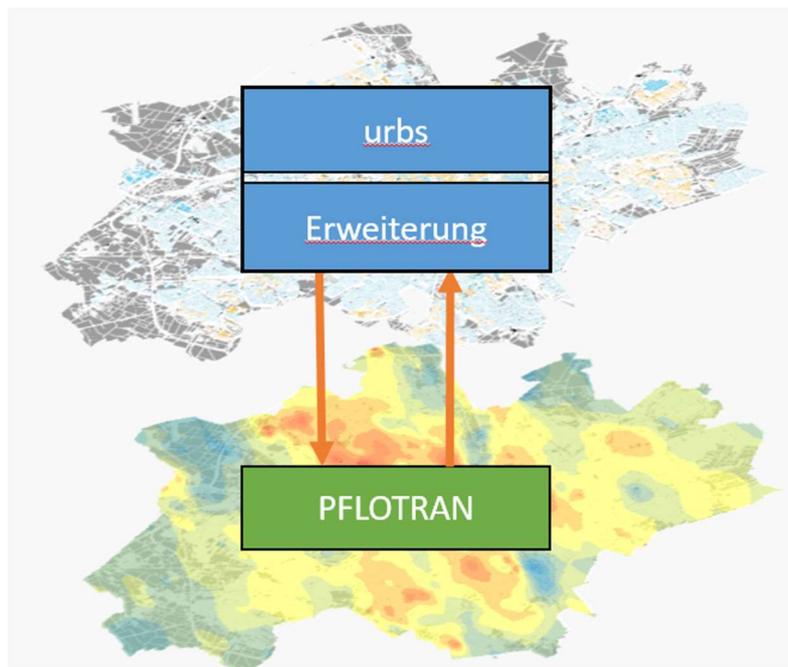


Abbildung 32: Die Gesamtkopplung

Der neue Optimierungsansatz fügt iterativ für jedes urbs-Modell (Region) und während einer äußeren Optimierungsiteration eines der neuen GWWP-Systeme hinzu oder entfernt es. Das Konzept dieses iterativen Optimierungsansatzes ist in Abbildung 33 dargestellt und wird im Folgenden erläutert. Abbildung 33 zeigt vier urbs-Regionen, die mit der Grundwasserflussrichtung von links nach rechts ausgerichtet sind, und zwei äußere Optimierungsiterationen. Während der Optimierung werden drei Arten von GWWP berücksichtigt:

- installierte/bestehende GWWP, bei denen es sich entweder um bereits bestehende GWWP in der Stadt oder um solche handelt, die während der Iterationen installiert wurden,
- potenzielle GWWP sind alle Standorte, an denen während der Iterationen ein neues System installiert werden kann, und
- ausgewählte/überprüfte GWWP, d.h. diejenigen, die das ursprüngliche urbs auf Grundlage der definierten Zielfunktion (z. B. Minimierung der Gesamtkosten) aus den potenziellen GWWP auswählt.

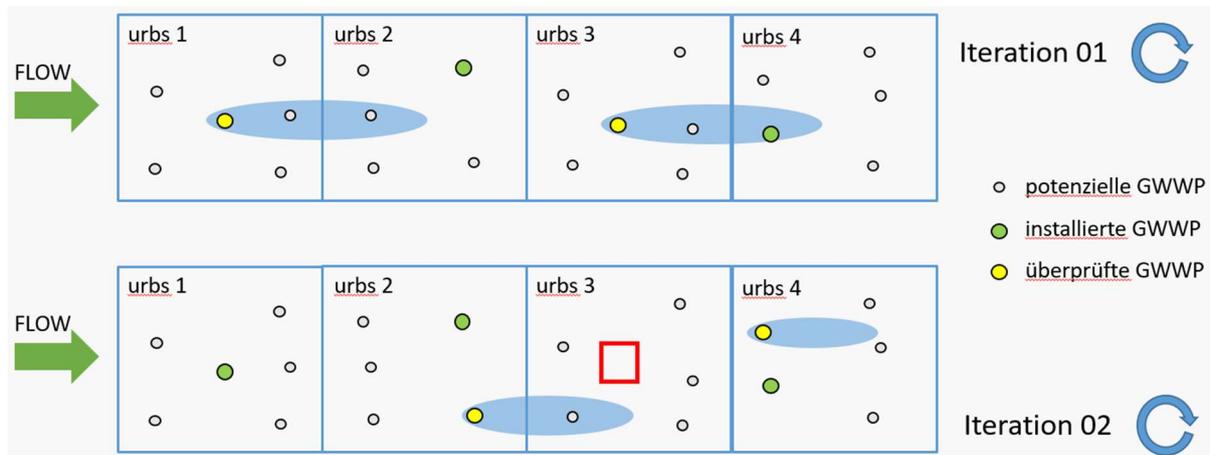


Abbildung 33: Neuer iterativer Optimierungsansatz für die Gesamtkopplung

Außerdem ist zu beachten, dass immer die Hälfte der Regionen gleichzeitig während einer äußeren Optimierungsiteration optimiert wird. Wie in Abbildung 33 zu sehen ist, werden in der Iteration 01 die urbs-Regionen 1 und 3 optimiert, und danach, in der Iteration 02, die urbs-Regionen 2 und 4. Der Grund, warum z. B. die Regionen 1 und 3 gemeinsam (gleichzeitig) optimiert werden können und die Regionen 1 und 2 nicht, liegt darin, dass eine neu hinzukommende GWWP in der Region 1 andere GWWP in dieser Region und der nachgelagerten Region 2 beeinflussen kann, nicht aber in der Region 3. Das bedeutet, dass die Regionen so gewählt werden müssen, dass die Region 2 groß genug ist, um die Regionen 1 und 3 zu trennen, damit die Region 1 die Region 3 nicht beeinflusst (siehe Abschnitt II.1.2.3.2). Die äußeren Iterationen werden wiederholt und neue GWWP werden für die "aktive" Hälfte der urbs-Regionen hinzugefügt oder entfernt. Das Gesamtverfahren läuft wie folgt ab:

- Iteration 01:
 - o Nach der Durchführung der PFLOTRAN-Simulation werden die Informationen über die Grundwassertemperaturen an den Entnahmebrunnen an die entsprechenden urbs-Modelle gesendet.
 - o urbs verwendet diese Daten, um die COP-Werte der GWWP zu aktualisieren und führt anschließend die standardmäßige Optimierung des Energiesystems (Heizung und Kühlung) durch.
 - o Auf der Basis der Optimierungsergebnisse wird maximal eines der potenziellen GWWP (eines mit der größten neu installierten Kapazität) pro urbs-Region zu den ausgewählten GWWP verschoben.
 - o urbs sendet dann Informationen über die bestehenden und ausgewählten GWWP an PFLOTRAN, d.h. ihre Pumpraten und Temperaturen an den Einspeisebrunnen
 - o Danach werden die PFLOTRAN-Simulationen bis zur Konvergenz durchgeführt (siehe Abschnitt II.1.3.3.2).
 - o Die Ergebnisse der Grundwassersimulationen, d. h. die Grundwassertemperatur- und -druckfelder, werden an urbs übermittelt, wo sie zur Überprüfung der gesetzlichen Auflagen/Bedingungen für die ausgewählten GWWP verwendet werden.
 - o Wenn diese Bedingungen erfüllt sind, wird die ausgewählte GWWP installiert, andernfalls wird sie entfernt und nicht mehr berücksichtigt.
 - o In der Iteration 01 erfüllt die ausgewählte GWWP in der urbs-Region 1 alle regulatorischen Bedingungen und wird daher von diesem Zeitpunkt an als installierte

GWWP betrachtet, während die ausgewählte GWWP in der urbs-Region 3 einen negativen Einfluss auf eine bestehende GWWP in der nachgelagerten Region 4 hat und daher entfernt wird.

- Iteration 02:
 - o Ist die gleiche wie Iteration 01, nur, dass jetzt die urbs-Regionen 2 und 4 optimiert werden, während die urbs-Regionen 1 und 3 "inaktiv" bleiben.

In der Iteration 03 werden die urbs-Regionen 1 und 3 erneut optimiert, und das Verfahren wird in gleicher Weise fortgesetzt, bis es in keiner Region mehr potenzielle GWWP gibt oder bis keines der urbs-Modelle eine neue GWWP aus den Potenziellen auswählt. Der zweite Fall bedeutet, dass es nicht mehr optimal ist, neue GWWP zu installieren.

Wie bereits erwähnt, wird bei dem vorgeschlagenen iterativen Optimierungsansatz in jeder "aktiven" urbs-Region pro äußerer Iteration eine potenzielle GWWP hinzugefügt oder entfernt. Hierfür gibt es zwei Hauptgründe:

- Wenn in einer Region mehrere neue GWWP gleichzeitig hinzugefügt werden, ist es schwierig festzustellen, welche dieser neu hinzugefügten GWWP regulatorische Probleme verursachen und entfernt werden sollten. Diese Situation ist in Abbildung 34 auf der linken Seite dargestellt, wo vier ausgewählte GWWP in der urbs-Region 1 untersucht werden müssen. Wenn in dieser Region oder in der nachgelagerten Region 2 bestimmte regulatorische Bedingungen nicht erfüllt sind, kann nicht direkt geprüft werden, welche neuen GWWP entfernt oder installiert werden sollten. Wenn andererseits nur eine neue GWWP hinzugefügt wird und einige regulatorische Bedingungen in dieser oder der nachgelagerten Region nicht erfüllt sind, kann diese GWWP die Vorschriften nicht erfüllen und sollte entfernt werden (Abbildung 34, rechte Seite).
- Gradientenfreie Optimierungsmethoden, wie evolutionäre Algorithmen, werden normalerweise zur Lösung von Black-Box-Optimierungsproblemen verwendet. Diese Methoden erfordern eine extrem große Anzahl von Optimierungsiterationen, d. h. Black-Box-Bewertungen, was für das Problem in diesem Fall nicht machbar ist, da diese Bewertungen rechenintensive numerische Grundwassersimulationen sind. Der neu eingeführte iterative Optimierungsansatz erfordert jedoch maximal eine äußere Optimierungsiteration pro potenzieller GWWP in jeder urbs-Region. Wenn es zum Beispiel 4 urbs-Regionen gibt und jede 10 potenzielle GWWP hat, beträgt die Gesamtzahl der äußeren Optimierungsiterationen maximal 20 (da die Regionen 1 und 3 sowie 2 und 4 gleichzeitig laufen). Die Gesamtzahl der Iterationen kann sogar noch niedriger sein, wenn die GWWP nicht mit anderen Systemen konkurrieren und urbs beschließt, nach einer bestimmten Anzahl äußerer Iterationen keine neuen GWWP hinzuzufügen. Allgemeiner ausgedrückt, wenn wir alle Regionen in zwei Gruppen unterteilen: A (Regionen 1, 3, 5, ...) und B (Regionen 2, 4, 6, ...), wo alle Regionen in einer Gruppe gleichzeitig optimiert werden, dann ist die maximale Anzahl äußerer Iterationen $n_A + n_B$, wobei n_A und n_B die maximale Anzahl potenzieller GWWP pro urbs-Region in Gruppe A bzw. B sind. Dies bedeutet eine erhebliche Verringerung der Anzahl von Optimierungsiterationen, was die zugrundeliegende Optimierung der Gesamtkopplung zu einem lösbaren Problem macht.

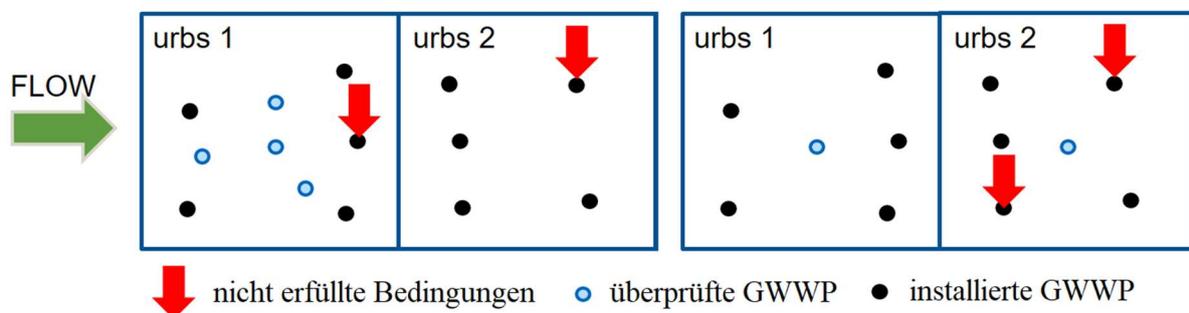


Abbildung 34: Hinzufügen mehrerer neuer GWWP (links) im Vergleich zum Hinzufügen eines neuen GWWP (rechts) pro urbs-Region in einer äußeren Optimierungsiteration

II.1.1.9.2 Dekomposition des gekoppelten Optimierungsproblems

Da es sich bei beiden Modellen, dem Energiesystem-Optimierungsmodell (urbs) und dem numerischen Grundwassersimulationsmodell (PFLOTRAN), um sehr detaillierte Modelle handelt (z. B. Aggregation auf Grundstücksebene in urbs), werden Dekompositionsmethoden verwendet, um die Regionen (Modelle) von PFLOTRAN und urbs in kleinere zu unterteilen und so die Problemgröße zu verringern. Die Auswahl der PFLOTRAN-Regionen wird in Abschnitt III.1.1.6 beschrieben. Die Dekomposition von urbs-Regionen ist eine komplexere Aufgabe, die hier auf Clustermethoden basiert. Die Einzelheiten werden im folgenden Abschnitt beschrieben. Die gesamte Dekomposition des Problems ist in Abbildung 35 schematisch dargestellt. Das gesamte Stadtgebiet von München wird zunächst in kleinere PFLOTRAN-Regionen unterteilt, die für unabhängige numerische Grundwassermodelle verwendet werden. Danach wird jede PFLOTRAN-Region in mehrere urbs-Regionen (Modelle) unterteilt, die separat optimiert werden können. Es ist zu beachten, dass Abbildung 35 nur das Dekompositionskonzept darstellt und die realen Regionen anders aussehen.

Dekomposition des Energiesystemoptimierungsmodells

Wie bereits beschrieben resultiert aus der benötigten räumlichen Detailtiefe des Energiesystemmodells ein sehr großes Optimierungsproblem in urbs, welches in einem normalen Zeitrahmen nicht lösbar ist. Um ein solches Modell überhaupt lösen zu können, muss es in Teilprobleme zerlegt werden. Diese Dekomposition ermöglicht zusätzlich eine bessere Parallelisierung des Solvers auf dem SuperMUC-NG.

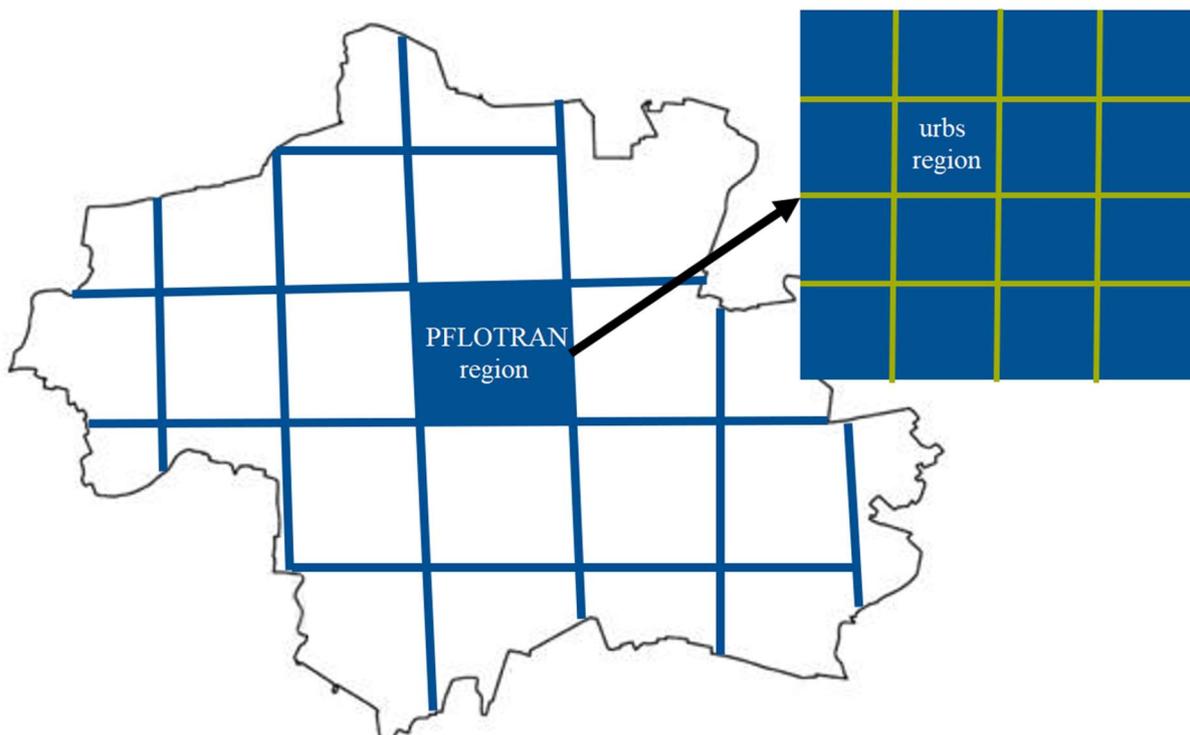


Abbildung 35: Konzept für die Dekomposition des Gesamtproblems

Die Dekomposition basiert auf einer besonderen Art von k-means-Clusteralgorithmen, nämlich dem eingeschränkten k-means-Clustering mit Hintergrundwissen (Wagstaff et al., 2001). Bei dieser Art des Clustering werden zusätzliche verfügbare Informationen (Hintergrundwissen) bei der Erstellung der resultierenden Cluster berücksichtigt. Die zusätzlichen Informationen stellen Einschränkungen für die sich ergebenden Cluster dar, und die beiden häufigsten Arten dieser Einschränkungen sind die paarweisen "must-link"- und "cannot-link"-Einschränkungen. Diese Einschränkungen bedeuten, dass die beiden betrachteten Dateninstanzen (Punkte) in demselben resultierenden Cluster liegen müssen bzw. nicht liegen können. Für die Dekomposition des Energiesystemmodells wird in diesem Projekt der

eingeschränkte k-means Clustering-Algorithmus aus (Wagstaff et al., 2001) mit nur "must-link"-Einschränkungen verwendet.

Die "must-link"-Einschränkungen basieren auf der Überschneidung von Standorten der Förderbrunnen und den Kältefahnen, sodass alle Förderbrunnen, welche in derselben Kältefahne positioniert sind, auch in das gleiche Cluster eingeordnet werden. Das Ziel ist es, die Grundwasserinteraktionen zwischen den einzelnen Gebäuden oder Gebieten zu berücksichtigen. Infolgedessen stellen die Output-Cluster "verbundene" Bereiche in dem Sinne dar, dass GWWP-Systeme interagieren und schließlich andere GWWP im selben Cluster negativ beeinflussen können. Diese Informationen werden dann verwendet, um aus den erhaltenen Clustern geeignete urbs-Regionen (Optimierungsmodelle) zu generieren. Bei der Erzeugung von urbs-Regionen aus den Clustern gibt es viel Flexibilität, aber die Bedingung, die erfüllt sein muss, ist, dass jedes Cluster Punkte von maximal zwei verschiedenen urbs-Regionen enthalten kann. Das Konzept der Erzeugung von urbs-Regionen aus den erhaltenen Clustern ist in Abbildung 36 schematisch dargestellt. Hier wird die Flexibilität bei der Generierung mit drei verschiedenen Trennungen von urbs-Regionen auf der Grundlage derselben Cluster demonstriert. Es ist jedoch in jedem Fall zu beachten, dass die oben genannte Regel immer erfüllt sein muss.

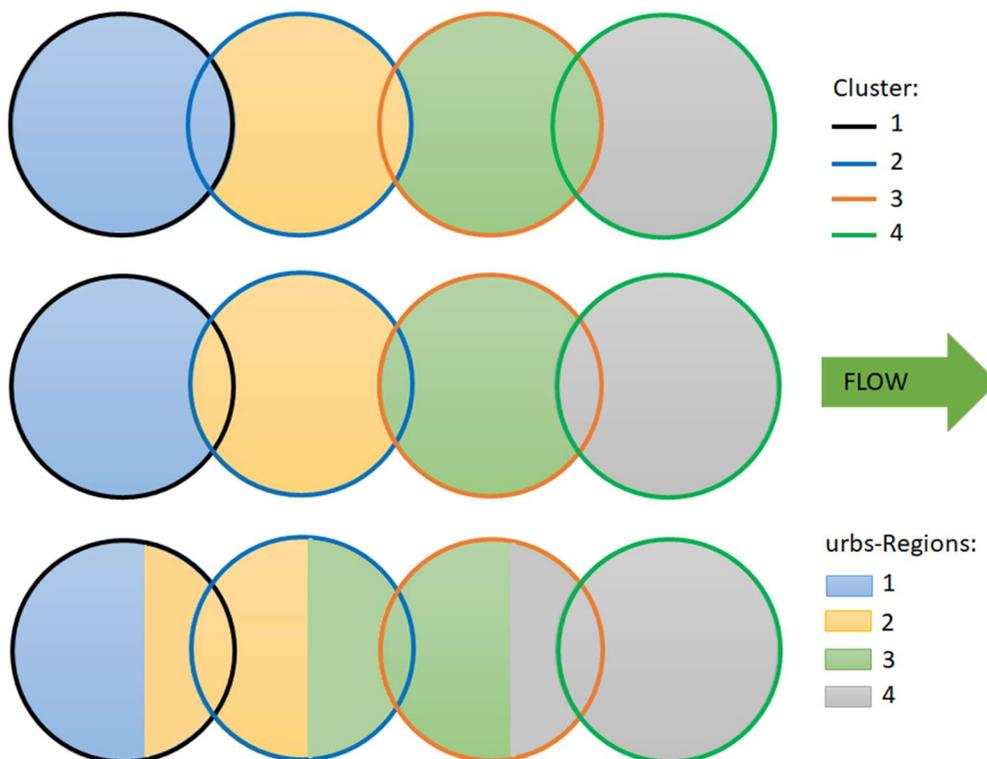


Abbildung 36: Flexibilität bei der Erzeugung von urbs-Regionen aus Clustern

Sobald die urbs-Regionen nach dem zuvor beschriebenen Clustering-Ansatz erzeugt wurden, erfüllen sie alle Anforderungen für den neuen iterativen Optimierungsansatz. Dies bedeutet, dass die Hälfte der urbs-Regionen gleichzeitig optimiert werden kann und die Überprüfung der Vorschriften bei der Installation neuer GWWP nur in der entsprechenden Region und der einen benachbarten stromabwärts gelegenen Region erforderlich ist. In Abbildung 36 können beispielsweise die urbs-Regionen 1 und 3 gleichzeitig optimiert werden, da sie im Sinne von Wechselwirkungen zwischen GWWP getrennt sind. Das Gleiche gilt für die urbs-Regionen 2 und 4.

Die Unterteilung des Stadtgebiets in urbs-Regionen für die Energiesystemoptimierung erfolgt schließlich in den folgenden Schritten nach dem zuvor beschriebenen Ansatz:

1. Vorverarbeitung: Die Erstellung der Kältefahnen und die Festlegung von Standorten für potenzielle Förderbrunnen sind in AP 2.1 zu finden.

2. Die "must-link"-Einschränkungen wurden auf der Grundlage der Überlappung der Standorte von Förderbrunnen und Kälteanlagen erstellt (siehe Beispiel in Abbildung 37).
3. Anhand der im vorherigen Schritt ermittelten "Must-Links" wird das k-means-Clustering durchgeführt und die Förderbrunnen werden in Cluster eingeteilt (siehe Beispiel in Abbildung 38).
4. Danach werden konkave Hüllen von Clustern erzeugt, um die räumliche Fläche von Clustern zu definieren, die dann für die Erzeugung von urbs-Regionen verwendet wird. Ein Beispiel hierfür ist in Abbildung 39 zu sehen.
5. Die urbs-Regionen werden anhand der konkaven Hüllen von Clustern erzeugt (Beispiel in Abbildung 40).
6. Schließlich werden basierend auf der Zugehörigkeit der Förderbrunnen zu den urbs-Regionen automatisch die Energiesystem-Optimierungsmodelle generiert (vgl. oben).

Es ist wichtig zu erwähnen, dass die Anzahl der Cluster vom Benutzer in Schritt 3 angegeben werden muss. Durch Variieren der Anzahl der Cluster können mehrere unterschiedliche Clustering-Ergebnisse erzielt und anschließend zur Erzeugung von urbs-Regionen verwendet werden, z. B. durch Zusammenfassen einiger kleiner Cluster zu einer Region. Basierend auf den Clustering-Ergebnissen ist die Anzahl und Größe der urbs-Regionen flexibel wählbar und diese können somit optimal für das oben beschriebene neue iterative Optimierungsverfahren definiert werden.



Abbildung 37: Erstellung von "must-link"-Einschränkungen



Abbildung 38: Clustering von Förderbrunnen mit dem eingeschränkten k-means-Algorithmus



Abbildung 39: Konkave Hüllen von Clustern

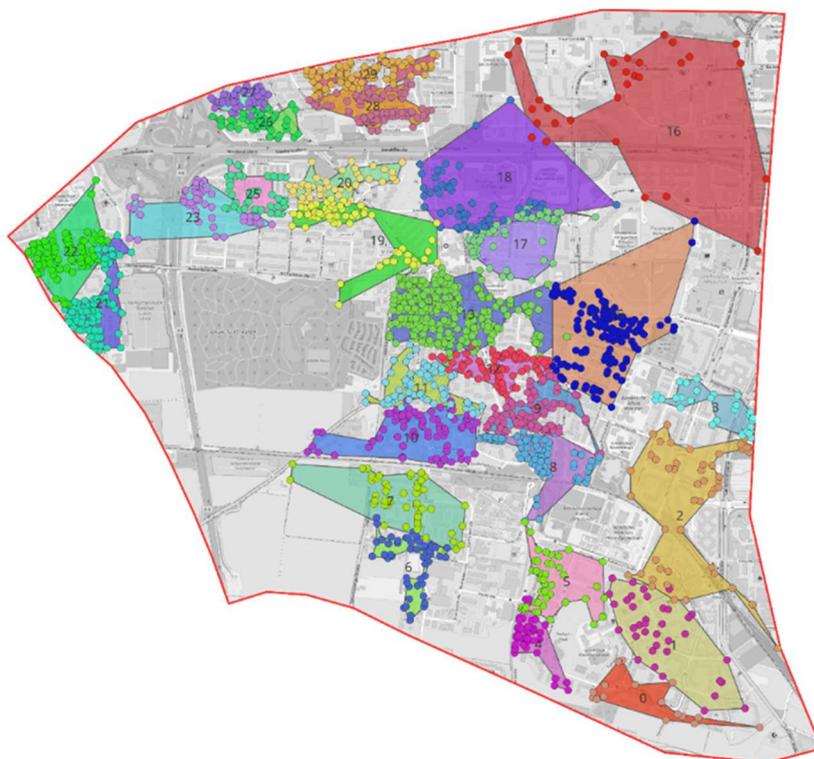


Abbildung 40: Erstellung von urbs-Regionen. Die Brunnen sind je nach Zugehörigkeit zu verschiedenen urbs-Regionen unterschiedlich gefärbt. Zusätzlich werden zur besseren Visualisierung konkave Hüllen von urbs-Regionen abgebildet.

Parallelisierung

Die zuvor beschriebene Dekomposition von urbs-Regionen und der vorgestellte iterative Optimierungsansatz vereinfacht die Parallelisierung, die für die Energiesystemoptimierung in urbs notwendig ist. Das Parallelisierungskonzept ist in Abbildung 41 dargestellt. Es ist anzumerken, dass jedes urbs-Modell/jede urbs-Region durch Gurobi, einen kommerziellen Solver für (lineare) Optimierungsprobleme, auch OpenMP-parallelisiert ist. Weitere Einzelheiten zur Parallelisierung sind im II.1.3.5 zu finden.

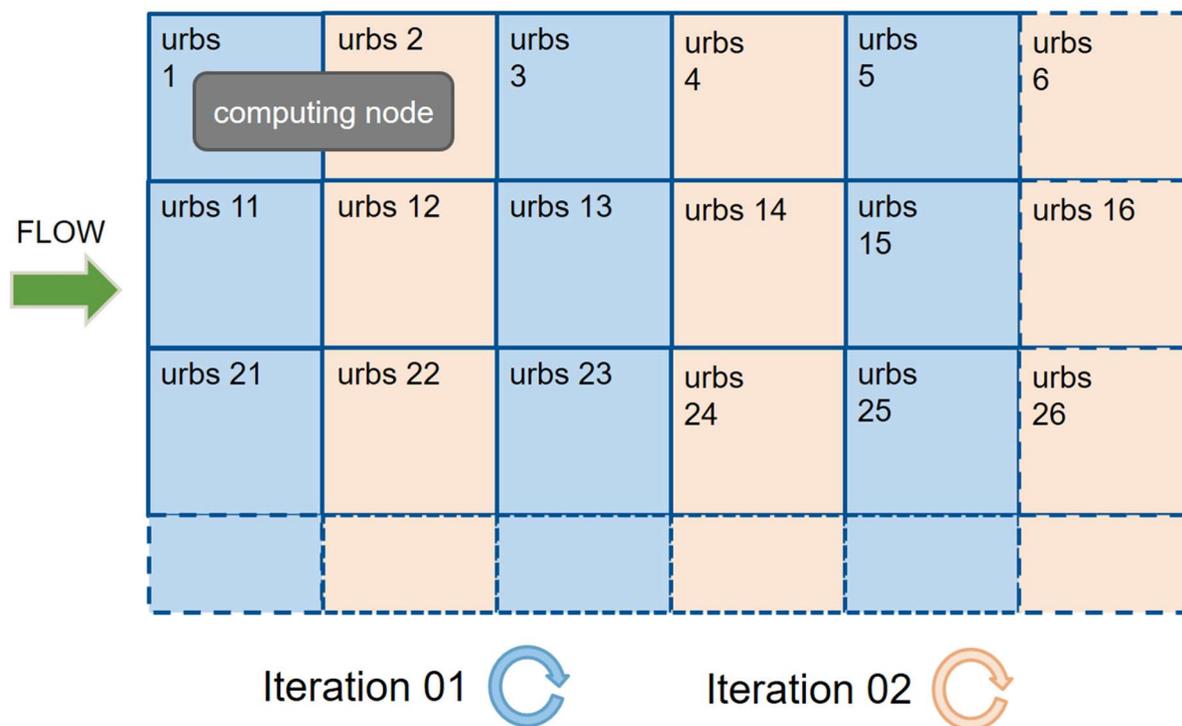


Abbildung 41: Parallelisierungskonzept für urbs-Regionen

II.1.1.10 Weitere Optimierungsansätze für die Brunnenauslegung von GWWP

Im Rahmen des Projekts wurden zwei weitere Optimierungsansätze für die Brunnenauslegung von GWWP-Anlagen entwickelt:

- PDE-basierte Optimierung (PDE: Partielle Differenzialgleichungen) und
- Optimierung basierend auf analytischen Modellen für Wärmefahnen von GWWP.

Diese beiden Optimierungsansätze können verwendet werden, um optimale Brunnenstandorte mehrerer benachbarter GWWP in kleinerem Maßstab zu finden, z. B. ein Stadtquart. Der zweite Ansatz wird auch verwendet, um Brunnenpositionen in der Vorverarbeitung für das Gesamtkopplungsschema zu definieren. Die Einzelheiten zu diesen beiden Ansätzen und ihren Unterschieden werden in den folgenden zwei Abschnitten bereitgestellt.

II.1.1.10.1 PDE-basierte Optimierung

Dies ist eine neue Methode zur Bestimmung optimaler Brunnenlayouts von Grundwasserwärmepumpen unter Verwendung des adjungierten Ansatzes, der eine effiziente Möglichkeit darstellt, das zugrundeliegende PDE-beschränkte Optimierungsproblem zu lösen. Integraler Bestandteil des Verfahrens ist die numerische Grundwassersimulation, die auf der Finite-Elemente-Methode basiert. Zusätzlich wird eine Multi-Start-Initialisierungsstrategie eingeführt, um zu versuchen, das globale Optimum besser zu erreichen.

Das neue Verfahren stellt eine deutliche Verbesserung gegenüber bereits existierenden Verfahren in der Literatur dar, da sowohl eine kontinuierliche Variation als auch eine große Anzahl von Brunnenstandorten innerhalb des Optimierungsverfahrens berücksichtigt werden können. Ein Zeitschriftenartikel, der die Methode und ihre Anwendbarkeit beschreibt, wurde bereits veröffentlicht und ist unter (Halilovic, 2022) zu finden. Abbildung 42 zeigt die Ergebnisse der Methode an einem realen Fallbeispiel mit zehn benachbarten GWWP (übernommen aus Halilovic, 2022). In der finalen (optimalen) Lösung werden die Brunnen so platziert, dass an allen Förderbrunnen maximale Grundwassertemperaturen erreicht werden. Wie aus der Abbildung ersichtlich ist, „bewegt“ diese Methode Brunnen kontinuierlich im Raum, bis ein optimales Brunnenlayout gefunden ist, d. h. es erfordert keine vordefinierten (diskreten) Brunnenstandorte.

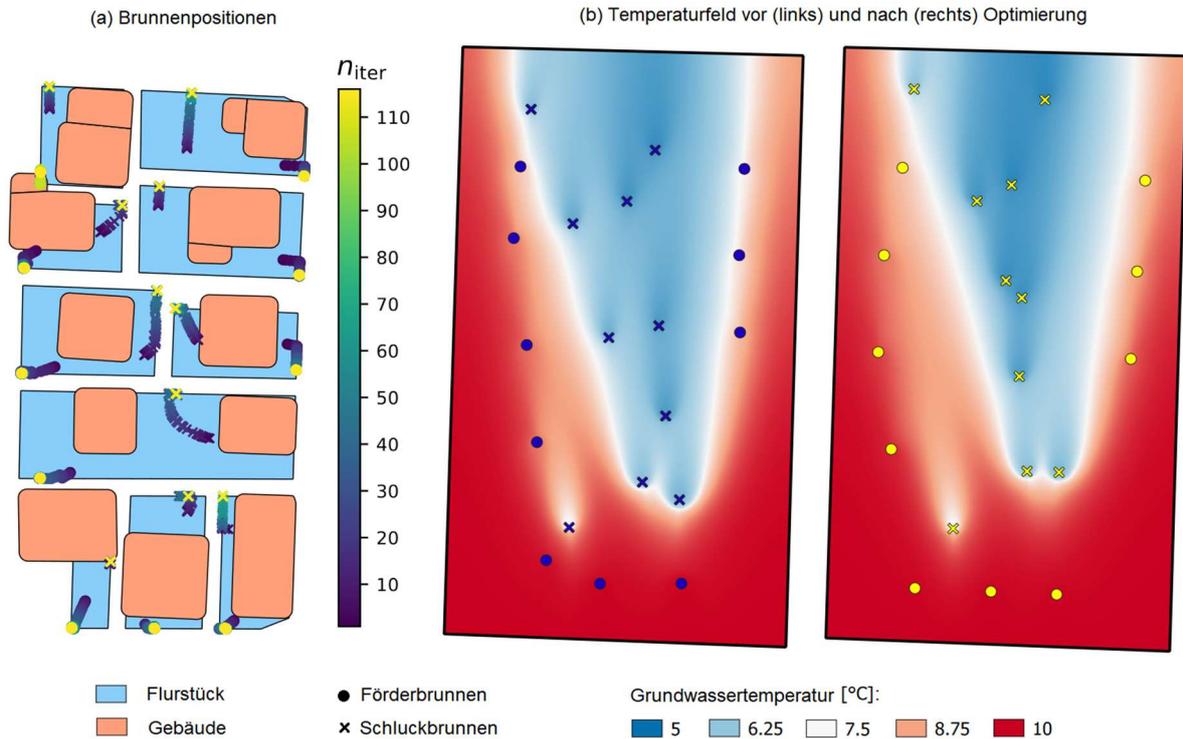


Abbildung 42: Optimales Brunnenlayout: (a) Brunnenpositionen durch Optimierungsiterationen. Förder- und Schluckbrunnen sind mit Kreisen bzw. Kreuzen dargestellt. Die Farben in der Legende stellen Optimierungsiterationen dar, wobei Dunkelblau und Gelb der ersten bzw. letzten Iteration (Lösung) entsprechen. (b) Grundwassertemperaturfeld und Brunnenstandorte für die anfängliche (links) und endgültige/optimale (rechts) Brunnenanordnung. (übernommen aus Halilovic, 2022))

II.1.1.10.2 Optimierung mit analytischen Modellen für Wärmefahnen von GWWP

Der zweite Ansatz zur Optimierung von Brunnenlayouts für GWWP basiert auf einem analytischen Modell zur Abschätzung der Wärmefahnen von GWWP. Genauer gesagt basiert es auf dem sogenannten LAHM-Modell (linearer advektiver Wärmetransport), das in der Genehmigungspraxis in Baden-Württemberg verwendet wird (Umweltministerium Baden-Württemberg, 2009a). Das ursprüngliche LAHM-Modell kann verwendet werden, um ein Injektionsbrunnen mit einer konstanten Pumprate zu simulieren, und wird mit der folgenden Formel angegeben (Umweltministerium Baden-Württemberg, 2009b; VDI, 2012a; VDI, 2012b; VDI, 2015; Kinzelbach, 1987):

$$\Delta T(x, y, t) = \frac{Q \cdot \Delta T_E}{4 \cdot n_f \cdot m \cdot v_a \cdot \sqrt{\pi \cdot \alpha_T}} \cdot \exp\left(\frac{x - r}{2 \cdot \alpha_L}\right) \cdot \frac{1}{\sqrt{r}} \operatorname{erfc}\left(\frac{r - v_a \cdot t / R}{2 \cdot \sqrt{v_a \cdot \alpha_L \cdot t / R}}\right)$$

$$r = \sqrt{x^2 + y^2 \frac{\alpha_L}{\alpha_T}}$$

- x, y = Längs- und Querkoordinate [m] (x in Strömungsrichtung, y senkrecht zur Strömungsrichtung)
 t = Zeit seit Beginn der Stoffeinleitung [s]
 Q = Infiltrationsrate [m³ s⁻¹]
 ΔT_E = Unterschied zwischen Einleittemperatur und unbeeinflusster Grundwassertemperatur [K]
 ΔT = Gesuchte Isotherme als Differenz zur Grundwassertemperatur [K] (Unterschied zur unbeeinflussten Grundwassertemperatur)
 n = transport- oder durchflusswirksamer Hohlraumanteil [-]
 m = genutzte grundwassererfüllte Mächtigkeit [m]
 v_a = Abstandsgeschwindigkeit [m s⁻¹]
 α_L = Längsdispersivität [m]
 α_T = Querdispersivität [m]
 R = Retardation [-]
 erfc = komplementäre Fehlerfunktion
 \exp = Exponentialfunktion zur Basis e

Im ersten Schritt des neuen Optimierungsansatzes wird das ursprüngliche LAHM-Modell so verbessert, dass es zur Simulation mehrerer Injektionsbrunnen mit zeitvariablen Pumpraten verwendet werden kann. Diese Erweiterung erfolgt durch räumliche und zeitliche Superposition. Die verbesserte Version des LAHM-Modells ist auch in das entwickelte Web-App-Tool integriert (siehe Abschnitt II.1.5.2).

Im zweiten Schritt des neuen Optimierungsansatzes wird das verbesserte LAHM verwendet, um die optimalen Brunnenstandorte mehrerer GWWP im betrachteten Gebiet zu finden. Dies erfolgt durch Definition potenzieller Brunnenstandorte für Förder- und Schluckbrunnen auf jedem Grundstück und der entsprechenden binären Optimierungsvariablen für jeden Standort. Die Brunnen werden an bestimmten Standorten platziert oder entfernt, indem die entsprechenden Variablen auf 1 bzw. 0 gesetzt werden. Das resultierende Optimierungsproblem ist im Allgemeinen ein ganzzahliges lineares Programm, das sehr effektiv gelöst werden kann. Abbildung 43 zeigt das Konzept des neu eingeführten Optimierungsansatzes.

Wie bereits erwähnt, wurde dieser Ansatz verwendet, um Brunnenpositionen in der Vorverarbeitung für das gesamte Kopplungsschema zu definieren. In diesem Fall wird auf jedem Grundstück ein Brunnenpaar so platziert, dass die negativen Wechselwirkungen zwischen allen GWWP minimiert werden. Der neue Ansatz kann jedoch auch verwendet werden, um die maximale Anzahl von GWWP und ihre optimalen Brunnenstandorte in einem bestimmten Gebiet zu finden. Mit anderen Worten kann dieser neue Ansatz verwendet werden, um das geothermische Potenzial von Grundwasser schnell abzuschätzen/maximieren. Diese Hauptanwendung der neuen Methode sowie methodische Details werden in einem aktuell vorbereiteten Zeitschriftenartikel beschrieben.

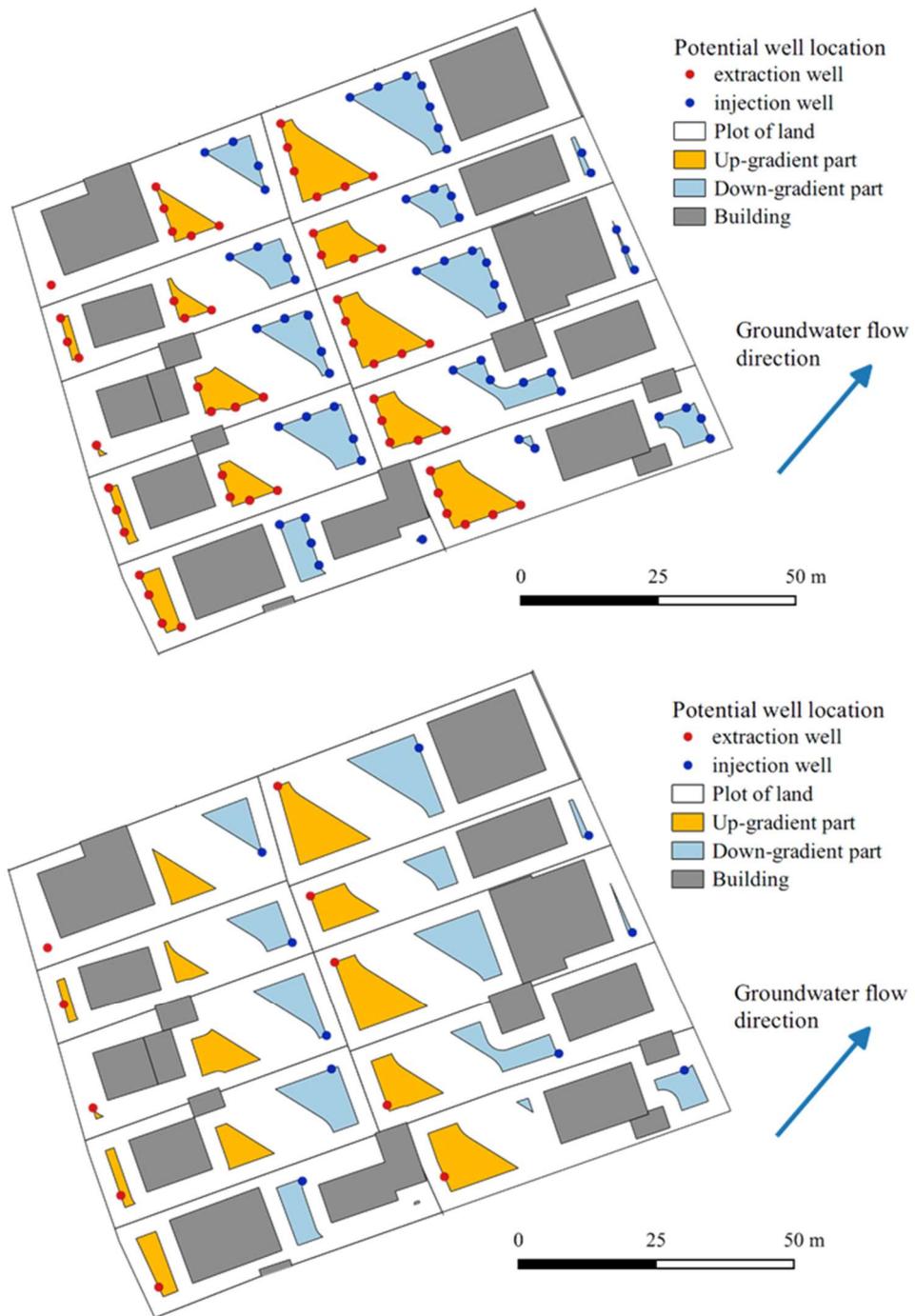


Abbildung 43: Optimierung von Brunnenstandorten mit analytischen Modellen: Alle potenziellen Brunnenstandorte (oben) und die ausgewählten/optimalen Brunnenstandorte (unten)

II.1.2 Kopplung des thermischen Transports im Grundwasser mit der Entwicklung des Stadtenergiesystems (US-SGS)

II.1.2.1 Überblick über den Kopplungsprozess

Sowohl die Berechnung der numerischen Grundwassersimulation in PFLOTRAN als auch die Optimierung der Energieinfrastruktur in urbs benötigen Informations-Updates der jeweils anderen Komponente, um korrekte Ergebnisse im Rahmen der gegebenen Randbedingungen zu liefern. Um eine effiziente und präzise Kopplung zu erreichen, müssen mehrere Faktoren berücksichtigt werden:

1. Welches Problem muss jede Komponente für sich lösen? Welche Berechnung muss dazu ausgeführt werden? Wie wird das Ergebnis durch die Kopplung verbessert oder ermöglicht?
2. Welche Information benötigt eine Komponente des anderen Prozesses? Warum ist diese Information unverzichtbar?
3. Welche Informationen kann jede Komponente zur Verfügung stellen? Wo und wie werden die Daten erzeugt? Sind sie verfügbar? Können sie ausgetauscht werden, so dass der andere Solver sie annehmen und in seiner eigenen Berechnung anwenden kann?
4. Welche Arten der Inter-Prozess-Kommunikation sind auf parallelen Rechnern mit verteiltem Speichersystem nutzbar? Welche Formen der Datenübertragung und Parallelisierung sind bereits implementiert?

II.1.2.2 Datenaustausch zwischen Solvern

Die Methode der partitionierten Simulation basiert auf einem einfachen Prinzip. Die beteiligten Komponenten werden jeweils unabhängig voneinander gestartet. In unserem Fall berechnet PFLOTRAN die Untergrundtemperatur- und Druckverläufe, urbs bestimmt die lineare Optimierung der Energie-Infrastruktur. Während der Laufzeit werden die benötigten Informationen unter den Komponenten ausgetauscht. In Abbildung 44 ist der entsprechende Informationsfluss dargestellt. PFLOTRAN und urbs senden ihre Informationen jeweils mit Hilfe der Kopplungs-Software preCICE an die andere Komponente.

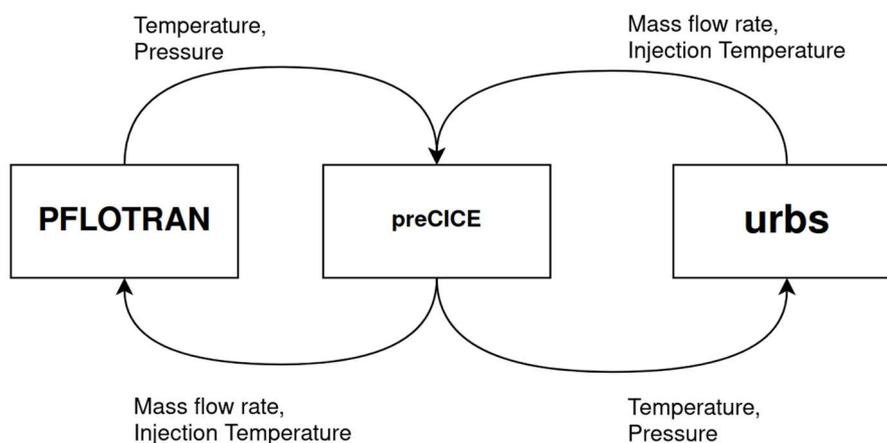


Abbildung 44: Informationsfluss während der Simulations-Kopplung.

II.1.2.2.1 Anbindung von PFLOTRAN

Die Rolle von PFLOTRAN (Hammond et al. 2014) ist es, zu bestimmen, inwieweit die Bedingungen im Untergrund (Temperatur, Druck, Fließgeschwindigkeit) durch eine bestimmte Konfiguration von Wärmepumpen (WP) beeinflusst werden. Dazu modelliert PFLOTRAN die WPs als Quellen bzw. Senken in den Randbedingungen. Durch diese Quellen/Senken kann Wasser mit einer bestimmten Durchflussrate in die Simulation-Domain eingeführt bzw. abgeführt werden. Dazu werden folgende Informationen benötigt: (1) Eine Zeitreihe mit Durchflussrate (mass flow rate) für jede WP, (2) eine Zeitreihe mit Temperaturwerten für den Zufluss.

Diese Zeitreihen spezifizieren den zugeführten Masse- und Wärmefluss zu definierten Zeitpunkten, beispielsweise in 10-Tages-Intervallen. Ein Beispiel ist in Tabelle 1 dargestellt.

Die Randbedingungen für einen beliebigen Zeitschritt können in PFLOTRAN durch lineare Interpolation bestimmt werden. Um einen Entnahmebrunnen zu modellieren, wird der negative Durchfluss des Injektionsbrunnens veranschlagt. Eine Temperaturangabe ist hier nicht notwendig. Zusammen ergibt dies die Randbedingungen, die einer Wärmepumpe entsprechen. PFLOTRAN benötigt also folgende Informationen von urbs:

1. Die Temperaturkurven an jedem Einspeisebrunnen.
2. Massendurchfluss für jeden Einspeise- und Entnahmebrunnen.

II.1.2.2.2 Anbindung von urbs

Die Aufgabe von urbs besteht darin, die optimale Menge an Wärmepumpen und deren Nutzung (Massenstrom) auf der Grundlage des aktuellen Grundwasserzustands im gesamten Gebiet und des entsprechenden Wärme- und Kältebedarfs zu bestimmen. Die ausgewählten GWHPs müssen eine Reihe interner Optimierungsbedingungen erfüllen (z. B. Deckung des Heiz-/Kühlbedarfs innerhalb der Kapazitätsgrenzen) und gleichzeitig die zugrundeliegende Zielfunktion (z. B. Gesamtkosten oder CO₂-Emissionen) minimieren. Die Lösung muss darüber hinaus eine Reihe von externen Randbedingungen erfüllen (maximale Einspeisetemperatur, Druck, Massendurchsatz usw.), die den behördlichen Auflagen bei der Installation neuer Wärmepumpen-Systeme entsprechen. Bei der Beschreibung des Kopplungsverfahrens sind nur die externen Randbedingungen für die Kopplung relevant, da diese durch den thermischen Zustand des Grundwassers beeinflusst werden. Zur Durchführung der Optimierung und der Überprüfung der Randbedingungen benötigt urbs vom Simulationsmodell PFLOTRAN:

1. die Grundwassertemperatur an allen Entnahmebrunnen, Einspeisebrunnen und Beobachtungspunkten,
2. den Grundwasserdruck an allen Entnahmebrunnen, Einspeisebrunnen und Beobachtungspunkten.

urbs ist in zwei Teile gegliedert:

- (i) das eigentliche Optimierungsframework,
- (ii) ein externer Optimierungs-Löser.

Bei dem Optimierungs-Löser kann prinzipiell ein beliebiger open-source oder kommerzieller Löser für lineare Optimierungsprobleme zum Einsatz kommen. Dieser Löser interagiert für die Kopplung transparent direkt mit urbs. Im vorliegenden Projekt wurde Gurobi verwendet, eine kommerzielle Software für lineare Optimierung. Das lineare Optimierungsproblem wird innerhalb von urbs erstellt (wobei jede interne Einschränkung oder Randbedingung des Optimierungsproblems definiert und geändert werden kann). Gurobi wird anschließend von urbs aufgerufen, um dieses vordefinierte Optimierungsproblem numerisch zu lösen.

Die Informationen, die eine optimale Lösung beschreiben, sind (i) welche Wärmepumpen installiert werden, um das Energieinfrastrukturproblem zu optimieren, und (ii) wie hoch der Massendurchsatz jeder dieser Wärmepumpen ist. Das urbs-Optimierungsmodell benötigt die potenzielle Leistungszahl (COP) für jede GWHP. Die Leistungszahl (COP, coefficient of performance) ist eine Funktion der Grundwassertemperatur am Entnahmebrunnen. Die COP-Werte werden in das Optimierungsmodell in urbs eingegeben, welches von Gurobi gelöst wird.

Alle anderen Informationen, die während der Kopplung von PFLOTRAN benötigt werden, werden für die Überprüfung der externen Randbedingungen benötigt. Bei dieser Überprüfung wird festgestellt, ob die Wärmepumpen innerhalb des festgelegten Betriebsbereichs arbeiten. Die Randbedingungen sind im Detail gegeben durch:

1. Die Temperaturen im Einspeisebrunnen liegen zwischen 5 °C und 20 °C.
2. Die Temperatur am Entnahmebrunnen bereits vorhandener Wärmepumpen darf sich nicht um mehr als 1 °C ändern.
3. Der Druck an den Injektionsbohrungen darf nicht über einen bestimmten Wert steigen.
4. Der Druck an den Entnahmebrunnen darf nicht unter einen vordefinierten Absenkungswert sinken.

Statt der ursprünglichen urbs Versionen werden die gekoppelten Optimierungen mit Hildes des sogenannten urbs-Adapters durchgeführt, der zusätzlich zur ursprünglichen urbs-Funktionalität die Kopplung über preCICE und die Überprüfung der externen Randbedingungen aus der Kombination von urbs-internen Informationen und Informationen aus der Simulation mit PFLOTRAN durchführt. Die von PFLOTRAN benötigten Temperaturen der Einspeisebrunnen werden im urbs-Adapter bestimmt und als Temperatur des Entnahmebrunnens ± 5 °C berechnet (je nachdem, ob sich die Wärmepumpe im Kühl- oder Heizmodus befindet). Um den Wärmestrom durch die Wärmepumpen und damit den Gesamtenergieverbrauch zu variieren, wird der Massendurchsatz der Wärmepumpen variiert. Um diese Aufgaben erfüllen zu können, sind im urbs-Adapter verschiedene Typen von Wärmepumpen definiert:

1. *Existing_original* - dies sind die bereits vorhandenen Wärmepumpen in der Stadt. Im urbs Optimierungsmodell haben sie eine vordefinierte installierte Leistung, die sich nicht ändern kann.
2. *Existing* – dies umfasst *Existing_original* sowie alle anderen Wärmepumpen, die während der gekoppelten Simulation zur optimalen Lösung hinzugefügt wurden. Alle Wärmepumpen, die von urbs als Teil der optimalen Lösung vorgeschlagen werden und die sternen Randbedingungen erfüllen, also den betrieblichen und regulatorischen Anforderungen entsprechen, werden hier hinzugefügt.
3. *Hypothetical* – anfängliche Liste aller potenziellen Standorte, an denen eine Wärmepumpe hinzugefügt werden könnte. Sie haben eine anfängliche Installationskapazität von Null.
4. *Selected* – Liste der Wärmepumpen, die im letzten Aufruf von urbs aktuellen hinzugefügt wurden (siehe unten). Diese Liste kann nur aus der Liste *Hypothetical* gefüllt werden. Diese Wärmepumpen werden in in die Liste *Existing* verschoben, wenn alle externen Randbedingungen erfüllt sind, andernfalls werden sie in die Liste *Removed* verschoben.
5. *Removed* – Liste der GWHP, bei denen die Randbedingungen nicht erfüllt wurden, und die dauerhaft deaktiviert sind. Sie werden im Optimierungs-Solver nicht mehr berücksichtigt.

II.1.2.2.3 preCICE

preCICE ist eine universelle, open-source Bibliothek für partitionierte Kopplung, die an der Technischen Universität München und der Universität Stuttgart entwickelt wurde (Chourdakis et al., 2022). Sie ist in der Lage, mehrere Funktionen für die partitionierte Kopplung bereitzustellen, insbesondere (i) die Datenkommunikation über mehrere Softwarekomponenten und Rechensysteme mit verteiltem Speicher, (ii) die mathematische Dateninterpolation, (iii) die Steuerung des Kopplungsschemas und die numerische Beschleunigung der entsprechenden Kopplungsiterationen. Diese Funktionen werden genutzt, um eine schnelle und effiziente Kommunikation zwischen PFLOTRAN und urbs auf allen Rechensystemen, von Laptops bis zum superMUC-NG, zu ermöglichen.

II.1.2.3 Kopplungsschema

Damit aus der Kombination von Grundwassersimulation und Energiesystemoptimierung aussagekräftige Ergebnisse bestimmt werden können, ist ein geeignetes Kopplungsschema erforderlich. Das Kopplungsschema definiert nicht nur den Informationsfluss zwischen den Komponenten, sondern steuert auch deren Arbeitsweise. Das implizite Kopplungsschema in preCICE ermöglicht die Implementierung von zwei ineinander geschachtelten Kopplungsschleifen, die über die Konfiguration von preCICE und die Adapter der einzelnen Komponenten spezifiziert werden: die äußeren Iterationen und die inneren Iterationen. In jeder äußeren Iteration wird der Optimierer Gurobi in urbs aufgerufen, um potentiell hinzuzufügenden neue Wärmepumpen zu bestimmen. Anschließend werden in der äußeren Iteration die externen Randbedingungen überprüft. Die innere Iteration ist aus technischen Gründen für die korrekte Bestimmung des thermischen Grundwasserzustands nötig, da die exakte Temperaturdifferenz zwischen Entnahme- und Einspeisebrunnen jeder Anlage nicht direkt vorgegeben, sondern nur über mehrere Durchläufe der Simulation korrekt eingestellt werden kann.

II.1.2.3.1 Äußere Iterationen

Das Ziel des urbs-Optimierungsmodells ist die Auswahl neuer Wärmepumpen, die in der Stadt hinzugefügt werden sollen. Aufgrund der externen Überprüfung der Randbedingungen, die durchgeführt wird und der Black-Box-Natur der Untergrundsimulation kann die Erfüllung aller Nebenbedingungen

nicht direkt im Optimierer sichergestellt werde. Um nach jedem Durchlauf des Optimierers in urbs in der externen Überprüfung der Randbedingungen sicher feststellen zu können, welche der neu vorgeschlagenen Wärmepumpen möglicherweise eine Verletzung der Randbedingungen verursacht hat, kann daher in jedem Aufruf von urbs, also in jeder äußeren Iteration für jedes urbs-Modell nur eine Wärmepumpe zur optimalen Lösung hinzugefügt. Daher sind mehrere äußere Iterationen erforderlich, um viele Wärmepumpen in der gesamten Stadt hinzuzufügen und gleichzeitig eine optimale Lösung innerhalb der Randbedingungen zu erhalten. Die Schritte innerhalb einer äußeren Iteration wurden wie folgt umgesetzt:

1. urbs erhält das thermische Feld von PFLOTRAN und bestimmt den COP für jede Wärmepumpe (*Existing, Selected, Hypothetical*).
2. Der Optimierer in urbs bestimmt, welche Wärmepumpe (aus der *Hypothetical* Liste) zur optimalen Lösung hinzugefügt wird und wie hoch der Massenstrom durch die neue Wärmepumpe ist.
3. Die neue Wärmepumpe wird von der *Hypothetical* Liste in die *Selected* Liste verschoben.
4. Die Temperatur am Einspeisebrunnen wird für alle Wärmepumpen bestimmt.
5. Es werden mehrere innere Iterationen (Beschreibung siehe unten) durchgeführt, bis das thermische Feld konvergiert ist.
6. Die externen Randbedingungen werden überprüft.
7. Wenn die externen Randbedingungen erfüllt sind, wird die neue Wärmepumpe von *Selected* nach *Existing* verschoben, andernfalls wird sie in die Liste *Removed* verschoben.

II.1.2.3.2 Innere Iterationen

Damit das urbs-Optimierungsverfahren die korrekten Betriebsbedingungen der Wärmepumpen verwenden kann, benötigt es ein konvergiertes Temperaturfeld des Untergrundes. Da die Grundwassertemperatur jedoch davon abhängt, welche Wärmepumpen ausgewählt werden und wie stark jede Wärmepumpe genutzt wird, besteht eine enge Wechselwirkung/Kopplung zwischen der GWHP-Auswahl/Nutzung und dem thermischen Feld. Die enge Wechselwirkung wird durch die Betrachtung des Informationsflusses zwischen PFLOTRAN und urbs veranschaulicht:

1. Unter der Annahme, dass urbs bereits ausgewählt hat, welche Wärmepumpen aktiv sind, und die Massenstromrate jeder Wärmepumpe bekannt ist, bestimmt urbs-Adapter die neuen Injektionsbrunnenentemperaturen über die folgende Formel bestimmen: $T_{\text{Einspeisung}} = T_{\text{Entnahme}} \pm 5 \text{ °C}$ (Schritt 4 oben).
2. Die neuen Einspeisetemperaturen werden an PFLOTRAN übermittelt, und die Untergrundssimulation wird ausgeführt, um ein aktualisiertes Wärmefeld zu erhalten, insbesondere auch angepasste Werte von T_{Entnahme} für alle Wärmepumpen.
3. urbs erhält die aktualisierten Temperaturwerte an jedem Entnahmebrunnen und aktualisiert die Temperaturen der Injektionsbrunnen.
4. 2. und 3. werden wiederholt bis sich die Temperaturen der Entnahmebrunnen nicht mehr ändern.

Zwischen jeder inneren Iteration ändert sich also nicht die Anzahl der ausgewählten Wärmepumpen, sondern nur die Temperaturen der Einspeisebrunnen. Der Massendurchsatz für jede Wärmepumpe wird ebenfalls von urbs an PFLOTRAN übermittelt, ist jedoch zwischen den inneren Iterationen konstant. Er wird in der ersten inneren Iteration zu Beginn einer äußeren Iteration berechnet und bleibt für alle weiteren inneren Iterationen innerhalb einer äußeren Iteration konstant.

Das Zusammenspiel zwischen der inneren und der äußeren Iteration ist in Abbildung 45 zu sehen. Die innere Iteration ist in der "if converged"-Kontrolle enthalten, während die äußere Iteration in der "are constraints met"-Kontrolle enthalten ist.

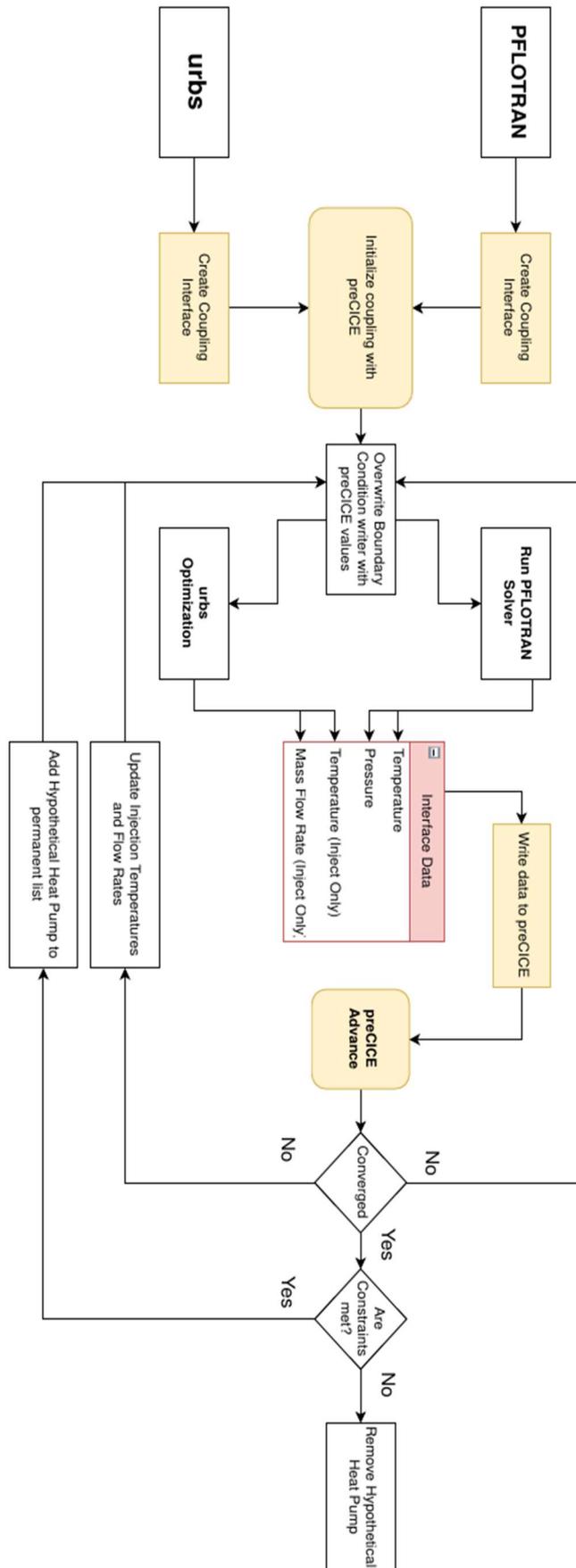


Abbildung 45: Zusammenspiel zwischen der inneren und der äußeren Iteration während des Kopplungsprozesses

II.1.2.4 Entwicklung der Adapter

Die oben beschriebenen Kopplungsschemata und Datenaustauschmethoden müssen von den einzelnen Komponenten durch Aufruf Funktionen des Application Programming Interface (API) von preCICE umgesetzt werden. Die API von preCICE ermöglicht es jeder Software, einfach mit preCICE zu interagieren. Um die Möglichkeit zu nutzen, mussten einige Änderungen am Code der jeweiligen Software vorgenommen werden, indem ein Adapter für jede Software entwickelt wurde. Der Adapter fügt alle notwendigen API-Befehle in den Löser selbst ein und macht ihn so mit preCICE kompatibel.

II.1.2.4.1 PFLOTRAN

Der PFLOTRAN-Adapter wurde innerhalb von PFLOTRAN selbst entwickelt, wobei nur minimale Änderungen an der PFLOTRAN-Codebasis vorgenommen wurden. Es wurde eine neue ausführbare Datei erzeugt (pflotran_precice.o), die die Kommunikation mit preCICE ermöglicht, während die ursprüngliche ausführbare Datei (pflotran.o) unangetastet blieb. Die preCICE-API-Funktionsaufrufe sind in einer neuen Datei namens Adapter.F90 implementiert, was zu minimalen Änderungen innerhalb von PFLOTRAN führt. Dies wurde in einem eigenen neuen Zweig von PFLOTRAN umgesetzt, aus dem die oben genannte neue ausführbare Version erstellt werden kann, ohne zusätzlich die Inhalte des Standardzweigs von PFLOTRAN zu benötigen. Diese Entwicklungsmethode erleichtert die kontinuierliche Nutzung und Wartung des Adapters für zukünftige Projekte und erhöht die Nachhaltigkeit des GEO.KW-Projekts.

II.1.2.4.2 urbs

Der urbs-Adapter erforderte einen aufwändigeren Ansatz. urbs ist eine in Python geschriebene Software, die Eingabedaten einliest und mit Hilfe einer Pyomo-Umgebung ein Optimierungsmodell erstellt, das von einem linearen Solver (z.B. Gurobi) gelöst werden kann. Dieser zweistufige Ansatz enthält den allgemeinen urbs-Löser selbst und bettet den Aufruf der Optimierungsfunktion in die urbs-Datei runme.py ein. Dieses Skript wurde direkt modifiziert, indem die preCICE-API-Funktionsaufrufe hinzugefügt und ein neues urbs-Skript runme_precice.py entwickelt wurde. Dieses Skript enthält alle ursprünglichen urbs-Befehle zur Erstellung des Optimierungsmodus und zusätzlich die neuen preCICE-API-Aufrufe, die den Adapter in urbs einbetten. Der preCICE-Adapter ist also ein völlig neues Python-Skript und nicht nur ein Zusatz zum ursprünglichen urbs-Skript. Die preCICE-API-Aufrufe helfen dabei, zu steuern, wann Gurobi aufgerufen wird, wann Daten in preCICE geschrieben werden und wann die Überprüfung der externen Nebenbedingungen stattfinden muss.

II.1.2.5 Parallelisierung

Um die Simulation auf großen Parallelrechnern durchführen zu können, muss jeder Solver in der Lage sein, parallel auf mehreren großen Rechenknoten zu laufen. Dies wirkt sich nicht nur auf die Effizienz der einzelnen Solver aus, sondern auch auf die Kommunikationstechnik, die zur Erreichung der Kopplung erforderlich ist.

II.1.2.5.1 Pre-processing

Vor der Parallelisierung der Solver ist eine Reihe von Vorbereitungsschritten erforderlich, um die benötigten Informationen zu extrahieren. Der kritische Teil der Einrichtung der Simulationsdomänen ist die Datenbank mit allen Informationen, die sich auf das physikalische Problem beziehen, darunter:

1. Physische Standorte aller vorhandenen und hypothetischen Wärmepumpen,
2. ID-Nummern für alle Brunnen und Wärmepumpen-Systeme,
3. Plot-ID, die zur Definition eines Wärmepumpen-Systems in urbs verwendet wird.

Die Datenbank wird bei der Konstruktion des PFLOTRAN-Netzes für das gesamte Gebiet verwendet, das alle Wärmepumpen-Systeme (*Existing* und *Hypothetical*) enthält. Eine Ausgabe des Vernetzungsprozesses ist neben dem Rechengitter für PFLOTRAN eine sogenannte Brunnenzusammenfassungsdatei, die bestimmte Informationen über jede Wärmepumpe enthält:

1. System-ID - eindeutige ID-Nummer für jedes Wärmepumpensystem,
2. Brunnen-ID - eindeutige Nummer für jeden Brunnen in der Domäne,
3. Zell-ID - Zell-ID des Finite Element Rechenetztes in PFLOTRAN, in dem sich der Brunnen befindet.

Jede *Existing_original* Wärmepumpe kann mehrere Entnahme- oder Einspeisebrunnen haben. Daher sind die Nummern der Brunnen-ID und der Zell-ID immer eindeutig, jedoch können mehrere Brunnen dieselbe System-ID haben, da sie zur selben Wärmepumpe gehören.

II.1.2.5.2 Data Mapping

Bevor Informationen zwischen PFLOTRAN und urbs ausgetauscht werden können, wird eine klar definierte Datenschnittstelle benötigt, über die preCICE die Informationen senden kann. Die Schnittstelle enthält die räumlichen und zeitlichen Informationen für jede Wärmepumpe, so dass der Wert der Temperatur, des Massenstroms oder des Drucks an einer Wärmepumpe für einen bestimmten Brunnen zu einem bestimmten Zeitpunkt von der richtigen Wärmepumpe im richtigen urbs-Modell an die richtige Wärmepumpe im PFLOTRAN-Modell und umgekehrt gesendet werden kann (siehe Abbildung 46). Die Erstellung dieser Schnittstelle ist sowohl für urbs als auch für PFLOTRAN unterschiedlich und wird im Folgenden separat erläutert.

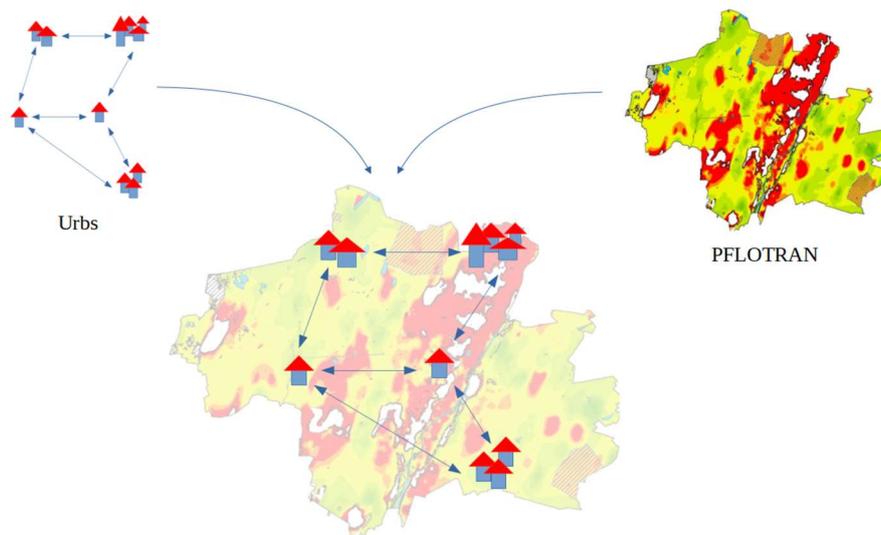


Abbildung 46: Data Mapping

II.1.2.5.3 PFLOTRAN

PFLOTRAN parallelisiert die Simulation automatisch mit einem internen Ansatz zur Partitionierung der Domain. Hierbei wird das Finite-Element-Netz in kleinere Regionen zerlegt, wodurch jede Region auf einem eigenen Prozessor (auch Rang genannt) berechnet werden kann. Dies führt dazu, dass jeder Prozessor nur die Informationen aus seiner jeweiligen Region kennt und nicht weiß, was auf anderen Prozessoren oder im gesamten Modell passiert. Das bedeutet zudem, dass auch nur die Informationen über die Entnahme- und Einspeisebrunnen der jeweiligen kleineren Region auf einem Rang liegen.

Vor dem Start der Simulation ist nicht bekannt, wie PFLOTRAN die Partitionierung des Netzes durchführen wird oder auf welchem Rang die Information einer speziellen Unterregion zu liegen kommt. Daher müssen die Informationen über die Entnahme- und Einspeisebrunnen durch die Kopplung mit preCICE nach der Partitionierung entsprechend gefunden werden.

PFLOTRAN wendet die Randbedingungen der Wärmepumpen-Brunnen entsprechend der in der Eingabedatei gegebenen Reihenfolge an. Diese Information ist daher vorab bekannt. Zusätzlich wird in der PFLOTRAN Eingabedatei eine Region für jeden Brunnen angelegt, in der die entsprechende Randbedingung gesetzt wird. Diese Brunnen-Region besteht aus einer Liste von Zell-IDs, die den Brunnen und seine räumliche Position im Modell beschreiben. Da folglich die Reihenfolge der Quell- und Senkterme der Randbedingungen, der Regionen und der Zell-IDs gleichbleibend, bekannt und in der Brunnenzusammenfassungsdatei gespeichert ist, kann die Zell-ID benutzt werden, um das

Kopplungs-Interface für PFLOTRAN zu erstellen. Die Zell-ID eignet sich hierbei besonders, da sie die einzige verfügbare Information beim Lesen von Beobachtungsdaten in PFLOTRAN ist.

Um das Interface zum Übertragen der Randbedingungsinformation von urbs nach PFLOTRAN herzustellen, gehen wir die Liste der Wärmepumpen-Anlagen durch und schreiben die jeweils erste Zell-ID, die mit einem Entnahme- oder Einspeisebrunnen eines Systems in Verbindung gebracht wird, in einen Vektor. Dies wird für jeden Zeitschritt der Simulation wiederholt, wodurch ein 2-dimensionaler Vektor mit Zell-ID und Zeitschritt entsteht:

$$\text{Interface} = [[\text{Zell_ID_1}, \text{Zeit_0}], [\text{Zell_ID_1}, \text{Zeit_1}], \dots, [\text{Zell_ID_1}, \text{Zeit_ende}], \\ [\text{Zell_ID_2}, \text{Zeit_0}], [\text{Zell_ID_2}, \text{Zeit_1}], \dots, [\text{Zell_ID_ende}, \text{Zeit_ende}]]$$

Dieser Vektor wird durch den PFLOTRAN-Adapter erstellt und zu preCICE geschickt. Er repräsentiert die eindeutigen Positionen in Raum (indirekt über die Zell_ID) und Zeit für alle Datenpunkte, an denen physikalische Größen wie Massenströme und Temperaturen zwischen PFLOTRAN und urbs ausgetauscht werden müssen. Wenn der Adapter Informationen, wie z.B. Temperatur, aus preCICE liest, dann ist der erste Wert im Temperatur Vektor eindeutig der Temperatur für die Wärmepumpe mit Zell_ID_1 zum Zeitpunkt 0 zugeordnet, da wir die PFLOTRAN Eingabedatei auch auf Basis der Brunnenzusammenfassungsdatei aufbauen. Der Vektor mit diesen gelesenen Daten wird auf dem Hauptrang erzeugt und anschließend an alle Ränge innerhalb von PFLOTRAN verteilt.

Das Interface zum Schreiben von Informationen nach preCICE ist etwas komplizierter aufgebaut. Die zu schreibenden Beobachtungsdaten sind vollständig partitioniert und nur auf dem jeweiligen Rank verfügbar. Wenn PFLOTRAN also die Beobachtungsdaten, wie Temperatur und Druck, schreibt, ist lediglich die Zell-ID mit dem jeweiligen Beobachtungspunkt assoziiert. Um die Daten in preCICE richtig zuordnen zu können, müssen darum beim Prozessieren der Beobachtungsdaten von jedem Rang auch die Zell-ID und der Zeitschritt zu preCICE geschickt werden. Durch diese Methode wissen wir, welche Beobachtung zu welcher Wärmepumpe in welchem Zeitschritt gehört.

II.1.2.5.4 urbs

Die urbs-Dekompositionsstrategie wird von TUM-ENS gesteuert und durchgeführt, bevor die gekoppelte Simulation beginnt. Die gesamte Stadt wird in kleine, lokale Domänen (urbs-Regionen) aufgeteilt, die jeweils ihr eigenes urbs-Modell ausführen. Weitere Informationen über die Dekomposition von urbs können in Abschnitt II.1.2.3.2 nachgelesen werden. Da das Hinzufügen von jeweils einer Wärmepumpe pro äußerer Kopplungsiteration zu lange dauern würde, um die Optimierung über die gesamte PFLOTRAN-Domäne durchzuführen, werden viele unabhängige urbs-Modelle über die Domäne verteilt, deren Wärmepumpen sich gegenseitig nicht oder nur vernachlässigbar beeinflussen. So kann in diesen Modellen gleichzeitig je eine Wärmepumpe hinzugefügt werden, ohne die wichtige Eigenschaft der Identifizierbarkeit derjenigen Wärmepumpe, die zu einer möglichen Verletzung der externen Randbedingungen geführt hat, zu verlieren.

Da die urbs-Regionen vor dem Ausführen der gekoppelten Simulation definiert werden, können wir jeder urbs-Region einen bestimmten Rechenrang zuweisen. Dies wird über ein Vorbereitungsverfahren gesteuert, das für jeder urbs-Region folgende Informationen zuordnet:

1. Rechenrang für die Ausführung,
2. Liste aller anderen Regionen, die auf demselben Rang ausgeführt werden,
3. Liste aller anderen Regionen, die für die Überprüfung der externen Randbedingungen nach Hinzufügen einer Wärmepumpe in der eigenen Region überprüft werden müssen.

Daher weiß jede urbs-Region, auf welchem Rang sie läuft, auf welchen Rängen alle anderen urbs-Regionen laufen und welche Regionen stromabwärts liegen. Da sich die Wärmefahnen weit stromabwärts ausbreiten können, müssen die Beschränkungen in ausreichend vielen stromabwärts gelegenen Regionen überprüft werden, um festzustellen, ob eine stromaufwärts gelegene Wärmepumpe innerhalb der entsprechenden Grenzen betrieben wird. Der Kopplungs-Vorbereitungsschritt durchläuft die urbs-Modelle in einer Schleife und alle Wärmepumpen in jedem Modell. Jedes urbs-Modell hat die System-ID für jede Wärmepumpe, wobei die Brunnen-IDs jeder

System-ID bekannt sind und die Zell-ID für jede Brunnen-ID ebenfalls bekannt ist. Daher wird eine Liste der Zell-IDs für jede Wärmepumpe erstellt. Diese Liste wird verwendet, um die Liste von Standorten ähnlich wie bei PFLOTRAN zu erstellen. Daten zu dieser Liste werden nach preCICE geschrieben und von dort gelesen. Die Reihenfolge der Wärmepumpen in jedem urbs-Modell, die Reihenfolge der Brunnen-IDs und die Reihenfolge der Zell-IDs, die für das Lesen und Schreiben von Daten in preCICE erforderlich sind, sind also bekannt.

Da preCICE weiß, welche Wärmepumpe sich auf welchem Rechenrang befindet, kann es die Daten zwischen PFLOTRAN und urbs mithilfe der Nearest-Neighbor-Mapping-Methode in preCICE kommunizieren. Die Punkt-zu-Punkt-Kommunikationstechnik in preCICE schafft nur einen Kommunikationskanal zwischen den Rechenrängen von PFLOTRAN und urbs, die gemeinsame Wärmepumpen haben, und begrenzt so die kostspielige parallele Kommunikation auf großen Rechenclustern.

Um eine parallele Prüfung der externen Randbedingungen durchzuführen, enthält jede Region eine "true"- oder "false"-Flagge, d.h. entweder sind die externen Randbedingungen erfüllt oder nicht. Da jede Region die Gesamtzahl der Regionen, die globale Reihenfolge der Regionen und die relevanten stromabwärts gelegenen Regionen kennt, erstellt jedes urbs-Modell einen Vektor `constraintCheck = [region_0, region_1, ..., region_N]`, der angibt, ob die externen Randbedingungen jeder Region erfüllt sind oder nicht.

Anfänglich ist jeder Wert in `constraintCheck` 0 (alle Randbedingungen sind erfüllt). Wenn nach dem Schritt der Prüfung die Randbedingungen nicht erfüllt sind, wird der Wert an der entsprechenden Stelle in `constraintCheck` auf 1 gesetzt (wenn z. B. die Nebenbedingungen der Region 1 nicht erfüllt sind, wird der zweite Wert in `constraintCheck` auf 1 gesetzt). Es wird ein globaler Allreduce-Summierungsschritt durchgeführt, nach dem jedes urbs-Modell das gleiche, globale Ergebnis der Prüfung der externen Randbedingungen hat. Jedes urbs-Modell kann prüfen, ob seine eigene stromabwärts gelegene Region alle Randbedingungen erfüllt (d. h. Region 1 liegt stromabwärts zu Region 0. Wenn der zweite Wert in `constraintCheck` in Region 0 den Wert 1 hat, dann kann die neue Wärmepumpe in Region 0 nicht hinzugefügt werden). Auf diese Weise kann die Prüfung der externen Randbedingungen für eine beliebige Anzahl von stromabwärts gelegenen Regionen gleichzeitig in allen Regionen durchgeführt werden.

II.1.2.6 Parallele Optimierung mit Prüfung externer Randbedingungen

Die Wärmefahne, die sich im Untergrund entwickelt, kann sich wie erwähnt stromabwärts ausbreiten und andere GWWP negativ beeinflussen. Daher ist nach dem Hinzufügen einer neuen Wärmepumpe zur optimalen Lösung immer eine Überprüfung der externen Randbedingungen erforderlich, um zu beurteilen, ob diese neue Wärmepumpe zur Verletzung von gesetzlichen Vorgaben am der eigenen oder an stromabwärts gelegenen Wärmepumpenstandorten führt. Die äußere Iterationskopplung wird daher in einem gestaffelten Ansatz implementiert, bei dem immer nur solche urbs-Modelle gleichzeitig optimieren (und je eine Wärmepumpe hinzufügen dürfen), deren Standorte sich über den Grundwasserstrom nicht gegenseitig beeinflussen. Im einfachsten Fall, in dem zu jeder urbs-Region eine zweite, stromabwärts gelegene Region gehört, die im entsprechenden Einflussbereich liegt, werden somit auf jedem Rechenrang zwei urbs-Modelle nacheinander (in zwei aufeinanderfolgenden äußeren Iterationen) ausgeführt. Zur Erläuterung dieses Konzepts wird ein einfaches Beispiel mit 4 Regionen verwendet. Jeder Rang (Rang 1 und Rang 2) hat zwei urbs-Regionen, die nacheinander ausgeführt werden. Rang 1 hat zwei urbs-Regionen namens Region 1 und Region 2, und Rang 2 hat zwei Regionen namens Region 3 und Region 4.

In der ersten äußeren Iteration, Abbildung 47, laufen Region 1 und Region 3 jeweils auf einem eigenen Rang. Die Entnahmebrunnen sind durch den orangefarbenen Knoten, die Einspeisebrunnen durch blaue Punkte und eine einzelne Wärmepumpe durch einen Pfeil zwischen einem Entnahme- und einem Einspeisebrunnen gekennzeichnet. In der ersten äußeren Iteration wird Gurobi für jedes urbs-Modell ausgeführt, löst das Optimierungsproblem und wählt eine neue Wärmepumpe aus. Mehrere innere Iterationen werden mit PFLOTRAN durchgeführt, bis eine konvergente Lösung der thermischen Grundwassersimulation erreicht ist. Sobald die Kopplung konvergiert, überprüfen Region 1 und Region

3 jeweils, ob alle externen Randbedingungen erfüllt sind. Die Auswirkungen jeder hinzugefügten Wärmepumpe können sich jedoch auf die nachgelagerten Regionen auswirken, d. h. Region 1 wirkt sich auf Region 2, Region 2 auf Region 3 und Region 3 auf Region 4 aus.

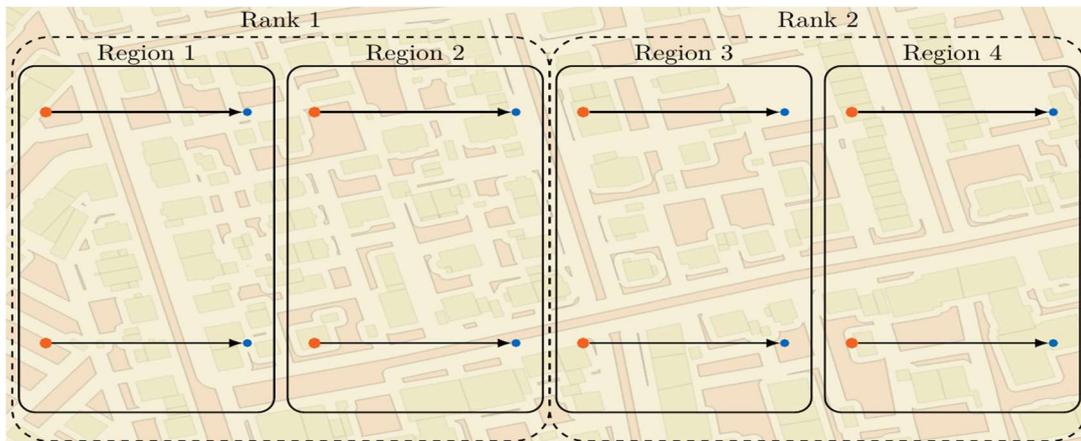


Abbildung 47: 1. Konzept zur Einteilung von urbs-Regionen nach Rängen (Ranks)

Um festzustellen, ob die in Region 1 hinzugefügte Wärmepumpe beibehalten oder entfernt werden sollte, werden daher die externen Randbedingungen in Region 1 und Region 2 überprüft. Ebenso werden die Randbedingungen in Region 3 und Region 4 für die in Region 3 hinzugefügte Wärmepumpe überprüft. Wenn alle Randbedingungen für Region 1 und Region 2 erfüllt sind, wird die neue Wärmepumpe in Region 1 zur Liste der *Existing* Wärmepumpen hinzugefügt, das Gleiche gilt für Region 3. Damit ist eine äußere Iteration abgeschlossen.

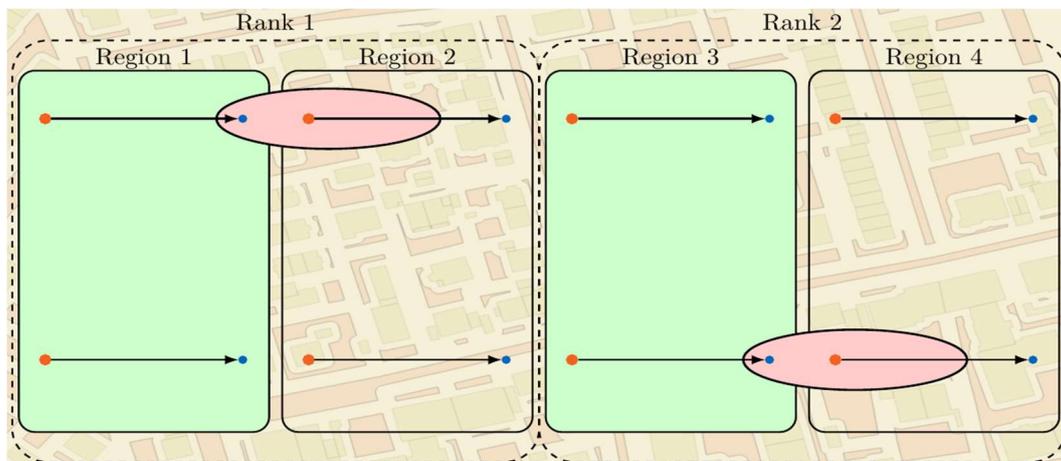


Abbildung 48: Erste äußere Iteration (outer iteration) in der Kopplung

Zu Beginn der nächsten äußeren Iteration werden die urbs-Regionen Region 2 und Region 4 auf ihrem jeweiligen Rang ausgeführt. In diesem Fall wirkt sich Region 2 auf Region 3 aus, aber Region 4 hat keine stromabwärts gelegene Region und wirkt nur auf sich selbst. Nachdem die inneren Iterationen konvergiert sind, werden die externen Randbedingungen für Region 2 und Region 4 überprüft. Da sich Region 2 und Region 3 auf getrennten Rängen befinden, benötigt das urbs-Modell für Region 2 zunächst das Ergebnis der globalen Randbedingungsprüfung und kann dann alle entsprechenden stromabwärts gelegenen Regionen prüfen. Die in Region 2 ausgewählte neue Wärmepumpe interagiert mit der Wärmepumpe in Region 3 aus der vorherigen äußeren Iteration, und die Wärmepumpe in Region 2 wird aus der optimalen Lösung entfernt. Die Wärmepumpe in Region 4 interagiert mit keiner anderen GWWP und wird in die Liste der *Existing* Wärmepumpen aufgenommen.

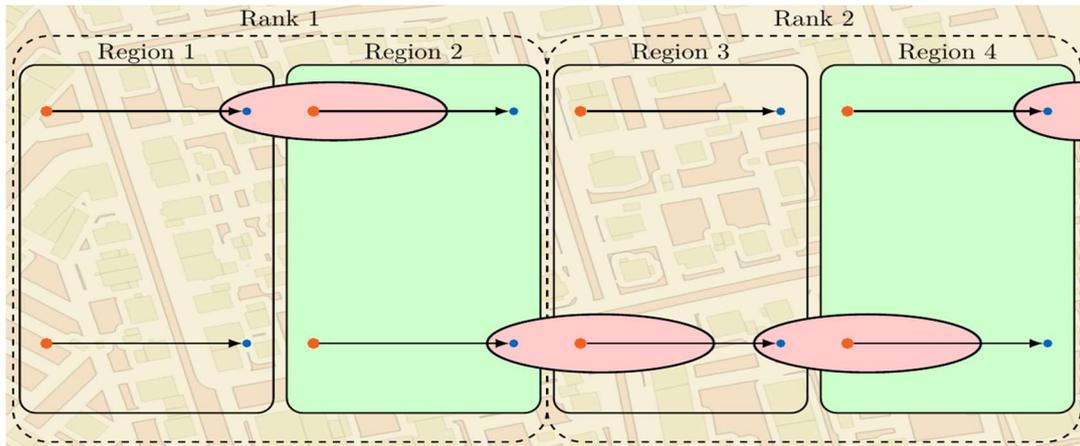


Abbildung 49: Zweite äußere Iteration in der Kopplung

Die äußere Iteration ist abgeschlossen und Region 1 und Region 3 werden erneut auf Rang 1 und Rang 2 durchgeführt. Da es in Region 2 keine Wärmepumpe gibt, wird die zweite Wärmepumpe in Region 1 ausgewählt und zur Liste der *Selected* Wärmepumpen hinzugefügt. Die neu ausgewählte Wärmepumpe in Region 3 interagiert jedoch mit der Wärmepumpe in Region 4 und wird der Liste der *Removed* Wärmepumpen hinzugefügt. Die theoretische Endlösung dieses Testproblems sieht vor, dass 4 Wärmepumpen für die optimale Lösung ausgewählt werden.

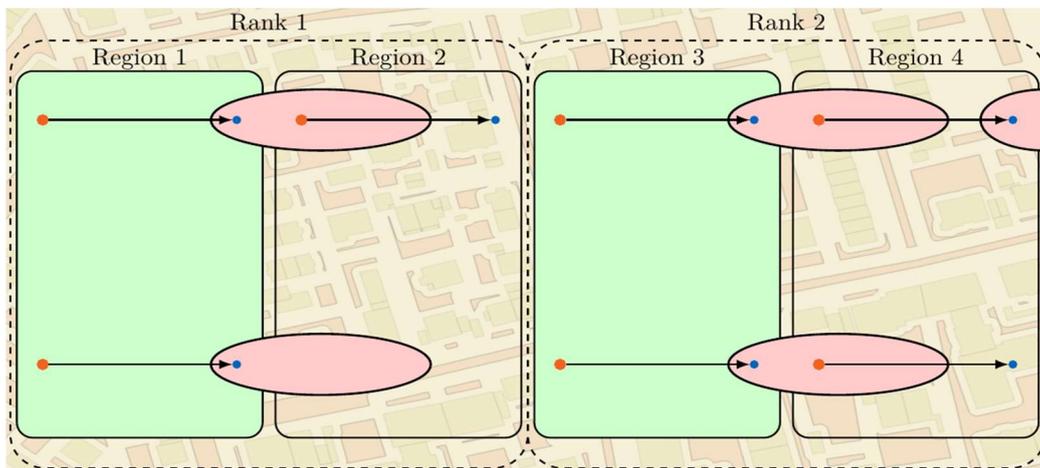


Abbildung 50: Dritte äußere Iteration in der Kopplung

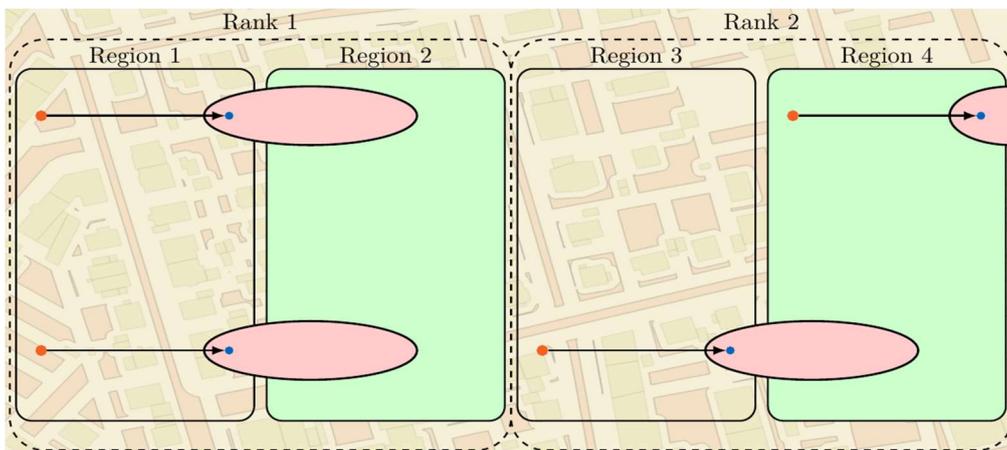


Abbildung 51: Vierte äußere Iteration in der Kopplung

Die endgültige Lösung des Problems, die mit PFLOTRAN und urbs durchgeführt wurde, ist in Abbildung 52 dargestellt, wobei die Entnahmebrunnen durch die Kreise und die Schluckbrunnen durch die Kreuze gekennzeichnet sind. Das Ergebnis der gekoppelten Simulation beweist, dass die parallele Optimierung mit Überprüfung der externen Randbedingungen funktioniert.

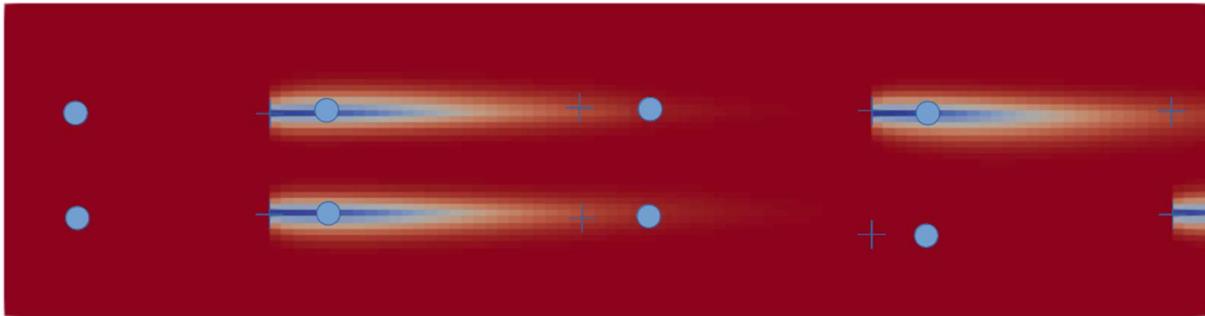


Abbildung 52: Endgültige Lösung des gekoppelten Problems

II.1.3 Optimierung, Parallelisierung und Portierung der Simulationsumgebung auf Hochleistungsrechner (BADW-LRZ)

Für die Durchführung der Rechnung größerer Modelle und gekoppelter Simulationen war es erforderlich, die benötigten Softwarekomponenten bzgl. der Nutzung auf den High Performance Systemen zu evaluieren. Performance-Tests wurden auf den Systemen des LRZ, wie dem CoolMUC-3 und dem SuperMUC-NG durchgeführt.

II.1.3.1 Parallele Performance von PFLOTRAN

II.1.3.1.1 Performance Tests und GCS-Projekt

Die Beschleunigung der Simulation bei paralleler Rechnung auf vielen Prozessen wurde mithilfe verschiedener Test-Meshes erfasst. Der Einfluss von I/O (Input/Output) Vorgängen wurde dabei gesondert betrachtet. Durch Ermittlung der besonders zeitintensiven Schritte (vor allem Set-Up-Phase und Mesh-Dekomposition) konnten Bottlenecks in der Abarbeitung erfasst und teilweise behoben werden.

Auf Basis der umfangreichen Tests konnte erfolgreich ein Antrag auf Rechenzeit auf dem SuperMUC-NG gestellt werden.

Das Scaling zeigt einen Einbruch der Effizienz ab einer bestimmten Anzahl von Prozessen (siehe Abbildung 53), die von der Größe des Meshes abhängig ist und nach unseren Analysen vor allem dadurch bedingt ist, dass das Set-Up zu Beginn der Simulation, das insbesondere die Dekomposition des Meshes und die Verteilung der Prozesse mit wachsender Anzahl von MPI-Ranks komplexer wird und einen nennenswerten Teil der Simulationszeit einnimmt, während die Berechnung der Propagation der Gleichungen sehr effizient parallel läuft. Durch die kurze Gesamtlaufzeit der Test-Simulation fiel dieser Faktor vergleichsweise stark ins Gewicht.

Tabelle 9: Laufzeit- und Effizienzmessungen von PFLOTRAN für die Test-Meshes auf SuperMUC-NG

	a) $6 \cdot 10^6$ mesh elements, 62.5 days			b) $9 \cdot 10^6$ mesh elements, 365 days		
#cores	absolute timing (s)	speedup	Performance per core [MFLOP/s]	absolute timing (s)	speedup	Performance per core [MFLOP/s]
1	53400	1.00	645	-	-	-
2	21798	2.45	718	-	-	-
4	13461	3.96	706	-	-	-
8	6825	7.8	679	-	-	-
16	3304	16.1	601	-	-	-
32	1909	28.0	610	-	-	-
64	949	56.2	599	-	-	-
128	489	109.2	480	19787	1.00	-
256	292	182,6	410	9151	2.16	-
512	157	340.9	337	4761	4.15	470
1024	92	581.2	331	2493	7.84	460
2048	66	810.1	311	1584	12.49	290
4096	42	1279.7	-	863	22.9	-
8192	32	1668.8	-	545	36.3	-
16384	36	1483.3	-	390	50.73	-
32784	-	-	-	448	44.17	-

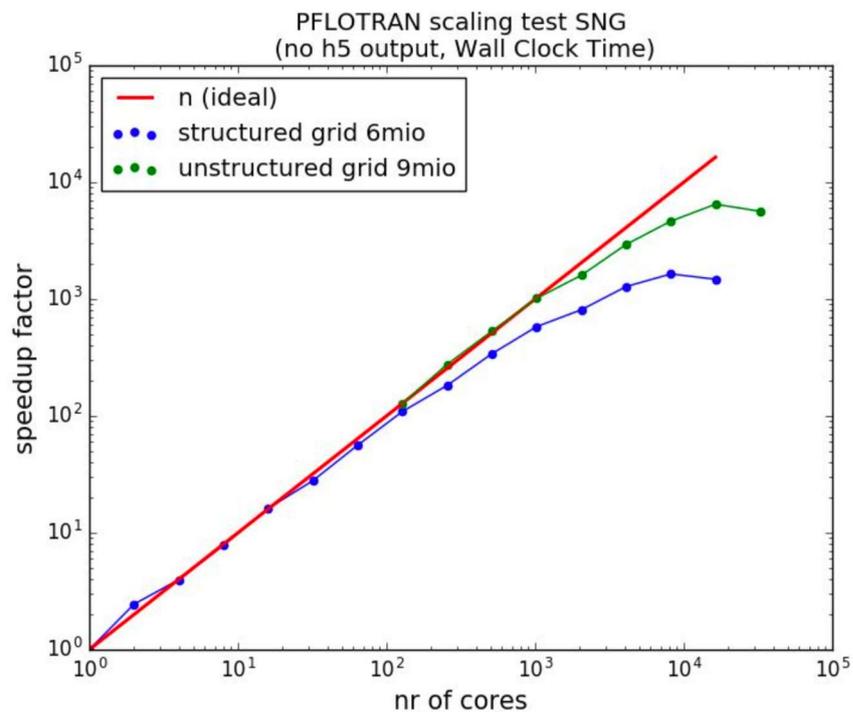


Abbildung 53: Grafische Darstellung der Laufzeit- und Effizienzmessungen von PFLOTRAN für die Test-Meshes auf SuperMUC-NG aus Tabelle 9

II.1.3.1.2 Evaluationen zur Modellerstellung und optimalen Konfiguration

Die Konvergenz der simulationsinternen Zeitschritte wurde beim Testen neuer Modelle besonders berücksichtigt, um eine Abschätzung für realistische Laufzeiten zu bekommen und den Prozess der Modellerstellung zu unterstützen. Mithilfe von Auswertungsskripten, konnten die verschiedenen zur Verfügung stehenden Algorithmen zur Lösung der Gleichungssysteme schnell auf ihre Konvergenz und Geschwindigkeit hin verglichen werden. Es wurden die in PFLOTRAN implementierten Solver GMRES/BCGS und ASM/BJACOBI jeweils kombiniert miteinander verglichen. Reproduzierbare relevante Unterschiede für die getesteten Modelle wurden nicht erkannt.

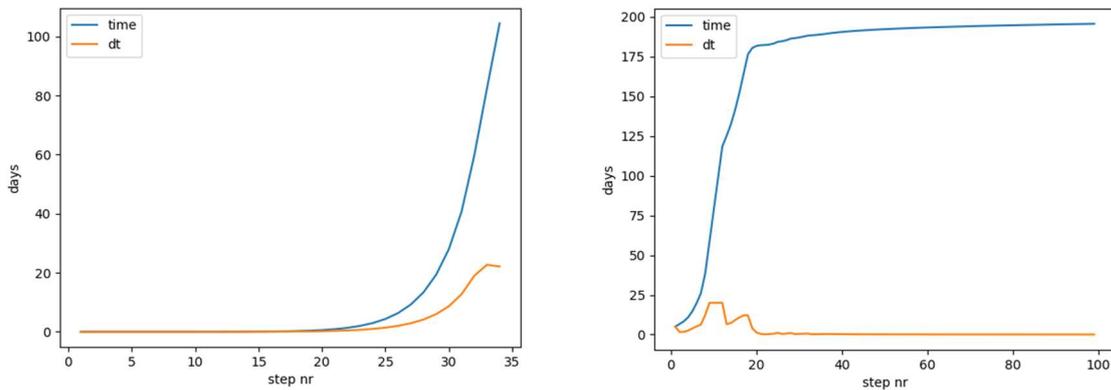


Abbildung 54: Evolution des internen Zeitschrittes dt (orange) und der in der Simulation verstrichenen Gesamtzeit time (blau) für zwei verschiedene Konfigurationen. Links: Gewünschtes Verhalten mit bis kurz vor Simulationsende monoton ansteigendem Zeitschritt und schnellem Erreichen der angegebenen Endzeit. Rechts: Numerische Instabilität erzeugt ein Einbrechen des Zeitschritts und ein Stagnieren des Simulationsfortschrittes.

Die Benutzung der Default-Einstellungen schien daher gerechtfertigt.

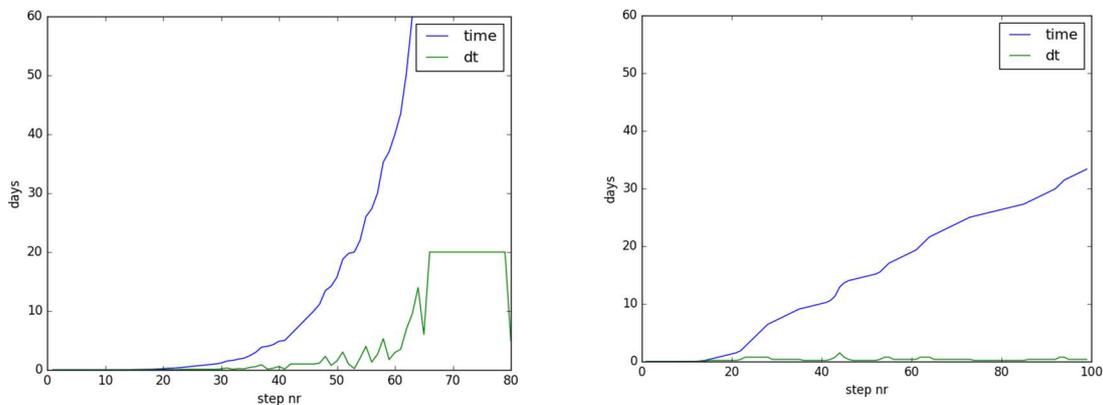


Abbildung 55: Evolution des internen Zeitschrittes dt (grün) und der in der Simulation verstrichenen Gesamtzeit time (blau) für zwei verschiedene Modelle mit unterschiedlicher Brunnenpositionierung.

Besonders stark auf die Laufzeit wirkt sich auch die zeitliche Auflösung in der Simulation aus. Dieser ist zu Anfang klein gewählt und wird dann im Laufe der Simulation anhand der Konvergenzkriterien angepasst (siehe Abbildung 54). Ein größerer Zeitschritt führt dabei zu einem zügigen Abschluss der Simulation, während numerische Instabilitäten den Zeitschritt kollabieren lassen und zu einem de-facto Stillstand der Simulation führen können (siehe Abbildung 54).

Neben fehlerhafter oder ungünstiger Zeitschrittconfiguration zeigte sich, dass vor allem Fehler im Mesh, wie übermäßig kleine Strukturen oder ungünstige Brunnenpositionierung (siehe Abb. 55) zu solchen Instabilitäten führen. Auf diese Weise konnten wichtige Erkenntnisse zur Erstellung der Modelle gewonnen werden.

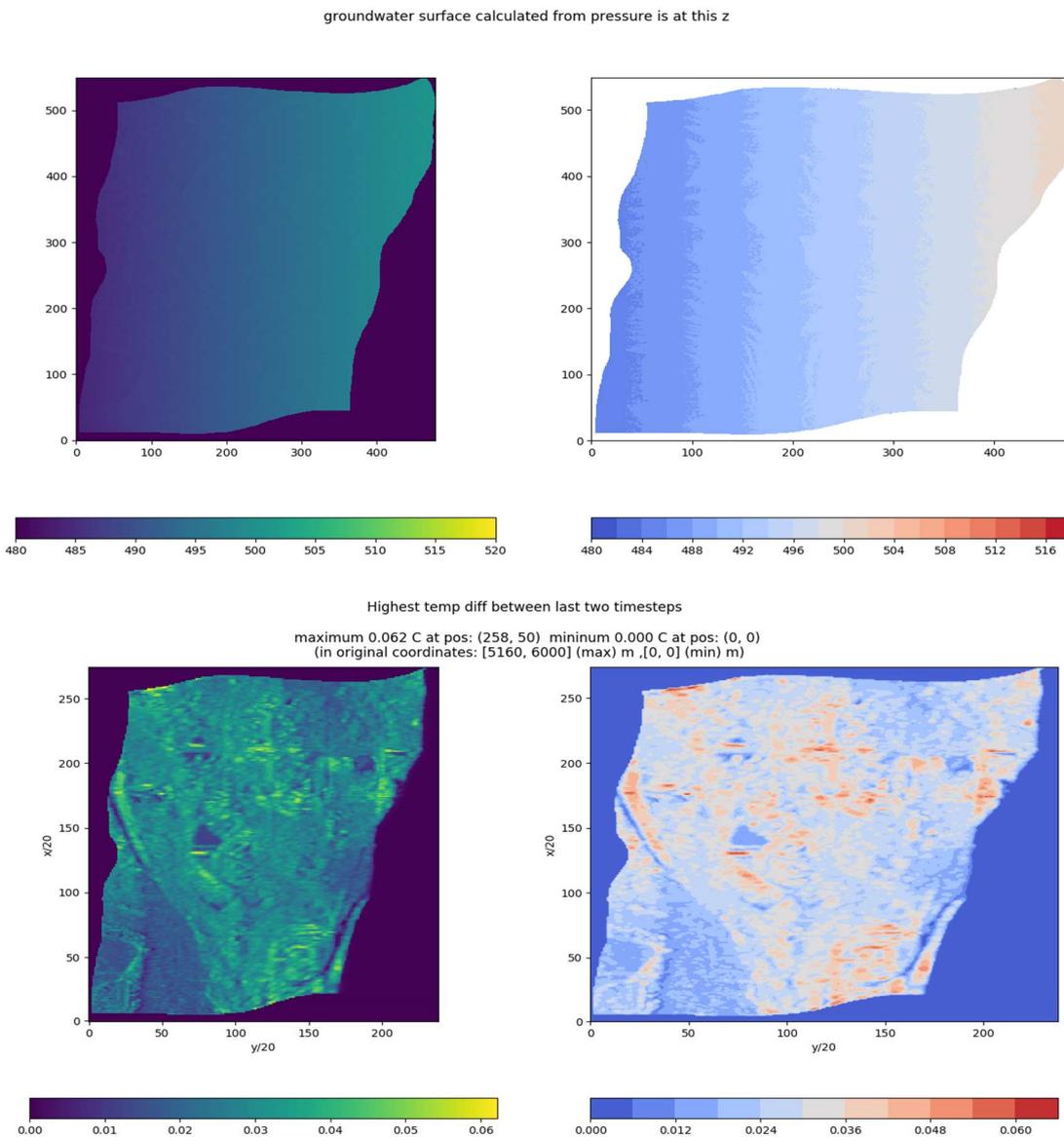


Abbildung 56: Temperatur- und Druckgradienten-Plots können helfen, problematische Stellen im Modell zu erfassen und Plausibilitäts-Checks für das physikalische Modell erleichtern.

II.1.3.2 Parallele Modellkalibration mit PEST

Als Modellkalibration bezeichnet man die indirekte Herleitung von Parametern, z.B. hydrogeologischen oder thermischen Leitfähigkeiten. In der Regel werden zahlreiche Modellläufe mit unterschiedlicher Parametrisierung mit Beobachtungsdaten verglichen. Ziel ist es, die modellierten Werte immer mehr den Beobachtungsdaten anzunähern, also den Fit zu verbessern (siehe Abbildung 57).

Das Projekt benutzte die Software PEST (Parameter ESTimation), welches das seit mehreren Jahren am meisten verbreitete Programm zur hydrologischen Kalibration ist. Da anders als bei anderer Software für den Wasser- und Stofftransport für das Programm PFLOTRAN noch kein PEST-Adapter vorhanden ist, musste über zahlreiche Skripte die Kommunikation zwischen PEST und PFLOTRAN, sowie die Parametrisierung und die Formatierung der Beobachtungsdaten gesteuert werden.

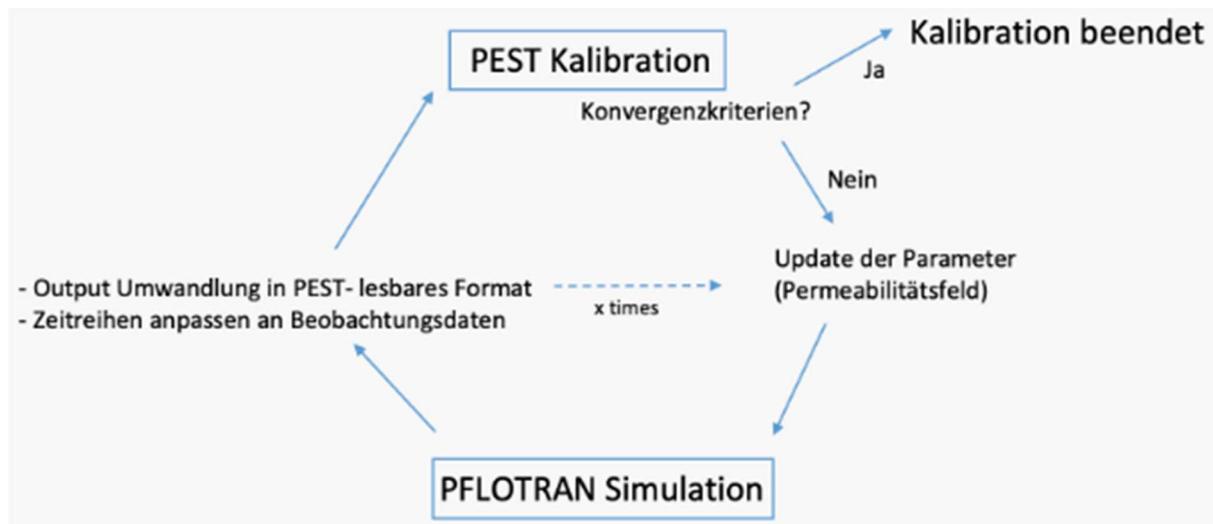


Abbildung 57: PEST workflow: Bis zum Erreichen eines Konvergenzkriteriums wird die PFLOTRAN Simulation mit stets verändernden Parameterfeld iteriert. Dazwischen laufen Unterstützungsskripte zur Formatierung und Zeitreihenanpassung.

Die beiden Hauptvarianten von PEST, GLM (originales PEST) und IES (PEST mit einem "iterative ensemble smoother") wurden in einer Testphase hinsichtlich der Performance verglichen, wobei GLM für unser Problem die deutlich schnellere Konvergenz zeigte.

Für die Parallelisierung benutzt PEST einen Manager-Worker Ansatz (siehe Abbildung 58). Der Manager kommuniziert über TCP/IP mit den Workern und verteilt Aufgaben (in diesem Fall speziell parametrisierte PFLOTRAN Läufe), die Worker liefern ihre Ergebnisse zurück. Die Eigenschaften des Problems sind "embarrassingly parallel", die Laufzeit der Kalibrierung kann also effizient reduziert werden. Ein Großteil des Workflows musste ebenfalls durch Unterstützungsskripte selbst erarbeitet werden (z.B. Erstellung der Worker, Steuerung der Kommunikation).

II.1.3.3 Umgebung auf SuperMUC-NG für gekoppelte Simulationen mit urbs und preCICE

Für die Erstellung einer Python-Umgebung, die die nötigen Module für urbs und die gekoppelte Simulation enthält, wurde eine Spack-Umgebung (<https://spack.readthedocs.io>), eine so genannte "environment" entwickelt, die die sonst übliche Conda-Umgebung ersetzen kann. Bei der Verwendung von Conda kam es zu Inkompatibilitäten der zugrundeliegenden MPI-Versionen mit den optimierten proprietären Versionen auf den HPC-Systemen des LRZ. Verwendet wurde hierfür das neue und noch in Erprobung befindliche Konzept des "User-Spicks", mithilfe dessen Nutzer auf dem CoolMUC-3 und dem SuperMUC-NG eigene Software mithilfe von Spack-Rezepten kompilieren und dabei, soweit möglich, auf die bereits zur Verfügung gestellten Module zurückgreifen können.

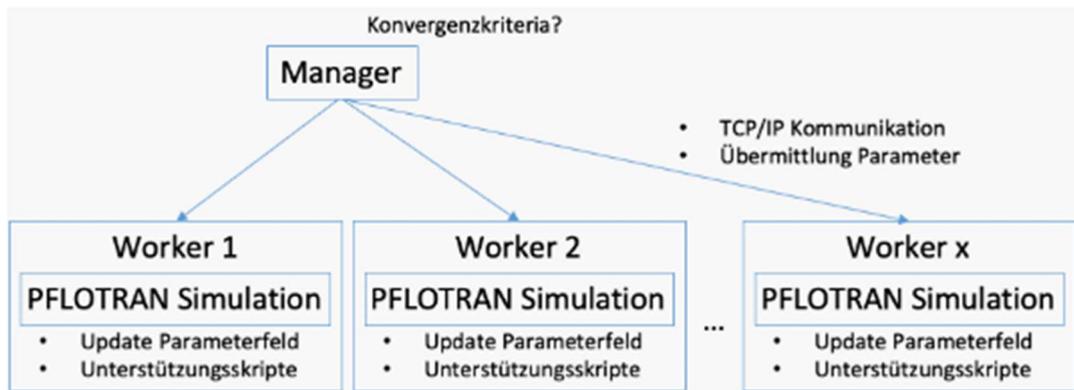


Abbildung 58: Workflow der parallelen PEST-Kalibrierung

Evaluiert wurde auch die Verwendung von auf Docker basierenden Containern, die mithilfe der auf SNG verfügbaren Software Charliecloud auf den HPC-Systemen laufen können. Hier gab es jedoch ebenfalls Schwierigkeiten mit der Anbindung an das für SNG optimierte MPI, die eine Rekompilierung der Images auf dem System erforderlich machten. Dieser Umstand nivelliert die Vorteile des container-basierten Ansatzes, sodass die Vorteile der auf Spack basierenden Installation, wie Selbst-Dokumentation und einfachere Handhabung der Umgebung bei der Ausführung, überwogen.

Das zunächst auf dem CoolMUC-3 getestete Konzept eines Spack-Systems für Nutzer wurde mittlerweile auf den SNG übertragen. So können Nutzer anhand ihrer vorbereiteten Umgebungen (environments) ihren Softwarestack auf dem SuperMUC-NG verwalten und pflegen. Durch das GeoKW-Projekt wurden nützliche Erfahrungen gesammelt, wie HPC-Nutzer mit komplexen Software-Stacks von dieser Technologie profitieren können.

PreCICE steht dank des Projektes seit 2021 als fertig kompiliertes Software-Modul auf den HPC-Systemen des LRZ zur Verfügung.

Während des Projektes wurde auch eine Gurobi-Lizenz auf dem SuperMUC-NG zur Verfügung gestellt, wodurch das Aufsetzen der Optimierungsmodelle unter Verwendung der performanten Solver vereinfacht wurde.

Zur Code-Versionierung, Kollaboration und Synchronisation von angepassten Codes, Skripten und Spack-Environments, wurde das am LRZ gehostete Tool Gitlab genutzt.

Für Tests, Vorarbeiten und Koordination wurde für das Projekt eine virtuelle Maschine in der LRZ Compute-Cloud eingerichtet.

II.1.4 Webapplikation als Frontend zur Nutzung der Ergebnisse

Wie in I.3.2 erläutert, ist im Rahmen des Forschungsprojekts GEO.KW eine Webapplikation entwickelt worden, um die Projektergebnisse darzustellen und für die Anwendung in der Praxis zugänglich zu machen. Die Web-App ist auf spezielle Nutzergruppen zugeschnitten und wurde deshalb im engen Austausch mit den Projektpartnern, assoziierten und weiteren interessierten Partnern konzipiert und während der Entwicklung durch Feedback-Schleifen angepasst. Aktuell wird die Web-App am Leibniz Rechenzentrum gehostet, womit eine hohe Verfügbarkeit und fortlaufende Betriebssicherheit gewährleistet sind. Sie ist über eine eigene URL abrufbar und durch ein Benutzermanagement-System gesichert, da die Dienste erst durch eine persönliche Registrierung beim Administrator freigeschaltet werden. Eine weiterführende Verwendung und Einbindung in kommunale oder regionale IT-Infrastrukturen werden aktuell in einigen potenziellen Anwendungsgebieten diskutiert (siehe II.4).

II.1.4.1 Anwendungsfelder der Web-Applikation

Die Webanwendung ist für die Nutzung der Projektergebnisse in drei übergeordneten Themenfeldern entworfen worden:

1. Grundlage zur Entwicklung von kommunalen bzw. quartierbezogenen Energiestrategien

2. Informationsbasis für die Genehmigungspraxis
3. Bereitstellung von Planungsgrundlagen für Fachplaner

Grundlegend stehen durch die hochaufgelöste stadtweite Energiesystemoptimierung mögliche Ausbauziele für die thermische Grundwassernutzung in verschiedenen Szenarien zur Verfügung, die eine wichtige Basis für die kommunale Energieplanung bilden. Zum einen ist durch das Referat für Klima und Umweltschutz der Stadt München die Nutzung der Ergebnisse für die strategische Energieplanung vorgesehen, zum anderen können die gebäudescharfen Daten aber auch im integrierten Quartiersansatz Verwendung finden und so aufwändige initiale Machbarkeitsstudien ersetzen. Zudem können die hier erzeugten Grundlagendaten, wie die dynamische Potenzialanalyse für die thermische Grundwassernutzung auch direkt in andere Energiestrategie-Werkzeuge integriert werden, wie dies für das „Modell München“ der SWM der Fall ist.

Im zweiten Themenfeld, der Genehmigungspraxis, profitieren die zuständigen Stellen an der unteren Wasserbehörde der Stadt und am Wasserwirtschaftsamt München zunächst von der aufbereiteten Datenbasis zu Grundwasserständen, Temperaturen und existierenden thermischen Nutzungen. Diese Daten liegen meist in getrennten Datenbanken und Ablagen vor und auch nicht qualitätskontrolliert, standardisiert und in einem System integriert. Dies wird durch die GEOKW-Web-App gewährleistet. Da an den Behörden die Genehmigung von thermischen Grundwassernutzungen erfolgt, erleichtert und beschleunigt eine qualitätsgeprüfte und ganzheitlich dargestellte Datenbasis den Genehmigungsprozess deutlich. Durch die Simulationsergebnisse des Projekts wird die zur Verfügung stehende Datenbasis mit zusätzlicher Information ergänzt. Neue Anträge können mit den umgesetzten Entwicklungen auf Basis von den im Projekt erzeugten Simulationsergebnissen begutachtet werden und die Risikoabschätzung von negativen thermischen Beeinflussungen bestehender Anlagen kann detaillierter vorgenommen werden. Für die Genehmigungspraxis konnte so ein entscheidender Schritt in Richtung eines ganzheitlichen Grundwassermanagements umgesetzt werden. Durch eine verstetigte Nutzung und ein regelmäßiges Update der Web-App ist auch die Kontrolle im Sinne des vorsorgenden Trinkwasserschutzes sichergestellt. Weiterentwicklungen, wie die Schaffung einer Schnittstelle zur digitalen und vereinheitlichten Berichterstattung für Nutzer und die automatische Aufnahme dieser Daten in das Grundwassermanagement werden derzeit durch die Fortschreibung der Projektergebnisse bearbeitet.

Ein weiteres Anwendungsfeld ergibt sich durch die Bedürfnisse von Fachplanern. Aktuell ist die initiale Beurteilung der Machbarkeit von Grundwasserwärmepumpen durch die aufwändige Datenrecherche zu Beginn eines Projekts noch eine Hürde für viele Bauherren, die das Risiko dieser Anfangsinvestition scheuen. Durch die jetzt in der Web-App veröffentlichten Planungsgrundlagen werden die Beurteilungen von Fachplanern auf identischen Datensätzen basieren, die auch der Genehmigungsbeurteilung zugrunde liegen. So werden initiale Abschätzungen der Machbarkeit günstiger und es verringert sich zugleich das Risiko von Unsicherheiten bei der Genehmigung.

II.1.4.2 Aufbau und Funktionen der Web-Applikation

Grundlegend ist die Web-App in vier Themenbereiche gegliedert, die jeweils verschiedene Funktionen und Daten bereitstellen (siehe Abbildung 59). Der Zugriff erfolgt über die Startseite, ein Wechsel zwischen den verschiedenen Themenbereichen kann aber auch nach Auswahl eines Bereiches über die Kopfzeile erfolgen.



Abbildung 59: Startseite der Web-Applikation mit vier Kacheln zur Organisation der Hauptfunktionen.

Im Zuge der Modellerstellung war es nötig die bestehenden Datensätze hinsichtlich ihrer Konsistenz, Plausibilität und Organisation zu überarbeiten. Sie werden zusammen mit den Simulationsergebnissen als Grundlagendaten in der Web-App zugänglich gemacht. Neben der Visualisierung von räumlichen und zeitlichen Daten ist auch die Bereitstellung der Daten an Dritte durch den registrierten Fachnutzer realisiert worden. In einem klassischen Map-Viewer können Flächendaten angezeigt und anschließend mit Hilfe eines Rechtecks, welches manuell zur Festlegung des Arbeitsgebiets des Nutzers verwendet wird, ausgeschnitten werden. Innerhalb der ausgewählten Fläche kann der Nutzer verschiedene Datensätze für einen Export bündeln und direkt für eine lokale Weiterverwendung z.B. in GIS-Programmen oder Detailsimulationen herunterladen, oder den Export an eine beliebige E-Mail-Adresse versenden (siehe Abbildung 60). Die vom Server versendete Mail enthält einen vorgefertigten Text, Beschreibungen der Datensätze und eine Verpflichtungserklärung zur Nutzung der digitalen Daten, die vom Empfänger unterschrieben, zurückgesendet werden muss. Dies erleichtert und beschleunigt die Beantwortung von allen grundwasserrelevanten Anfragen, wie z. B. die Anfragen zur Detailplanung von Systemen zur thermischen Grundwassernutzung, insbesondere bei der Planung größerer Anlagen.

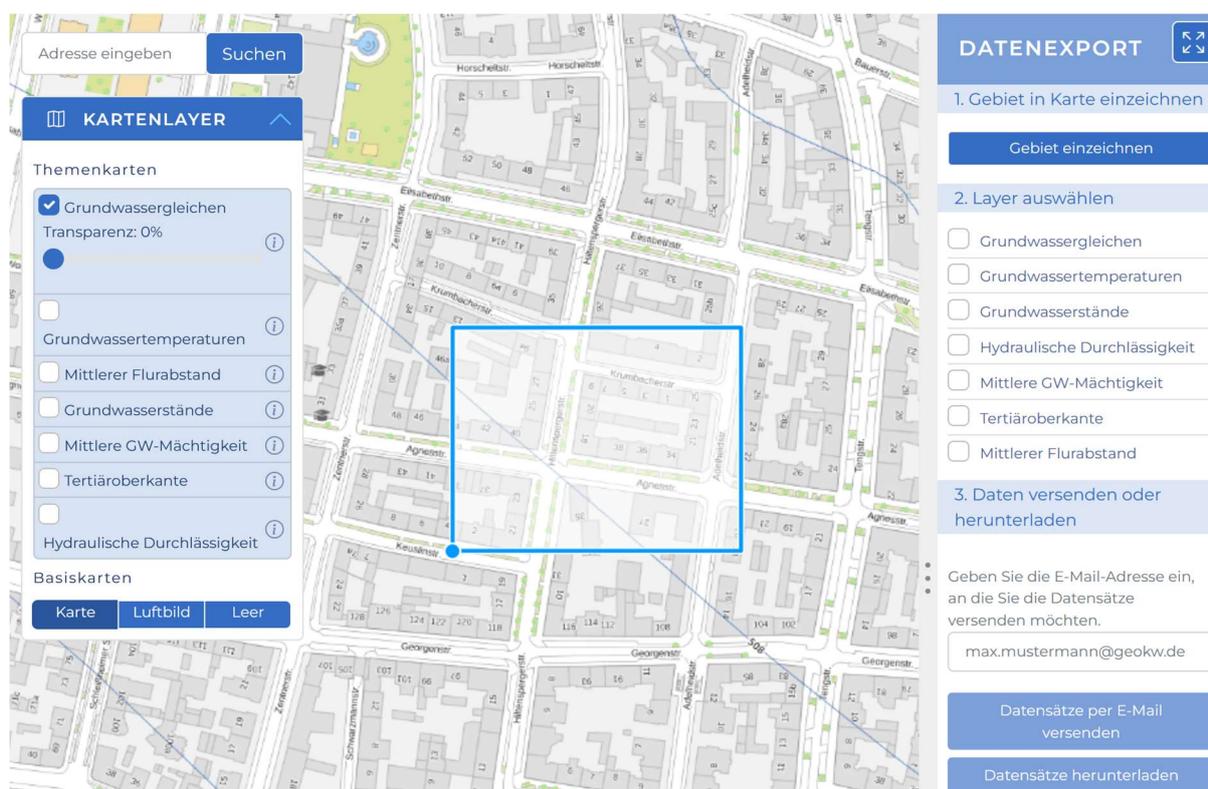


Abbildung 60: Download oder Versand von Grundwasserdaten mittels Rechteck Auswahl.

Ein besonderer Fokus beim Design der Web-App wurde auf die kombinierte Darstellung von räumlich und zeitlich aufgelösten Daten gelegt. In der Praxis besteht oft die Schwierigkeit, dass Informationen zur Dynamik, z.B. des Grundwasserstands, aber zugleich auch zur Grundwasserfließrichtung nötig sind, um Fragestellungen beantworten zu können. Normalerweise werden zur Darstellung von räumlichen und zeitlichen Daten unterschiedliche Programme bzw. Datenbanken benötigt, wodurch ein schneller Zugriff auf die relevanten Informationen und eine zusammenhängende Beurteilung oft erschwert wird. Die Zusammenstellung der räumlichen und zeitlichen Informationen bedeuten einen erheblichen Aufwand und benötigt viel Zeit. Daher wurde für das Grundwassermanagement darauf geachtet diese Daten ganzheitlich und aufbereitet in einem System zur Beurteilung zur Verfügung zu stellen.

Im Themengebiet "Messstellen" können sowohl die Zeitreihen der Grundwasserganglinien und der Grundwassertemperaturen als auch der Lastkurven der thermischen Nutzungen in einer interaktiven Abbildung dargestellt werden (siehe Abbildung 61). Da diese Datensätze mit jeweils zur Beurteilung relevanten Hintergrunddaten verknüpft sind, wird zusätzlich unter der Zeitreihe eine Metadaten Tabelle angezeigt, die den Datensatz entsprechenden weiterführende Informationen enthält. Innerhalb der Abbildung kann der Nutzer Zoomen, Momentaufnahmen extrahieren, oder auch Datensätze sichtbar

oder unsichtbar schalten, um z.B. Abbildungen für Berichte zu generieren. Zusätzlich sind die Zeitreihen in einem einheitlichen Format als csv-Datei lokal downloadbar. Die Lastkurven der existierenden thermischen Nutzungen sind zum einen dringend erforderlich zur Planung und Beurteilung von neuen Anlagen sowie zur Quantifizierung des vorhandenen Potenzials. Dieser Datensatz stand bis jetzt nicht in seiner Vollständigkeit in der Stadt zur Verfügung und wurden als neuer Datensatz innerhalb des GEO.KW-Projekts erarbeitet. Für thermische Grundwassernutzungen unter einer jährlichen Wassermenge von 100.000 Kubikmetern pro Jahr besteht in Bayern keine Überwachungspflicht. Daher wurden die Daten aus den Genehmigungsbescheiden der Anlagen herangezogen, mit den Ergebnissen der stadtweiten Simulation des Wärmebedarfs verschnitten und anschließend auf Plausibilität geprüft, um den dargestellten Datensatz zu erzeugen. Für Nutzungen über einer jährlichen Wassermenge von 100.000 Kubikmetern pro Jahr, die in die Überwachungspflicht fallen, wurden die übermittelten Jahresberichte digitalisiert und entsprechend die Monitoringdaten der Betreiber eingesetzt. Da diese Daten leider sehr unregelmäßig übermittelt werden und die Qualität der Daten stark variiert, sollte dieser Datensatz allerdings nicht ohne das entsprechende Hintergrundwissen verwendet werden.

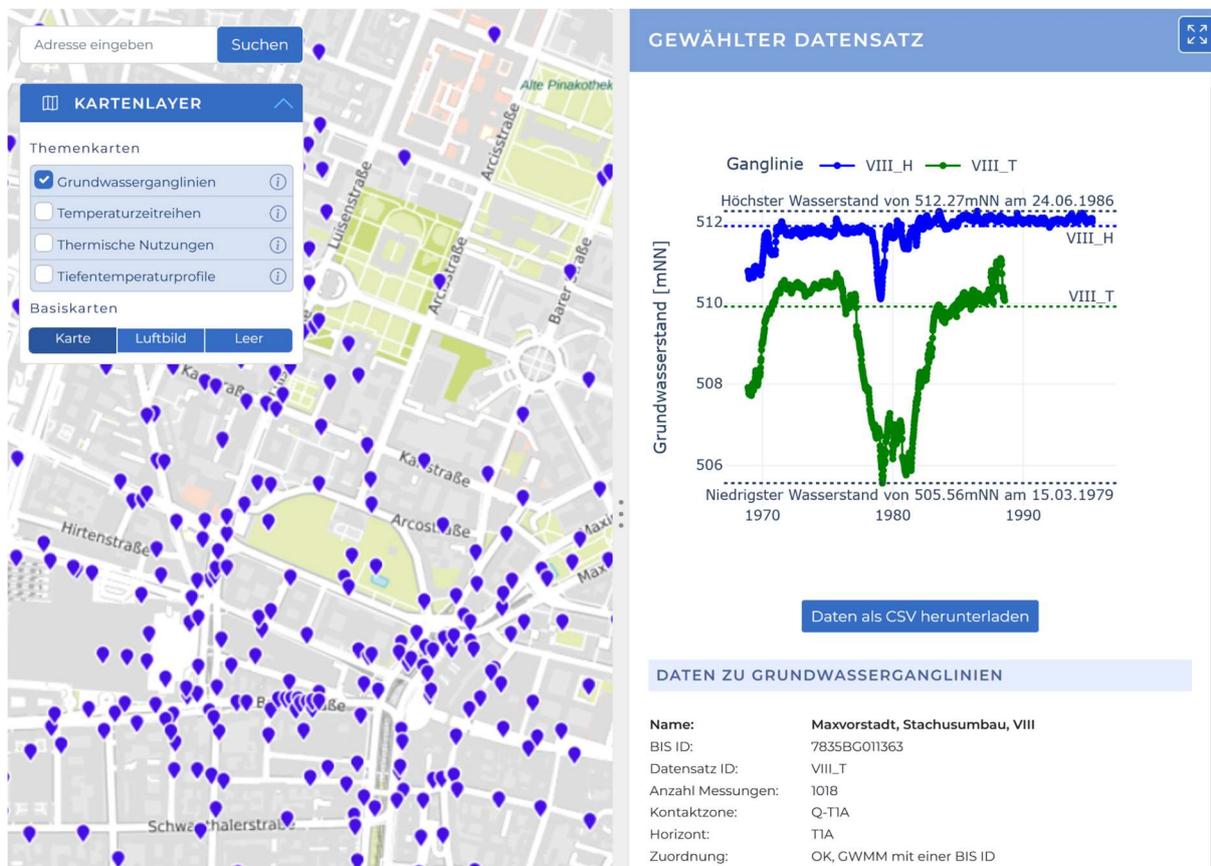


Abbildung 61: Darstellung verschiedener Grundwasserganglinien mit Metadaten im Themenbereich "Messstellen".

Als zeitlich unabhängigen Datensatz stellen wir hier zusätzlich noch die vom Lehrstuhl für Hydrogeologie gemessenen Tiefentemperaturprofile dar. Im Zuge von mehreren Projekten und studentischen Abschlussarbeiten wurde ein großer Datensatz von Temperaturmessungen zusammengetragen, bei dem jeweils zu unterschiedlichen Zeiten jeden Meter in der Wassersäule von Messstellen die Temperatur gemessen wurde.

Ein wesentlicher Baustein der Web-App zur Unterstützung der Genehmigungspraxis und Machbarkeitsanalyse, sowie zur Unterstützung der Planung ist das Brunnenplanungstool. Hier werden die im Projekt aufbereiteten Datensätze mit den Simulationsergebnissen vereint, um umfassend alle relevanten Informationen zur Beurteilung von neuen Anlagen zur Verfügung zu stellen. Dies setzt voraus, dass der Nutzer relevante Angaben zur geplanten Anlage machen kann. Initial werden die Standpunkte der geplanten Förder- und Schluckbrunnen auf der Karte eingetragen. Dabei können bis

zu fünf Förderbrunnen und fünf Schluckbrunnen pro Berechnung gesetzt werden. In der Menüführung werden nach der Bestimmung der Brunnenpositionen grundlegende Anlagendaten, wie Heiz- oder Kühlfall und maximale Verdampfer-Leistung der Wärmepumpe bzw. maximale Kühlleistung der Kälteanlage abgefragt, die auch auf Basis von Gebäudetyp Vorlagen getroffen werden kann. So kann der Fachanwender auch bei allgemeineren Anfragen schnell die initiale Machbarkeit vor Ort abschätzen. Hierbei werden die eingegebenen Kilowatt Leistung in den Nenndurchfluss am quellenseitigen Wärmetauscher einer Grundwasser-Wärmepumpe mit der gängigen Konversionsrate von 0,7 L/s pro 10 kW Verdampferleistung umgerechnet (siehe VDI 4640 Blatt 2). Bei genauerem Kenntnisstand zur geplanten Anlage kann im folgenden Menüpunkt das Lastprofil in Form von monatlichen Pumpraten und einer konstanten Temperaturspreizung eingetragen werden. Auf Basis der Eingaben zur Leistung im vorherigen Menüpunkt sind diese Angaben aber bereits durch die Berechnung einer Standardlastkurve unter Berücksichtigung des Anlagentyps vorausgefüllt. Falls mehrere Förder- oder Schluckbrunnen gesetzt wurden, kann hier auch, falls bekannt, eine anteilmäßige Verteilung der Lasten eingetragen werden.

Durch das Aufrufen des nächsten Menüpunkts wird die Brunnenplanung durchgeführt und die Ergebnisse dargestellt (siehe Abbildung 62). Auf der Karte werden die Temperaturanomalien anhand von 1 K-, 2 K-, und 3 K-Isothermen gezeigt, die von den Schluckbrunnen ausgehen. Diese werden basierend auf der LAHM-Methode analytisch für jeden Monat und für den Steady State gemäß dem vorher eingetragenen Lastprofil berechnet (Umweltministerium Baden-Württemberg, 2009). Die analytischen Berechnungen der einzelnen Zeitschritte werden auf Basis des zeitlichen Superpositionsprinzips durchgeführt. Die dargestellten thermischen Zustände repräsentieren daher jeweils den Fall, bei dem sich durch dauerhaftes Einleiten mit der jeweiligen Pumprate ein quasi-stationärer Zustand ausgebildet hat. Der Nutzer sollte somit bei manuellen Eingaben der Pumpraten monatliche Mittelwerte eintragen, um das Temperaturfeld zu berechnen. Bei mehreren Schluckbrunnen, wie in Abbildung 62 zu sehen, kommt zudem eine räumliche Superposition hinzu. Eine Veröffentlichung zu dieser im Projekt entwickelten Verwendung der LAHM-Methode ist in Bearbeitung. Die einzelnen Zustände können über ein Dropdownmenü im Ergebnis-Abschnitt aufgerufen werden. Unter den Ergebnissen, die auf der rechten Seite in der App erscheinen, werden zusätzlich die hydrogeologischen Basisdaten zum Standort gezeigt, die für die Berechnung maßgeblich waren. Neben der Berechnung der Temperaturanomalie werden unter dem Punkt "Bewertung der Machbarkeit" weitere für eine Beurteilung wichtige Informationen zusammengefasst. Thematisch wird die Bewertung in einen thermischen und einen hydraulischen Teil untergliedert. Im thermischen Abschnitt wird geprüft, ob die geplante Anlage existierende Anlagen thermisch negativ beeinflusst. Falls dies der Fall ist, wird zusätzlich die Zeitspanne in monatlicher Auflösung angezeigt. Zusätzlich werden die thermischen Beeinflussungen auf die geplante Anlage selbst analysiert. Dabei wird ebenfalls auf Basis der LAHM-Methode berechnet, ob ein thermischer Kurzschluss zwischen den geplanten Förder- und Schluckbrunnen zustande kommt und wieviel Grad das thermische Feedback jeweils pro Monat beträgt. Des Weiteren wird auf Basis von großräumigen Simulationsergebnissen des thermischen IST-Zustands abgeschätzt inwiefern die geplanten Förderbrunnen von schon bestehenden Anlagen positiv oder negativ thermisch beeinflusst werden. Abschließend werden noch Kennwerte gegeben, die den Effizienzgewinn beschreiben, der durch die bestehende suburbane Wärmeinsel in München hervorgerufen wird. Im zweiten Bewertungsabschnitt zur hydraulischen Machbarkeit werden Kennwerte zur Leistung der Brunnen, wie technisch-gesetzlich umsetzbare Entnahme im Förderbrunnen und Aufstau im Schluckbrunnen, ausgegeben. Zusätzlich wird auch auf hydraulischer Basis der Brunnenabstand bewertet. Die einzelnen bewertungsrelevanten Punkte werden durch ein Ampelsystem mit Indikatoren versehen, um eine einfache Interpretation der Ergebnisse zu unterstützen.

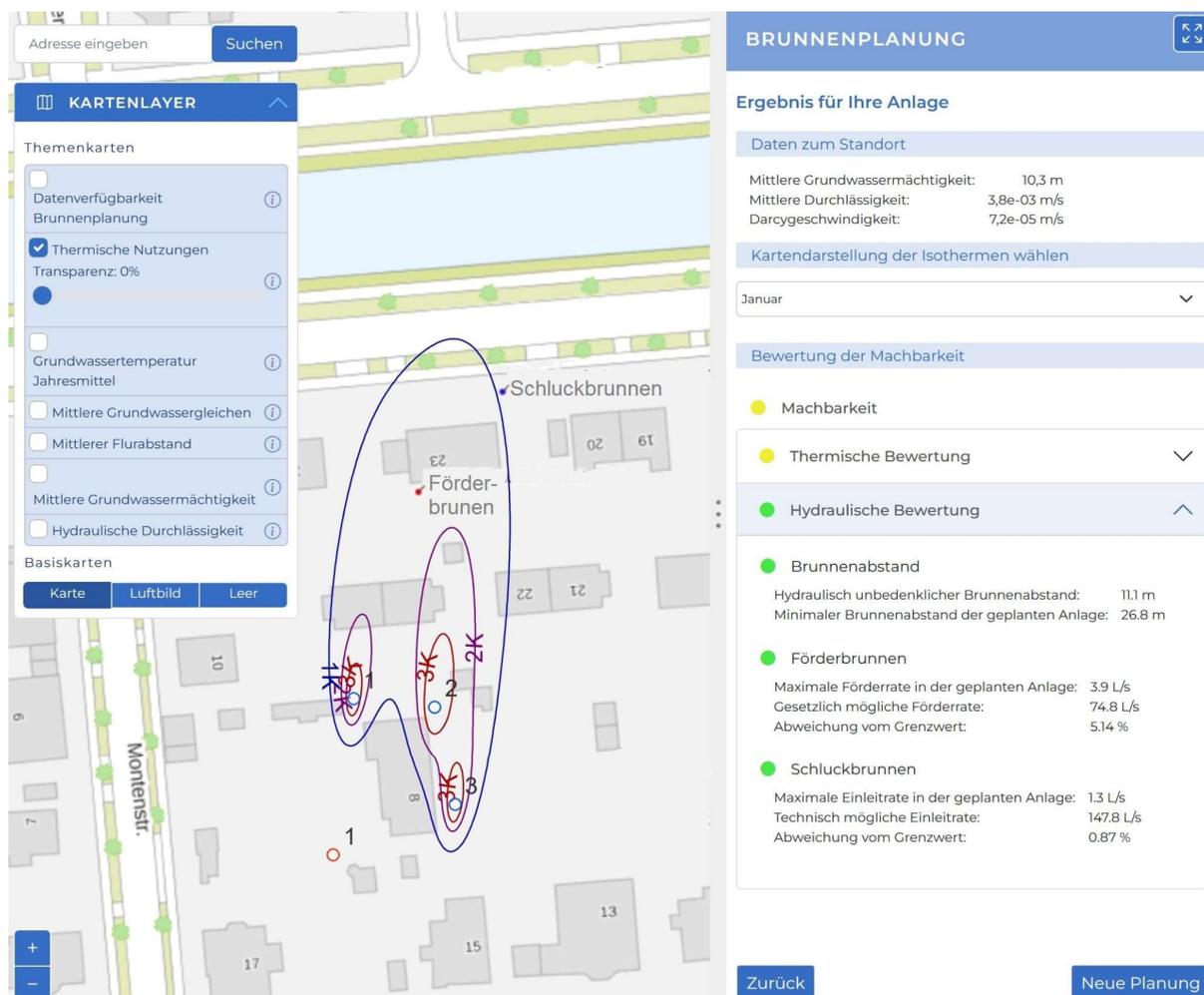


Abbildung 62: Ergebnis einer Brunnenplanung mit einem Förderbrunnen und 3 Schluckbrunnen mit Bewertung der Machbarkeit.

Im Themengebiet "Energiesystem" werden die Ergebnisse der Energiesystemoptimierung dargestellt (siehe Abbildung 63). Analog zu der Zeitreihendarstellung im Themengebiet "Messstellen" können die Auswertungen per Mausklick auf den jeweiligen Stadtteil aufgerufen werden. Über das Menü Kartenlayer können die Datensätze zu den verschiedenen Optimierungsszenarien aufgerufen werden. Nach dem Anwählen eines Stadtteils werden auf der rechten Seite Abbildungen zur Analyse der optimalen Wärme- und Kälteversorgung dargestellt. Zum einen wird ein Tortendiagramm angezeigt, das den Anteil der nach der Optimierung installierten Heizungstechnologien zeigt, zum anderen wird in einem Säulendiagramm die je Technologie erzeugte Energiemenge dargestellt. Die bearbeiteten Optimierungsszenarien und Optimierungsziele werden in Kapitel II 1.3 näher beschrieben.

Die Weiterentwicklung und vor allem die Fortschreibung der in der Web-App dargestellten Datensätze, wie z.B. die bestehenden thermischen Nutzungen, wird in Zukunft am Referat für Klima und Umweltschutz an der Stadt München fortgeführt. Schon während der Projektlaufzeit wurden hierfür durch den Stadtrat Mittel bereitgestellt und eine Verstetigung der im Projekt entwickelten Ergebnisse zugesichert. Parallel zu den Feedbackgesprächen im Zuge der App-Entwicklung erfolgte auch eine Einarbeitung der Mitarbeiter in der unteren Wasserbehörde der Stadt, in deren Zuständigkeit die Genehmigung neuer thermischer Nutzungen fällt. Somit wurde durch einen anfänglichen Testbetrieb auch die Praxistauglichkeit der Funktionen sichergestellt und eine Überführung der Web-App in den Praxisbetrieb gewährleistet. Darüber hinaus bestehen auch Überlegungen von Seiten der Stadt München wie man die GEO.KW Web-App auch für einen weiteren Nutzerkreis öffnen wird.

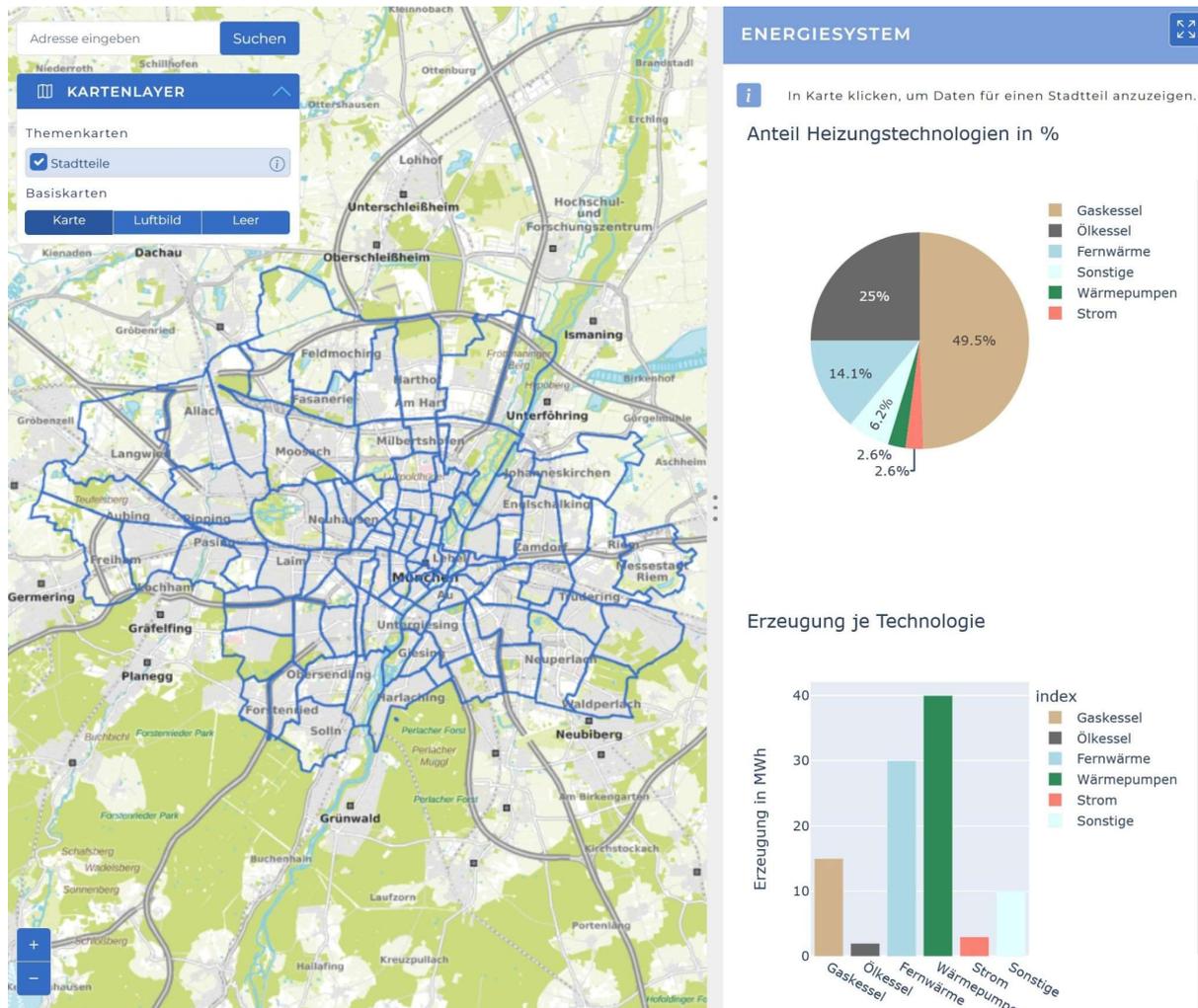


Abbildung 63: Ergebnisse der Energiesystemoptimierung aggregiert für die Stadtteile Münchens.

II.1.5 Optimierungsszenarien

II.1.5.1 Skalierbarkeit

Zur Bewertung der parallelen Skalierbarkeit der Modellkopplung wurde eine Laufzeitanalyse durchgeführt. So konnte das Verhalten von PFLOTRAN und urbs während der Verwendung von sukzessive gesteigerten Rechenressourcen getestet werden, um einen sinnvollen Ressourceneinsatz zu gewährleisten.

- Mit PFLOTRAN wurden die Laufzeiten von Simulation und Output-Erstellung unter der Verwendung von mehr Rechenkernen überwacht.
- Mit urbs wurden die Laufzeiten für eine unterschiedlich große Anzahl von Grundwasserwärmepumpen pro Region und kürzere Optimierungszeitschritte getestet.

Die PFLOTRAN-Modelle können über eine große Anzahl von MPI-Ranks verteilt werden, um die Laufzeit der Simulation zu reduzieren. Das Verhältnis der Laufzeit zur Anzahl der verwendeten MPI-Ranks beschreibt das Skalierungsverhalten des Codes. Eine optimale Skalierung wird erreicht, wenn bei einer Verdopplung der MPI-Ranks auch eine Halbierung der Laufzeit die Folge wäre. Da bei einer Verteilung der Simulation, allerdings auch der Kommunikationsbedarf der MPI-Ranks untereinander steigt, weicht die parallele Performance von verteilten Simulationen zunehmend vom Optimum ab.

Urbs Modelle können nicht auf diese einfache Weise verteilt werden, nachdem die Domain-Dekomposition und das Regionen Clustering abgeschlossen sind (siehe Kapitel II.1.3.5.4). Deshalb wurde die Skalierbarkeit der urbs-Modelle anhand einer steigenden und abnehmenden Anzahl von

Konversionsprozessen und Grundwasserwärmepumpen pro Region getestet, um eine optimale Größe der Regionen zu ermitteln. Zusätzlich kann die Zeitschrittlänge in der Optimierung verändert werden. Im Detail wurden der Energiebedarf und das Optimierungsergebnis stündlich, täglich oder wöchentlich spezifiziert, um die Auswirkungen auf die Laufzeit bewerten zu können.

Tabelle 10: Ergebnisse des gekoppelten Skalierungstests für PFLORAN anhand des REG-30 Modells separat dargestellt für die Gesamtlaufzeit, das Schreiben des VTK-Outputs und der Simulationszeit (Sim-Zeit).

Ranks	48	96	192	384	768	1536	3072	6144
Gesamtzeit	2.188	1.106,6	565,4	309,5	173,5	108,2	90	105,5
VTK	0,64	4,68	9,51	12,41	19,5	27,75	38,61	80,73
Sim-Zeit	2.187,36	1.101,92	555,89	297,09	154	80,45	51,39	24,77

Die in Tabelle 10 abgebildeten Skalierungsergebnisse für PFLORAN zeigen die Laufzeit des iterativen Löser ("Sim-Zeit"), die Laufzeit zum Schreiben der Simulationsergebnisse im VTK-Format ("VTK") und die gesamte Laufzeit von PFLORAN ("Gesamtzeit") für eine unterschiedliche Anzahl von MPI-Ranks. Die der Rechenkerne (MPI-Ranks) wurde kontinuierlich von 48 bis 6.144 verdoppelt. Jeder der Skalierungstests wurde durchgeführt, indem ein einziger high-fidelity Simulationszeitschritt von Tag 0 bis Tag 360 mit einem VTK-Output in einem Intervall von 120 Tagen berechnet wurde. Folglich wurden 4 VTK-Datensätze geschrieben, i.e. an Tag 0, 120, 240 und 360. Es ist zu sehen, dass die Laufzeit der eigentlichen Simulation ("Sim-Zeit") über den gesamten evaluierten Bereich sehr gut skaliert. Sogar bei der letzten Verdopplung von 3.072 auf 6.144 Kerne reduziert sich die Zeit noch um knapp mehr als die Hälfte. Eine Verbesserung um weniger als die Hälfte ist technisch gesehen nicht möglich und wird hier durch Messfehler bei den Timings hervorgerufen. Es kann daher festgehalten werden, dass PFLORAN außerordentlich gute parallele Performance liefert und eine optimale Auslastung der Rechenressourcen auf dem Cluster gegeben ist. Die benötigte Zeit zum Schreiben der Simulationsergebnisse steigt allerdings durch die Benutzung von mehr Rechenkernen kontinuierlich an. Hierfür wird ein globaler MPI-Schritt zur Sammlung der Daten von allen Ranks benötigt, um sie auf dem Hauptkern zu aggregieren. Dieser Schritt beeinträchtigt die parallele Performance stark. Im finalen Test mit 6.144 Ranks wird 76 % der gesamten Laufzeit für das Generieren der VTK-Output Dateien verbraucht. Das Schreiben der Simulationsergebnisse sollte daher generell so reduziert wie möglich eingesetzt werden. Für die gekoppelten Simulationsläufe ist dies nicht relevant, da hier kein Schreiben von Outputs notwendig ist. Die parallele Performance der Simulations-Optimierungs-Kopplung ist daher seitens PFLORAN gegeben.

Tabelle 11: Ergebnisse des gekoppelten Skalierungstests für urbs anhand des REG-30 Modells separat dargestellt für Tägliche (T) und Wöchentliche (W) Optimierungszeitschritte mit einer variierenden Anzahl von Grundwasserwärmepumpen (GWWP) pro Region. Die Laufzeiten des Linear Programming Solvers (Gurobi), des Wärmepumpen-Selektionsprozesses (Sel. WP), der Energie- und Volumenstromberechnung (Energie) und der kombinierten Gesamtlaufzeit (Total) sind ebenfalls separat aufgelistet.

	Region	0	3	4	1	6	7	2	10	8	9
	Anzahl GWWP	11	16	22	24	27	28	29	40	43	44
T	Gurobi	51,6	72,4	102,5	113,7	132,2	132,8	132,2	189,0	208,9	202,0
	Sel. WP	2,29	5,03	2,29	12,2	14,0	16,5	14,8	33,0	50,7	37,7
	Energie	4,65	10,2	20,3	24,9	31,7	33,6	35,7	73,3	104,8	87,5

	Total	58,6	87,7	125,1	151,0	177,9	183,0	182,8	295,4	364,5	327,3
W	Gurobi	15,8	10,4	15,5	7,0	19,3	18,6	11,31	29,0	31,1	32,3
	Sel. WP	1,4	1,8	1,1	0,3	1,8	1,7	0,7	4,2	5,0	5,2
	Energie	3,0	4,0	2,4	0,6	3,6	3,7	1,3	8,0	10,8	9,8
	Total	20,1	16,2	19,0	8,0	24,8	24,1	13,3	41,1	47,0	47,2

Die Skalierungsergebnisse für urbs sind in Tabelle 11 dargestellt. Die Optimierung wurde jeweils für wöchentliche (W) und tägliche (T) Zeitschritte durchgeführt und die benötigten Laufzeiten für die unterschiedlichen Prozesse der Optimierung (Gurobi, Sel. WP, Energie) wurden gesondert aufgetragen. Die verschiedenen urbs-Regionen (Region) des Modells sind nach aufsteigender Anzahl der Grundwasserwärmepumpen (GWWP) angeordnet. Die Ergebnisse sind daher in zwei Blöcken angeordnet (wöchentlich und täglich) und jeder Block enthält vier Optimierungslaufzeiten, wovon "Gurobi" die Laufzeit des linearen Optimierungslösers selbst ist. "Sel. WP" fasst die Funktionen zusammen, die die Wärmepumpen auswählen, die in der linearen Optimierung berücksichtigt werden und "Energie" fasst die Funktionen zusammen, die sowohl den Energiestrom durch jede Wärmepumpe als auch den Volumenstrom der Brunnen berechnen. "Total" beschreibt dementsprechend die Summe dieser vier Komponenten. Aus den erhaltenen Ergebnissen kann man generell ableiten, dass sich die gesamte Laufzeit erheblich reduziert, wenn der Zeitschritt der Optimierung von täglich auf wöchentlich verlängert wird. Dies reduziert zwar die Genauigkeit der Optimierung, führt aber im speziellen Fall der thermischen Grundwassernutzung für die betrachteten Intervalle noch nicht zu signifikanten Fehlern. Der Wärmetransport im Grundwasser unterliegt auf der betrachteten Skala langsamen zeitlichen Schwankungen, die mit wöchentlichen Intervallen noch hinreichend genau abgebildet werden können. Wöchentliche Intervalle können zum Beispiel die thermischen Effekte im Grundwasserleiter beim Übergang von der Kühl- zur Heizperiode noch adäquat simulieren. Da diese Vorgänge, zu denen mit der zeitlich höchsten Dynamik im Grundwasserleiter gehören, war eine Reduktion des Optimierungsintervalls auf wöchentliche Zeitschritte zur Einsparung von Rechenleistung das Hauptergebnis des durchgeführten Skalierungstests. Bei den übrigen Komponenten ist vor allem das gute lineare Skalieren des Gurobi-Lösers für den untersuchten Bereich (11 - 44 Wärmepumpen) hervorzuheben. Die Funktionen zur Selektion und Energiestrom Berechnung zeigten allerdings eine schlechtere parallele Performance, da hier jeweils eine Schleife durch alle bestehenden Wärmepumpen nötig ist, um die Energienutzung herauszufinden. Diese Schleifen können vermutlich in einer Funktion zusammengefasst werden und bieten das größte Verbesserungspotential für zukünftige Versionen der urbs-Kopplung. Aufgrund der fast linearen Skalierbarkeit der Laufzeit des Optimierers sollten die urbs-Regionen jeweils eine ähnliche Anzahl an Wärmepumpen besitzen, um das Load-Balancing zwischen den Rängen zu verbessern.

Zur Verbesserung der parallelen Performance wurden zudem Beschleunigungen der Kopplung mit der quasi-Newton Methode getestet. Quasi-Newton Methoden haben sich in zahlreichen gekoppelten Problemen als sehr effizient erwiesen (siehe Bogaers et al., 2014; Bogaers et al., 2016; Degroote et al., 2008; Fang und Saad, 2009; Haeltermann et al. 2016; Lindner et al., 2015; Scheufele, 2018), Varianten sind in der Literatur auch bekannt unter dem Begriff Anderson acceleration (Walker und Ni, 2011). Die numerischen Tests wurden mit dem COM-4 Modell (siehe Davis und Schulte, 2022a) durchgeführt und ergaben, dass eine quasi-Newton-Kopplung nur zu einer minimalen Verbesserung gegenüber dem direkten Austausch zwischen den Lösern führt. In Szenarien, bei denen lange Ketten von im Abstrom miteinander interagierenden Wärmepumpen existieren, würde der Einfluss, den jede Kältefahne auf die jeweils nächste Wärmepumpe ausübt, eine komplette innere Iteration benötigen. Andererseits können auch Szenarien existieren, bei denen keine oder nur wenigen Interaktionen zwischen Wärmepumpen existieren. In solchen Fällen kann der direkte Austausch zwischen den Lösern genauso performant sein wie eine quasi-Newton Beschleunigung. Die quasi-Newton Gleichungskopplung und der direkte Datenaustausch wurden daher auch im REG-30 Modell verglichen (siehe Davis und Schulte, 2022b). Die IQN-ILS quasi-Newton Methode wurde mit einem Konvergenz Limit von 10^{-3} , ohne Filterung oder Vorkalibrierung, und mit 10 "time-steps-reused" sowie 100 "max-iterations-reused" durchgeführt. Das Hauptkriterium zur Bewertung der Effektivität der Kopplungsbeschleunigung ist die Verringerung der benötigten Anzahl an Kopplungsiterationen.

Tabelle 12: REG-30 Modell; Anzahl der inneren Iterationen pro äußerer Iteration (A. Iter.) für die IQN-ILS-Kopplung und den direkten Austausch von Daten. Aufgrund der Modellgröße wurden die Simulationen nach 60 Minuten beendet und es wurde kein VTK-Output geschrieben.

Ä. Iter.	1	2	3	4	5	6	7	8
Direkt	7	3	3	3	3	3	3	3
QN	10	7	5	6	-	-	-	-

Die gesamte Anzahl der inneren Iterationen pro äußerer Iteration wird in Tab. X jeweils für den direkten Datenaustausch ("Direkt") und die quasi-Newton Methode ("QN") gezeigt. Im REG-30 Modell war der direkte Austausch der quasi-Newton-Kopplung deutlich überlegen. Für den direkten Austausch wurden bei der ersten äußeren Iteration 10 innere Iterationen benötigt und für alle Folgenden lediglich 3 innere Iterationen. Daraus lässt sich ableiten, dass sich wenige bis keine Ketten an thermischen Interaktionen zwischen Wärmepumpen in dem Modell bilden. Die quasi-Newton-Kopplung schafft lediglich 4 komplette äußere Iterationen in der Zeit, in der mit direktem Austausch 8 äußere Iterationen berechnet werden. Bei einem kleineren Konvergenz Limit von 10^{-1} benötigen die zwei Ansätze schließlich die gleiche Anzahl von inneren Iterationen pro äußerer Iteration.

Ein zweiter Nachteil der quasi-Newton-Kopplung ist, dass die Werte am Kopplungs-Interface nicht exakt sind. Die Werte werden stattdessen durch den quasi-Newton Update Schritt selektiert, um die Residuen am Kopplungs-Interface zu minimieren. Solange das Konvergenz Limit nicht sehr gering gewählt ist, können Temperatur- und Druckwerte sich zwischen den beiden Lösern unterscheiden. Aufgrund des zusätzlich benötigten Constraint-checks in urbs, ist der direkte Datenaustausch die bevorzugte Methode der Gleichungskopplung.

II.1.5.2 Optimierte Ergebnisse

Das finale numerische Experiment ist die Durchführung der vollständigen Simulations-Optimierung-Kopplung, in diesem Abschnitt beispielhaft am Modell REG-30 dargestellt. Im Folgenden werden die Ergebnisse der gekoppelten Rechnung anhand verschiedener Szenarien qualitativ bewertet. Um den Hintergrund für das gestaffelte Vorgehen bei der Optimierung aufzuzeigen, werden zunächst die verschiedenen Optimierungsziele beschrieben.

1. Basis-Szenario: Die Simulations-Optimierung-Kopplung wurde mit einer angenommenen konstanten Pumprate von 0.1 L/s für alle hypothetischen Wärmepumpen im Modell durchgeführt, um das Ausmaß der thermischen Interaktion zu visualisieren, falls alle Anlagen betrieben werden. Unabhängig von Nebenbedingungen (Constraints) und Kosten-Effektivität bietet dieses Szenario einen Ausgangszustand, von dem aus Nutzen und Sinnhaftigkeit des gekoppelt berechneten Ergebnisses klar abgeleitet werden kann.
2. Nicht-gekoppeltes-Szenario: Es wurde initial eine nicht gekoppelte Optimierung durchgeführt, die eine gegenseitige Interaktion zwischen PFLOTTRAN und urbs nicht berücksichtigt. Hierfür wurden mehrere innere Iterationen in der ersten äußeren Iteration berechnet, bis eine konvergierte Lösung vorlag, die den thermischen IST-Zustand mit allen existierenden Grundwassernutzungen abbildet. Anschließend wurden mit den Temperaturen an den Förderbrunnen der hypothetischen Anlagen die COP's berechnet und die Energiesystemoptimierung mit urbs in jeder Region durchgeführt. Die Anzahl der maximal zu installierenden GWWP ist nicht begrenzt worden und Nebenbedingungen wurden ebenfalls nicht geprüft. Dieses Szenario bietet die Möglichkeit einzugrenzen, welche GWWP-Anlagen in einer initialen komparativen Optimierung mit den übrigen Alternativen zur Wärme- und Kälteversorgung generell zur Minimierung der Zielfunktion selektiert werden würden. Da hier die möglichen Effizienzverbesserungen durch Synergien nicht berücksichtigt werden, bietet das

Szenario nur eine erste grundlegende Einschätzung ohne den Einbezug der thermischen Ressource Grundwasser.

3. Einzel-Region Optimierung: In diesem Szenario wurde der reguläre gestaffelte Optimierungsansatz durchgeführt, der in Abschnitt XX beschrieben wurde. Hier wird die Optimierung für jeweils eine Region pro Rank in jeder äußeren Iteration durchgeführt.
4. Doppel-Region Optimierung: Das Optimierungsproblem wird für jede der zwei Regionen pro Rank in jeder äußeren Iteration durchgeführt. Dieses Vorgehen kann zu mehr entfernten GWWP-Anlagen führen, da bei einer Verletzung der Nebenbedingungen jeweils in beiden Regionen auf demselben Rank beide getesteten GWWP-Anlagen entfernt werden (Entweder hat die GWWP in der Oberstrom-Region die Nebenbedingung nicht erfüllt oder die GWWP in der Abstrom-Region. Es werden aber immer beide Anlagen entfernt). Dieses Vorgehen beschleunigt die Optimierung, da weniger äußere Iterationen benötigt werden, führt aber, wie beschrieben, zu möglicherweise fälschlich entfernten Anlagen.
5. Null-Kosten-Szenario: Die Investitionskosten, Fixkosten und variablen Kosten wurden in diesem Szenario für jede GWWP-Anlage gleich Null gesetzt. Dies zwingt den Optimierungslöser, in jeder äußeren Iteration Grundwasser als Wärme- und Kältequelle zu bevorzugen, um die kostenoptimale Zielfunktion zu minimieren. Dies führt zu einem maximalen Ausbau der thermischen Grundwassernutzungen ohne Verletzung der Nebenbedingungen und kann als maximales räumliches Potential der thermischen Ressource unter Berücksichtigung aller Synergien, die sich aus der Nutzerstruktur ergeben, herangezogen werden.

In jedem Szenario wurden zwei Hauptkriterien zur Diskussion der Ergebnisse für jede Region herangezogen: (i) Anzahl der GWWP-Anlagen, die installiert wurden, und (ii) Anzahl der GWWP-Anlagen, die entfernt wurden. Wenn in einer Region nur eine kleine Anzahl an GWWP-Anlagen installiert und entfernt wurden, bedeutet das, dass der Optimierungsprozess in der entsprechenden Region abgeschlossen ist und die maximale Anzahl an wirtschaftlich darstellbaren Anlagen erreicht worden ist, um den bestehenden Wärme- und Kältebedarf zu decken.

Das Ergebnis des Basis-Szenarios, bei dem alle hypothetischen Anlagen mit einer reduzierten Pumprate und konstanter Wärmeabgabe teilweise in Betrieb genommen wurden, ist in Abbildung 64 dargestellt. Die Temperaturen für das gesamte Modellgebiet sind im linken Teil der Abbildung zu sehen und eine Detailansicht aus dem Zentrum des Modellgebiets ist im rechten Teil der Abbildung dargestellt. Schon bei der sehr reduzierten Pumprate von 0.1 L/s und 5 K Erwärmung sind signifikante thermische Interaktionen zu sehen. Bei der durchschnittlichen Grundwassertemperatur von ca. 12 °C würde die globale Maximaltemperatur im Modell um die 17 °C betragen. In der Simulation wurden allerdings 19 °C erreicht. Die weitere Erwärmung ist auf die erhöhte Vorlauftemperatur in vielen Förderbrunnen durch im Oberstrom existierende Anlagen und entsprechende Wärmeanomalien zurückzuführen. Auf Basis dieser grundlegenden Analyse kann also davon ausgegangen werden, dass unter normalen Wärme- und Kältelasten eine starke thermische Beeinträchtigung zwischen den Anlagen stattfinden werden. In Abwesenheit der 1 K-Grenze für maximal erlaubte negative Beeinflussung würde zusätzlich die globalen Temperaturgrenzen (4 °C und 20 °C) zur jeweiligen saisonalen Bedarfsmaximum überschritten werden.

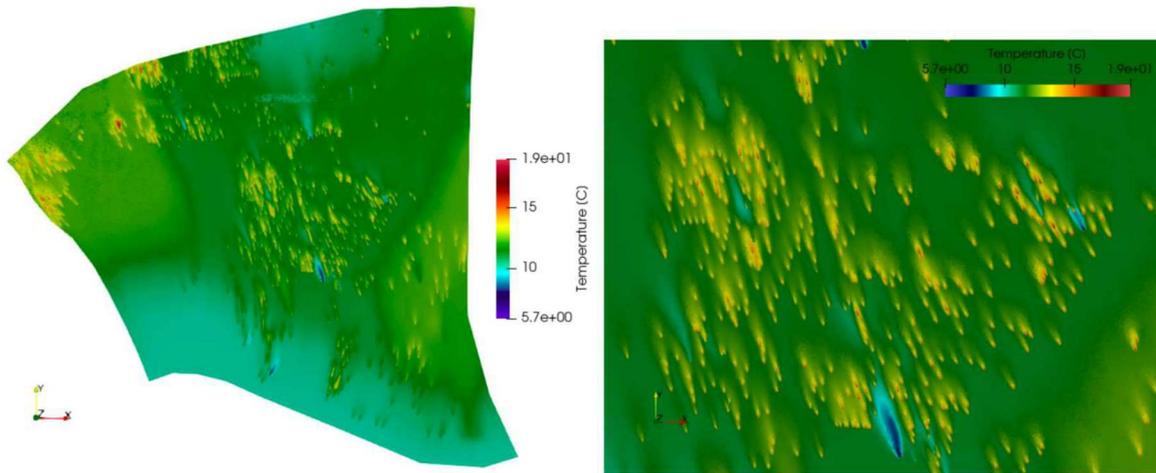


Abbildung 64: REG-30 Modell Grundwassertemperatur im Basis-Szenario mit allen hypothetischen GWWP-Anlagen im Betrieb, dargestellt nach 120 Tagen (konstant 0.1 L/s und 5 K Erwärmung). Überblick für die gesamte Domain (links) und Detailansicht (rechts) jeweils abgebildet in einem Schnitt mittig durch den Grundwasserleiter auf 525 müNN.

Die Temperaturentwicklung innerhalb eines Jahres für die Einzel-Region-Optimierung wird in Abbildung 65 für Tag 0 bis 300 in 60 Tage-Intervallen gezeigt. Für das Ergebnis der Optimierung wurde der gestaffelte Ansatz mit Einzel-Regionen-Optimierung, wie im folgenden Absatz beschrieben, genutzt. Die initialen Bedingungen für die Grundwassertemperatur an Tag 0 wurden mit einem quasi-stationären Zustand erzeugt, bei dem die Simulation mit allen existierenden Nutzungen und übrigen transienten Randbedingungen, wie der zyklischen Schwankung der Oberflächentemperatur, über mehrere Jahre hinweg berechnet wurde. In Abbildung 65 werden zusätzlich in der Legende die globalen Extremtemperaturen im Modell gezeigt.

Anfang Januar (Tag: 0) arbeiten die GWWP-Anlagen im Heizmodus und kühlen das umgebende Grundwasser entsprechend ab. Das globale Temperaturmaximum entspricht mit 13 °C in etwa dem generellen Durchschnitt und das globale Minimum ist mit 5 °C am kältesten Schluckbrunnen noch 1 K von der unteren technischen Grenze entfernt. Am Tag 60 (Anfang März) endet die Heizsaison allmählich und einzelne Anlagen beginnen das Grundwasser wieder aufzuheizen, da langsam der Kältebedarf steigt. Die kalten Temperaturanomalien sind im Aquifer aber noch deutlich ausgebildet und werden gemäß der natürlichen Grundwasserfließrichtung stromabwärts verfrachtet und lösen sich zunehmend auf. Das räumlich globale Temperaturminimum liegt durch das Ende der Heizperiode auch auf dem ganzjährigen Minimum von 3,3 °C. Über den Sommeranfang, Ende April bis Ende Juni (Tag 120 bis Tag 180) steigt die minimale Temperatur kontinuierlich auf 4,9 °C bzw. 6,6 °C und die Wärmeanomalien der Kältenutzungen breiten sich zunehmend im Aquifer aus. Da der Kältebedarf im Bereich der Wohngebäude allerdings signifikant niedriger ist als der Wärmebedarf, ist die thermische Beeinflussung im Grundwasser auch generell kleiner. Im Spätsommer, Ende August (Tag 240) haben sich die Wärmeanomalien etabliert und nehmen zum Ende Oktober hin (Tag 300) wieder allmählich ab. Ebenso nimmt mit dem Einsetzen der Heizperiode Ende Oktober auch die minimale Grundwassertemperatur an den Schluckbrunnen wieder auf 5,6 °C ab. Durch die Visualisierung des Jahresgangs der Temperaturentwicklung konnte die korrekte Betriebsweise der GWWP-Anlagen validiert und geprüft werden, ob die minimalen und maximalen Temperatur-Nebenbedingungen global erfüllt werden.

Tabelle 13: REG-30 Modell; Anzahl der existierenden ("Exist."), hypothetischen ("Hyp.") und entfernten ("Entf.") GWWP-Anlagen zum Start der gekoppelten Optimierung und am Ende der Einzel-Regionen, Doppel-Regionen, Nicht-gekoppelten und Null-Kosten Test-Szenarien.

Region	Start		Einzel Opt		Doppel Opt		Nicht-gekoppelt		Null-Kosten	
	Anzahl Exist.	Anzahl Hyp.	Anzahl Exist.	Anzahl Entf.	Anzahl Exist.	Anzahl Entf.	Anzahl Exist.	Anzahl Entf.	Anzahl Exist.	Anzahl Entf.
0	0	11	7	0	7	0	7	0	11	0
1	1	22	13	0	15	0	15	0	13	0
2	4	25	12	0	12	0	12	0	15	0
3	0	15	4	0	4	0	4	0	12	0
4	0	22	0	0	0	0	0	0	12	0
5	0	22	0	2	2	0	2	0	0	11
6	2	25	3	0	3	0	3	0	13	0
7	1	26	2	0	2	0	2	0	13	0
8	5	38	5	0	5	0	5	0	5	12
9	0	44	0	2	0	2	2	0	0	11
10	2	37	3	0	2	1	3	0	14	0
11	1	39	1	0	1	0	1	0	1	11
15	2	67	6	0	6	0	6	0	14	0
16	1	14	4	0	4	0	4	0	12	0
17	2	30	4	1	5	0	5	0	14	0
18	2	29	2	5	7	0	7	0	13	0
19	2	29	4	1	5	0	5	0	14	0
20	3	21	4	0	4	0	4	0	14	0
21	1	47	6	0	6	0	6	0	12	0
22	0	48	2	0	2	0	2	0	12	0
23	0	26	5	0	5	0	5	0	11	0
25	0	25	0	0	0	0	0	0	12	0
26	1	25	2	0	2	0	2	0	12	0
27	1	27	3	0	3	0	3	0	13	0
28	0	44	0	0	0	0	0	0	11	0
29	0	42	1	0	1	0	1	0	12	0
Total	31	800	93	11	103	3	106	0	285	45

Die Anzahl der GWWP-Anlagen, die während der gekoppelten Optimierung selektiert und entfernt wurden, sind in Tabelle 13 aufgeführt. Die jeweilige Nummer der urbs-Region ist in der ersten Spalte der Tabelle angegeben. Die maximale Anzahl an existierenden ("Exist") und hypothetischen ("Hyp.") GWWP-Anlagen pro Region sind unter der "Start"-Spalte zusammengefasst. Anschließend werden die nach der Optimierung existierenden ("Exist.") und entfernten ("Entf.") GWWP-Anlagen unter den Spalten des jeweiligen Optimierungsansatzes aufgelistet. Die pro Region neu zugebauten GWWP-Anlagen ergeben sich folglich aus der Differenz zwischen der zum Start existierenden und nach der Optimierung existierenden Anzahl.

Die vier Test-Szenarien beginnen jeweils mit 31 ursprünglich existierenden GWWP-Anlagen und 800 hypothetisch zu installierenden Anlagen, die in der Optimierung betrachtet werden. Jedes Szenario wurde in 24 äußeren Iterationen berechnet, nach der anschließend die PFLOTRAN- und urbs-Ergebnisse extrahiert und in Tabelle 13 dargestellt wurden. Dieser Ansatz wurde gewählt, um den Zubau von Anlagen innerhalb einer PFLOTRAN-Region zunächst zu begrenzen, damit ein möglicher thermischer Einfluss auf weitere Regionen im Abstrom niedrig bleibt. Während der gekoppelten Simulation der 24 äußeren Iterationen können somit 312 hypothetische Anlagen evaluiert werden, da jede der 26 Regionen 12 Möglichkeiten hat, eine neue Anlage in dem gestaffelten Ansatz zu installieren. Die finale kostenoptimierte Lösung besteht für die gestaffelte Einzel-Regionen Optimierung aus 93 existierenden und 11 entfernten Anlagen. Diese Anzahl ist geringer als die potentiell möglichen 312 GWWP-Anlagen, die in der Optimierung berücksichtigt wurden. In den Regionen 4 und 28 in Tabelle 13 fällt auf, dass weder Anlagen installiert noch entfernt wurden. Hier hat der Linear Programming Solver in urbs folglich nie eine GWWP als die wirtschaftlichste Wahl zur Deckung des bestehenden Wärme- und Kältebedarfs angesehen und entsprechend alternative Versorgungsmethoden gewählt. In Region 0 und 1 wurden 7 bzw. 12 GWWP-Anlagen installiert und keine entfernt. Das Fehlen von entfernten Anlagen bedeutet, dass keine der zur Installation herangezogenen Anlagen eine Nebenbedingung verletzt hat und somit alle legislativ-technischen Rahmenbedingungen für einen nachhaltigen Betrieb erfüllt sind. Vor dem Hintergrund der 12 möglichen Installationen in den 24 äußeren Iterationen der Optimierung, würden in Region 1 folglich alle bewerteten GWWP auch installiert und ein weiterer Ausbau in dieser Region ist aufgrund der fehlenden entfernten Anlagen möglich. Der Zubau in Region 0 wiederum stoppte, nachdem 7 Anlagen installiert wurden, obwohl noch 4 Optionen für einen weiteren Zubau evaluiert wurden. Eine optimale Versorgung dieser Region wurde folglich bereits vorher erreicht.

In der Doppel-Region Optimierung wurden ebenfalls 24 äußere Iterationen durchgeführt, in denen allerdings jede der 26 urbs-Regionen die Möglichkeit hatte, eine neue GWWP-Anlage zu installieren. Es ergibt sich mit 624 GWWP-Anlagen daher die doppelte Anzahl an möglichen Installationen. Die kostenoptimierte Lösung ergab 103 existierende und 3 entfernte GWWP-Anlagen. Die Regionen 0, 4 und 28 hatten die gleichen Ergebnisse wie die Einzel-Regionen Optimierung, wohingegen sich in Region 1 insgesamt 15 existierende Anlagen ergaben. Ein großer Unterschied konnte in Region 18 beobachtet werden, wo keine Anlagen in der Doppel-Regionen Optimierung entfernt wurden. Für das REG-30 Modell ergibt sich im Vergleich der beiden Optimierungsmethoden (Einzel-Region und Doppel-Region) kein signifikanter Unterschied. Dies ist vor allem mit der räumlichen Verteilung der selektierten GWWP-Anlagen im Modellgebiet zu begründen. Diese haben durch ihre Anlagengröße keinen relevanten Einfluss auf die jeweilige urbs-Region im Abstrom ausgeübt und eine Beschleunigung der Kopplung wäre hier zulässig. Da das Ergebnis allerdings von der räumlichen Verteilung der selektierten Anlagen und der jeweiligen Anlagengrößen abhängig ist, kann dieses Vorgehen nicht ohne vorherige Analyse auf andere Modellgebiete übertragen werden.

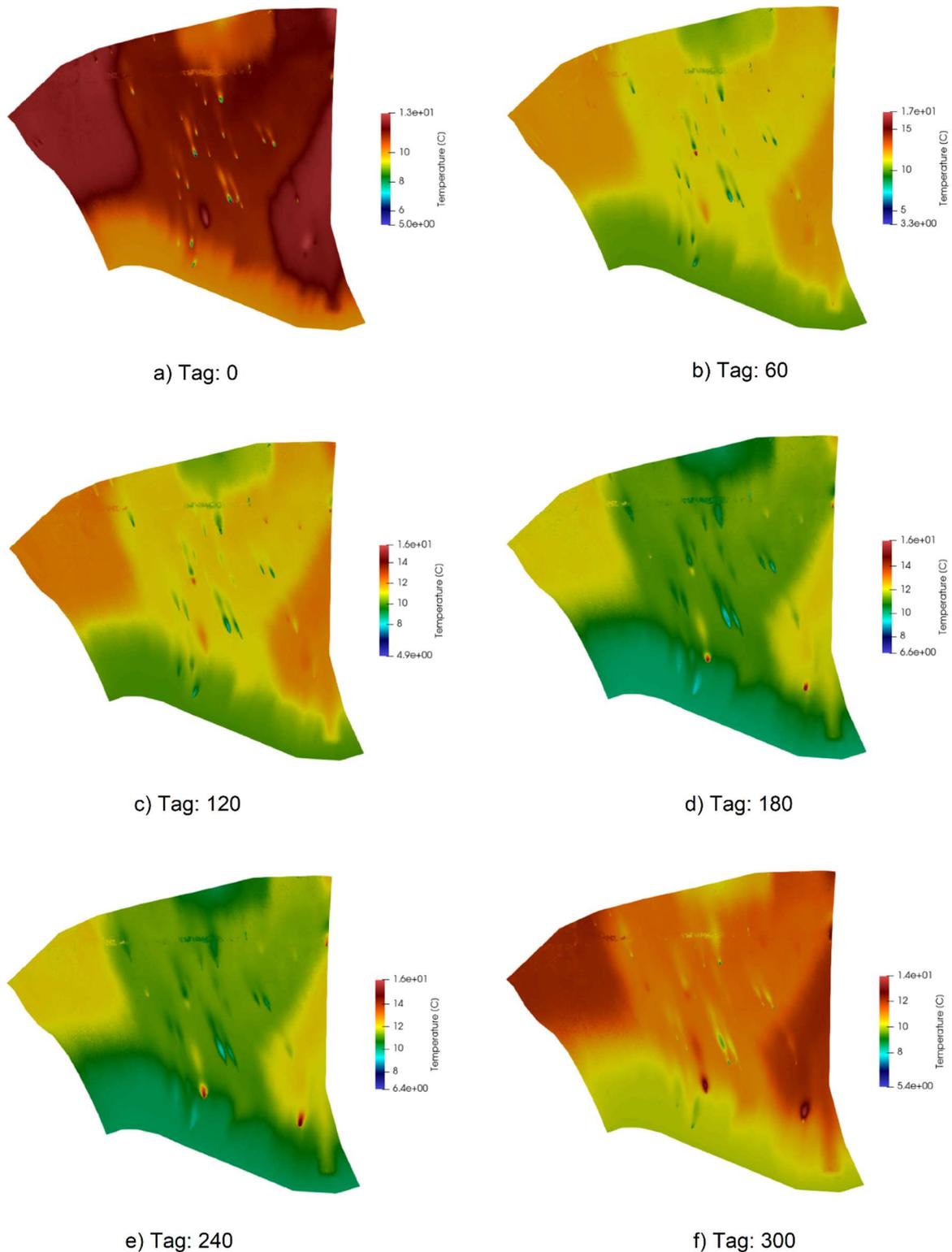


Abbildung 65: REG-30 Modell Grundwassertemperaturen für die Einzel-Region-Optimierung an Tag 0, 60, 120, 180, 240 und 300.

Im nicht-gekoppelten Fall ist es jeder urbs-Region erlaubt, gleichzeitig ohne Berücksichtigung externer Constraints so viele GWWP-Anlagen wie kostenoptimal sinnvoll zu installieren. Somit gibt es keine entfernten Anlagen in diesem Szenario. Dieses Ergebnis stellt folglich keine optimierte Lösung dar. Der Test wurde ausschließlich durchgeführt, um die Anzahl der hypothetisch wirtschaftlichen Anlagen zu ergründen. Die finale Lösung bestand aus 106 existierenden Anlagen. Das Ergebnis zeigt somit grob,

in welcher urbs-Region beim Einzel-Region-Szenario der Optimierungsprozess bereits nach den durchgeführten 24 äußeren Iterationen bereits abgeschlossen war. Das Ergebnis ist zwar nicht exakt, bietet aber eine gute Näherung, da möglicherweise Anlagen nach der Berücksichtigung von Synergien oder negativen Beeinflussungen wirtschaftlich bzw. unwirtschaftlich werden. Das Ergebnis des nicht-gekoppelten Falls kann ebenso bei anderen Zielfunktionen in der Optimierung als initiale Näherung herangezogen werden, um die generelle Machbarkeit der verschiedenen Energiesysteme in einem Gebiet zu analysieren.

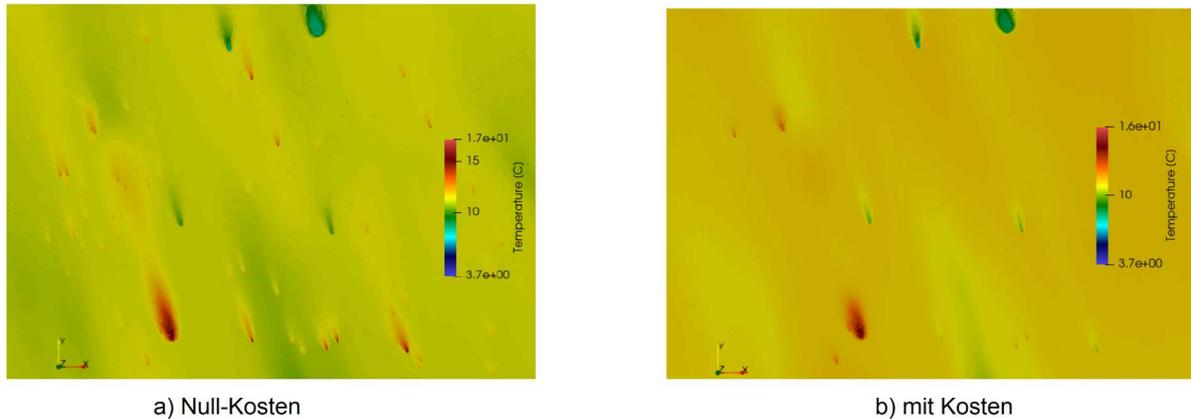


Abbildung 66: REG-30 Modell Grundwassertemperaturen für das Null-Kosten-Szenario (a) und mit Kosten aus der Einzel-Region-Optimierung (b), dargestellt für Tag 360 im Schnitt auf Höhe 525 mÜNN.

Die Ergebnisse des nicht-gekoppelten Falls haben außerdem gezeigt, dass GWWP-Anlagen für viele Verbraucher in dem betrachteten Modell nicht die kostenoptimale Wärme- und Kälteversorgung darstellen. Darum wurde zusätzlich das Null-Kosten Szenario berechnet, um einen räumlich maximalen Ausbau und somit das maximale legislativ-technische Potential der thermischen Ressource zu erkunden. Zusätzlich konnte mit dem Null-Kosten Szenario geprüft werden, ob der Linear-Programmingsolver und der entwickelte Software-Adapter fehlerfrei funktionieren. Wie beschrieben, wurden in diesem Szenario die Installation und der Betrieb von thermischen Nutzungen als kostenlos angenommen, wodurch sie zur Minimierung der Zielfunktion bevorzugt, verwendet werden und nur die gesetzten Nebenbedingungen (Constraints) eine Einschränkung darstellen. Die finale Lösung bestand aus 285 existierenden und 45 entfernten GWWP-Anlagen nach 24 äußeren Iterationen. Zum Vergleich des Temperaturfeldes nach dem Null-Kosten und dem Einzel-Region Szenario wurde ein zentraler Bereich in der Mitte des REG-30 Modells in Abbildung 66 dargestellt. Innerhalb der ursprünglich existierenden Nutzungen ist im Null-Kosten Szenario die verstärkte thermische Nutzung durch eine Vielzahl an kleinen Temperaturanomalien deutlich zu erkennen (siehe Abbildung 66a). Durch den finalen Test konnte nachgewiesen werden, dass der entwickelte Software-Adapter korrekt funktioniert und die gestaffelte Einzel-Region Optimierung plausible Ergebnisse erzielt. Ferner konnte gezeigt werden, dass der entwickelte Kopplungsansatz in der Lage ist, großskalige Simulations- und Optimierungs-Rechnungen für die stadtweite Optimierung von thermischen Grundwassernutzungen und des städtischen Energiesystems durchzuführen.

II.1.6 Zusammenfassung der Ergebnisse und wichtigsten Erkenntnisse

Die Ergebnisse und wichtigsten Erkenntnisse sind im Detail in den oberen Kapiteln, hauptsächlich in II.1, ausgeführt. Hier werden nun stichpunktartig die Ergebnisse, fokussiert auf die hauptsächlichen Aspekte und kategorisiert nach den Aufgaben der Projektpartner, dargestellt.

Wesentliche Ergebnisse der TUM

- Erstellung des GEO.KW Modell:
 - Zusammenstellung, Qualitätskontrolle, Plausibilisierung und Aufbereitung aller relevanter Daten
 - Entwicklung eines vollständigen und integrierten Datenmodells zur automatisierten Erstellung von thermisch-hydraulischen Grundwassermodellen
 - Entwicklung eines Modellierungs-Frameworks zur automatisierten Erstellung der Geometrien, des Netzes, der Parametrisierung und der Zuweisung von Randbedingungen.
 - Entwicklung einer performanten Kopplung von PFLOTTRAN und PEST zur Kalibrierung von Grundwassermodellen
 - Entwicklung neuer Optimierungsansätze für die räumliche Planung von Grundwasserwärmepumpen unter energetischen und hydrogeologischen Aspekten
 - Ergänzung der Optimierungswerkzeuge zur Infrastrukturplanung um komplexe Nebenbedingungen zur Integration der Hydrodynamik
 - Entwicklung eines Frameworks, das eine optimale städtische Infrastrukturplanung im Bereich Energie für den Großraum München in Bezug auf den bestehenden Stand sowie die zukünftigen Entwicklungen des Energiebedarfs ermöglicht
 - Parallelisierung der Optimierungswerkzeuge und deren Einsatz auf Hochleistungsrechnern
 - Untersuchung des Energiesystems der Stadt München mit einem hochaufgelösten Energiesystemmodell unter Einbezug zahlreicher Datenquellen
- Entwicklung der GEO.KW Web-App zur Bereitstellung der Projektergebnisse und zur Unterstützung praxisrelevanter Vorgänge im Planungs- und Genehmigungsprozess
 - Erstellung eines Konzepts für ein nutzerorientiertes Grundwassermanagement-Werkzeug
 - Umsetzung der GEO.KW Web-App für das Pilotgebiet München für den praktischen Gebrauch in der kommunalen Planung und Genehmigungspraxis, sowie „Blaupause“ für andere Städte.
 - Verstetigung der Projekthinhalte und nachhaltige Verankerung der Ergebnisse bei den relevanten Interessenvertretern, unter anderem mit neu geschaffenen Personalstellen am RKU, beim WWA München und bei den SWM

Wesentliche Ergebnisse der US-SGS

- Entwicklung einer gestaffelten Kopplungsmethode zur Ermöglichung:
 - Konvergenz des thermischen Feldes durch den Einsatz von Wärmepumpen,
 - parallele Überprüfung der dekomponierten Urbs-Regionen, um sicherzustellen, dass die Wärmepumpen nicht gegen externe Randbedingungen verstoßen.
- Entwicklung einer Datenmapping-Methode zum Austausch von Informationen zwischen PFLOTTRAN und urbs, die auf verteilten Systemen laufen
- Entwicklung eines parallelisierten RBF-Mappings für die Interpolation von Permeabilitätsfeldern während der PEST-Kalibrierung
- Automatisierung der Kopplung von Eingabedateien aus urbs-Modellen zur Verbesserung der Benutzerfreundlichkeit.

Wesentliche Ergebnisse der BADW-LRZ

- Evaluation von neuen Methoden zur Unterstützung von Nutzern mit komplexen und sich schnell weiterentwickelnden Software-Stacks auf den Systemen des LRZ mit
 - Spack
 - HPC-Containern
- Beantragung und Organisation des GCS-Projektes zur Bereitstellung von Computer-Ressourcen
- Entwicklung des parallelisierten PEST-Workflows für das Projekt
- Stärkung der Kompetenz des LRZs im Bereich Environmental Computing

II.2 Wichtigste Positionen des zahlenmäßigen Nachweises

Im Folgenden sind die wichtigsten Positionen des zahlenmäßigen Nachweises zusammenfassend dargestellt.

Das PTJ bewilligte für das Verbundprojekt GEO.KW eine Laufzeit vom 01.12.2018 - 30.11.2021 sowie nach Antrag eine kostenneutrale Verlängerung um drei Monate bis zum 31.03.2022. Die Bewilligung umfasste ein Budget von 1.143.604 €. Davon verausgabten die Projektpartner 1.057.983,38 € im Laufe des Projektes.

Der geplante Förderbeitrag des BMWK betrug 1.105.367 €. Weitere 100.000 € stellten die SWM, 60.000 € die Stadt München als Drittmittel für das Projekt zur Verfügung.

Tabelle 14 zeigt eine Zusammenfassung der Gesamtkosten und der Fördermittel

Tabelle 14: Zusammenfassung der Gesamtkosten und der Fördermittel

	bewilligte Fördermittel	Gesamtkosten
TUM	633.676,00 €	629.265,17 €
US-SGS	254.915,00 €	196.942,03 €
LRZ	255.013,00 €	231.776,18 €
Summe	1.143.604,00 €	1.057.983,38 €

Wesentliche Abweichungen von der Planung des Projektes ergaben sich zum einen in der Ausrichtung des Auftrags (TUM-HYD, Position 0835), zum anderen bei den Dienstreisen:

- 0835 Aufträge: Das vorgesehene Budget für eine ursprünglich angedachte, kommerzielle Software wurde mit Bewilligung vom 09.11.2020 für die Entwicklung einer Web-Applikation umgewidmet. Gesamtkosten: 78.444,80 € (s.a. Abschnitt I.3 Planung und Ablauf des Vorhabens). Die umgewidmeten Mittel konnten mit der Web-App für die Entwicklung eines effizienten Werkzeuges eingesetzt werden, das insbesondere für Genehmigungs- und Fachbehörden von Nutzen ist und in der Praxis mit großem Erfolg und gutem Feedback Eingang gefunden hat.
- 0846 Dienstreisen: Infolge der Coronapandemie konnten während fast der gesamten Projektlaufzeit keine Dienstreisen zu Projekttreffen oder Konferenzen stattfinden. Das hierfür vorgesehene Budget wurde zum Teil für Personal eingesetzt, um den erhöhten Aufwand für den kommunikativen Austausch auszugleichen. Konferenzen fanden vielfach online statt.

II.3 Notwendigkeit und Angemessenheit der geleisteten Arbeit

Die Hebung von ungenutzten Synergien in der energetischen Stadtplanung hat für die Erreichung von Einsparzielen einen hohen Nutzwert. Die gekoppelte Simulation von oberflächennaher Geothermie und Energieinfrastruktur kann daher zum einen zur Ausweitung der effizienten thermischen Nutzung des Grundwassers und so zu hohen Kosteneinsparungen führen, die sowohl aus volkswirtschaftlicher als auch aus betriebswirtschaftlicher Sicht erstrebenswert sind. In vielen Studien der Fachwelt (Umweltbundesamt, 2019; Beuth, 2017; ifeu, 2018) herrscht die Übereinkunft, dass für eine erfolgreiche Energiewende im Wärmemarkt ein deutlicher Ausbau von Wärmepumpen zwingend erforderlich ist. Da Wärmepumpen eben auch einen Teil elektrischen Antrieb benötigen, führt diese Elektrifizierung des Wärmemarktes schlussendlich auch zu einem Anstieg des notwendigen erneuerbaren Stroms (Fraunhofer IEG, 2022). Durch den Einsatz von erdgekoppelten bzw. grundwassergeführten Wärmepumpen kann dieser Anstieg jedoch gemindert werden, da diese Technologien in der Regel über höhere Jahresarbeitszahlen verfügen und so effizientere Systeme gegenüber luftgeführten Wärmepumpen darstellen. In der Roadmap für oberflächennahe Geothermie (Fraunhofer IEG, 2022) wird das Potenzial der oberflächennahen Geothermie mit 600 TWh/a angeführt, was einer Abdeckung

des aktuellen bundesdeutschen Wärmebedarfs von ca. 75 % entspricht. In der Studie wird dabei ein realistisch ansetzbarer Anteil der erdgekoppelten Wärmepumpen (zudem u. a. die grundwassergeführte Wärmepumpe zählt) am zukünftigen Wärmepumpenmarkt von bis zu 50 % angegeben. Dies bedeutet, dass ein deutlicher Ausbau dieses Wärmepumpensystems zu erwarten vorteilhaft und zu erwarten ist. Darüber hinaus trägt die verstärkte Nutzung der oberflächennahen Geothermie als heimisch verfügbare Energiequelle zur Versorgungssicherheit im Wärmesektor bei. Für diese Ziele ist es notwendig, den Ausbau dieser Systeme zu fördern und bestehende Barrieren abzubauen, wie beispielsweise Informations- und Planungsgrundlagen zu schaffen, um nachhaltige Ausbau-Strategien zu entwickeln und umzusetzen, sowie Genehmigungsprozesse zu beschleunigen.

Hieraus ergibt sich eine hohe Anwendungsrelevanz des beantragten Vorhabens der gekoppelten Modelle als Planungswerkzeug. Die nötige Methodenkompetenz zur Beherrschung der Einzelkomponenten und vor allem ihrer Kopplung stellt jedoch eine hohe technische Eintrittsbarriere für ihre kommerzielle Nutzung dar. Dieses Projekt hat erstmals eine Kopplung implementiert und auf dieser Basis die hierdurch erzielbaren Einsparungen energetisch und ökonomisch quantifiziert. Zudem wurden darauf aufbauend Planungswerkzeuge für strategische und direkte Ausbauszenarien entwickelt, für die zudem eine komplexe und aufwändige Datenbearbeitung notwendig war. Da diese Art der Kopplung neuartig war und komplexe Vorarbeiten erforderlich waren, lagen bisher keine gesicherten Daten zur Machbarkeit, zur Verlässlichkeit der Ergebnisse sowie zur Effizienz vor. Daher war die Arbeit des durchgeführten Projektes trotz ihrer Notwendigkeit, die durch die aktuellen Diskussionen zur Versorgungssicherheit nochmals gestiegen ist, nicht direkt aus Industrie- oder städtischen Mitteln finanzierbar.

Gleichzeitig bestand ein wesentlicher Teil der Projektarbeit in der Kombination und Erweiterung bestehender Methoden in den Einzeldisziplinen, so dass eine Forderung benötigt wurde, die nicht allein auf disziplinäre Grundlagenforschung, sondern auf den Übergangsbereich von wissenschaftlichen Grundlagenenergebnissen zur Anwendungsreife abzielt.

Auch die besonderen technischen Aspekte der Kopplung und komplexe Simulation, wie bereits oben angeführt, erfordern die Notwendigkeit der Förderung. Multiphysics-Anwendungen, also Simulationen, die mehrere verschiedene Modellsysteme verbinden, sind ein immer wieder auftauchendes Problem in der computergestützten Wissenschaft. Das Sammeln von Erfahrungen mit der Anwendung der Kopplungs-Bibliothek preCICE ist daher wertvoll für die Support-Qualität des LRZ im Bereich computergestützte Geo- und Umweltwissenschaften. Neue Konzepte zur Installation und Software-Wartung, wie Spack und HPC-Container, sollten immer wieder an komplexen Use-Cases, wie den gekoppelten Simulationen aus dem vorliegenden Projekt erprobt werden. Die enge Zusammenarbeit mit Nutzern aus verschiedenen Bereichen der Wissenschafts-Community ist essentiell für das LRZ, um den Bedarf der Wissenschaftler an Ressourcen und Support zu kennen und auch in Zukunft auf die Bedürfnisse zugeschnittene Services schaffen zu können.

Kein bestehendes Förderinstrument bediente diesen Bedarf bislang. Für eine EU-Förderung hat das vorliegende Projekt keine spezifische europäische Komponente aufgewiesen.

Die unmittelbare Übernahme von großen Teilen der Projektergebnisse in die direkte Anwendung der kommunalen Wärmeplanung und Genehmigungspraxis, sowie die Anknüpfungspotenziale in der Forschung, unterstreicht die Notwendigkeit der Förderung und ihre Angemessenheit.

II.4 Voraussichtlicher Nutzen, insbesondere Verwertbarkeit des Ergebnisses im Sinne des fortgeschriebenen Verwertungsplans

In diesem Kapitel erfolgt zuerst eine allgemeine, kurze Zusammenfassung der Verwertung der Projektergebnisse. Im Anschluss folgt eine detaillierte Darstellung der wirtschaftlichen, wissenschaftlich/technischen und wissenschaftlich/wirtschaftlichen Erfolgsaussichten.

II.4.1 Erfindungen, Schutzrechte

Für alle Projektpartner (TUM-HYD, TUM-ENS, US-SGS, BADW-LRZ) gilt, dass keine Änderung gegenüber der Antragstellung bzw. im Berichtszeitraum besteht. Mit dem Projekt erfolgten keine Erfindungen oder Schutzrechtsanmeldungen.

II.4.2 Wirtschaftliche Erfolgsaussichten

Für die Erreichung der übergreifenden und kommunalen Klimaziele und für eine Sicherung der Wärmeversorgung ist der deutliche und schnelle Ausbau von Wärmepumpen zwingend erforderlich. Durch die hohe Effizienz (hohe erreichbare Jahresarbeitszahlen) von Grundwasser-Wärmepumpen und den synergetischen Nutzen zur Abdeckung des Kühlbedarfs kann die thermische Grundwassernutzung bei vorhandenem Potenzial eine bedeutende Rolle in der Wärmewende spielen. In diesem Kontext tragen die im Projekt GEO.KW entwickelten Werkzeuge dazu bei, die kommunale Wärmewende zu unterstützen, indem Barrieren für den Ausbau von Grundwasser-Wärmepumpen abgebaut werden. In den durch die gekoppelten Modelle erstellten Szenarien wird der Energievorrat, der Energiebedarf, der Speicher sowie der Energietransport im Untergrund hochdynamisch und detailliert für den Ist-Zustand dargelegt und für die Zukunft prognostiziert. Durch diese Betrachtung und ihre Integration in die entwickelten Werkzeuge, kann durch ihre Berücksichtigung in der strategischen Wärmeplanung das vorhandene Potenzial deutlich effizienter genutzt werden.

Im Laufe des Projektes haben sich die Nutzungsmöglichkeiten der im Projekt entwickelten Werkzeuge zum Management und der Optimierung der thermischen Grundwassernutzung konkretisiert bzw. erweitert. In der Konzeptentwicklung wurde wie vorgesehen der praxisnahe Einsatz der Werkzeuge und Projektergebnisse bei Energieversorgern, in der kommunalen Wärmeplanung und bei technischen Planern für die erweiterte thermische Nutzung des Grundwassers und für die Optimierung von Quartierskonzepten bedacht. So wurde in Feedback-Schleifen, insbesondere mit der Stadt München, den Stadtwerken München, technischen Planungsbüros und dem Wasserwirtschaftsamt München, sichergestellt, dass die praxisrelevanten Fragestellungen integriert werden und auch die Anwendung und Pflege der Werkzeuge nach Projektabschluss möglich sind. Aus diesen Erkenntnissen wurde die Notwendigkeit deutlich, dass auch ein Betrieb der Informationswerkzeuge, wie die gekoppelte numerische Simulation auf kleinerem Maßstab ohne den Einsatz von Supercomputern notwendig ist. Dieser Anforderung wurde im Projekt mit der Entwicklung eines praxisnahen Front-Ends, der GEO.KW App, entsprochen. Diese App basiert auf den wesentlichen Ergebnissen des thermisch-hydraulischen Grundwassermodells und der gekoppelten Simulation und beinhaltet alle relevanten Aspekte in der Praxis für die Vor-Planung und Beurteilung der thermischen Grundwassernutzung.

Mit der projektbegleitenden Installation einer Arbeitsgruppe zur Weiterführung des im Projekt erarbeiteten Grundwassermanagement- und Optimierungs-Tools wurde ein Vorstoß zur Einrichtung eines dauerhaften Grundwassermanagements unternommen, der behördliche Stellen der energetischen Stadtplanung und der Genehmigungspraxis unterstützt und Informationen für eine nachhaltige Planung und den strategischen Ausbau der thermischen Grundwassernutzung an Dritte zur Verfügung stellt. Ein Beispiel hierfür ist die Nutzung von Projektergebnissen im hauseigenen Energieplanungsmodell des Energieversorgers Stadtwerke München.

Zur weiteren Umsetzung und Eingliederung der GEO.KW-Werkzeuge und -Ergebnisse in die wasserwirtschaftliche Genehmigungs- und Beurteilungspraxis hat das Wasserwirtschaftsamt München für die nächsten drei Jahre nach Projektende zwei Projektstellen geschaffen. Innerhalb der Laufzeit dieser Stellen sollen die fachlichen und technischen Schnittstellen ausgebaut werden, um die Werkzeuge in der genehmigungsrechtlichen Praxis zu etablieren, sowie weiter eruiert werden inwieweit die Ergebnisse des Projekts für weitere Anwendungen in den wasserwirtschaftlichen Aufgaben verwendet werden können. Im Detail werden Leitlinien erarbeitet, für welche Fragestellungen die GEO.KW Web-Applikation genutzt werden soll und ab welcher Komplexität der Fragestellung zu einer Detailsimulation gegriffen werden muss. Die wesentlichen Randbedingungen und die Parametrisierung solcher Modelle sollen dabei wiederum aus der GEO.KW Modellumgebung erstellt werden, um den Aufbau solcher notwendigen Detailmodelle zu vereinfachen und qualitativ zu verbessern. Hierfür sollen am Wasserwirtschaftsamt München in Zusammenarbeit mit der TU München weitere Schnittstellen geschaffen werden

In der Stadt München stellen die GEO.KW Projektergebnisse mittlerweile eine wichtige Säule der kommunalen Wärmeplanung dar. In einer Studie zur klimaneutralen Wärme München 2035 wird mit Bezug auf die GEO.KW Projektergebnisse die Bedeutung der thermischen Grundwassernutzung für die Wärmewende in der Stadt unterstrichen (FFE & Öko-Institut e. V., 2021). Zudem wurde im Münchener Stadtrat im Rahmen eines Grundsatzbeschlusses für Klimaschutzmaßnahmen die Nutzung und Fortführung der im Projekt GEO.KW entwickelten Werkzeuge und Ergebnisse sowie deren direkte Integration in die kommunale Wärmeplanung beschlossen. Damit wurde auch eine permanente Stelle am Referat für Klimaschutz und Umwelt der Stadt München für die direkte Nutzung und Fortführung der im GEO.KW erarbeiteten Grundwassermanagement- und Wärmeplanungskonzepte und Werkzeuge geschaffen. Die Projektergebnisse werden dabei die Stadtverwaltung bei der Genehmigungspraxis der thermischen Grundwassernutzung unterstützen und diese deutlich vereinfachen und beschleunigen. Dies wird insbesondere auch dadurch unterstützt, dass die Genehmigungsbehörden der Stadt München (Referat für Klimaschutz und Umwelt, untere Wasserbehörde) und des Wasserwirtschaftsamt München (übergeordnete Behörde) nun über die GEO.KW Werkzeuge auf einer gemeinsamen harmonisierten Datengrundlage arbeiten, die gemeinsam aktualisiert wird und die auch den Planern zur Verfügung steht, so dass Synergien genutzt und Beurteilungsprozesse beschleunigt werden können.

Zudem werden die Werkzeuge in der Entwicklung von energetischen Quartierskonzepten im Rahmen der kommunalen Wärmeplanung durch die Stadt genutzt. In diesem Kontext beauftragte das Referat für Klimaschutz und Umwelt der Stadt München im Anschluss an das Projektende den Lehrstuhl für Hydrogeologie der TU München mit der Integration der Projektergebnisse in das Energiestrategiewerkzeug "Modell München", das federführend durch die Stadtwerke München entwickelt wird und zentral für die kommunale Wärmeplanung in München verwendet werden soll (Laufzeit 5 Monate). Die Stadtwerke München als Energieversorger werden zudem die Optimierungsergebnisse in ihre interne strategische Wärme- und Kälteplanung integrieren und so das bestehende Contracting-Geschäftsfeld von netzgebundenen, thermischen Grundwasserlösungen weiterentwickeln (z.B. im Rahmen von neuen kalte Nahwärmenetzen). Weiterhin wird auf Basis der Projektergebnisse ein neu anvisiertes Geschäftsfeld zur Grundwasserwärmepumpe für dezentrale, netzungebundene Wärmelösungen bei den Stadtwerken aufgebaut („M-Wärmepumpe) mit dem Ziel die Wärmewende in der Stadt auch in dezentral versorgten Gebieten weiter zu beschleunigen und die Umsetzung für den Kunden zu vereinfachen. Auch hier stellt es sich für eine erfolgreiche kommunale Wärmeplanung als sehr vorteilhaft heraus, dass die Stadtwerke und die Stadt auf eine gemeinsame Datengrundlage für ihre Planung zurückgreifen, was eine einheitliche Strategieentwicklung deutlich unterstützt.

Die Weiterführung der Projekthalte, -ergebnisse und Werkzeuge ist damit bei allen relevanten Stellen in der Stadt München gewährleistet und zeigt die praktische Relevanz und den Nutzen der Projektergebnisse deutlich auf. Insbesondere ist damit auch eine kontinuierliche Weiterentwicklung der Modellierungsergebnisse (Updates, Grundlagendatenverbesserung) sichergestellt. Zusammenfassend dienen die Projektergebnisse und entwickelten Werkzeuge dazu, die Bearbeitung aller grundwasserrechtlichen Fragen in der Stadt zu erleichtern und genehmigungsrechtliche und strategisch-planerische Entscheidungen ganzheitlich zu betrachten und zu unterstützen. Umgesetzte Anwendungsszenarien sind hier die Bewertung der Grundwassernutzung, strategische Stadt- und Energieplanung (Entwicklung von Szenarien für die thermische Grundwassernutzung zur Integration in Planungswerkzeuge für die kommunale Wärmeplanung), weiterführende Klima- und Umweltstudien zu Veränderungen des Grundwassers unter verschiedenen klimatischen Entwicklungsszenarien, unterschiedlichen Nutzungsszenarien und variierenden Stadtentwicklungsszenarien. Durch das GEO.KW Projekt konnte so das hohe vorhandene Potenzial der thermischen Grundwassernutzung für München aufgezeigt, die kommunale Wärmewende unterstützt, die Genehmigungspraxis vereinfacht und der notwendige Ausbau von grundwassergeführten Wärmepumpen in der Stadt durch eine Verbesserung der Planungsgrundlagen für z.B. die Stadtwerke München beschleunigt werden.

Die im Antrag genannten, unten aufgeführten Verwertungsziele konnten damit erfolgreich erreicht werden:

- Vereinfachung der Genehmigungspraxis und behördlichen Hürden durch die integrative flächenübergreifende Betrachtung der thermischen Nutzung und Randbedingungen und

Erreichung einer hohen Akzeptanz der Ergebnisse und Werkzeuge durch die Betrachtung und Integration aller relevanten Infrastrukturelemente und die realitätsnahen Simulationen

- Aufzeigen von ungenutzten vorhandenen geothermischen Potenzialen in der Pilotregion unter Berücksichtigung einer ganzheitlichen Betrachtung der Umwelteinflüsse
- Erhöhung der Planungssicherheit bei der Umsetzung oberflächennaher geothermischer Systeme

Die im Projekt entwickelten Konzepte und Algorithmen sind für den Transfer auf andere Umsetzungsbeispiele anwendbar und können dazu beitragen, das Management der oberflächennahen geothermischen Energie in anderen Städten umzusetzen und die Nutzung auch dort zu optimieren. Derzeit führt der Lehrstuhl für Hydrogeologie der TU München Gespräche mit dem Landesamt für Umwelt, inwieweit die entwickelte GEO.KW-Web-App bayernweit an Wasserwirtschaftsämtern zum Einsatz kommen könnte. Zudem ist geplant, dieses Werkzeug im Rahmen des landesgeförderten Projekts „GeoSpot“ auch in Augsburg für das Grundwassermanagement einzubinden. Erste Gespräche mit den Partnern aus Augsburg, sowie ein intensiver Austausch mit der dortigen kommunalen Energieplanung diesbezüglich fanden bereits statt. Darüber hinaus wurden auch dem Berliner Senat die Projektergebnisse und -entwicklungen vorgestellt. Auch hier finden derzeit Gespräche über eine mögliche Replikation der GEO.KW Konzepte und Nutzung der Werkzeuge in der Stadt Berlin statt. Durch die OpenSource-Entwicklungen im Projekt ist eine gute Übertragbarkeit auf andere Städte gewährleistet. Darüber hinaus stellen das GEO.KW Modell und die GEO.KW Web-Applikation als Planungs- und Beurteilungs-Tools im Moment die alleinigen Werkzeuge dar, welche die thermische Grundwassernutzung für den kommunalen Bedarf der Wärmeplanung und die dazugehörige Genehmigungspraxis gemeinsam und synergetisch adressieren und zur Verfügung stellen. Zusätzlich bieten diese Tools, insbesondere die GEO.KW Web-Applikation auch für Planer und Interessenten aus der Öffentlichkeit eine Informationsgrundlage zur Erstbeurteilung von Standorten unter Berücksichtigung aller relevanten Aspekte.

Zusätzlich wurde das Kopplungstool preCICE deutlich verbessert worden, insbesondere hinsichtlich der allgemeinen Nutzbarkeit und speziell in der Nutzbarkeit für Anwendungen über die klassische Oberflächenkopplung innerhalb eines Simulationzeitschrittes hinaus. Unter anderem sind durch diese Verbesserungen, die Nutzerzahlen des Tools deutlich gestiegen, so dass aktuell kommerzielle Support-Lizenz-Konzepte mit ersten Partnern erprobt werden (siehe <http://precice.org/community-support-precice.html>).

II.4.3 Wissenschaftliche und/oder technische Erfolgsaussichten

Wie im Projekt vorgesehen und bereits unter II.4.3 ausgeführt, wurden das Optimierungstool und die GEO.KW Web-App für eine Anwendung in der kommunalen Genehmigungs- und Planungspraxis konzipiert und werden dort bereits im Pilotstandort erfolgreich eingesetzt. Durch den vorangegangenen Austausch mit Genehmigungs- und Fachbehörden ist ein effizientes Werkzeug entstanden, das in der Praxis mit großem Erfolg und hoher Akzeptanz verwendet wird. Mit der oben beschriebenen Schaffung von Stellen an den regionalen und kommunalen Behörden, sowie der gleichzeitigen Verwendung der Projektergebnisse beim Energieversorger Stadtwerke München wird zugleich eine Aktualisierung der Datengrundlage gewährleistet und somit eine Fortschreibung der Modellergebnisse und auch der Web-App sichergestellt. Zudem werden weitere Entwicklungen in der Modellkopplung und der Anwendung der GEO.KW Web-App in den Fokus genommen. In diesem Zuge werden mit den Anwendern des Wasserwirtschaftsamtes München, der Stadt München und den Stadtwerken München derzeit weiterführende Entwicklungen geplant. Zum einen wird die Nutzung der GEO.KW Projektergebnisse und Werkzeuge für die detaillierte energetische Quartiersplanung in der Stadt und deren Kopplung mit anderen existierenden Tools in der kommunalen Wärmeplanung („München Modell“, „E-Manager“, etc.) konzipiert. Zum anderen wird seitens der wasserrechtlichen Genehmigungsbehörden, bzw. des Bayerischen Landesamts für Umwelt diskutiert, wie die GEO.KW Web-App mit Werkzeugen bzw. Datenbanken der Wasserwirtschaft („Portawas“) gekoppelt werden kann. Ziel ist eine Erweiterung und automatische Aktualisierung der Datengrundlage (z.B. von neuen thermischen Grundwassernutzungen oder Jahresberichten der Nutzungen) zu erreichen und eine effiziente Schnittstelle zwischen den

Betreibern von Anlagen und den Genehmigungsbehörden zu schaffen, welche die Beantragung und Berichterstattung der Betreiber sowie die Aktualisierung der Daten in der Wasserwirtschaft nochmal deutlich erleichtern wird. Diese Aktualisierungen können dann über die Schnittstelle der GEO.KW Web-App direkt in das gekoppelte Modell übernommen werden.

Darüber hinaus wurden die Ergebnisse des GEO.KW Projektes während und nach Beendigung des Projektes auf vielen Austauschtreffen vorgestellt (z.B. EU-GeoERA Project MUSE; Stakeholder Workshop BMWi-Projekt IWAES; Insight Seminar des Bundesverbands Geothermie, etc.), so dass die Ergebnisse und Entwicklungen in anderen Projekten aufgegriffen werden, wie z.B. im BmBF-geförderten Projekt „SpeicherCity“, das die Beurteilung von Aquiferspeicher-Systemen behandelt. Auch hier wird weiterführend diskutiert, wie die GEO.KW Web-App in Pilotregionen wie Freiburg eingesetzt werden kann. Auf Basis dieser Austauschtreffen ergaben sich auch die in II.4.3 genannten Kooperation mit dem Berliner Senat, der Stadt Augsburg und der Stadt Wien. Durch die Zusammenarbeit und die Kopplung der GEO.KW Modelle mit dem Energiestrategie-Tool der Stadtwerke München wurde auch der Kontakt zur Technischen Universität Wien hergestellt, die in Kooperation mit den Stadtwerken das „München Modell“ mit einem „Multi-Agenten“-Ansatz entwickeln. In diesem Rahmen findet der wissenschaftliche Austausch statt, wie die Konzepte der GEO.KW Modelle und die Ansätze der TU Wien synergetisch weiterentwickelt werden können, insbesondere mit dem Fokus auf die Umsetzung „Kalter Nahwärmenetze“. Da die TU Wien und die TU München derzeit im EU-Horizon Projekt „SAPHEA“ zusammenarbeiten, werden diese Ansätze auch dort weiterentwickelt. Die entwickelte Infrastruktur steht zudem auf Open Source Plattformen (z.B. GitHub) zur Verfügung. Zudem wird angestrebt, die in GEO.KW errichtete Kopplungsinfrastruktur mit preCICE inklusive Kursprogramm am LRZ für andere wissenschaftliche Projekte bzw. für alle Nutzer des SuperMUC-NG anzubieten.

II.4.4 Wissenschaftliche und wirtschaftliche Anschlussfähigkeit

Wie in II.4.3 und II.4.4. bereits ausgeführt, werden die erarbeiteten Werkzeuge und Methoden in die städtische und regionale Verwaltungsstruktur der Pilotregion München integriert, was auch in anderen Städten wie Berlin als Option erwägt wird. Um die Werkzeuge praxisnah und optimal in die jeweilige städtische Struktur und den jeweiligen Services, wie etwa kommunale Geo-Portale zu integrieren, bedarf es weiterer Erfahrungen und Entwicklungen bezüglich der unterschiedlich vorhandenen Anforderungen. Durch die weitere Anwendung und Aktualisierung in der Pilotregion und in andere Städten sollen die GEO.KW-Werkzeuge weiterentwickelt und angepasst werden, um bestenfalls einen Mehrwert für verschiedenste kommunalen Aufgabenbereiche zu liefern wie etwa ein ganzheitliches Untergrundmanagement oder eine nachhaltige Quartiersentwicklung, welche unterschiedlichste Informationen aus den GEO.KW Tools nutzen können wie Energiepotenziale aber auch Grundwasserverhältnisse für z.B. städtische Bewässerungsstrategien etc. Für Letzteres kann gerade das komplexe aufgebaute thermisch-hydraulisches Grundwassermodell verwendet werden und beispielsweise mit detaillierteren Klimadaten gekoppelt werden, um die zukünftig klimawandelbeeinträchtigen Grundwasserverhältnisse in der Stadt zu simulieren, grundwasserrelevante Vulnerabilitätsbereiche zu identifizieren und nachhaltige Mitigationsstrategien zu entwickeln. Der TUM Lehrstuhl Hydrogeologie bereitet diesbezüglich gerade einen Forschungsantrag vor. Auch für die ökologischen Betrachtungen der Ressource sowie des urbanen unterirdischen Hitzeinsel-Effekts kann das GEO.KW Modell erweitert werden und lieferte bereits jetzt wertvolle Erkenntnisse, die in einem engen Austausch mit der Stadt Wien und der Geologischen Bundesanstalt Österreichs diskutiert und in einer wissenschaftlichen Vergleichsstudie in den Städten Wien und München weiter analysiert werden soll.

Darüber hinaus zeigten die Projektergebnisse auf, dass in einigen Fällen die thermische Grundwassernutzung zwar ein hohes Potenzial in der Pilotregion aufweist, jedoch oberirdisch der Platz für eine Brunnenanlage mit Förderbrunnen und Schluckbrunnen nicht gegeben ist. Durch das Aufzeigen dieser Problematik wurden erste Studien am Lehrstuhl Hydrogeologie durchgeführt, ob und wie eine technische Weiterentwicklung hin zu einem Ein-Brunnen-System in der Pilotregion erfolgversprechend und nachhaltig eingesetzt werden könnte.

Durch den Austausch mit Anwendern ergaben sich weitere offene Aspekte bezüglich der Simulation und Prognose zur Optimierung und Planung von geothermischen Systemen, speziell von

geschlossenen oberflächennahen Geothermie-Systemen. Teile der Konzepte und Methoden des GEO.KW Projektes könnten bei einer Entwicklung für geschlossene Systeme auch hier eine deutliche Verbesserung bei der Umsetzung und Planung von Erdwärmesonden erreicht werden und wiederum die Genehmigungspraxis unterstützen. In diesem Kontext wurde vom Lehrstuhl für Erneuerbare und Nachhaltige Energiesystem und dem Lehrstuhl für Hydrogeologie der TU München in Kooperation mit Planungs- und Umsetzungsbüros aus der Wirtschaft ein Forschungsantrag zur Optimierung der geschlossenen oberflächennahen geothermischen Systeme im 7. Energieforschungsprogramm eingereicht.

“Physics-informed Machine Learning” ist ein neuer Bereich der Simulationswissenschaften, der darauf abzielt, physikalische Phänomene mit Modellen vorherzusagen, die entweder auf der Grundlage von Daten und/oder der Kenntnis der zugrundeliegenden physikalischen Gleichungen trainiert wurden. Die Vorhersage von Temperaturanomalien im Untergrund, die durch eine Wärmepumpe verursacht wird, ist für diese Art von Modell perfekt geeignet. Im Vergleich zu einer numerischen Simulation, wird der Berechnungsaufwand drastisch reduziert. Die Dauer einer Vorhersage beträgt nur noch ca. 50 Millisekunden und kann verwendet werden, um die Wärmefahnen von Tausenden von Wärmepumpen schnell zu bestimmen und die Auswirkungen einer Wärmepumpe in Echtzeit zu bewerten. Im Rahmen eines bestehenden Projekts werden bereits Modelle zur Vorhersage von Wärmefahnen für 2D-Szenarien im stationären Zustand entwickelt, und ein neues Projekt zielt auf die Vorhersage von komplexeren Szenarien ab, z. B. bei heterogenen Strömungen, behinderten Strömungen oder 3D- und zeitabhängigen Problemen. Diese Modelle können in den Optimierungsprozess einbezogen werden und könnten es ermöglichen, diesen zu beschleunigen, kleinere Optimierungsprobleme auf kleiner Computerhardware auszuführen oder die Optimierung online zu überwachen und zu bewerten. Dies wäre ein weiterer Schritt die Anwendung der GEO.KW Web-App für die Beurteilung und Planung von größeren oberflächennahen geothermischen Systemen geeigneter zu machen, um so etwa auch die Planung von Kalten Nahwärmenetze weiter zu verbessern.

II.5 Während der Durchführung des Vorhabens dem ZE bekannt gewordenen Fortschritt auf dem Gebiet des Vorhabens bei anderen Stellen

Für alle Projektpartner und den gesamten Projektzeitraum gilt, dass gegenüber dem Stand der Erkenntnisse zur Zeit der Antragstellung uns generell keine für das Projektvorhaben signifikanten neuen Ergebnisse von dritter Seite bekannt geworden sind. Die Studie “Klimaneutrale Wärme München 2035” (FFE & Öko-Institut e. V., 2021) enthält interessante Ergebnisse, insbesondere hinsichtlich der zukünftigen Fernwärmeausbaugebiete in der Pilotregion. Aufgrund der Veröffentlichung zum Zeitpunkt des eigentlichen Projektendes von GEO-KW 11/2021 und der zu erwartenden Dauer bis zur Klärung der datenschutzrechtlichen Rahmenbedingungen für den Erhalt der Studiendaten wurde in Rücksprache mit den SWM entschieden, auf eine Überarbeitung der Optimierungsszenarien hinsichtlich des Fernwärmeausbaus im Rahmen dieses Projekts zu verzichten. Dies wird in der fortführenden kommunalen Wärmeplanung in den GEO.KW-Werkzeugen und Modellen weiter berücksichtigt.

II.6 Erfolgte oder geplante Veröffentlichungen des Ergebnisses

II.6.1 Veröffentlichungen / Papers / Journals / Peer-reviewed Proceedings

Böttcher, F., Davis, K., Halilovic, S., Odersky, L., Pauw, V., Schramm, T., and Zosseder, K. (2021): Optimising the thermal use of groundwater for a decentralized heating and cooling supply in the city of Munich, Germany, EGU General Assembly 2021, online, 19–30 Apr 2021, EGU21-14929, <https://doi.org/10.5194/egusphere-egu21-14929>, 2021

Böttcher, F., Zosseder, K. (2022): Thermal influences on groundwater in urban environments – A multivariate statistical analysis of the subsurface heat island effect in Munich, Science of The Total Environment 810(4). <https://doi.org/10.1016/j.scitotenv.2021.152193>

Halilovic, Smajil; Böttcher, Fabian; Hamacher, Thomas (2021): Maximizing the spatial potential of thermal groundwater use by mixed-integer PDE-constrained optimization. 31st European Conference on Operational Research (EURO 2021), Conference Abstracts 2021

Halilovic, Smajil; Odersky, Leonhard; Hamacher, Thomas (2022): Integration of groundwater heat pumps into energy system optimization models. *Energy* 238/2022

Halilovic, Smajil; Böttcher, Fabian; Kramer, Stephan C.; Piggott, Matthew D.; Zosseder, Kai; Hamacher, Thomas (2022). "Well layout optimization for groundwater heat pump systems using the adjoint approach." *Energy Conversion and Management* 268/2022: 116033.

Halilovic, S., Odersky, L., Böttcher, F., Davis, K., Schulte, M., Zosseder, K. and Hamacher, T., (2022) July. Optimization of an Energy System Model Coupled with a Numerical Hydrothermal Groundwater Simulation. In *Mapping the Energy Future-Voyage in Uncharted Territory-, 43rd IAEE International Conference, July 31-August 3, 2022*. International Association for Energy Economics.

Schramm, T., Heller, H., Böttcher, F., Halilovic, S., Odersky, L., Davis, K., Hamacher, T., Mehl, M., and Zosseder, K. (2020): Geo.KW - Coupling hydrothermal and infrastructure modeling at urban scale for an efficient use of shallow geothermal energy, EGU General Assembly 2020, Online, 4–8 May 2020, EGU2020-10357, <https://doi.org/10.5194/egusphere-egu2020-10357>, 2020.

Schramm, T., Böttcher, F., Pauw, V., Odersky, L., Halilovic, S., and Davis, K. (2021): Geo.KW, a coupled hydrothermal and infrastructure model at urban scale, EGU General Assembly 2021, online, 19–30 Apr 2021, EGU21-12076, <https://doi.org/10.5194/egusphere-egu21-12076>, 2021

Zosseder, Kai; Böttcher, Fabian; Haas, Christine (2020): Das Projekt GEO.KW – Optimierung der Grundwassernutzung für die dezentrale Wärme- und Kältebereitstellung in der Stadt; Geothermische Energie, Heft 95//2020/2

II.6.2 Konferenzen / Projektvorstellungen / Workshops

Tabelle 15: Vorstellung des Projektes auf Konferenzen, Veranstaltungen und Workshops

Datum	Veranstaltung	Beitrag des Projektes
02/2019	GeoTherm (Offenburg, D)	Messe; Vortrag; Poster und Präsentation am Stand der TUM
01/2020	„Die Wärmewende meistern“, Energieagentur EBE/M (Moosach, D)	Workshop; Vortrag K. Zosseder
02/2020	EU-COST-Projekt „Geothermal DHC“ (München, D)	Workshop; Vortrag K. Zosseder; EU-weiter Austausch
09/2020	EU-Cost-Projekt „Shallow Geothermal Energy“ (online)	Webinar
09/2020	„GeoSpot Augsburg“ (Augsburg, D)	Kick-off Meeting; Projekt gefördert vom Landesamt für Umwelt Bayern
10/2020	Berliner Senat (Berlin, D)	Vorstellung des Projektes GEO.KW im Rahmen des wissenschaftlichen Austausches mit der Berliner Senatsverwaltung für Umwelt, Verkehr und Klimaschutz
11/2020	EnergieWendeBauen (Garching, D)	Projektleitertreffen

11/2020	"Klimaanpassungsstrategie München", Stadt München (München, D)	Projekttreffen
11/2020	"Wärmestudie München" (München, D)	Austausch hinsichtlich der GEO.KW Projektergebnisse und -ziele mit der Forschungsstelle für Energiewirtschaft e.V. (FfE) im Rahmen der "Wärmestudie München"
02/2021	preCICE 2021 (online)	Workshop am Informatik Forum Stuttgart;
02/2021	Expertenworkshop Universität Kiel	Vortrag K. Zosseder: Das Projekt GEO-KW - Nutzung von Grundwasserwärmepumpen für die Wärmewende in München
04/2021	EGU 2021 (online)	Jahreskonferenz der European Geophysical Union; Vortrag ??
06/2021	MUSE-Workshop (Wien, A)	Vortrag K. Zosseder: GEO-KW - Groundwater Management Tool to optimize the utilization of Groundwater for Heating and Cooling in Munich
07/2021	EURO 2021 (Athen, GR)	31st European Conference on Operational Research; Vortrag S. Halilovic
07/2021	SIAM OP21 Konferenz (online)	SIAM Conference on Optimization; Vortrag S. Halilovic
08/2021	Stadtwerke Weimar	Vortrag K. Zosseder, Kai, I. Pache: Das Projekt GEO.KW - Nutzung von Grundwasserwärmepumpen für die Wärmewende in München.
10/2021	GEPO-Statusseminar Augsburg, 11.10.2021.	Vortrag K. Zosseder F. Böttcher: GEO.KW - Management und Planung von Grundwasserwärmepumpen
11/2021	Deutscher Geothermiekongress (online)	Konferenz; Vortrag K.Zosseder
02/2022	preCICE 2022 (online)	Workshop am Informatik Forum Stuttgart;
08/2022	IAEE (Tokio, JP)	43rd IAEE International Conference; Vortrag S. Halilovic

II.6.3 Webseiten und -applikationen

Das Projekt wurde fortlaufend auf einer eigens eingerichteten Webseite (www.geo-kw.de) dokumentiert. Dabei wurden Ziele, Werkzeuge und Partner beschreiben sowie die wichtigsten Fortschritte und Veranstaltungen dargestellt.

Die während des Projektes entwickelte Webapplikation ist nach persönlicher Registrierung beim Administrator unter www.geokw.dyn.mwn.de verfügbar.

Anhang

A.1 Literaturverzeichnis

Albarrán-Ordás, A., Zosseder, K. (2022): The Di models method: geological 3-D modeling of detrital systems consisting of varying grain fractions to predict the relative lithological variability for a multipurpose usability. *Bull Eng Geol Environ* 81, 34, <https://doi.org/10.1007/s10064-021-02538-2>

Arnold, M. (2006): Einsatz von Fernkälte aus Grundwasserüberleitungen für ein Rechenzentrum in München. Abschlussbericht. [online] <https://www.swm.de/dms/swm/dokumente/m-fernwaerme/abschlussbericht-fernkaelte-dt.pdf> [08.05.2015]

Baruffa, Fabio, Luigi Iapichino, Nicolay J. Hammer, Vasileios Karakasis (2018): Performance Optimisation of Smoothed Particle Hydrodynamics Algorithms for Multi/Many-Core Architectures, [online] <https://arxiv.org/abs/1612.06090> [17.4.2018]

BDEW (2022): Standardlastprofile Strom. [online] <https://www.bdew.de/energie/standardlastprofile-strom/> [02.11.2022]

Beuth Hochschule Technik für Berlin & ifeu-Institut für Energie und Umweltforschung (2017): Ableitung eines Korridors für den Ausbau der erneuerbaren Wärme im Gebäudebereich, Endbericht https://www.ifeu.de/fileadmin/uploads/BeuthHS_ifeu_Anlagenpotenzial_Endbericht_2017.pdf

Bogaers, A. et al. (2014): Quasi-Newton methods for implicit black-box FSI coupling, *Comput. Methods, Appl. Mech. Engrg.* 279, 2014, pp. 113–132, I S S N: 0045-7825, doi:10.1016/j.cma.2014.06.033, doi: 10.1016/j.cma.2014.06.033.

Bogaers, A. et al. (2016): An evaluation of quasi-newton methods for application to FSI problems involving free surface flow and solid body contact, *Comput. Struct.* 173, 2016, pp. 71–83, doi: 10.1016/j.compstruc.2016.05.018.

Böttcher, F., Casasso, A., Götzl, G., & Zosseder, K. (2019). TAP - Thermal aquifer Potential: A quantitative method to assess the spatial potential for the thermal use of groundwater. *Renewable Energy*, 142(April), <https://doi.org/10.1016/j.renene.2019.04.086>

Böttcher, F., Zosseder, K. (2022): Thermal influences on groundwater in urban environments – A multivariate statistical analysis of the subsurface heat island effect in Munich, *Science of The Total Environment* 810(4), <https://doi.org/10.1016/j.scitotenv.2021.152193>

Bungartz, H.-J., F. Lindner, B. Gatzhammer, M. Mehl, K. Scheufele, A. Shukaev, B. Uekermann (2016): preCICE – A Fully Parallel Library for Multi-Physics Surface Coupling. *Computers & Fluids*, doi:10.1016/j.compfluid.2016.04.003

Bungartz, H.-J., F. Lindner, M. Mehl, and B. Uekermann (2014): A plug-and-play coupling approach for parallel multi-field simulations. *Computational Mechanics*, doi:10.1007/s00466-014-1113-2

Chourdakis, G. et al. (2022): Precice v2: a sustainable and user-friendly coupling library [version 1; peer review: 2 approved], *Open Res Europe* 2:51, 2022, <https://doi.org/10.12688/openreseurope.14445.1>

Davis, Kyle; Schulte, Miriam, (2022a): "COM-4 model to replicate simulation results for the GEO.KW project", <https://doi.org/10.18419/darus-3185>, DaRUS, V1

Davis, Kyle; Schulte, Miriam, (2022b): "REG-30 model to replicate simulation results for the GEO.KW project", <https://doi.org/10.18419/darus-3195>, DaRUS, V1

Degroote, J.; K-J. Bathe, J. Vierendeels (2008): Performance of a new partitioned procedure versus a monolithic procedure in fluid structure interaction, *Computers and Structures* 87.11-12, 2009, pp. 793–801, I S S N: 0045-7949, doi: 10.1016/j.compstruc.2008.11.013, <http://dx.doi.org/10.1016/j.compstruc.2008.11.013>.

Diersch, H.-J. (2014): FEFLOW, Finite Element Method of Flow, Mass and Heat Transport in Porous and Fractured Media. Springer Verlag Berlin Heidelberg, doi:10.1007/978-3-642-38739-5

DIN e.V. (Hrsg.) (2018): DIN V, 18599-2, Energetische Bewertung von Gebäuden - Berechnung des Nutz-, End- und Primärenergiebedarfs für Heizung, Kühlung, Lüftung, Trinkwarmwasser und Beleuchtung, Beuth Verlag, Berlin, 2018.

Dorfner, J. (2016): Open Source Modelling and Optimisation of Energy Infrastructure at Urban Scale. Doctoral Thesis, Technische Universität München, <http://nbn-resolving.de/urn/resolver.pl?urn:nbn:de:bvb:91-diss-20161206-1285570-1-6>

Effati, S., Janfada, M., Esmaeili, M. (2008): Solving the optimal control problem of the parabolic PDEs in exploitation of oil. *Journal of Mathematical Analysis and Applications*, 340, 606-620, doi:<https://doi.org/10.1016/j.jmaa.2007.08.037>

EIGEN (2022): [online] <https://eigen.tuxfamily.org/> [31.10.2022]

Fang, H.R.; Y. Saad. (2009): Two classes of multisection methods for nonlinear acceleration, *Numerical Linear Algebra with Applications* 16.3, 2009, pp. 197–221, ISSN: 10705325, doi:10.1002/nla.617.

FfE GmbH und Öko-Institut e. V. (Hrsg.), 2021: Klimaneutrale Wärme München 2035, Abschlussbericht, 2021, <https://www.oeko.de/fileadmin/oekodoc/Klimaneutrale-Waerme-Muenchen.pdf>

Fraunhofer IEG (Hrsg.) (2022): Roadmap Oberflächennahe Geothermie.

GeoDatenService Bayern, <https://www.gdi.bayern.de/index.html>

Gholami, A., A. Mang, K. Scheufele, C. Davatzikos, M. Mehl, G. Biros (2017): A Framework for Scalable Biophysics-based Image Analysis. *Proceedings of the International Conference for High Performance Computing, Networking, Storage and Analysis, SC17*, doi:10.1145/3126908.3126930

Haber, E., & Hanson, L. (2007): Model problems in PDE-constrained optimization. Tech. Rep. TR-2007-009, Emory University.

Haelterman, R., et al. (2016): Improving the performance of the partitioned QN-ILS procedure for fluid-structure interaction problems: Filtering, *Computers and Structures* 171, 2016, pp. 9–17, ISSN: 00457949, doi:10.1016/j.compstruc.2016.04.001.

Halilovic, Smajil; Böttcher, Fabian; Kramer, Stephan C.; Piggott, Matthew D.; Zosseder, Kai; Hamacher, Thomas (2022): Well layout optimization for groundwater heat pump systems using the adjoint approach, *Energy Conversion and Management* 268/2022: 116033.

Hammond, G.; Lichtner, P.; Mills, R. (2014): Evaluating the performance of parallel subsurface simulators: an illustrative example with pflotran, *Water Resources Research* 50, 2014, pp. 208–228, doi:10.1002/2012WR013483

Herrmann F, Chen S, Heidt L, Elbracht J, Engel N, Kunkel R, Müller U, Röhm H, Vereecken H, Wendland F. (2013): Zeitlich und räumlich hochaufgelöste flächendifferenzierte Simulation des Landschaftswasserhaushalts in Niedersachsen mit dem Model mGROWA. *Hydrologie und Wasserbewirtschaftung* 2013; 57: 206-224. DOI: 10.5675/HyWa_2013,5_2

Herrmann F, Keller L, Kunkel R, Vereecken H, Wendland F. (2015): Determination of spatially differentiated water balance components including groundwater recharge on the Federal State level – A case study using the mGROWA model in North Rhine-Westphalia (Germany). *Journal of Hydrology: Regional Studies* 2015; 4: 294-312. DOI: 10.1016/j.ejrh.2015.06.018

Huber, M., F. Sanger, and T. Hamacher (2013): Coordinating smart homes in micro-grids: A quantification of benefits. *IEEE PES ISGT Europe 2013*, doi:10.1109/isgteurope.2013.6695357

Huber, M., J. Dorfner, and T. Hamacher (2012): Electricity system optimization in the EUMENA region. Technical report, Technische Universität München, doi:10.14459/2013md1171502

ifeu, Fraunhofer IEE und Consentec (2018): Wert der Effizienz im Gebäudesektor in Zeiten der Sektorenkopplung. Studie im Auftrag von Agora Energiewende.

Intel® Parallel Computing Center (IPCC) at Leibniz Supercomputing Centre and Technische Universität München (2014) [online] <https://software.intel.com/articles/intel-parallel-computing-center-at-leibniz-supercomputing-centre-and-technische-universit-t> [17.4.2018]

IWU (2013): Typology Approach for Building Stock Energy Assessment - Calculation Method, Institut Wohnen und Umwelt GmbH (IWU), Darmstadt, 2013

IWU (2019): "TABULA Web Tool," [Online]. Available: <http://webtool.building-typology.eu/#bd>.

Kerl, M., Runge, N., Tauchmann, H. & Goldscheider, N. (2012): Hydrogeologisches Konzeptmodell von München: Grundlage für die thermische Grundwassernutzung. Grundwasser (17): 127-135, Berlin. doi:10.1007/s00767-012-0199-8

Kinzelbach, W (1987): Numerische Methoden zur Modellierung des Transports von Schadstoffen im Grundwasser, Oldenbourg, 1987.

KONWIHR Project: IPHIGENIE/CPMD [online] <http://www.konwih.uni-erlangen.de/projekte/multicore-software-initiative/iphigenie-cpmd.shtml> [17.4.2018]

Lehrstuhl für Hydrogeologie der Technischen Universität München (2015): Abschlussbericht zum Forschungsvorhaben „Erstellung einer Datengrundlage für die Abschätzung des geothermischen Potenzials im oberflächennahen Untergrund des quartären Grundwasserleiters des Großraum Münchens“; Unveröffentl. Abschlussbericht, finanziert vom Bayerischen Staatsministerium für Umwelt und Verbraucherschutz.

Lindner, F. et al. (2015): A comparison of various quasi-newton schemes for partitioned fluid-structure interaction, In proceedings of the VI International Conference on Computational Methods for Coupled Problems in Science and Engineering, Venice, Italy, 2015, pp. 477–488.

LRZ Compute-Cloud (2022): [online] <https://doku.lrz.de/display/PUBLIC/Compute+Cloud> [31.10.2022]

LRZ Environment (2022): [online] <https://doku.lrz.de/display/PUBLIC/Environment+Modules> [31.10.2022]

LRZ Linux-Clusters (2022): [online] <https://doku.lrz.de/display/PUBLIC/Linux+Cluster+Segments> [31.10.2022]

LRZ Server-Hosting (2022): [online] <https://doku.lrz.de/display/PUBLIC/Server-Hosting> [31.10.2022]

LRZ SuperMUC-NG (2022): [online] <https://doku.lrz.de/display/PUBLIC/SuperMUC-NG> [31.10.2022]

Mohammadi, B., Pironneau, O. (2001): Applied Shape Optimization for Fluids. Clarendon Press.

Molar-Cruz, Anahi; Hamacher, Thomas (2019): A GIS-based gray-box approach for the estimation of heat demand at the urban scale. In: INTERNATIONAL ENERGY WORKSHOP (38TH)

Open Street Maps contributors (2018): Planet dump retrieved from <https://planet.osm.org>. [online] <https://www.openstreetmap.org> [15.01.2018]

ParMETIS (2022): [online] <https://github.com/KarypisLab/ParMETIS> [31.10.2022]

petsc (2022): [online] <https://petsc.org/release/> [31.10.2022]

Richter, S. (2004): Entwicklung einer Methode zur integralen Beschreibung und Optimierung urbaner Energiesysteme. Doctoral thesis, Universität Augsburg, <http://d-nb.info/973199415/34>

Rousseau (o. D.): GitHub MoiseRousseau/SALOME-Voronoi, [online] <https://github.com/MoiseRousseau/SALOME-Voronoi/commits?author=MoiseRousseau> [02.11.2022]

Scheufele, K. (2018): Coupling Schemes and Inexact Newton for Multi-Physics and Coupled Optimization Problems, PhD thesis, Universität Stuttgart, 2018.

Spack (2022): [online] <https://github.com/spack/spack> [31.10.2022]

Spence, T., N. Hosters, M. Behr (2019): A multi-vector interface quasi-Newton method with linear complexity for partitioned fluid-structure interaction, *Computer Methods in Applied Mechanics and Engineering* 361, 2020, ISSN: 00457825, doi:10.1016/j.cma.2019.112810, arXiv: 2001.07947.

Statistische Ämter des Bundes und der Länder (Hrsg.) (2015): ZENSUS2011 - Zensusatlas. Bevölkerungszahl, [online] <https://atlas.zensus2011.de/> [20.11.2020]

TUM Pressemitteilung (2014): Rechenrekord auf dem SuperMUC, [online] <https://www.tum.de/die-tum/aktuelles/pressemitteilungen/detail/article/31478/> [17.4.2018]

Umweltbundesamt [Hrsg.] (2019): Den Weg zu einem treibhausgasneutralen Deutschland ressourcenschonend gestalten: ISSN 1862-4359

Umweltministerium Baden-Württemberg (Hrsg.) (2009a): Leitfaden zur Nutzung von Erdwärme mit Grundwasserwärmepumpen, 2009.

Umweltministerium Baden-Württemberg (Hrsg.) (2009b): Arbeitshilfe zum Leitfaden zur Nutzung von Erdwärme mit Grundwasserwärmepumpen, 2009.

Urbs (2022): [online] <https://github.com/tum-ens/urbs> [31.10.2022]

VDI e.V. (Hrsg.) (2012a): VDI, 2076 Part 1, Economic efficiency of building installations, Beuth Verlag, Berlin 2012

VDI e.V. (Hrsg.) (2012b): VDI, 6025, Economy calculation systems for capital goods and plants, Beuth Verlag, Berlin

VDI e.V. (Hrsg.) (2015): VDI, 2078, Berechnung der thermischen Lasten und Raumtemperaturen (Auslegung Kühllast und Jahressimulation), Beuth Verlag, Berlin

Wagstaff, Kiri; Cardie, Claire; Rogers, Seth; Schrödl, Stefan (2001): Constrained k-means clustering with background knowledge, *icml*, vol. 1, pp. 577-584. 2001.

Walker, H., P. Ni (2011): Anderson acceleration for fixed-point iterations, *SIAM Journal on Numerical Analysis* 49, 2011, pp. 1715–1735.

Xun, X., Cao, J., Mallick, B., Carroll, R. J., & Maity, A. (2013): Parameter Estimation of Partial Differential Equation Models. *Journal of the American Statistical Association*, 108(503), 10.1080/01621459.2013.794730. <http://doi.org/10.1080/01621459.2013.794730>

Zosseder, K. (2007): Heterogene Verteilung von PAK-Kontaminationen im Grundwasser, *Bochumer Geowissenschaftliche Arbeiten*. 12, p. 236.

Zoßeder, K., Chavez-Kus, L., Kerl, M., Wagner, B., Kainzmaier, B., Kotyla, P. & Somogyi, G. (2013): GEPO – Geothermisches Potenzial der Münchener Schotterebene, 19. Tagung für Ingenieurgeologie [urn:nbn:de:bvb:91-epub-20130320-1138144-0-3](http://nbn:de:bvb:91-epub-20130320-1138144-0-3)

A.2 Aufträge

A.2.1 bitfactory

Zur Erarbeitung der Leistungsbeschreibung für die Web-Applikation wurde am 12.01.2021 ein Auftrag an die Firma bitfactory, Stuttgart für einen Workshop mit den Projektpartnern vergeben. Kosten: 3.750,00 €

A.2.2 ENIANO GmbH

Am 10.06.2021 wurde der Auftrag "Erstellung einer Webapplication zur Darstellung des Potentials oberflächennaher Geothermie in München" an die Firma ENIANO GmbH, München vergeben. Kosten: 74.874,80 €