

Institut für Wasserbau · Universität Stuttgart

Mitteilungen



Heft 119 Lina Neunhäuserer

Diskretisierungsansätze
zur Modellierung von Strömungs-
und Transportprozessen
in geklüftet-porösen Medien

**Diskretisierungsansätze zur Modellierung von
Strömungs- und Transportprozessen
in geklüftet-porösen Medien**

Von der Fakultät Bau- und Umweltingenieurwissenschaften der Universität Stuttgart
zur Erlangung der Würde eines Doktor-Ingenieurs (Dr.-Ing.)
genehmigte Abhandlung

Vorgelegt von
Lina Neunhäuserer
aus Hannover

| | |
|-----------------|------------------------------|
| Hauptberichter: | Prof. Dr.-Ing. Rainer Helmig |
| Mitberichter: | Prof. Dr. Ralf Kornhuber |
| Mitberichter: | Prof. Dr.-Ing. Werner Zielke |

Tag der mündlichen Prüfung: 10.02.2003

Institut für Wasserbau der Universität Stuttgart

2003

Heft 119 Diskretisierungsansätze
zur Modellierung von Strömungs-
und Transportprozessen
in geklüftet-porösen Medien

von Dr.-Ing. Lina Neunhäuserer

D93 Diskretisierungsansätze zur Modellierung von Strömungs- und Transportprozessen in geklüftet-porösen Medien

Neunhäuserer, Lina:

Diskretisierungsansätze zur Modellierung von Strömungs- und Transportprozessen in geklüftet-porösen Medien / von Lina Neunhäuserer.
Institut für Wasserbau, Universität Stuttgart. - Stuttgart: Inst. für Wasserbau, 2003

(Mitteilungen / Institut für Wasserbau, Universität Stuttgart: H. 119)
Zugl.: Stuttgart, Univ., Diss., 2003
ISBN 3-933761-22-0

Gegen Vervielfältigung und Übersetzung bestehen keine Einwände, es wird lediglich um Quellenangabe gebeten.

Herausgegeben 2003 vom Eigenverlag des Instituts für Wasserbau
Druck: Wolfram Schmidt, Braunschweig

Aloita päiväsi tiikerihypyillä

Kellogg's Frosties, Finland, 1993

Danksagung

Die vorliegende Arbeit entstand im Rahmen meiner Tätigkeit als wissenschaftliche Mitarbeiterin am Institut für Wasserbau der Universität Stuttgart und am Institut für Computeranwendungen im Bauingenieurwesen der Technischen Universität Braunschweig. Während dieser Zeit habe ich die DFG-Projekte *Festgesteins–Aquiferanalog: Experimente und Modellierung, Teilprojekt 3: Einsatz von diskreten Modellansätzen* und *Mehrgittermethoden und adaptive Euler–Lagrange–Verfahren zur Simulation von Strömungs– und Transportvorgängen in Kluftaquiferen* bearbeitet, aus denen ich maßgebliche Impulse für meine Arbeit erhielt.

Herrn Professor Rainer Helmig danke ich ganz herzlich für das gute Arbeitsklima, die Möglichkeit, an interessanten Aufgaben zu forschen und die Ergebnisse international vorzustellen, seine Motivation, seine Flexibilität und nicht zuletzt für die Übernahme des Hauptreferats. Herrn Professor Werner Zielke und Herrn Professor Ralf Kornhuber danke ich sehr für die Übernahme des Koreferats, Herrn Zielke für sein stetes Interesse an meiner Arbeit und Herrn Kornhuber für viele Diskussionen und Anregungen und die gute Zusammenarbeit im Rahmen des „Adaptiv“-Projekts. Ganz besonders möchte ich mich bei Frau Professor Barbara Wohlmuth und Herrn Professor Manfred Krafczyk bedanken, die mir mit ihrer Unterstützung die Fertigstellung dieser Arbeit sehr erleichtert haben.

Mein großer Dank geht an meine Kolleginnen und Kollegen, ohne die das Arbeiten nicht halb soviel Spaß gemacht hätte. Insbesondere danke ich Phillip Hinkelmann für sein Organisationstalent, Olaf Cirpka für viele Fragestunden, Christoph Betz und Reini Schmidt für den Stuttgarter Weihnachtsmarkt, Arne Färber für seine Tipps, Annette Silberhorn–Hemminger und Vincent Lagendijk von der RWTH Aachen für prima Projektarbeit, Sabine Manthey für das Depeche–Mode–Konzert, Maren Paul und Thomas Breiting für viele, viele Teppichnächte, Hartmut Jakobs für tiefeschürfende Diskussionen, Ulrich Ölmann für die Kinoabende und ebenso wie David Werner für viele Diskussionen im IRC, Björn Nachtwey für seine Hilfsbereitschaft und Jan Zimmermann für viel gute Laune. Alex Fuchs danke ich für den Netzgenerator, Volker Reichenberger von der Universität Heidelberg für viele Antworten zu *UG*, und Susanna Gebauer von der FU Berlin für die gute Zusammenarbeit, viele schöne Aufenthalte in Berlin und überhaupt. Martin Imig danke ich für seine unermüdliche Programmierarbeit, und Fritz Lewall, David Werner, Ingo Meyer und Doro Schweizer dafür, dass die Rechner meist taten, was ich von ihnen wollte. Ganz herzlich möchte ich mich bei Brigitte Fraschke und bei Prudence Lawday für ihr Organisationstalent und ihre Hilfsbereitschaft bedanken.

Mein besonderer Dank gilt meinen Eltern sowie meinem Freund Hartmut Katz für seine Geduld und seine Unterstützung.

Inhaltsverzeichnis

| | |
|--|------------|
| Nomenklatur | XIV |
| Kurzfassung | XIX |
| Abstract | XXI |
| 1 Einleitung | 1 |
| 1.1 Motivation | 1 |
| 1.2 Klassifikation von Klüften und Kluftsystemen | 2 |
| 1.3 Modellansätze | 4 |
| 1.3.1 Äquivalente Modellansätze | 6 |
| 1.3.2 Diskrete Modellansätze | 7 |
| 1.4 Zielsetzung | 11 |
| 2 Modellgleichungen | 16 |
| 2.1 Strömung | 16 |
| 2.1.1 Strömung in porösen Medien | 16 |
| 2.1.2 Strömung in der Kluft | 17 |
| 2.2 Transport | 18 |
| 2.3 Anfangs- und Randbedingungen | 24 |
| 3 Diskretisierungsansätze | 26 |
| 3.1 Eigenschaften von Diskretisierungsverfahren | 28 |
| 3.2 Finite-Volumen-Verfahren | 31 |
| 3.2.1 TVD-Verfahren | 36 |
| 3.2.2 Wesentlich nicht-oszillierende Verfahren | 40 |
| 3.2.3 Flux-Corrected Transport | 41 |
| 3.3 Finite-Elemente-Verfahren | 43 |
| 3.3.1 Standard-Galerkin-Verfahren | 47 |
| 3.3.2 Taylor-Galerkin-Verfahren | 47 |
| 3.3.3 Petrov-Galerkin-Verfahren | 48 |
| 3.3.4 Flux-Corrected Transport | 52 |
| 3.3.5 Gemischte Finite-Elemente-Verfahren | 52 |
| 3.3.6 Diskontinuierliche Galerkin-Verfahren | 57 |
| 3.4 Zeitdiskretisierung | 60 |
| 3.5 Resümee | 62 |

| | | |
|----------|--|------------|
| 4 | Verwendete numerische Verfahren | 66 |
| 4.1 | Gemischt-hybride Finite Elemente | 66 |
| 4.2 | Boxverfahren | 68 |
| 4.2.1 | Boxverfahren mit Streamline Upwinding | 68 |
| 4.2.2 | Boxverfahren mit Streamline Orientation | 71 |
| 4.3 | Berücksichtigung von Randbedingungen | 79 |
| 5 | Modellaufbau | 81 |
| 5.1 | Kluftgenerierung | 84 |
| 5.1.1 | Kluftgenerator FRAC3D | 84 |
| 5.2 | Netzgenerierung | 87 |
| 5.2.1 | Netzgenerator ART | 88 |
| 5.2.2 | Erweiterungsmodul FRACMESH | 93 |
| 5.3 | Programmsystem MUFTE-UG | 98 |
| 5.3.1 | Software-Toolbox UG | 98 |
| 5.3.2 | Softwarepaket MUFTE | 100 |
| 6 | Beispiele | 102 |
| 6.1 | Einzelkluft | 103 |
| 6.1.1 | Modellproblem | 103 |
| 6.1.2 | Ergebnisse der Strömungsmodellierung | 105 |
| 6.1.3 | Ergebnisse der Transportmodellierung | 111 |
| 6.1.4 | Diskussion der Ergebnisse | 118 |
| 6.2 | Kluftkreuzung | 119 |
| 6.2.1 | Modellprobleme | 119 |
| 6.2.2 | Ergebnisse der Strömungsmodellierung | 121 |
| 6.2.3 | Ergebnisse der Transportmodellierung | 132 |
| 6.2.4 | Diskussion der Ergebnisse | 144 |
| 6.3 | Kluftnetzwerk | 145 |
| 6.3.1 | Modellproblem mit sechs Klüften I | 146 |
| 6.3.2 | Modellproblem mit sechs Klüften II | 149 |
| 6.3.3 | Modellproblem mit einem stochastisch generierten Kluftnetzwerk | 153 |
| 6.3.4 | Diskussion der Ergebnisse | 158 |
| 7 | Zusammenfassung und Ausblick | 160 |
| 7.1 | Zusammenfassung | 160 |
| 7.2 | Ausblick | 163 |
| | Summary | 167 |
| | Literaturverzeichnis | 181 |

Abbildungsverzeichnis

| | | |
|------|--|----|
| 1.1 | Advektive und dispersive Transportvorgänge in geklüftet-porösem Gestein (MACKAY & CHERRY (1989)[141], modifiziert) | 2 |
| 1.2 | Ansicht eines geklüfteten Bundsandsteinblocks mit Kluftspuren und halbrunden Bohrspuren (DFG-Projekt <i>Festgesteins-Aquiferanalog: Experimente und Modellierung</i> , Feldversuchsblock Pliezhausen, Mittelteil der Westwand) | 3 |
| 1.3 | Repräsentatives Elementarvolumen REV (BEAR (1972)[15], modifiziert) | 5 |
| 1.4 | Verschiedene Ausschnitte aus einem geklüfteten System (KRÖHN (1991)[124]) | 6 |
| 1.5 | Anforderungen an die numerische Modellierung von Strömungs- und Transportprozessen in geklüftet-porösen Medien | 12 |
| 1.6 | Fluss in Kluft und Matrix in Abhängigkeit vom Modellansatz. Links: Niederdimensional. Rechts: Äquidimensional. | 14 |
| 2.1 | Wirkung ausgewählter Transportprozesse auf einen kreisförmigen Tracerpuls | 20 |
| 2.2 | Durchbruchskurven. Beispiele für a) Fick'schen und b) – d) Nicht-Fick'schen Transport | 22 |
| 3.1 | Analytische Lösung der eindimensionalen Advektions-Dispersions-Gleichung für unterschiedliche Peclet-Zahlen (HELMIG (1997)[85], modifiziert) | 30 |
| 3.2 | Finite Volumen mit zugehörigen Kontrollvolumen V_i . Links: Zellenzentriert. Rechts: Knotenzentriert. | 31 |
| 3.3 | Finite Volumen: Gradienten für die Ermittlung der Flüsse zwischen den Zellen. Links: 5-Punkt-Differentiation. Rechts: 9-Punkt-Differentiation. | 32 |
| 3.4 | Patch am Knoten i mit Box V_i , Integrationspunkte, Ansatz- und Wichtungsfunktion für den Knoten i | 34 |
| 3.5 | Godunov-Verfahren für konstante Verteilungsfunktionen | 37 |
| 3.6 | Links: Region zweiter Ordnung. Rechts: Region mit TVD-Eigenschaften. | 38 |
| 3.7 | Region zweiter Ordnung mit TVD-Eigenschaften | 39 |
| 3.8 | Flux-Corrected Transport Verfahren (CIRPKA & HELMIG (1996)[41]) | 43 |
| 3.9 | Standard-Galerkin-Verfahren: Ansatzfunktion N_i und Wichtungsfunktion W_i am Knoten i | 47 |
| 3.10 | Petrov-Galerkin-Verfahren: Ansatzfunktion N_i und Wichtungsfunktion W_i am Knoten i nach Glg. 3.52 | 49 |
| 3.11 | Streamline-Upwind Petrov-Galerkin-Verfahren: Ansatzfunktion N_i und Wichtungsfunktion W_i am Knoten i | 51 |
| 3.12 | Ansatzfunktionen im \mathcal{RT}_0 für viereckiges (links) und dreieckeckiges (mitte) Referenzelement sowie Beispiel einer Geschwindigkeitsverteilung im \mathcal{RT}_0 für ein Viereckselement (rechts). | 54 |

| | | |
|------|--|----|
| 3.13 | Polynome der Ansatzfunktionen für diskontinuierliche Galerkin–Verfahren bei einem Approximationsgrad von $p = 2$ im eindimensionalen Raum | 59 |
| 4.1 | Patch am Knoten i mit Box V_i . Links: Klassisches Upwinding entlang der Elementkante. Rechts: Streamline Upwinding. | 68 |
| 4.2 | Patch am Knoten 0 , Strömung unter 30° | 69 |
| 4.3 | Patch am Knoten i mit Box V_i . Links: Klassisches Upwinding. Rechts: Projektion von α_0 , das in Richtung von \underline{v}_{ij} definiert ist, auf e_{ij} | 71 |
| 4.4 | Konzentrationsverteilung im Modellgebiet nach 60000[s], bestimmt mit analytischer Lösung, Boxverfahren mit Fully Upwinding (FU) und Boxverfahren mit Streamline Orientation (SO). Links: $Pe = 100$. Rechts: $Pe = 1$ | 75 |
| 4.5 | Modellgebiet mit Vernetzung, Punktquelle. Links: Dreiecke. Rechts: Vierecke. . . | 76 |
| 4.6 | Dreiecksnetz, $Pe = 0.6899\dots 1$. Links: Fully Upwinding. Rechts: Mit Stromlinienorientierung. | 76 |
| 4.7 | Dreiecksnetz, $Pe = 0.6899\dots 1$. Links: Prozessadaptives α_0 . Rechts: Prozessadaptives α_0 und Stromlinienorientierung. | 77 |
| 4.8 | Vierecksnetz, $Pe = 1$. Links: Fully Upwinding. Rechts: Prozessadaptives α_0 . . . | 77 |
| 4.9 | Dreiecksnetz, $Pe = 68.986\dots 100$. Links: Fully Upwinding. Rechts: Prozessadaptives α_0 und Stromlinienorientierung. | 78 |
| 4.10 | Vierecksnetz, $Pe = 100$. Links: Fully Upwinding. Rechts: Prozessadaptives α_0 . . . | 78 |
| 5.1 | Teilschritte der Modellbildung für ein geklüftet–poröses Medium (HEMMINGER, NEUNHÄUSERER & HELMIG (2000)[89]) | 81 |
| 5.2 | Deterministische 2D– und 3D–Kluftstrukturmodelle (NEUNHÄUSERER, HEMMINGER & HELMIG (2000)[162]) | 85 |
| 5.3 | Stochastische 2D– und 3D–Kluftstrukturmodelle (SILBERHORN–HEMMINGER (2002)[194]) | 85 |
| 5.4 | Vernetzung der Topfläche eines Bohrkerns mit ART. Links: Konstante Elementgröße. Rechts: Mit Verfeinerung entlang der Klüfte. | 90 |
| 5.5 | Vernetzung des Feldversuchsblocks Pliezhausen mit ART. Links: 3D–Kluftnetzwerk. Rechts: 3D–Kluft–Matrix–System. | 91 |
| 5.6 | Ausschnitt der Vernetzung des Feldversuchsblocks Pliezhausen mit ART. Links: 3D–Kluftnetzwerk. Rechts: 3D–Kluft–Matrix–System. | 91 |
| 5.7 | Dateien und Eingabeformat für ART | 93 |
| 5.8 | Vernetzung der Klüfte. Links: Niederdimensional mit 1D–Elementen. Mitte, Rechts: Äquidimensional mit Viereckselementen, Grobgitter. | 94 |
| 5.9 | Definition der Teilgebiete in den Klüften. Links: Die Kluftkreuzung erhält eine eigene Subdomain. Rechts: Die Kluftkreuzung wird der Subdomain der ersten anliegenden Kluft zugeordnet. | 95 |
| 5.10 | Positionierung der Kluftkreuzungsknoten. Links: Verschiebung entlang der Winkelhalbierenden. Rechts: Verschiebung auf die Schnittpunkte der Kluftkanten. . | 96 |
| 5.11 | Glätten des Kreuzungsbereiches. Links: Ohne Glättung. Mitte: Glättung vor dem Verschieben der Knoten. Rechts: Glättung nach dem Verschieben der Knoten. . . | 96 |
| 5.12 | Glätten des Kreuzungsbereiches. Links: Mit Faktor 0.5. Rechts: Mit Faktor 0.75. . | 97 |
| 5.13 | Kluftenden. Links: Dreieck. Rechts: Rechteck. | 97 |

| | | |
|------|--|-----|
| 5.14 | Struktur des Programmsystems <i>MUFTE-UG</i> | 98 |
| 5.15 | Struktur der Software-Toolbox <i>UG</i> | 99 |
| 6.1 | Modellgebiet mit Einzelkluft. Links: Geometrie und Grobgitter. Rechts: Skizze des Modellgebiets mit den Umrissen der zweidimensional dargestellten Kluft und den Schnittlinien A – E, entlang derer die Zustandsgrößen untersucht und miteinander verglichen werden (Kluftbreite nicht maßstäblich). | 104 |
| 6.2 | Druckverteilung im Modellgebiet mit Einzelkluft. | 105 |
| 6.3 | Geschwindigkeitsverteilung entlang Schnittlinie B für Level 2, 3 und 4 (gemischt-hybride FE). Links: x-Komponente. Rechts: y-Komponente. | 106 |
| 6.4 | Geschwindigkeitsverteilung entlang Schnittlinie D für Level 2, 3 und 4 (gemischt-hybride FE). Links: x-Komponente. Rechts: y-Komponente. | 106 |
| 6.5 | Kluftenden. Links: Langes Dreieck. Mitte: Kurzes Dreieck. Rechts: Rechteck. | 107 |
| 6.6 | Druckverteilung für drei Formen des Kluftendes. Links: Linie B. Rechts: Linie D. | 107 |
| 6.7 | Geschwindigkeitsverteilung entlang Schnittlinie B für drei Formen des Kluftendes (gemischt-hybride FE). Links: x-Komponente. Rechts: y-Komponente. | 108 |
| 6.8 | Geschwindigkeitsverteilung entlang Schnittlinie D für drei Formen des Kluftendes (gemischt-hybride FE). Links: x-Komponente. Rechts: y-Komponente. | 108 |
| 6.9 | Geschwindigkeitsverteilung entlang Schnittlinie B für Boxverfahren (niederdimensional: BOX 1d, äquidimensional: BOX 2d) und gemischt-hybride FE (MHFE 2d). Links: x-Komponente. Rechts: y-Komponente. | 109 |
| 6.10 | Geschwindigkeitsverteilung entlang Schnittlinie D für Boxverfahren (niederdimensional: BOX 1d, äquidimensional: BOX 2d) und gemischt-hybride FE (MHFE 2d). Links: x-Komponente. Rechts: y-Komponente. | 109 |
| 6.11 | Geschwindigkeitsverteilung im Bereich des unteren Kluftendes. Links: Niederdimensional. Rechts: Äquidimensional. | 110 |
| 6.12 | Geschwindigkeitsverteilung entlang der Schnittlinien C und E (gemischt-hybride FE). Links: x-Komponente. Rechts: y-Komponente. | 110 |
| 6.13 | Konzentrationsverteilung im Modellgebiet nach 24000[s]. Links: Fully Upwinding. Rechts: Streamline Orientation. | 111 |
| 6.14 | Links: Konzentrationsverteilung entlang Schnittlinie A. Rechts: Durchbruchskurven am Ausstromrand ($x = 1.0[m]$). Jeweils für Fully Upwinding (fu, Level 2–4) und Streamline Orientation (so, Level 2–3). | 111 |
| 6.15 | Konzentrationsverteilung im Modellgebiet, niederdimensionaler Ansatz. Links: Nach 18000[s]. Rechts: Nach 24000[s]. | 113 |
| 6.16 | Konzentrationsverteilung im Modellgebiet, äquidimensionaler Ansatz, Kluftende langes Dreieck. Links: Nach 18000[s]. Rechts: Nach 24000[s]. | 113 |
| 6.17 | Konzentrationsverteilung im Modellgebiet, äquidimensionaler Ansatz, Kluftende Rechteck. Links: Nach 18000[s]. Rechts: Nach 24000[s]. | 113 |
| 6.18 | Konzentrationsverteilung entlang Schnittlinie D für niederdimensionalen (1d) und äquidimensionalen Ansatz (2d Dreieck und 2d Rechteck). Links: Nach 18000[s]. Rechts: Nach 24000[s]. | 114 |
| 6.19 | Links: Durchbruchskurven am Ausstromrand ($x = 1.0[m]$) für niederdimensionalen (1d) und äquidimensionalen Ansatz (2d Dreieck und 2d Rechteck). Rechts: Zoom. | 115 |

| | | |
|------|--|-----|
| 6.20 | Links: Konzentrationsverteilung entlang Schnittlinie A nach 24000[s]. Rechts: Durchbruchskurve am Ausstromrand ($x = 1.0[m]$). Jeweils für Boxverfahren (BOX 2d) und gemischt-hybride FE (MHFE 2d) in der Strömungsdiskretisierung, Streamline Orientation (Level 3) für Transport. | 115 |
| 6.21 | Verteilung der Peclet-Zahlen zwischen $Pe = 0.2$ und $Pe = 0.8$ im Modellgebiet bei äquidimensionaler Modellierung. Links: Dreieckiger Kluftabschluss. Rechts: Rechteckiger Kluftabschluss. | 117 |
| 6.22 | Modellgebiet mit Kluftkreuzung A. Links: Geometrie und Grobgitter. Rechts: Skizze des Modellgebiets mit den Umrissen der zweidimensional dargestellten Kluft und den Schnittlinien A – E, entlang derer die Zustandsgrößen untersucht und miteinander verglichen werden (Kluftbreite nicht maßstäblich). | 120 |
| 6.23 | Modellgebiet mit Kluftkreuzung B. Links: Geometrie und Grobgitter. Rechts: Skizze des Modellgebiets mit den Umrissen der zweidimensional dargestellten Kluft und den Schnittlinien A – E, entlang derer die Zustandsgrößen untersucht und miteinander verglichen werden (Kluftbreite nicht maßstäblich). | 120 |
| 6.24 | Druckverteilung im Modellgebiet mit Kluftkreuzung A für Level 4. Links: Niederdimensional. Rechts: Äquidimensional. | 121 |
| 6.25 | Geschwindigkeitsverteilung in der Kluftkreuzung A für Level 4 (äquidimensional). Links: Boxverfahren. Rechts: Gemischt-hybride Finite Elemente. | 121 |
| 6.26 | Geschwindigkeitsverteilung entlang Schnittlinie A für Level 2, 3 und 4 (Boxverfahren, äquidimensional). Links: x-Komponente. Rechts: y-Komponente. | 122 |
| 6.27 | Geschwindigkeitsverteilung entlang Schnittlinie B für Level 2, 3 und 4 (Boxverfahren, äquidimensional). Links: x-Komponente. Rechts: y-Komponente. | 122 |
| 6.28 | Geschwindigkeitsverteilung entlang Schnittlinie C für Level 2, 3 und 4 (Boxverfahren, äquidimensional). Links: x-Komponente. Rechts: y-Komponente. | 123 |
| 6.29 | Geschwindigkeitsverteilung entlang Schnittlinie D für Level 2, 3 und 4 (Boxverfahren, äquidimensional). Links: x-Komponente. Rechts: y-Komponente. | 123 |
| 6.30 | Geschwindigkeitsverteilung entlang Schnittlinie A für Level 2, 3 und 4 (gemischt-hybride Finite Elemente, äquidimensional). Links: x-Komponente. Rechts: y-Komponente. | 124 |
| 6.31 | Geschwindigkeitsverteilung entlang Schnittlinie B für Level 2, 3 und 4 (gemischt-hybride Finite Elemente, äquidimensional). Links: x-Komponente. Rechts: y-Komponente. | 124 |
| 6.32 | Geschwindigkeitsverteilung entlang Schnittlinie C für Level 2, 3 und 4 (gemischt-hybride Finite Elemente, äquidimensional). Links: x-Komponente. Rechts: y-Komponente. | 125 |
| 6.33 | Geschwindigkeitsverteilung entlang Schnittlinie D für Level 2, 3 und 4 (gemischt-hybride Finite Elemente, äquidimensional). Links: x-Komponente. Rechts: y-Komponente. | 125 |
| 6.34 | Geschwindigkeitsverteilung entlang Schnittlinie A für Level 4 für Boxverfahren, niederdimensional (1d BOX) und gemischt-hybride Finite Elemente, äquidimensional (2d MHFE). Links: x-Komponente. Rechts: y-Komponente. | 126 |
| 6.35 | Geschwindigkeitsverteilung entlang Schnittlinie B für Level 4 für Boxverfahren, niederdimensional (1d BOX) und gemischt-hybride Finite Elemente, äquidimensional (2d MHFE). Links: x-Komponente. Rechts: y-Komponente. | 126 |

6.36 Geschwindigkeitsverteilung entlang Schnittlinie C für Level 4 für Boxverfahren, niederdimensional (1d BOX) und gemischt-hybride Finite Elemente, äquidimensional (2d MHFE). Links: x-Komponente. Rechts: y-Komponente. 127

6.37 Geschwindigkeitsverteilung entlang Schnittlinie D für Level 4 für Boxverfahren, niederdimensional (1d BOX) und gemischt-hybride Finite Elemente, äquidimensional (2d MHFE). Links: x-Komponente. Rechts: y-Komponente. 127

6.38 Druckverteilung im Modellgebiet mit Klufftkreuzung B für Level 4. Links: Niederdimensional. Rechts: Äquidimensional. 128

6.39 Geschwindigkeitsverteilung in der Klufftkreuzung B für Level 4 (äquidimensional). Links: Boxverfahren. Rechts: Gemischt-hybride Finite Elemente. 128

6.40 Geschwindigkeitsverteilung entlang Schnittlinie A für Level 4 (L4) und Level 5 (L5) jeweils für Boxverfahren, äquidimensional (2d BOX) und gemischt-hybride Finite Elemente, äquidimensional (2d MHFE) sowie für Level 4 für Boxverfahren, niederdimensional (1d BOX). Links: x-Komponente. Rechts: y-Komponente. 130

6.41 Geschwindigkeitsverteilung entlang Schnittlinie B für Level 4 (L4) und Level 5 (L5) jeweils für Boxverfahren, äquidimensional (2d BOX) und gemischt-hybride Finite Elemente, äquidimensional (2d MHFE) sowie für Level 4 für Boxverfahren, niederdimensional (1d BOX). Links: x-Komponente. Rechts: y-Komponente. 130

6.42 Geschwindigkeitsverteilung entlang Schnittlinie C für Level 4 (L4) und Level 5 (L5) jeweils für Boxverfahren, äquidimensional (2d BOX) und gemischt-hybride Finite Elemente, äquidimensional (2d MHFE) sowie für Level 4 für Boxverfahren, niederdimensional (1d BOX). Links: x-Komponente. Rechts: y-Komponente. 131

6.43 Geschwindigkeitsverteilung entlang Schnittlinie D für Level 4 (L4) und Level 5 (L5) jeweils für Boxverfahren, äquidimensional (2d BOX) und gemischt-hybride Finite Elemente, äquidimensional (2d MHFE) sowie für Level 4 für Boxverfahren, niederdimensional (1d BOX). Links: x-Komponente. Rechts: y-Komponente. 131

6.44 Konzentrationsverteilung im Modellgebiet mit Klufftkreuzung A nach 2400[s]. Links: Fully Upwinding. Rechts: Streamline Orientation. 132

6.45 Links: Konzentrationsverteilung entlang Schnittlinie B. Rechts: Konzentrationsverteilung entlang Schnittlinie D. Jeweils für Fully Upwinding (fu, Level 2-3) und Streamline Orientation (so, Level 2-3). 133

6.46 Links: Konzentrationsverteilung entlang Schnittlinie B. Rechts: Konzentrationsverteilung entlang Schnittlinie D. Jeweils für Streamline Orientation im gesamten Modellgebiet (Kluft so) und Streamline Orientation in der Matrix, Fully Upwinding in der Kluft (Kluft fu). 133

6.47 Konzentrationsverteilung im Modellgebiet mit Klufftkreuzung A nach 18000[s]. Links: Fully Upwinding. Rechts: Streamline Orientation. 134

6.48 Links: Konzentrationsverteilung entlang Schnittlinie E. Rechts: Durchbruchkurven am Ausstromrand ($x = 1.0[m]$). Jeweils für Fully Upwinding (fu, Level 2-3) und Streamline Orientation (so, Level 2-3). 134

6.49 Konzentrationsverteilung im Modellgebiet mit Klufftkreuzung A nach 2400[s]. Level 3, Streamline Orientation. Links: Niederdimensional. Rechts: Äquidimensional. 135

- 6.50 Links: Konzentrationsverteilung entlang Schnittlinie B. Rechts: Konzentrationsverteilung entlang Schnittlinie D. Jeweils für Boxverfahren, niederdimensional (1d BOX) und gemischt-hybride FE, äquidimensional (2d MHFE) in der Strömungsdiskretisierung, Streamline Orientation (Level 3) für Transport. 135
- 6.51 Durchbruchskurven am Ausstromrand ($x = 1.0[m]$). Für Boxverfahren, niederdimensional (1d BOX) und gemischt-hybride FE, äquidimensional (2d MHFE) in der Strömungsdiskretisierung, Streamline Orientation (Level 3) für Transport. 136
- 6.52 Konzentrationsverteilung im Modellgebiet mit Klufftkreuzung A nach 2400[s]. Level 3, äquidimensionaler Ansatz, Streamline Orientation. Links: Strömungsdiskretisierung mit Boxverfahren. Rechts: Strömungsdiskretisierung mit gemischt-hybriden FE. 137
- 6.53 Links: Konzentrationsverteilung entlang Schnittlinie B. Rechts: Konzentrationsverteilung entlang Schnittlinie D. Level 3, äquidimensionaler Ansatz, Streamline Orientation. Jeweils für Strömungsdiskretisierung mit Boxverfahren (BOX 2d) und mit gemischt-hybriden FE (MHFE 2d). 137
- 6.54 Links: Durchbruchskurven am Ausstromrand ($x = 1.0[m]$) für Level 3, äquidimensionaler Ansatz, Streamline Orientation, Strömungsdiskretisierung mit Boxverfahren (BOX 2d) und mit gemischt-hybriden FE (MHFE 2d). Rechts: Zoom. . 138
- 6.55 Geschwindigkeitsverteilung im Modellgebiet mit Klufftkreuzung A, rechtes Klufftende der durchgehenden Klufft. Links: Boxverfahren. Rechts: Gemischt-hybride FE. 138
- 6.56 Konzentrationsverteilung im Modellgebiet mit Klufftkreuzung A nach 2400[s], rechtes Klufftende der durchgehenden Klufft. Links: Boxverfahren. Rechts: Gemischt-hybride FE. 139
- 6.57 Konzentrationsverteilung im Modellgebiet mit Klufftkreuzung B nach 2400[s]. Links: Fully Upwinding. Rechts: Streamline Orientation. 139
- 6.58 Links: Konzentrationsverteilung entlang Schnittlinie B. Rechts: Konzentrationsverteilung entlang Schnittlinie D. Jeweils für Fully Upwinding (fu, Level 2–3) und Streamline Orientation (so, Level 2–3). 140
- 6.59 Links: Konzentrationsverteilung entlang Schnittlinie B. Rechts: Konzentrationsverteilung entlang Schnittlinie D. Jeweils für Streamline Orientation im gesamten Modellgebiet (Klufft so) und Streamline Orientation in der Matrix, Fully Upwinding in der Klufft (Klufft fu). 140
- 6.60 Konzentrationsverteilung im Modellgebiet mit Klufftkreuzung B nach 18000[s]. Links: Fully Upwinding. Rechts: Streamline Orientation. 141
- 6.61 Links: Konzentrationsverteilung entlang Schnittlinie E. Rechts: Durchbruchskurven am Ausstromrand ($x = 1.0[m]$). Jeweils für Fully Upwinding (fu, Level 2–3) und Streamline Orientation (so, Level 2–3). 142
- 6.62 Konzentrationsverteilung im Modellgebiet mit Klufftkreuzung B nach 2400[s]. Level 3, Streamline Orientation. Links: Niederdimensional. Rechts: Äquidimensional. 142
- 6.63 Links: Konzentrationsverteilung entlang Schnittlinie B. Rechts: Konzentrationsverteilung entlang Schnittlinie D. Jeweils für Boxverfahren, niederdimensional (1d BOX) und gemischt-hybride FE, äquidimensional (2d MHFE) in der Strömungsdiskretisierung, Streamline Orientation (Level 3) für Transport. 143

| | | |
|------|--|-----|
| 6.64 | Links: Konzentrationsverteilung entlang Schnittlinie B. Rechts: Konzentrationsverteilung entlang Schnittlinie D. Level 3, äquidimensionaler Ansatz, Streamline Orientation. Jeweils für Strömungsdiskretisierung mit Boxverfahren (BOX 2d) und mit gemischt-hybriden FE (MHFE 2d). | 143 |
| 6.65 | Modellgebiet mit Kluftnetzwerk I. Links: Geometrie und Grobgitter. Rechts: Druckverteilung, Level 3. | 146 |
| 6.66 | Geschwindigkeitsverteilung in der oberen Kluftkreuzung, Level 3. Links: Niederdimensional. Rechts: Äquidimensional. | 147 |
| 6.67 | Konzentrationsverteilung im Modellgebiet nach 2000[s], Level 3. Links: Niederdimensional. Rechts: Äquidimensional. | 148 |
| 6.68 | Konzentrationsverteilung in der oberen Kluftkreuzung nach 2000[s], Level 3. Links: Niederdimensional. Rechts: Äquidimensional. | 148 |
| 6.69 | Konzentrationsverteilung in der oberen Kluftkreuzung nach 10000[s], Level 3. Links: Niederdimensional. Rechts: Äquidimensional. | 148 |
| 6.70 | Durchbruchskurven am Ausstromrand ($x = 1.0[m]$). Für Boxverfahren, niederdimensional (1d BOX) und gemischt-hybride FE, äquidimensional (2d MHFE) in der Strömungsdiskretisierung, Boxverfahren für den Transport. | 149 |
| 6.71 | Modellgebiet mit Kluftnetzwerk II. Links: Geometrie und Grobgitter. Rechts: Druckverteilung, Level 3. | 150 |
| 6.72 | Geschwindigkeitsverteilung im Bereich der oberen rechten Kluft, Level 3, niederdimensional, Boxverfahren. | 151 |
| 6.73 | Geschwindigkeitsverteilung im Bereich der oberen rechten Kluft, Level 3, äquidimensional, gemischt-hybride FE. | 151 |
| 6.74 | Geschwindigkeitsverteilung im Bereich der oberen Kluft am linken Rand, Level 3. Links: Niederdimensional. Rechts: Äquidimensional. | 151 |
| 6.75 | Konzentrationsverteilung im Modellgebiet nach 3600[s], Level 3. Links: Niederdimensional. Rechts: Äquidimensional. | 152 |
| 6.76 | Durchbruchskurven am Ausstromrand ($x = 1.0[m]$). Für Boxverfahren, niederdimensional (1d BOX) und gemischt-hybride FE, äquidimensional (2d MHFE) in der Strömungsdiskretisierung, Boxverfahren für Transport, jeweils Level 2 (L2) und Level 3 (L3). | 152 |
| 6.77 | Modellgebiet mit stochastisch generiertem Kluftnetzwerk. Links: Geometrie und Grobgitter. Rechts: Druckverteilung, Level 2. | 154 |
| 6.78 | Geschwindigkeitsverteilung im Bereich der linken Kluftkreuzung bei etwa $y = 0.5[m]$, Level 2, Boxverfahren. Links: Niederdimensional. Rechts: Äquidimensional. | 155 |
| 6.79 | Geschwindigkeitsverteilung im Bereich der linken Kluftkreuzung bei etwa $y = 0.5[m]$, Level 2, gemischt-hybride FE, äquidimensional. Links: Mehrgitterlöser. Rechts: Direkter Löser. | 155 |
| 6.80 | Konzentrationsverteilung nach 60[s], Level 2, niederdimensional, Boxverfahren für Strömung und Transport. Links: Gesamtes Modellgebiet. Rechts: Bereich der linken Kluftkreuzung bei $y = 0.5[m]$ | 156 |
| 6.81 | Konzentrationsverteilung nach 60[s], Level 2, äquidimensional, Boxverfahren für Strömung und Transport. Links: Gesamtes Modellgebiet. Rechts: Bereich der linken Kluftkreuzung bei $y = 0.5[m]$ | 157 |

| | | |
|------|---|-----|
| 6.82 | Konzentrationsverteilung nach 60[s], Level 2, äquidimensional, gemischt-hybride FE für die Strömung, Boxverfahren für den Transport. Links: Gesamtes Modellgebiet. Rechts: Bereich der linken Kluftkreuzung bei $y = 0.5[m]$ | 157 |
| 6.83 | Durchbruchskurven am Ausstromrand ($x = 0.6[m]$). Für Boxverfahren, niederdimensional (1d BOX), Boxverfahren, äquidimensional (2d BOX) und gemischt-hybride FE, äquidimensional (2d MHFE) in der Strömungsdiskretisierung, Boxverfahren mit Fully Upwinding (fu) und mit Streamline Orientation (so) für den Transport. | 158 |
| 1 | Demands on numerical modelling of flow and transport processes in fractured porous media. | 168 |
| 2 | Flux in fracture and matrix depending on the model concept. Left: lower-dimensional formulation. Right: equidimensional formulation. | 169 |
| 3 | Patch at node i with box V_i . Left: fully upwinding. Right: projection of α_0 , being defined in direction of \underline{v}_{ij} , onto e_{ij} | 172 |
| 4 | Left: fracture system with pressure distribution. Right: velocity in upper fracture on the right, black: 2d fracture, green: 1d fracture. | 175 |
| 5 | Tracer distribution after 3600[s]. Left: lower-dimensional. Right: equidimensional. | 175 |
| 6 | Breakthrough curves. For box scheme, lower-dimensional, (1d BOX) and mixed-hybrid FE, equidimensional, (2d MHFE) for flow on level 2 (L2) and level 3 (L3). | 175 |
| 7 | Example problem with stochastically generated fracture network. Left: geometry and coarse grid. Right: pressure distribution, level 2. | 176 |
| 8 | Velocity distribution in left fracture crossing at $y = 0.5[m]$, level 2. Left: box scheme. Right: mixed-hybrid FE. | 176 |
| 9 | Left: lower-dimensional. Right: equidimensional. | 177 |

Tabellenverzeichnis

| | | |
|-----|--|-----|
| 4.1 | Modellparameter für das eindimensionale Modellproblem | 74 |
| 4.2 | Modellparameter für das zweidimensionale Modellproblem | 75 |
| 6.1 | Parameter, Rand- und Anfangsbedingungen für die Modellbeispiele. | 103 |
| 6.2 | Freiheitsgrade der verschiedenen Ansätze und Verfahren über vier Level. | 104 |
| 6.3 | Courant- und Peclet-Zahlen sowie Upwinding-Parameter α des Streamline Orientation für niederdimensionalen (Boxverfahren BOX) und äquidimensionalen (Boxverfahren BOX und gemischt-hybride FE MHFE sowie drei- und rechteckige Kluffenden) Ansatz auf Level 4. | 116 |
| 1 | Parameters, boundary (bnd.) and initial conditions (init.cond.) for example problems. | 174 |

Nomenklatur

In der nachfolgenden Tabelle sind die wesentlichen Symbole und Abkürzungen der vorliegenden Arbeit aufgeführt. Lokale Bezeichnungen werden im Allgemeinen nur an der entsprechenden Stelle im Text erläutert. Einige Symbole haben mehrere Bedeutungen, die eindeutige Zuordnung ist jedoch immer aus dem Zusammenhang gewährleistet.

| Symbol | Einheit | Bedeutung |
|-----------------------------------|----------------------|--|
| Lateinische Symbole | | |
| A | | Korrelationsmaß nach Scheidegger |
| A_i | $[m^3]$ | Randfläche des Patches am Knoten i |
| a | $[m]$ | halbe Kluftöffnungsweite |
| a | | allgemeiner Koeffizient |
| \underline{B} | $[-]$ | allgemeiner Koeffizient als Tensor |
| B | $[-]$ | allgemeiner Koeffizient als Skalar |
| b | $[m]$ | Kluftöffnungsweite |
| Cr | $[-]$ | Courant-Zahl |
| c | $[kg \cdot m^{-3}]$ | Konzentration des gelösten Stoffs |
| c_{ij} | $[kg \cdot m^{-3}]$ | Konzentration des gelösten Stoffs am Integrationspunkt zwischen den Knoten i und j |
| c_{in} | $[kg \cdot m^{-3}]$ | Konzentration des gelösten Stoffs am Zuflussrand |
| c_{up} | $[kg \cdot m^{-3}]$ | Konzentration des gelösten Stoffs am Upwinding-Knoten |
| \underline{D} | $[m^2 \cdot s^{-1}]$ | Tensor der hydrodynamischen Dispersion |
| $\underline{\underline{D}}_D$ | $[m^2 \cdot s^{-1}]$ | Tensor der mechanischen Dispersion |
| $\underline{\underline{D}}_{loc}$ | $[1 \cdot s^{-1}]$ | Tensor der hydrodynamischen Dispersion in lokalen Elementkoordinaten |
| $\underline{\underline{D}}_m$ | $[m^2 \cdot s^{-1}]$ | Tensor der molekularen Diffusion |
| D_h | $[m]$ | hydraulischer Durchmesser |
| D_m | $[m^2 \cdot s^{-1}]$ | molekulare Diffusionskonstante |
| d | $[m]$ | Abstandskoordinate der Schnittlinien |
| d_{50} | $[m]$ | mittlerer Korndurchmesser |
| \underline{e}_i | $[-]$ | Einheitsvektor der lokalen Koordinate i im globalen Koordinatensystem |
| \underline{e}_{ij} | $[-]$ | Einheitsvektor der Kante zwischen den Knoten i und j |
| \underline{e}_{vloc} | $[-]$ | Einheitsvektor der lokalen Geschwindigkeit |
| F | | Fluss über den Rand zwischen zwei Zellen |

| Symbol | Einheit | Bedeutung |
|-------------------------------|--------------------------|---|
| \underline{F} | | allgemeiner Fluss |
| g | $[m \cdot s^{-2}]$ | Erdbeschleunigung |
| h | $[m]$ | Piezometerhöhe |
| h^e | $[m]$ | charakteristische Elementgröße |
| \underline{J} | $[m]$ | Jakobi-Matrix |
| $\underline{\underline{J}}$ | $[kg \cdot (m^2s)^{-1}]$ | dispersiver Massenfluss |
| $\underline{\underline{K}}_0$ | $[m^2]$ | Tensor der Permeabilität |
| $\underline{\underline{K}}_f$ | $[m \cdot s^{-1}]$ | Tensor der hydraulischen Leitfähigkeit |
| k | $[m]$ | absolute Rauigkeit der Kluftwände |
| k_0 | $[m^2]$ | Permeabilität, Skalarform |
| L_{ik} | $[m]$ | Länge der Kante zwischen den Knoten i und k |
| $\underline{\underline{N}}_F$ | $[1 \cdot m^{-2}]$ | Vektor mit vektorwertigen Ansatzfunktionen für Fluss, gemischte / gemischt-hybride FE |
| \underline{N} | $[-]$ | Vektor der Ansatzfunktionen, FE-Verfahren |
| N_u | $[-]$ | Ansatzfunktion für Zustandsgröße u , gemischte / gemischt-hybride FE |
| Ne | $[-]$ | Neumann-Zahl |
| \underline{n} | $[-]$ | Normalenvektor |
| n | $[-]$ | Gesamtporosität |
| n_A | $[-]$ | Anzahl der Teilränder eines Patches |
| n_e | $[-]$ | effektive Porosität |
| n_{ed} | $[-]$ | Anzahl der Kanten im Element |
| n_{el} | $[-]$ | Anzahl der Elemente im Lösungsgebiet |
| n_{nd} | $[-]$ | Anzahl der Knoten im Lösungsgebiet |
| Pe | $[-]$ | Peclet-Zahl |
| p | $[Pa]$ | Druck |
| $\underline{\underline{Q}}_K$ | $[m^3 \cdot s^{-1}]$ | Vektor der diskreten Kantenflüsse, gemischte / gemischt-hybride FE |
| Q_K | $[m^3 \cdot (sm)^{-1}]$ | Volumenstrom pro Meter Kluftbreite |
| Q_{SCVF} | $[m^3 \cdot s^{-1}]$ | Volumenstrom über ein Subkontrollvolumen-Interface |
| q | $[s^{-1}]$ | Quelldichte |
| Re_{Dh} | $[-]$ | Reynolds-Zahl für idealisierte Kluft |
| Re_{d50} | $[-]$ | Reynolds-Zahl für mittleren Korndurchmesser |
| r | | allgemeiner Quell- und Senkterm |
| r | $[-]$ | lokale Koordinate |
| \underline{r} | $[-]$ | Vektor der lokalen Koordinaten (r, s, t) |
| S_0 | $[m^{-1}]$ | spezifischer Speicherkoeffizient |
| s | $[kg \cdot m^{-4}]$ | Konzentrationsgradient innerhalb einer Zelle, TVD-Verfahren |
| s | $[-]$ | lokale Koordinate |
| T | $[-]$ | Korrekturfaktor für FCT |
| t | $[-]$ | lokale Koordinate |
| t | $[s]$ | Zeit |

| Symbol | Einheit | Bedeutung |
|-----------------------|------------------------|---|
| t_0 | [s] | Anfangszeitpunkt |
| u | | allgemeine Zustandsgröße |
| V_i | [m ³] | Volumen des Patches am Knoten i |
| \underline{v}_a | [m · s ⁻¹] | Vektor der Abstandsgeschwindigkeit |
| \underline{v}_f | [m · s ⁻¹] | Vektor der Filtergeschwindigkeit |
| \underline{v}_{ij} | [m · s ⁻¹] | Vektor der Geschwindigkeit am Integrationspunkt zwischen den Knoten i und j |
| \underline{v}_{loc} | [1 · s ⁻¹] | Vektor der Abstandsgeschwindigkeit in lokalen Elementkoordinaten |
| \underline{v}_n | [m · s ⁻¹] | Geschwindigkeit normal zu einer Kante |
| \underline{W} | [–] | Vektor der Wichtungsfunktionen |
| x | [m] | globale Koordinate |
| \underline{x} | [m] | Vektor der globalen Koordinaten (x, y, z) |
| $\underline{\hat{x}}$ | [m] | Vektor der vektorwertigen globalen Koordinaten eines Elements |
| y | [m] | globale Koordinate |
| Z | [–] | Zufallszahl |
| z | [m] | geodätische Höhe, globale Koordinate |

Griechische Symbole

| | | |
|----------------|-----|--|
| α | [–] | fraktionale Ordnung der fraktionalen Advektions–Dispersions–Gleichung |
| α | [–] | Upwinding–Parameter |
| α_0 | [–] | optimaler Upwinding–Parameter in Strömungsrichtung, Boxverfahren mit Streamline Orientation |
| α_i | [–] | richtungsbezogener Upwinding–Parameter |
| α_{ij} | [–] | Upwinding–Parameter am Integrationspunkt zwischen den Knoten i und j |
| α_l | [m] | longitudinale Dispersivität |
| α_{opt} | [–] | optimaler Upwinding–Parameter in Strömungsrichtung, inkonsistentes Petrov–Galerkin–Verfahren |
| α_t | [m] | transversale Dispersivität |
| β | [–] | Interpolationsparameter, TVD–Verfahren |
| β | [–] | Upwinding–Parameter, inkonsistentes Petrov–Galerkin–Verfahren |
| Γ_C | | Teilbereich des Gebietsrands mit Cauchy–Randbedingung |
| Γ_D | | Teilbereich des Gebietsrands mit Dirichlet–Randbedingung |
| Γ_N | | Teilbereich des Gebietsrands mit Neumann–Randbedingung |
| Γ_i | | Rand des Patches am Knoten i |
| Γ_{in} | | Zuflussrand |
| Γ_{out} | | Ausflussrand |
| γ | | Faktor der Cauchy–Randbedingung |

| Symbol | Einheit | Bedeutung |
|------------------|------------------------|--|
| δ_{loc} | $[1 \cdot s^{-1}]$ | Skalarform des lokalen hydrodynamischen Dispersionstensors |
| Δ | $[1 \cdot m^{-2}]$ | Laplace-Operator |
| Δl | $[m]$ | charakteristische Länge |
| Δs | $[m]$ | Wegstrecke |
| Δt | $[s]$ | Zeitschritt |
| Δx | $[m]$ | Ortsschritt |
| Δz | $[m]$ | Elementdicke |
| ϵ | | Residuum |
| η | $[kg \cdot (ms)^{-1}]$ | dynamische Fluidviskosität |
| Θ | $[-]$ | Kollokationspunkt in der Zeit |
| θ | $[-]$ | Krümmung des Konzentrationsprofils, TVD-Verfahren |
| ϑ | $[^\circ]$ | Winkel |
| ν | $[m^2 \cdot s^{-1}]$ | kinematische Fluidviskosität |
| Ω | | offene Menge in \mathbb{R}^n , Lösungsgebiet |
| $\partial\Omega$ | | Gebietsrand von Ω |
| Ψ | $[-]$ | Krümmung des Konzentrationsprofils, TVD-Verfahren |
| ρ | $[kg \cdot m^{-3}]$ | Fluidmassendichte |
| τ | $[s]$ | Upwinding-Parameter, SUPG-Verfahren |

Spezielle Symbole

| | |
|-----------------------------------|---|
| $a, \underline{b}, \underline{c}$ | Skalar, Vektor, Tensor |
| ∇a | Gradient von a |
| $\nabla \cdot \underline{b}$ | Divergenz von \underline{b} |
| ∇_r | Gradient in lokalen Koordinaten (r, s, t) |
| $ \underline{b} $ | Betrag von \underline{b} |
| \tilde{a} | Näherungslösung von a |
| \hat{a} | diskreter Knotenwert von a |

Abkürzungen

| | |
|------|--------------------------------------|
| DG | Discontinuous Galerkin |
| ENO | Essentially Non-Oscillatory |
| FCT | Flux-Corrected Transport |
| FE | Finite Elemente |
| SCV | SubControl Volume |
| SCVF | SubControl Volume Face |
| SUPG | Streamline-Upwind Petrov-Galerkin |
| TVD | Total Variation Diminishing |
| TVBM | Total Variation Bounded in the Means |
| WENO | Weighted Essentially Non-Oscillatory |

| Symbol | Einheit | Bedeutung |
|--------|---------|-----------|
|--------|---------|-----------|

Indizes

| | | |
|------|--|--------------------------------------|
| e | | Elementindex |
| e' | | Nachbarelement von e |
| i | | Knotenindex, Ortsindex, Laufvariable |
| j | | Knotenindex, Ortsindex, Laufvariable |
| k | | Knotenindex, Ortsindex, Laufvariable |
| m | | Laufvariable |
| n | | Zeitindex, Dimension |
| p | | Polynomgrad |
| x | | x-Komponente |
| y | | y-Komponente |

Kurzfassung

Im Zusammenhang mit z.B. der Trinkwassergewinnung aus Kluftaquiferen oder der Beurteilung von Deponiestandorten kommt der Simulation von Strömungs- und Transportprozessen in geklüfteten Systemen eine große Bedeutung zu. Die oft sehr unterschiedlichen hydraulischen Eigenschaften von Kluft und umgebender Gesteinsmatrix prägen das Strömungs- und Transportverhalten stark. Unter gesättigten Bedingungen können Klüfte bevorzugte Fließwege darstellen, während die umgebende Gesteinsmatrix dagegen häufig wie ein Speicher wirkt. Diese gegensätzlichen physikalischen Prozesse müssen bei der numerischen Simulation von dem zur Anwendung kommenden Modellkonzept mit den dazugehörigen Diskretisierungsverfahren in Abhängigkeit von der Fragestellung hinreichend erfasst werden.

Vor diesem Hintergrund werden in der vorliegenden Arbeit Diskretisierungsansätze für die Simulation von Strömungs- und Transportprozessen in geklüftet-porösen Medien entwickelt und untersucht. Als Grundlage wird der kombinierte Modellansatz verwendet. Die Klüfte werden dabei üblicherweise mit Elementen niedrigerer Dimension diskretisiert als die Matrix. Dieses Vorgehen wird als *niederdimensional* bezeichnet. Dabei ist allerdings die lokale Flusserhaltung am Kluft-Matrix-Übergang nicht gewährleistet und der zugrunde liegende physikalische Prozess gegebenenfalls nicht richtig erfasst. Um hier eine bessere Prozessdarstellung zu erreichen, wird als neuer Ansatz eine *äquidimensionalen* Formulierung vorgestellt, der Kluft und Matrix mit Elementen gleicher Dimension beschreibt. Es werden eine Reihe etablierter numerischer Diskretisierungsansätze aus dem Bereich der Finite-Elemente- und Finite-Volumen-Verfahren hinsichtlich ihrer Eignung sowohl für die nieder- als auch für die äquidimensionale Approximation der Strömungs- und Transportprozesse in beliebig geklüfteten System analysiert. Als Resultat dieser Untersuchung wird für die Strömung ein Boxverfahren und ein gemischt-hybrides Finite-Elemente-Verfahren, für den Transport ein Boxverfahren mit unterschiedlichen Upwinding-Strategien ausgewählt. Die im Rahmen der Modellbildung implementierte und verwendete Software für Kluft- und Netzgenerierung und für die numerische Diskretisierung wird vorgestellt. Die Anwendbarkeit und die Eigenschaften sowohl der äquidimensionalen im Vergleich mit der niederdimensionalen Formulierung als auch der gewählten numerischen Diskretisierungsverfahren im Hinblick auf diese beiden Ansätze wird anhand von Modellbeispielen von ansteigend geometrischer Komplexität diskutiert. Die Ergebnisse zeigen, dass die Verwendung eines äquidimensionalen Ansatzes bei langsameren Systemen mit Klüften quer zur Hauptströmung deutliche Auswirkungen auf die approximierten Lösung im Gesamtsystem zeigt, während bei schnelleren Systemen eher lokale Effekte auftreten. Der Einsatz gemischt-hybrider Finite Elemente ist bei äquidimensionaler Formulierung sinnvoll. Das für den Transport verwendete Boxverfahren mit Streamline Orientation in der Matrix erzeugt deutlich steilere Konzentrationsfronten im Matrixbereich als mit reinem Fully Upwinding.

Abstract

The simulation of groundwater flow and solute transport behaviour in fractured subsurface systems is of major importance when investigating, for example, the safety of aquifers used as drinking-water reservoirs or the long-term safety of legacies and waste-disposal sites. The vastly different hydraulic properties of fractures and the surrounding matrix usually strongly affect the flow and transport processes in the domain of interest. Under saturated conditions, fractures allow comparatively high groundwater velocities and therefore might represent preferential pathways for fast contaminant transport. On the other hand, the rock matrix acts as a repository for the pollutant. For a numerical simulation, the employed model concept together with the associated discretisation techniques has to take these opposed characters of the physical processes into account.

Against this background, the present thesis develops and analyses discretisation techniques for simulating flow and transport processes in fractured porous media. A combined model concept is used, describing fractures and matrix with discrete structure elements. Usually, the fractures are discretised with elements of lower dimension than that of the surrounding matrix. This approach is called *lower-dimensional*. It does not ensure local flux conservation at the fracture-matrix interface and therefore possibly does not describe the underlying physical process correctly. To improve the description of the process behaviour, a new approach in terms of an *equidimensional* formulation is introduced, discretising fracture and matrix with elements of the same dimension. A number of established numerical discretisation techniques from the finite volume and the finite element schemes are analysed with respect to their suitability for approximating flow and transport processes in arbitrarily fractured porous systems. As a result, a box scheme and a mixed-hybrid finite element approach are chosen for the flow discretisation, and a box scheme with different upwind strategies for the transport discretisation. The software implemented and employed in the context of the model concept for fracture and mesh generation and for numerical discretisation is presented. The applicability and the properties both of the equidimensional compared to the lower-dimensional formulation and of the chosen numerical discretisation techniques with respect to these two formulations are discussed on the basis of several model problems of increasing geometric complexity. The results show that an equidimensional formulation has a visible influence on the approximated overall solution when used on slow systems with fractures transverse to the main direction of flow while it causes rather local effects applied to faster systems. The mixed-hybrid finite element method turns out to be superior to the box scheme for the equidimensional flow approximation. For transport calculations, the box scheme with streamline orientation clearly reduces the numerical dispersion in the matrix zone compared to a box scheme with fully upwinding.

1 Einleitung

1.1 Motivation

Kluftgesteine werden in zunehmendem Maße Gegenstand einer Reihe unterschiedlicher, teilweise miteinander konkurrierender Nutzungen. Kluftaquifere werden im Rahmen der Trinkwasserversorgung bewirtschaftet. Grundwasser ist nach dem Zahlenspiegel des Bundesverbandes der deutschen Gas- und Wasserwirtschaft (BGW) mit einem Anteil von 64% (im Jahr 2000) die überwiegend genutzte Ressource für die Wassergewinnung der öffentlichen Wasserversorgung in Deutschland. Dazu kommt in der Form von Quellwasser frei zutage tretendes Grundwasser, das mit weiteren 9% zur Bedarfsdeckung beiträgt. In der Summe entspricht dies einer Menge von rund 4,0 Milliarden Kubikmetern für die Wasserversorgung geförderten Grundwassers. Dem Schutz des Grundwassers muss daher besondere Aufmerksamkeit gewidmet werden, und Kontaminationen müssen weitestgehend vermieden werden. Dies gilt vor allem im Hinblick auf die Schadstoffausbreitung unter undichten Deponien auch im geklüfteten Gestein und in Bezug auf die Sicherheitsbeurteilung von Lagerstätten von gegebenenfalls hochtoxischen oder radioaktiven Abfällen. Felsgestein bietet sich aufgrund seines hohen Widerstandes gegenüber einer Durchdringung jedweden Stoffes als Deponiestandort zunächst an. Es muss jedoch berücksichtigt werden, dass im Gestein Klüfte und Scherzonen auftreten können, die den Transport von Schadstoffen ermöglichen. Die Überwachung von Kluftaquiferen, die Planung und Dimensionierung von Sanierungs- und Sicherheitsmaßnahmen für Altlasten und die sicherheitstechnische Beurteilung von Deponiestandorten im gegebenenfalls klüftigen Festgestein erfordern die Kenntnis der Strömungs- und Transportprozesse im fraglichen Gebiet. Dies gilt auch für eine weitere Anwendung, die seit einigen Jahren entwickelt wird, der Gewinnung von geothermischer Energie. Dabei werden durch hohe Druckkräfte zwischen zwei Bohrungen in einigen Tausend Metern Tiefe künstliche Klüfte erzeugt und vorhandene erweitert. Ein geeignetes Fluid, das über die Bohrungen durch sie hindurchgepumpt wird, dient als Wärmetauscher (Hot-Dry-Rock-Verfahren).

Die starke Heterogenität des geklüfteten Untergrunds beeinflusst das Prozessverhalten in hohem Maße. Unter gesättigten Bedingungen zeichnen sich Klüfte oder Kluftzonen im Allgemeinen durch eine verhältnismäßig hohe Permeabilität und eine geringe Speicherkapazität aus. So können sie bevorzugte Fließwege darstellen, die ein schnelles Vordringen von gelösten Schadstoffen ermöglichen. Im Gegensatz dazu weist die umgebende Gesteinsmatrix eine oft sehr niedrige Permeabilität und eine hohe Speicherkapazität auf. Eindringender Schadstoff kann so eine Langzeitkontamination verursachen, indem er sich sehr langsam durch die Matrix bewegt oder aber wieder in die Kluft abgegeben wird (Abb. 1.1). Die Transportprozesse spielen sich demnach auf sehr unterschiedlichen räumlichen und zeitlichen Skalen ab. Zur

Untersuchung der Ausbreitungsvorgänge im Kluftgestein sind eine Reihe von Felslaboren in situ erbaut worden, dies jedoch vor allem in der Umgebung potentieller Endlagerstandorte im Festgestein (z.B. Konrad/Deutschland, Grimsel/Schweiz, Stripa/Schweden, Äspö/Schweden, Fanay–Augères/Frankreich). Untersuchungen an geklüftetem Sandstein finden z.B. im Rahmen des DFG–Projektes *Festgesteins–Aquiferanalog: Experimente und Modellierung* statt (u.a. LEVEN, MCDERMOTT, BARAKA–LOKMANE, SAUTER, LIEDL & TEUTSCH (2000)[133], THÜRINGER & HÖTZL (2000)[204], HEMMINGER, NEUNHÄUSERER & HELMIG (2000)[89], LAGENDIJK & KÖNGETER (2000)[125]).

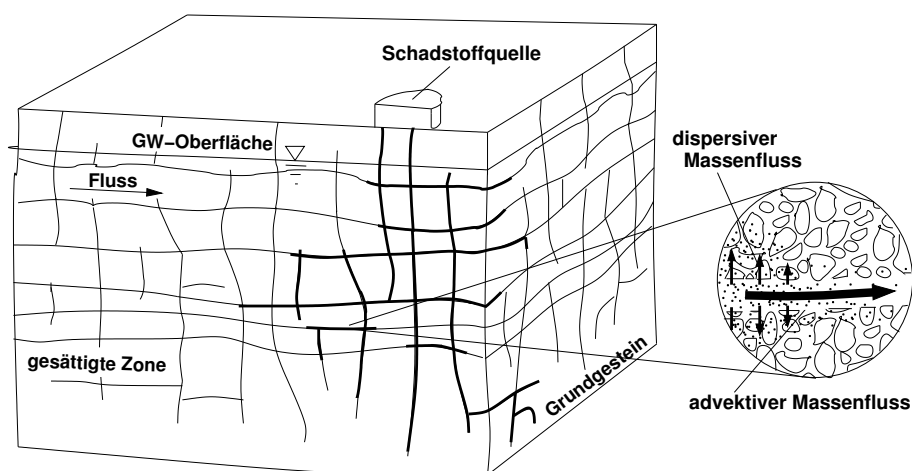


Abbildung 1.1: Advektive und dispersive Transportvorgänge in geklüftet-porösem Gestein (MACKAY & CHERRY (1989)[141], modifiziert)

Vor diesem Hintergrund und ergänzend zu den In-situ-Untersuchungen hat sich die numerische Modellierung von Strömungs- und Transportprozessen in den letzten Jahren zu einem wichtigen Instrument bei der Lösung der genannten Aufgabenstellungen entwickelt. Numerische Simulationen helfen bei der Analyse und Interpretation von Feldversuchen und der Ermittlung von strömungs- und transportrelevanten Systemparametern. Sie ermöglichen die Beurteilung der Auswirkungen von Eingriffen in den Untergrund und die Abschätzung der Ausbreitung von Schadstofffahnen. Sie erlauben auf verhältnismäßig einfache Weise die Bewertung von Systemvarianten und die Aufstellung von Prognosen und Szenarien. Und nicht zuletzt kann mit Hilfe des „Durchspielens“ von Systemparametern und Geometrien ein besseres Verständnis der im Gebiet ablaufenden Prozesse und des Einflusses eben dieser Parameter auf das Gesamtsystem erreicht werden.

1.2 Klassifikation von Klüften und Kluftsystemen

Kluftsysteme zeichnen sich dadurch aus, dass relativ große Gebiete ungestörten Festgesteins von Klüften und Scherzonen mit wesentlich kleineren Abmessungen durchzogen werden (Abb. 1.2). Klüfte bilden sich dabei in Abhängigkeit ihrer Entstehungsgeschichte und der vorherrschenden tektonischen Beanspruchung oft in bestimmte Richtungen aus, den sogenannten

Kluft- oder Störungszonen. Diese gestörten Bereiche weisen im Allgemeinen eine um Größenordnungen höhere Permeabilität auf als die sie umgebene Gesteinsmatrix und stellen daher bevorzugte Transportwege dar.

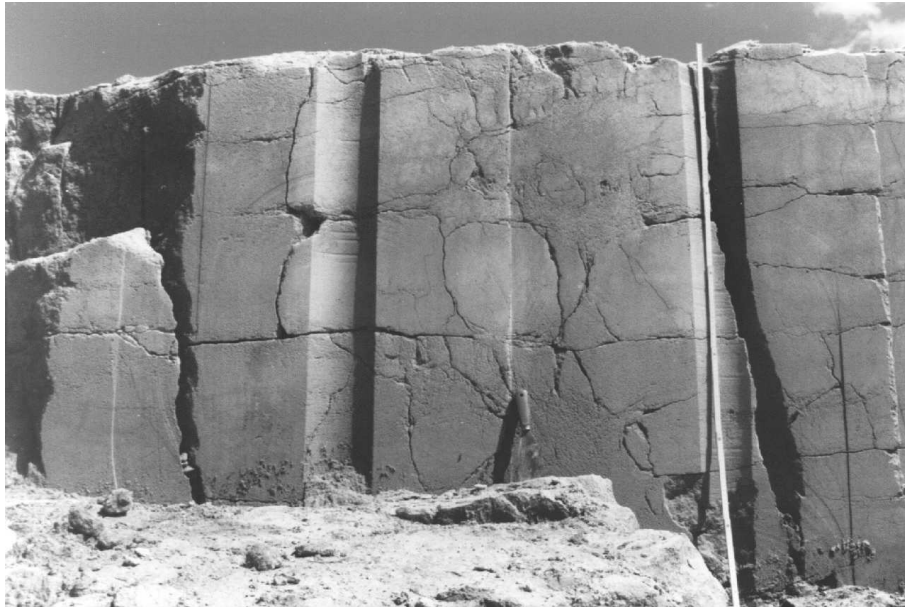


Abbildung 1.2: Ansicht eines geklüfteten Bundsandsteinblocks mit Kluftspuren und halbrunden Bohrspuren (DFG-Projekt *Festgesteins-Aquiferanalog: Experimente und Modellierung*, Feldversuchsblock Pliezhausen, Mittelteil der Westwand)

Welche Strukturen bei einer Untersuchung zu berücksichtigen sind, wird von der Art der Fragestellung und der Größe des in Frage stehenden Gebiets sowie gegebenenfalls von der Datengrundlage bestimmt. In Anlehnung an KOBUS, BARCZEWSKI & KOSCHITZKY (1996)[116] und SILBERHORN-HEMMINGER (2002)[194] lassen sich Kluftsysteme in fünf Längenskalen mit jeweils charakteristischen Eigenschaften einteilen:

- **Mikroskala**
Die mikroskopische Betrachtungsebene liegt im Mikrometerbereich. Sie umfasst einzelne Porenräume des porösen Mediums bzw. der Gesteinsmatrix, Mikroklüfte und einzelne Fließkanäle in größeren Klüften.
- **Einzelkluft**
Bei Einzelkluftuntersuchungen werden die Prozesse innerhalb einer Kluft erfasst. In Abhängigkeit von der Rauigkeit und der Topographie der begrenzenden Kluftwände kann es zur Bildung von bevorzugten Fließkanälen kommen (*Channeling*). Die betrachtete Größenordnung reicht von Mikro- bis zu Millimetern.
- **Kluftnetzwerk**
Die nächst höhere Skala bilden Kluftnetzwerke. Die Größe des Untersuchungsgebiets bewegt sich im Millimeter- bis Meterbereich. Eine detaillierte Beschreibung ist aufgrund der dafür notwendigen Datenfülle nicht mehr möglich. Den Klüften wird eine konstante mittlere Öffnungsweite zugewiesen. Die Prozesse im System werden maßgeblich von

der Konnektivität des Kluftnetzwerks und von den Unterschieden in den Materialeigenschaften von Kluft und umgebender Gesteinsmatrix gesteuert.

- **Aquiferstruktur**
Für die Betrachtung von Aquiferstrukturen, die sich über mehrere hundert Meter bis zu Kilometern erstrecken, ist ein weiterer Mittelungsschritt notwendig. Die kleinskaligen Kluftstrukturen werden zusammen mit der Gesteinsmatrix als Kontinuum aufgelöst. Strömung und Transport werden von geologischen Schichten und einzelnen Scherzonen bestimmt.
- **Grundwasserreservoir**
Die Untersuchung ganzer Grundwasserreservoirs in der Größenordnung von mehreren Kilometern läßt eine Erfassung und Beschreibung von einzelnen Schichten und Scherzonen nicht mehr zu. Die auf dieser Skala interessierenden Prozesse werden im Wesentlichen von großräumigen Verschiebungen und Schichtungen geprägt.

1.3 Modellansätze

Wie aus Kap. 1.2 ersichtlich wird, ist der Übergang von einer Skala zur nächsten häufig mit einem Mittelungsprozess verbunden. Sowohl die physikalischen Prozesse als auch die Heterogenitäten und die Materialeigenschaften auf kleinen Skalen beeinflussen das Systemverhalten auf größeren Skalen. Sollen große Systeme erfasst und zur Untersuchung in ein Modell überführt werden, so kann dies aber im Allgemeinen nicht auf der Basis detaillierter kleinskaliger Informationen geschehen, da zum einen die Daten in der Regel nicht in der notwendigen Dichte aufgenommen werden oder werden können, zum anderen auch die dafür erforderliche Rechnerkapazität und Rechenzeit in keinem vernünftigen Verhältnis zum Ergebnis steht. Um die Komplexität des Systems zu reduzieren, müssen daher die physikalisch relevanten Parameter und Prozesse auf den verschiedenen Skalen identifiziert und mit Hilfe effektiver Parameter beschrieben werden. Beispiele hierfür sind die effektive hydraulische Durchlässigkeit, in der sich die auf der Mikroskala wirkenden Zähigkeitskräfte widerspiegeln, oder die Dispersion, die den Massenfluss aufgrund von Geschwindigkeitsfluktuationen im Betrachtungsvolumen beschreibt. Unter bestimmten Voraussetzungen kann die Übertragung von Eigenschaften auf die nächst höhere Skala auch eine Beschreibung durch einen *effektiven Prozess* erforderlich machen, wie in Kap. 2.2 gezeigt werden wird. Effektive Parameter und Prozesse ermöglichen es also, kleinskalige Prozesse auf größeren Skalen zu berücksichtigen und gleichzeitig das System zu vereinfachen. Üblicherweise werden effektive Parameter bestimmt, indem ein Mittelungsprozess über das Skalenvolumen durchgeführt wird, wobei das Skalenvolumen ein repräsentatives Elementarvolumen (REV, BEAR (1972)[15], Abb. 1.3) bezüglich des zu untersuchenden Parameters oder Prozesses sein muss.

Die Bildung eines REV setzt eine hinreichend gleichmäßige Verteilung der Einzelzustände im Mittelungsvolumen voraus. Das Volumen muss einerseits groß genug gewählt werden, um unzulässig große Schwankungen der betrachteten Zustandsgröße zu vermeiden (untere Grenze). Es muss andererseits klein genug sein, um die Ortsabhängigkeit der gemittelten Größe wiedergeben zu können (obere Grenze). Bei porösen Medien kann im Allgemeinen für jeden Punkt

des Gebietes ein REV gefunden werden. Für geklüftete Systeme gilt dies nur bedingt. Dichte, Orientierung und Größe der Klüfte in einem Gebiet können sehr unregelmäßig verteilt sein. Die Bestimmung eines REV gelingt daher nur, wenn Klüfte vergleichbarer Größenordnung ein hinreichend vermaschtes Netzwerk bilden. Ist das der Fall, so kann das Klufnetzwerk wie ein poröses Medium mit den entsprechenden Eigenschaften behandelt werden. Ist das jedoch nicht der Fall, oder treten auf größeren Längenskalen wiederum vereinzelt Klüfte auf, so ist keine ausreichend gleichmäßige Verteilung mehr gegeben (KRÖHN (1991)[124]).

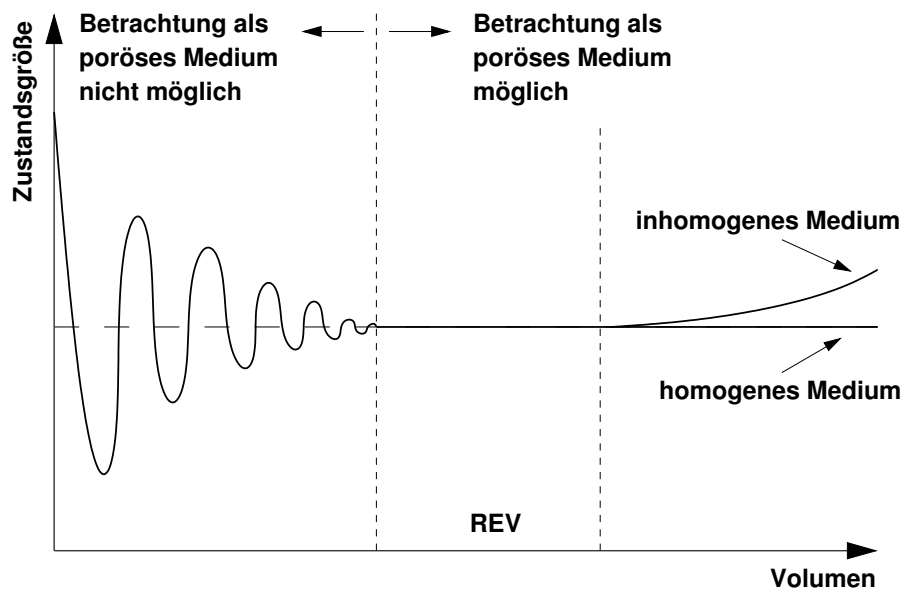


Abbildung 1.3: Repräsentatives Elementarvolumen REV (BEAR (1972)[15], modifiziert)

Abb. 1.4 verdeutlicht, welche Möglichkeiten sich daraus für die Modellierung von Strömungs- und Transportprozessen in geklüfteten Systemen ergeben. Ausschnitt A zeigt einen ungestörten Bereich der Gesteinsmatrix. Er kann wie ein poröses Medium durch Mittelwertbildung im REV in ein äquivalentes Kontinuum überführt werden. Ausschnitt B umfasst ein engmaschiges Feinkluftnetzwerk, das von der Gesteinsmatrix umgeben wird. Je nach Datenlage und Eigenschaften können daraus ein Kontinuum, das das Klufnetz wiedergibt, ein Kontinuum, das Klufnetz und Matrix wiedergibt, oder zwei Kontinua, von denen das eine das Klufnetz und das andere die Matrix wiedergibt, gebildet werden. In Ausschnitt C wird das Prozessverhalten von wenigen großen Klüften dominiert. Diese können diskret modelliert und gegebenenfalls mit dem Kontinuum der umgebenden Gesteinsmatrix gekoppelt werden. Eine REV-Bildung für die Grobklüfte ist nicht sinnvoll. Gleiches gilt für Ausschnitt D, in dem die Kopplung der diskret ausgebildeten Grobklüfte mit dem oder den Kontinua für das Feinkluftsystem und die Matrix erforderlich ist.

Für die numerische Beschreibung der Strömungs- und Transportprozesse in geklüftet-porösen Medien sind in den letzten Jahren verschiedene Modellansätze entwickelt worden, die sich, wie im vorigen Absatz bereits angedeutet, im Wesentlichen in die beiden Gruppen der äquivalenten und der diskreten Ansätze einteilen lassen (KOLDITZ (1997)[118]). Die Modellauswahl

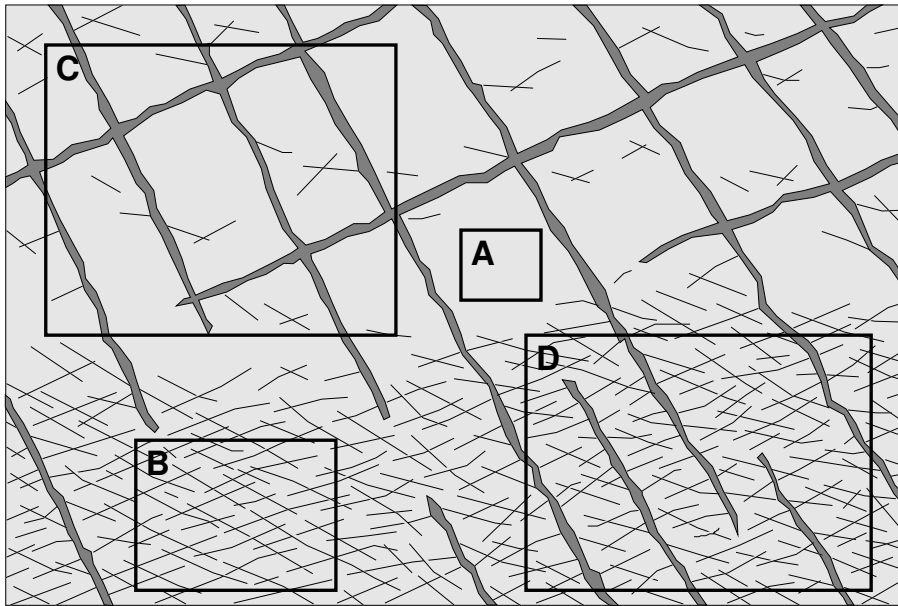


Abbildung 1.4: Verschiedene Ausschnitte aus einem geklüfteten System (KRÖHN (1991)[124])

wird in Abhängigkeit des betrachteten Maßstabs, der Fragestellung und der Datenlage getroffen. Im Folgenden soll ein Überblick über die Ansätze und ihre möglichen Anwendungsbereiche gegeben werden, der aufgrund der Fülle der Literatur nur beispielhaften Charakter haben kann und keinen Anspruch auf Vollständigkeit erhebt.

1.3.1 Äquivalente Modellansätze

Äquivalente Modellansätze werden im Allgemeinen eingesetzt, wenn das geklüftete Untersuchungsgebiet ganz oder jeder seiner Teilaspekte (z.B. Fein-, Grobklüfte) für sich homogenisierbar ist. Sie eignen sich für großräumige Kluftsysteme und Aquiferstrukturen, die eher als kleine Systeme eine Mittelwertbildung zulassen und für die eine detaillierte Darstellung aufgrund der dafür notwendigen Datenfülle nicht oder nur schwer möglich ist. Es werden Einkontinuum-Modelle, Doppelkontinuum-Modelle und Mehrkontinua-Modelle unterschieden.

Einkontinuum-Modelle

Einkontinuum-Modelle überführen die Eigenschaften des geklüftet-porösen Systems durch Homogenisierung in ein kontinuierliches Medium. Die in das Modell einfließenden effektiven Parameter müssen sowohl die räumliche Variabilität der Klüfte als auch die Speicherwirkung der Matrix berücksichtigen. Es existieren eine Reihe von Arbeiten, die die Frage diskutieren, unter welchen Voraussetzungen geklüftete Medien mit Einkontinuum-Modellen erfasst werden können, welche Fehler dabei zu erwarten sind und welche effektiven Parameter anzusetzen sind. Die Untersuchungen wurden in der Regel mit Hilfe diskreter Modelle auf der Basis stochastisch generierter Kluftsysteme ohne Berücksichtigung der Gesteinsmatrix durchgeführt (z.B. LONG, REMER, WILSON & WITHERSPOON (1982)[138], LONG & WITHERSPOON (1985)[139], WOLLRATH (1990)[215]).

Doppelkontinuum- und Mehrkontinua-Modelle

Durch die Zusammenfassung der hydraulisch sehr unterschiedlichen Komponenten – Fein-, Mittel-, Grobklüfte, Matrix – zu einem äquivalenten Ersatzsystem kann die Heterogenität des Untersuchungsgebietes nicht oder nur unzureichend erfasst werden, was vor allem bei der Transportsimulation zu erheblichen Fehleinschätzungen führen kann. Bessere Ergebnisse lassen sich durch die Verwendung eines Mehrkontinua-Modells erzielen (BARENBLATT, ZHELTOV & KOCHINA (1960)[8], WARREN & ROOT (1963)[209]). Dabei werden die oben genannten Komponenten jeweils durch eigene, sich räumlich überlagernde Kontinua repräsentiert, sodass an einem Ort des Aquifers mehrere effektive Parameter und Zustandsgrößen definiert sind. Auf diese Weise müssen nur die geringeren Variabilitäten innerhalb einer Komponente homogenisiert werden, nicht mehr die Unterschiede zwischen den Komponenten. Die Wechselwirkung zwischen den einzelnen Kontinua wird über Austauschterme berücksichtigt. Die Bestimmung der Austauschterme erfolgt über Austauschmodelle. Der Linearansatz (BARENBLATT, ZHELTOV & KOCHINA (1960)[8]) basiert auf der Annahme einer direkten Proportionalität des Fluid- und Stofftransfers zur Differenz der Zustandsgrößen zweier betrachteter Komponenten an einem Ort. Alternativ dazu kann ein Gradientenansatz (HUYAKORN, LESTER & MERCER (1983)[105], (1983)[106]) formuliert werden, bei dem die Flüsse zwischen den Kontinua nicht mit dem mittleren Gradienten, sondern mit dem Gradienten, der unmittelbar im Interface der Kontinua anliegt, bestimmt werden.

Mehrkontinua-Modelle können theoretisch beliebig viele Kontinua umfassen. Die Entwicklung geeigneter numerischer Berechnungsverfahren war jedoch lange Zeit auf zwei Kontinua beschränkt, in der Regel ein Kluft- und ein Matrixkontinuum (Doppelkontinuum-Modell) (KÖNGETER, LAGENDIJK, JANSEN & VOGEL (2000)[121]). Doppelkontinuum-Modelle können in Doppelporositäts- und Doppelpermeabilitätsmodelle unterschieden werden. Doppelporositätsmodelle, auch Speichermodelle genannt, bieten sich an, wenn die Gesteinsmatrix eine sehr geringe Durchlässigkeit aufweist und somit als reines Speichermedium behandelt werden kann (z.B. NARASIMHAN (1982)[150], HUYAKORN, LESTER & FAUST (1983)[104], HUYAKORN, LESTER & MERCER (1983)[105], [106], PRUESS & NARASIMHAN (1985)[175]). Doppelpermeabilitätsmodelle werden verwendet, wenn das Fluid in der Gesteinsmatrix eine nicht zu vernachlässigende Mobilität aufweist (Mobilitätsmodell). In diesem Fall müssen die prozessbeschreibenden Differentialgleichungen für beide Kontinua vollständig aufgestellt werden (z.B. TEUTSCH (1988)[202], GERKE & VAN GENUCHTEN (1993)[72], BIRKHÖLZER (1994)[26]). PRUESS & NARASIMHAN führten das MINC-Konzept ein (Multiple Interacting Continua), das eine Erweiterung des Doppelporositätsmodells um beliebig viele poröse Komponenten darstellt (PRUESS & NARASIMHAN (1985)[175], NARASIMHAN & PRUESS (1998)[151]). Die Kombination einer unbegrenzten Anzahl von porösen und permeablen Kontinua konnte erst in den letzten Jahren einer numerischen Berechnung zugänglich gemacht werden (JANSEN (1999)[109], KÖNGETER, LAGENDIJK, JANSEN & VOGEL (2000)[121]).

1.3.2 Diskrete Modellansätze

Als diskrete Modellansätze werden Einzelkluftmodelle, Kluftnetzwerkmodelle und kombinierte Modelle bezeichnet. Sie werden häufig verwendet, um in kleinem Maßstab, der eine

explizite Darstellung der Klüfte erlaubt, Untersuchungen zum Prozessverhalten in Klüften oder geklüfteten Systemen durchzuführen und Parameter für äquivalente Modellansätze zu ermitteln. Außerdem werden sie, gegebenenfalls kombiniert mit einem oder mehreren Kontinua (Abb. 1.4), eingesetzt, wenn bei großräumigen Untersuchungsgebieten einzelne Klüfte, Scherzonen und/oder weitmaschige Kluffnetzwerke das System dominieren.

Einzelkluffmodelle

Das einfachste Modellkonzept für Einzelklüfte besteht aus zwei planparallelen Platten, zwischen denen die Strömungsprozesse betrachtet werden (*parallel-plate-Modell*). Dieser Ansatz hat dann seine Gültigkeit, wenn die mittlere Klufföffnungsweite im Verhältnis zur Wandrauigkeit groß genug ist. Die entsprechenden Fließgesetze wurden u.a. von HUITT (1956)[103], SNOW (1965)[196], LOUIS (1967)[140] und WITTKÉ (1984)[214] theoretisch und experimentell ermittelt.

In Natursystemen hat die Wandrauigkeit jedoch häufig einen deutlichen Einfluss auf das Strömungs- und Transportgeschehen in der Kluff. Tracerexperimente in einer Einzelkluff im Stripa-Felslabor (Schweden) haben gezeigt, dass der Massenfluss sehr ungleichmäßig über die Kluff verteilt ist und große Teile der Kluff überhaupt nicht von Wasser erreicht werden. Die sich während der Experimente einstellenden Fließpfade nahmen etwa 5–20% der gesamten Klufffläche ein (ABELIN, NERETNIEKS, TUNBRANT & MORENO (1985)[1], NERETNIEKS (1985)[152]). Ähnliche Ergebnisse erbrachten Experimente in Granitgestein in Cornwall (BOURKE (1987)[29]). Diese *Channeling*-Effekte wurden numerisch zunächst mit Hilfe eindimensionaler, voneinander unabhängiger Fließkanäle untersucht. Jedem Fließkanal wurde eine konstante Öffnungsweite zugewiesen, die über eine entsprechende Dichteverteilung ermittelt wurde (MORENO, NERETNIEKS & ERIKSEN (1985)[147], TSANG & TSANG (1987)[205]). Zweidimensionale Einzelkluffmodelle überlagern die Kluff mit einem Rasternetz, und jedes Rasterfeld erhält eine eigene Klufföffnungsweite. MORENO, TSANG, TSANG, HALE & NERETNIEKS (1988)[148] und TSANG, TSANG, NERETNIEKS & MORENO (1988)[207] ermittelten die Klufföffnungsweiten aus einer Lognormal-Verteilung. HELMIG (1993)[84] bestimmte die Klufföffnungsweiten auf der Basis der fraktalen Brown'schen Bewegung (FEDER (1988)[61]).

Für Transportvorgänge innerhalb der Klüfte ist eine ausschließliche Betrachtung des Kluffbereiches nicht mehr ausreichend. Experimentelle und numerische Ergebnisse zeigen, dass der Transport durch die Gesteinsmatrix und die Interaktion zwischen Kluff und Matrix im Allgemeinen nicht zu vernachlässigen ist (z.B. HIMMELSBACH (1993)[92], MAŁOSZEWSKI & ZUBER (1993)[142], THERRIEN & SUDICKY (1996)[203], NEUNHÄUSERER, HEMMINGER & HELMIG (1997)[160], (1999)[161]). GILLHAM, SUDICKY, CHERRY & FRIND (1984)[73] entwickelten eine analytische Lösung für reine Advektion in einer eindimensionalen Kluff und reine Diffusion in der umgebenden zweidimensionalen Matrix. Von GRISAK & PICKENS (1980), (1981)[76], [77], PFINGSTEN (1990)[172] und KRÖHN (1991)[124] sind umfangreiche Arbeiten zur numerischen Beschreibung der Diffusion aus der Kluff in die Matrix durchgeführt worden. LEGE (1995)[129] beschrieb die Matrixdiffusion durch 1D-Elemente, die senkrecht zu einer zweidimensionalen diskretisierten Kluff stehen und mit dieser gekoppelt sind (*Bürstenmodell*). Dabei wird in der zweidimensionalen Kluffebene ein advektiver Transport zugelassen, in den ein-

dimensionalen, die Matrix repräsentierenden Elementen dispersiver Transport. KENNEDY & LENNOX (1995)[114] untersuchten in einem zweidimensionalen Modell den Transport gelöster Stoffe aus der Kluft in die Matrix und die Interaktion zwischen Kluft und Matrix in Abhängigkeit von der Fließgeschwindigkeit in der Kluft.

Kluftnetzwerkmodelle

Kluftnetzwerkmodelle werden für eine Reihe unterschiedlicher Aufgaben eingesetzt, immer jedoch vor dem Hintergrund, die Struktur und die heterogenen Eigenschaften des Netzwerkes sowie seinen Einfluss auf das Prozessverhalten zu erfassen, zu beschreiben und, wenn möglich, das System zu vereinfachen. In vielen Arbeiten werden Kluftnetzwerke für die REV-Bildung verwendet. Auf der Basis von Strömungssimulationen werden für das betrachtete Gebiet äquivalente Kontinuumsparameter ermittelt, mit denen eine Kontinuumsmodellierung auf einer höheren Skala möglich ist. SNOW (1965)[196] und WILSON (1970)[213] haben äquivalente Durchlässigkeitstensenoren für senkrecht zueinander angeordnete Scharen unendlich ausgedehnter Klüfte ermittelt. LONG, REMER, WILSON & WITHERSPOON (1982)[138] und LONG (1983)[136] untersuchten, ab wann sich ein Kluftnetzwerk wie ein kontinuierliches Medium verhält, und entwickelten eine Methodik zur Bestimmung äquivalenter Durchlässigkeitstensenoren für zweidimensionale Kluftnetzwerke mit endlich ausgedehnten Klüften. Dazu wurden Realisationen zweidimensionaler Kluftnetze aus vorgegebenen Verteilungsfunktionen für Orientierung, Öffnungsweite und Länge generiert und äquivalente Durchlässigkeiten in Abhängigkeit von der Richtung des aufgebrachtten Druckgradienten berechnet. WOLLRATH (1990)[215] untersuchte die Abhängigkeit äquivalenter Durchlässigkeitstensenoren zweidimensionaler Kluftnetzwerke von der Größe des Modellgebiets, der Anzahl der Klüfte und der Verteilung der Kluftöffnungsweiten. KOSAKOWSKI (1996)[122] ermittelte auf analoge Weise für ein dreidimensionales Beispiel richtungsbezogene äquivalente Durchlässigkeitsbeiwerte, die sich jedoch nicht durch einen Tensor erfassen ließen.

Die Bestimmung äquivalenter Dispersivitäten für den Transport lässt sich auf diese Weise im Allgemeinen nicht durchführen, da sich eine Gauß-Verteilung der Masse, wie sie durch Annahme eines Diffusionsmodells für die Dispersion vorausgesetzt wird, in geklüfteten Systemen nur unter ganz bestimmten Bedingungen einstellt. Untersuchungen dazu wurden für zweidimensionale Gebiete z.B. von SCHWARTZ, SMITH & CROWE (1983)[188], SMITH & SCHWARTZ (1984)[195] oder WOLLRATH (1990)[215] durchgeführt. CACAS, LEDOUX, DE MARSILY, TILLIE, BARBREAU, DURAND, FEUGA & PEAUDECERF (1990)[35] und CACAS, LEDOUX, DE MARSILY, BARBREAU, CALMELS, GAILLARD & MARGRITTA (1990)[34] analysierten die Strömungs- und Transportprozesse in einem Kluftnetzwerk basierend auf Daten des Felslabors in Fanay-Augères (Frankreich). Die Klüfte wurden zunächst als ein Netzwerk zweidimensionaler Scheiben im dreidimensionalen Raum generiert. Anschließend wurden Channeling-Effekte in der Kluftebene vorausgesetzt und das System zu einem Röhrennetzwerk mit den entsprechenden Fließpfaden vereinfacht. DERSHOWITZ & FIDELIBUS (1999)[53] entwickelten auf der Basis der Randelementmethode ein Verfahren, die hydraulischen Eigenschaften von Netzwerken aus Scheiben oder beliebigen Polygonen auf ebensolche Röhrensysteme zu übertragen. NORDQVIST, TSANG, TSANG, DVERSTORP & ANDERSSON (1992)[165] berücksichtigten die Channeling-Effekte im Röhrennetzwerk, indem sie den

einzelnen Röhren über eine Bibliothek Eigenschaften aus Einzelkluftsimulationen zuwies. Die mit dem Modell ermittelten Durchbruchskurven zeigten deutliche Skaleneffekte, sie ließen Dispersionsanteile sowohl aus der Einzelkluft als auch aus dem Kluftnetzwerk erkennen.

Aufbauend auf den bisherigen Erkenntnissen und einhergehend mit den anwachsenden Computerkapazitäten, konzentrieren sich jüngere Arbeiten stärker auf die Strukturanalyse von Kluftnetzwerken und die Integration der Effekte auf den unterschiedlichen Skalen in großräumige Kluftnetzwerkmodelle. Beispielsweise untersuchten ACUNA & YORTSOS (1995)[3] Pumpversuchskurven, die mit Hilfe fraktaler Netzwerkmodelle ermittelt wurden, hinsichtlich ihrer fraktalen Eigenschaften und Aussagekraft. Ein anderer Ansatz zur Modellierung von Strömung und Transport, der in der Lage ist, Channeling-Effekte und bevorzugte Fließpfade wiederzugeben, beruht auf der Perkolationstheorie (z.B. HESTIR & LONG (1990)[91], BERKOWITZ & BALBERG (1993)[19]). BOUR & DAVY (1997)[28] untersuchten die Anwendbarkeit der Perkolationstheorie auf Kluftnetzwerke, deren Kluftlängenverteilung mit Hilfe des Potenzgesetzes beschrieben wurde. Kern der Studie war der Einfluss der Kluftlängenverteilung auf die Konnektivität der Netzwerke. MARGOLIN, BERKOWITZ & SCHER (1998)[143] verwendeten ein Bond-Lattice-Modell, um den Einfluss von Netzwerkdicke, Netzwerkanisotropie und Kluftöffnungsweitenvariabilität auf den Transport zu analysieren. Damit konnten sie zum einen die Abhängigkeit der effektiven hydraulischen Durchlässigkeit von der Öffnungsweitenverteilung und der Netzwerkstruktur quantifizieren und zum anderen eine Beziehung zwischen der Öffnungsweitenverteilung und der Peclet-Zahl aufstellen. KOUDINA, GONZALEZ GARCIA, THOVERT & ADLER (1998)[123] sowie ADLER, HUSEBY & THOVERT (1999)[4] bestimmten Durchlässigkeits- und Dispersionstensor für räumlich periodische Kluftnetzwerke.

Kombinierte Modelle

Kombinierte Modelle beschreiben das Kluftsystem zusammen mit der umgebenden Gesteinsmatrix. Sie werden im Wesentlichen eingesetzt, um den Einfluss der Kluft-Matrix-Interaktion auf die ablaufenden physikalische Prozesse genauer verstehen und erfassen zu können und um Parameter für Kontinuum-Modelle (Äquivalentwerte, Austauschterme) zu ermitteln. Um die Verwendung gerade dieser Austauschterme, die für die Kopplung der einzelnen Kontinua in Mehrkontinua-Modellen benötigt werden und deren Bestimmung im Allgemeinen mit Unsicherheiten verbunden ist, zu vermeiden, untersuchten BERKOWITZ, BEAR & BRAESTER (1988)[20] mit Hilfe zweier senkrecht aufeinander stehender Kluftscharen in einer porösen Matrix, unter welchen Umständen das System durch ein äquivalentes homogenes Medium beschrieben werden kann. LANG & HELMIG (1995)[126] und LANG (1995)[127] führten zweidimensionale Betrachtungen mit Kluft-Matrix-Modellen zur Parameteridentifikation für Doppelkontinuum-Modelle durch.

SUDICKY & McLAREN (1992)[200] und HARRISON, SUDICKY & CHERRY (1992)[79] stellten ein zweidimensionales kombiniertes Modell für großräumige Simulationen vor. In Nordamerika sind große Gebiete mit Tonablagerungen überdeckt, die sich wegen ihrer geringen Durchlässigkeit als Untergrund für Deponien anbieten. Unterhalb der Tonablagerungen finden sich häufig Sand- oder Kiesaquifere. Ziel des Modells war es, die Rolle von feinen Klüften

und Rissen im Ton im Hinblick auf möglichen Schadstofftransport durch die Klüfte in den darunterliegenden Grundwasserleiter zu erforschen. Ein Doppelkontinuum-Modell war für diesen Zweck ungeeignet, da zum einen die Klüftung zu gering für eine REV-Bildung war und zum anderen das in Betracht gezogene Doppelporositätsmodell keine Advektion in den Matrixblöcken zulässt. Der Einsatz eines reinen Kluftnetzwerkmodells ließ ebenfalls deutliche Fehler in der Bestimmung des Schadstofftransports erwarten, da das tonige Matrixmaterial eine verhältnismäßig hohe Porosität aufwies. MCKAY, CHERRY & GILLHAM (1993)[145] und MCKAY, GILLHAM & CHERRY (1993)[146] führten im Tonuntergrund einer Deponie südlich von Sarnia, Ontario, Kanada, Tracerexperimente mit gelösten Schadstoffen und mit Kolloiden durch, um den Einfluss der Matrixdiffusion auf den Transport der gelösten Stoffe zu untersuchen. Kolloide sind im Allgemeinen zu groß, um in die Poren der Matrix einzudringen, und wurden daher als Indikator für die Fließgeschwindigkeit in den Klüften eingesetzt. Ein Vergleich der experimentellen Ergebnisse mit Ergebnissen, die durch Simulationen mit einem Kluft-Matrix-Modell bzw. mit einem äquivalenten porösen Medium erzielt wurden, ergab für das Kluft-Matrix-Modell relativ gute Übereinstimmungen, für das äquivalente poröse Medium dort gute Übereinstimmung, wo eine dichte Klüftung nachzuweisen war. IBARAKI & SUDICKY (1995)[107], [108] analysierten die Auswirkungen der Matrixdiffusion auf kolloidunterstützten Schadstofftransport. THERRIEN & SUDICKY (1996)[203] zeigten, dass eine Berücksichtigung der Matrix in geklüfteten Systemen und eine explizite Beschreibung der Interaktion zwischen Kluft und Matrix auch und gerade unter ungesättigten Bedingungen notwendig sind, da Klüfte hierbei gegebenenfalls als Barrieren fungieren und der Transport im Wesentlichen in der porösen Matrix stattfindet.

Auch auf der Laborskala wurden experimentelle und numerische Untersuchungen vorgenommen, die den deutlichen Einfluss einer porösen Matrix auf das Prozessverhalten im Gesamtsystem nachwiesen (z.B. JØRGENSEN, MCKAY & SPLIID (1998)[111], GENTY, GRENIER, MOUCHE & TEVISSSEN (1998)[71], SONNENBORG, BUTTS & JENSEN (1999)[198], SAUTER, LIEDL, TEUTSCH, LEVEN, BARAKA-LOKMANE & MCDERMOTT (2000)[182]). NEUNHÄUSERER, HEMMINGER & HELMIG (1997)[160], (1999)[161], (2000)[162] führten basierend auf den Daten aus dem DFG-Projekt *Festgesteins-Aquiferanalog: Experimente und Modellierung* Simulationen auf der Labor- und der Feldskala durch, um die Auswirkungen der Kluft-Matrix-Interaktion auf die physikalischen Prozesse und die Bildung effektiver Parameter für die Kontinuumsmodellierung näher bestimmen zu können.

1.4 Zielsetzung

Im Rahmen der vorliegenden Arbeit werden Diskretisierungsansätze hinsichtlich ihrer Eignung und ihres Lösungsverhaltens für die Simulation von Strömungs- und Transportprozessen in geklüftet-porösen Medien untersucht. Als Grundlage wird der kombinierte Modellansatz verwendet. Die diskrete Modellierung und hier insbesondere die kombinierten Modelle erlauben die direkte Erfassung und Einbindung einzelner, für das Strömungs- und Transportverhalten relevanter geologischer Strukturen in einem Modell. Für die Betrachtung poröser Kluftaquifersysteme ergibt sich daraus die Möglichkeit, Klüfte und Gesteinsmatrix im Modell als einzelne Strukturelemente zu integrieren. Damit eröffnet sich die Chance, Strömungs- und

Transportprozesse in geklüftet-porösen Systemen sowohl im Rahmen theoretischer Untersuchungen als auch in starker Anlehnung an ein Natursystem mit Hilfe der numerischen Modellierung beschreiben und analysieren zu können. Auf diese Weise wird es möglich, den Einfluss einzelner Komponenten auf das Gesamtsystem ebenso wie die Auswirkungen der Interaktion zwischen Kluft und Matrix auf das Prozessverhalten besser zu verstehen und zu erfassen. Dazu muss jedoch das zur Anwendung kommende numerische Verfahren in der Lage sein, die zugrunde liegende Geometrie und die auftretenden physikalischen Prozesse richtig zu beschreiben. Es werden daher eine Reihe von Anforderungen für die Simulation von Strömung und Transport aufgestellt (Abb. 1.5), an denen sich die Auswahl eines geeigneten Lösungsverfahrens orientieren sollte. Diese Anforderungen gelten ebenso für ungeklüftete Systeme, die spezielle Struktur von diskreten Kluft-Matrix-Systemen mit ihren sich sprunghaft ändernden Materialeigenschaften und ihren sehr unterschiedlichen Längen- und Zeitskalen wirft jedoch zusätzliche Probleme bei der Erfüllung der aufgeführten Punkte auf.

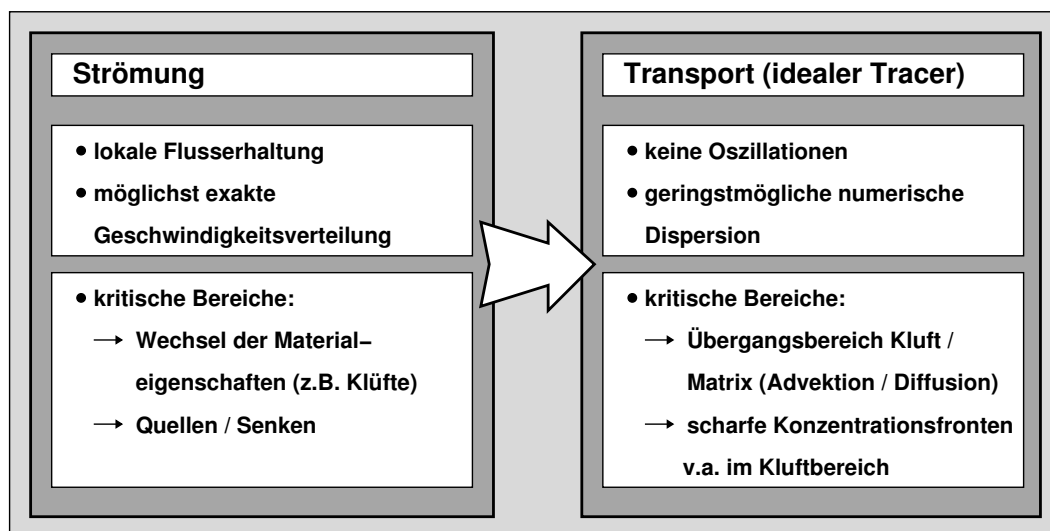


Abbildung 1.5: Anforderungen an die numerische Modellierung von Strömungs- und Transportprozessen in geklüftet-porösen Medien

Die Transportberechnung ist zum einen in hohem Maße abhängig von dem zugrunde liegenden Strömungsfeld. Die Ermittlung der Geschwindigkeitsverteilung muss daher mit großer Sorgfalt erfolgen. Kritische Bereiche sind vor allem Inhomogenitäten wie der Wechsel der Materialeigenschaften (Klüfte) oder Quellen und Senken, wo Betrag und Richtung der Geschwindigkeit auf kleiner Fläche stark variieren können. Das zur Anwendung kommende Lösungsverfahren sollte nach Möglichkeit einen stetigen Fluss im Gebiet, insbesondere am Kluft-Matrix-Interface gewährleisten (Abb. 1.5, links). Zum anderen wechselt im Übergangsbereich von Kluft und Matrix der Charakter der Transportgleichung zwischen Diffusion und Advektion bzw. im mathematischen Sinn zwischen elliptisch/parabolisch und hyperbolisch. Das zur numerischen Approximation eingesetzte Verfahren muss diesen Wechsel erfassen und verarbeiten können, um Probleme wie numerische Dispersion und numerische Oszillation zu minimieren bzw. zu vermeiden. Hinzu kommen scharfe Konzentrationsfronten im hochadvektiven Kluftbereich und im Kluft-Matrix-Übergangsbereich, die das verwendete Verfahren

stabil und möglichst genau erhalten soll (Abb. 1.5, rechts). Eine Rückkopplung zwischen Transport und Strömung, d.h. ein Einfluss des transportierten Stoffs und seiner Verteilung im Gebiet auf das Strömungsverhalten wird hier nicht betrachtet.

Im Kontext kombinierter Modelle werden Kluft und Matrix üblicherweise durch Elemente unterschiedlicher Dimension modelliert, d.h., die Dimension der Kluftelemente ist eine oder zwei Dimensionen niedriger als die Dimension der Matrixelemente (z.B. HELMIG (1993)[84], BARLAG (1997)[9]). Dieses Vorgehen wird im Weiteren auch als *niederdimensionaler* Modellansatz bezeichnet (Abb. 1.6, links). Die Kopplung von Kluft und Matrix erfolgt durch Addition der geeignet gewichteten lokalen Elementsteifigkeitsmatrizen bei den Finite-Elemente-Methoden bzw. durch Addition der jeweils zu einem Knoten gehörenden Flussanteile bei den Finite-Volumen-Methoden. Dadurch ist allerdings die lokale Flusserhaltung am Kluft-Matrix-Übergang nicht sichergestellt und der zugrunde liegende physikalische Prozess gegebenenfalls nicht richtig erfasst.

Um eine stetige Beschreibung des Flusses zwischen Kluft und Matrix zu erhalten und damit eine der grundlegenden Anforderungen gemäß Abb. 1.5 zu erfüllen, wurde im Rahmen des DFG-Projekts *Mehrgittermethoden und adaptive Euler-Lagrange-Verfahren zur Simulation von Strömungs- und Transportvorgängen in Kluftaquifersystemen* ein alternativer Ansatz entwickelt, der als *äquidimensional* bezeichnet wird (Abb. 1.6, rechts), d.h., Kluft und Matrix werden mit Elementen der gleichen Dimension vernetzt, wobei in den Klüften *degenerierte Elemente*, Elemente mit der Breite $b \rightarrow 0$, zugelassen werden (NEUNHÄUSERER, GEBAUER, HINKELMANN, KORNHUBER & HELMIG (2000)[157], NEUNHÄUSERER, GEBAUER, OCHS, HINKELMANN, KORNHUBER & HELMIG (2001)[158]). Die Beschreibung von Klüften in Form niederdimensionaler Elemente (Abb. 1.6, links) ist zunächst nahe liegend, da die Öffnungsweite der Kluft in der Regel um einige Größenordnungen kleiner ist als ihre Längs- und Querausdehnung und als die umgebende Gesteinsmatrix. Eine äquidimensionale Diskretisierung der Klüfte erzeugt daher sehr ungünstige, d.h. sehr lange und schmale Elemente in der Kluft, die gegebenenfalls numerische Probleme hervorrufen können. Die äquidimensionale Herangehensweise bietet jedoch auch eine Reihe von Vorteilen bei der numerischen Modellierung. Zum einen existieren bei der äquidimensionalen Beschreibung Freiheitsgrade in der Kluft, die allein zur Kluft gehören und nicht gleichzeitig Kluft- und Matrixknoten sind. Die sich für die Kluft ergebenden Werte der berechneten Zustandsgrößen sind daher keine Mischwerte aus Kluft und Matrix, sondern reine Kluftwerte, sodass Flüsse in der Kluft sowie zwischen Kluft und Matrix zuverlässiger abgebildet werden können. Zum anderen ermöglicht eine Diskretisierung gleicher Dimension in Kluft und Matrix Gradienten quer zur Kluft. Dies ermöglicht die lokale Flusserhaltung am Kluft-Matrix-Interface. Außerdem lassen sich für das gesamte System eindeutige Stromlinien bestimmen, sodass z.B. Partikelmethode zur Transportmodellierung herangezogen werden können.

Die Entwicklung eines Lösungsverfahrens für äquidimensional diskretisierte Modellprobleme, das robust gegenüber verschwindender Kluftbreite ist, ist Gegenstand aktueller Forschung und für die Strömung bereits implementiert (z.B. GEBAUER, NEUNHÄUSERER, KORNHUBER, OCHS, HINKELMANN & HELMIG (2002)[68]). Es handelt sich dabei um ein effizientes Lösungsverfahren, das auf einer hierarchischen Zerlegung des Modellproblems in ein Kluft-

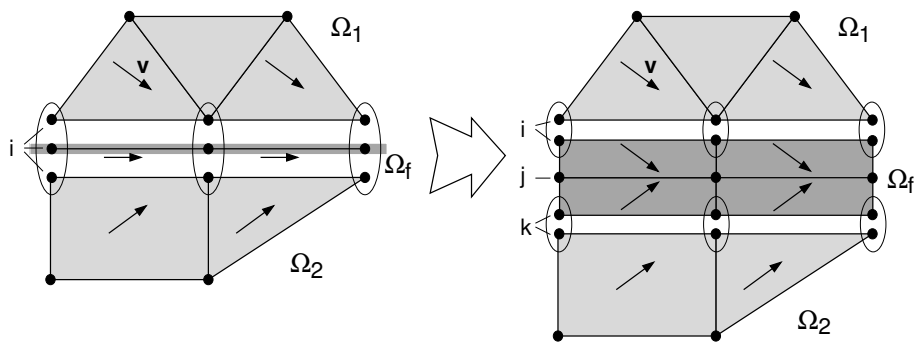


Abbildung 1.6: Fluss in Kluft und Matrix in Abhängigkeit vom Modellansatz. Links: Niederdimensional. Rechts: Äquidimensional.

und ein Matrixproblem beruht. Das Matrixproblem wird mit einem Mehrgitterverfahren mit speziellen Glättungsschritten und das Kluftproblem mit einem Mehrgitterverfahren mit anisotropem Glätter gelöst. Wird das Verfahren für die Transportdiskretisierung weiterentwickelt, so ist beispielsweise denkbar, in den jeweiligen Teilräumen von Kluft und Matrix unterschiedliche, dem dominierenden physikalischen Prozess angepasste Diskretisierungsverfahren oder sogar unterschiedliche mathematische Modelle einzusetzen.

Die äquidimensionale Modellierung bietet also, gegebenenfalls in Kombination mit einer hierarchischen Zerlegung, eine Reihe interessanter Perspektiven für die Simulation von Strömungs- und Transportprozessen in geklüftet-porösen Medien, die eine verbesserte Darstellung des Prozessverhaltens im Sinne der in Abb. 1.5 gestellten Anforderungen ermöglichen. Eine eingehende Untersuchung über die Auswirkungen dieses Ansatzes auf die damit approximierte Lösung im Vergleich mit der niederdimensionalen Formulierung existiert bisher allerdings nicht. Gleichzeitig gibt es bislang kaum Erkenntnisse darüber, welche numerischen Diskretisierungsverfahren auf eine äquidimensionale Diskretisierung anwendbar sind bzw. welche im Vergleich zur niederdimensionalen Darstellung zusätzlichen Möglichkeiten sich daraus bei der Wahl des numerischen Diskretisierungsansatzes sowohl für die Strömung als auch für den Transport im Hinblick auf die Anforderungen in Abb. 1.5 ergeben.

Ziel der vorliegenden Arbeit in diesem Kontext ist es daher, sowohl für die äquidimensionale als auch für die niederdimensionale Formulierung unter Nutzung der spezifischen Eigenschaften des jeweiligen Ansatzes eine Auswahl geeigneter numerischer Diskretisierungsverfahren zu treffen und das Lösungsverhalten des äquidimensionalen Modellansatzes im Vergleich zum niederdimensionalen Modellansatz sowie der jeweils darauf verwendeten numerischen Diskretisierungsverfahren aufzuzeigen und in Bezug zu den Anforderungen in Abb. 1.5 zu setzen. Auf dieser Basis werden Aussagen über den Anwendungsbereich der einzelnen Ansätze und Verfahren sowie über die Qualität der erzielten Ergebnisse getroffen. Als geeignete numerische Diskretisierungsverfahren werden dabei diejenigen Verfahren bezeichnet, die sich auf den bei beliebigen Kluft-Matrix-Systemen notwendigerweise unstrukturierten Gittern einsetzen lassen und eine oder mehrere der oben aufgestellten Anforderungen erfüllen. Der erforderliche rechentechnische Aufwand im Verhältnis zum damit erzielten Nutzen spielt bei der Bewertung ebenfalls eine Rolle.

Für die Auswahl der numerischen Verfahren werden eine Reihe etablierter Diskretisierungsansätze aus dem Bereich der Finite-Elemente- und Finite-Volumen-Verfahren hinsichtlich ihrer potentiellen Eignung sowohl für die nieder- als auch für die äquidimensionale Approximation der Strömungs- und Transportprozesse in beliebig geklüfteten Systemen analysiert. Von den untersuchten Verfahren wird für die Strömung ein Boxverfahren und ein gemischt-hybrides Finite-Elemente-Verfahren und für den Transport ein Boxverfahren eingesetzt. Die Verwendung des gemischt-hybriden Verfahrens, das eine gegenüber den linearen Finiten Elementen und dem Boxverfahren verbesserte Geschwindigkeitsapproximation liefert, für diskret beschriebene beliebige Kluft-Matrix-Systeme wird durch die äquidimensionale Darstellung der Klüfte ermöglicht. Für niederdimensionale Diskretisierungen sind die gemischt-hybriden Finiten Elemente nicht geeignet. Weiterhin wird für das Boxverfahren der Transportdiskretisierung eine Upwinding-Strategie adaptiert, die das Upwinding in Abhängigkeit vom lokal dominierenden Transportprozess bestimmt und so eine schärfere Frontapproximation in der Gesteinsmatrix ermöglicht.

Die Eigenschaften des äquidimensionalen und des niederdimensionalen Ansatzes sowie der darauf eingesetzten numerischen Diskretisierungsverfahren sowie ihre Anwendbarkeit auf Kluft-Matrix-Systeme wird an verschiedenen Modellproblemen von ansteigend geometrischer Komplexität untersucht. Um diese Beispiele realisieren zu können, wurde aus verschiedenen Softwarekomponenten eine flexible Simulationsumgebung aufgebaut, die die Approximation von Strömung und Transport mit den ausgewählten numerischen Diskretisierungsverfahren sowohl für die niederdimensionale als auch für die äquidimensionale Darstellung beliebig geklüfteter Systeme erlaubt. Insbesondere wurde ein Verfahren für die äquidimensionale Diskretisierung der Klüfte entwickelt und implementiert. Die Modularität der einzelnen Softwarekomponenten lässt eine Erweiterung der Simulationsumgebung um z.B. weitere Diskretisierungsmethoden oder Lösungsverfahren zu.

Im Rahmen dieser Arbeit wird von einem Einphasen-Zweikomponenten-Modellkonzept ausgegangen, d.h., es wird eine gesättigte Strömung und ein idealer Tracertransport, der Advektion, Diffusion und Dispersion umfasst, betrachtet. Die zugehörigen Modellgleichungen und die zugrunde liegenden physikalischen Prozesse werden in Kap. 2 dargestellt. Kap. 3 enthält eine Darstellung der hinsichtlich ihrer Eignung für die nieder- und äquidimensionale Prozessmodellierung in geklüftet-porösen Medien analysierten numerischen Diskretisierungsansätze und ihrer Eigenschaften. Die ausgewählten Verfahren werden in Kap. 4 noch einmal näher betrachtet und erläutert. Die Softwarekomponenten der Simulationsumgebung werden in Kap. 5 vorgestellt. Dazu gehören der Kluftgenerator *FRAC3D* zur Erstellung der Kluftgeometriemodelle (Kap. 5.1), der Netzgenerator *ART* für die niederdimensionale Vernetzung der geklüfteten Modellgebiete (Kap. 5.2.1), das Modul *FRACMESH* für die äquidimensionale Vernetzung der Klüfte (Kap. 5.2.2) und die Software-Toolbox *MUFTE-UG* als Simulationsprogramm (Kap. 5.3). In Kap. 6 wird der Einfluss der verschiedenen Modell- und Diskretisierungsansätze auf die Simulationsergebnisse für Strömung und Transport in geklüftet-porösen Systemen anhand einer Reihe von Modellbeispielen von ansteigend geometrischer Komplexität diskutiert und bewertet. Kap. 7 gibt eine Zusammenfassung der Arbeit und einen Ausblick.

2 Modellgleichungen

2.1 Strömung

Betrachtet wird eine Strömung unter gesättigten Bedingungen in einem gespannten Aquifer. Die zugehörige Kontinuitätsgleichung lässt sich über eine Massenbilanz an einem orts- und zeitfesten Kontrollvolumen herleiten:

$$\frac{\partial(n\rho)}{\partial t} + \nabla \cdot (\rho \underline{v}_f) - \rho q = 0 \quad (2.1)$$

Dabei ist n die Gesamtporosität, ρ die Fluidmassendichte, t die Zeit, \underline{v}_f die Filtergeschwindigkeit und q die Quelledichte. Glg. 2.1 ist aufgrund ihrer Herleitung (Massenbilanz am Kontrollvolumen) makroskopischer Natur. Die Zeitableitung kann mit Hilfe von Produkt- und Kettenregel umgeschrieben werden:

$$\frac{\partial(n\rho)}{\partial t} = \rho \frac{\partial n}{\partial t} + n \frac{\partial \rho}{\partial t} = \left(\rho \frac{\partial n}{\partial p} + n \frac{\partial \rho}{\partial p} \right) \frac{\partial p}{\partial t} = \rho \left(\frac{\partial n}{\partial p} + \frac{n}{\rho} \frac{\partial \rho}{\partial p} \right) \frac{\partial p}{\partial t} \quad (2.2)$$

Der linke Term in der Klammer auf der rechten Seite von Glg. 2.2 beschreibt die Kompressibilität des Porenvolumens infolge des Drucks p , der rechte Term erfasst die Kompressibilität des Fluids. Bei der Umformung wird davon ausgegangen, dass die Temperatur keine Rolle spielt und die Dichte des Fluids nicht durch gegebenenfalls vorhandene Schadstoffe beeinflusst wird (siehe dazu z.B. KRÖHN (1991)[124]). Aus Glg. 2.2 kann der spezifische Speicherkoeffizient S_0 ermittelt werden, der nach DIN 4049-3 definiert ist als die Änderung des gespeicherten Wasservolumens je Volumeneinheit des Grundwasserraumes bei Änderung der Standrohrspiegelhöhe um einen Meter:

$$S_0 = \rho g \left(\frac{\partial n}{\partial p} + \frac{n}{\rho} \frac{\partial \rho}{\partial p} \right) \quad (2.3)$$

Mit g wird die Erdbeschleunigung bezeichnet. Im Folgenden soll von einem inkompressiblen Fluid ausgegangen werden. Mit Glg. 2.3 ergibt sich die Kontinuitätsgleichung in der Druckformulierung dann zu:

$$\frac{S_0}{\rho g} \frac{\partial p}{\partial t} + \nabla \cdot \underline{v}_f - q = 0 \quad (2.4)$$

2.1.1 Strömung in porösen Medien

Die Filtergeschwindigkeit \underline{v}_f bestimmt sich aus der Darcy-Gleichung :

$$\underline{v}_f = -\underline{K}_f \cdot \nabla h \quad (2.5)$$

bzw. in der Druckformulierung mit

$$h = \frac{p}{\rho g} + z \quad (2.6)$$

und

$$\underline{\underline{K}}_f = \frac{\rho g}{\eta} \underline{\underline{K}}_0 \quad (2.7)$$

zu

$$\underline{v}_f = -\frac{1}{\eta} \underline{\underline{K}}_0 \cdot \nabla(p + \rho g z) \quad (\rho = \text{const.}) \quad (2.8)$$

Hierbei ist $\underline{\underline{K}}_f$ der Tensor der hydraulischen Leitfähigkeit, $\underline{\underline{K}}_0$ der Tensor der Permeabilität, h die Piezometerhöhe, z die geodätische Höhe und η die dynamische Fluidviskosität. $\underline{\underline{K}}_0$ wird als eine reine Bodenkenngröße betrachtet und beschreibt den Widerstand, den die durchflossene Bodenzone dem Fluidfluss entgegensetzt. In der ungesättigten Bodenzone ist $\underline{\underline{K}}_0$ zusätzlich eine Funktion der Sättigung. $\underline{\underline{K}}_f$ erfasst hingegen über η und ρ auch die Fluideigenschaften. $\underline{\underline{K}}_0$ bzw. $\underline{\underline{K}}_f$ sind symmetrisch:

$$\underline{\underline{K}}_0 = \begin{bmatrix} k_{0xx} & k_{0xy} \\ k_{0xy} & k_{0yy} \end{bmatrix} \quad (2.9)$$

Stimmt das betrachtete Koordinatensystem mit den Hauptachsen des Permeabilitätstensors überein, so werden die Nebendiagonalelemente k_{0xy} zu Null. Sind die Hauptdiagonalelemente gleich groß ($k_{0xx} = k_{0yy}$), handelt es sich um ein isotropes Medium, für das jede Richtung Hauptrichtung ist ($k_{0xy} = 0$). Die entsprechende Formulierung gilt für den dreidimensionalen Raum. Voraussetzung für die Gültigkeit der Darcy-Gleichung ist eine laminar schleichende Strömung. Nach BEAR (1972)[15] ist diese in porösen Medien gegeben für $Re_{d50} \leq 1 \dots 10$, und die Reynolds-Zahl Re_{d50} ist definiert als:

$$Re_{d50} = \frac{|\underline{v}_f| d_{50}}{\nu} \quad (2.10)$$

Mit d_{50} wird der mittlere Korndurchmesser bezeichnet, mit ν die kinematische Viskosität. Die der vorliegenden Arbeit zugrunde liegende Strömungsgleichung ergibt sich durch Einsetzen von Glg. 2.8 in Glg. 2.4:

$$\frac{S_0}{\rho g} \frac{\partial p}{\partial t} - \nabla \cdot \left(\frac{1}{\eta} \underline{\underline{K}}_0 \cdot \nabla(p + \rho g z) \right) - q = 0 \quad (2.11)$$

2.1.2 Strömung in der Kluft

Für die Beschreibung der Strömungsverhältnisse in einer Kluft können grundsätzlich zwei Fälle unterschieden werden:

- die Kluft wird als verfüllt betrachtet, z.B. mit Sand oder Verwitterungsmaterial
- die Kluft wird als unverfüllt betrachtet

In verfüllten Klüften wird die Strömung im Allgemeinen als laminar schleichend angesetzt, so dass das Fließgesetz nach Darcy in der oben beschriebenen Form (Glg. 2.8) angewendet werden kann. Ist die Kluft unverfüllt und kann sie im einfachsten Fall gegebenenfalls bereichsweise

als offener Spalt zwischen zwei planparallelen Platten beschrieben werden, kann die Filtergeschwindigkeit über die Fließgesetze der eindimensionalen Spaltströmung angenähert werden (WITTKÉ (1984)[214], ORON & BERKOWITZ (1998)[169]). Das Fließregime im Spalt bzw. in der idealisierten Kluft bildet sich in Abhängigkeit der Reynolds-Zahl Re_{D_h} und der relativen Rauigkeit der Kluftwände k/D_h aus (k ist die absolute Rauigkeit der Kluftwände, $D_h = 4a$ ist der hydraulische Durchmesser der Kluft, a ist die halbe Kluftöffnungsweite). Für $Re_{D_h} < 2300$ ist die Strömung laminar, für $Re_{D_h} > 2300$ turbulent. Re_{D_h} unterscheidet sich von Re_{d50} in der charakteristischen Länge:

$$Re_{D_h} = \frac{|\underline{v}_f| D_h}{\nu} \quad (2.12)$$

Im Falle einer zweidimensionalen, laminaren Strömung in einem unendlich ausgedehnten Spalt mit konstanter Öffnungsweite $2a$ und glatten Wänden ($0 \leq k/D_h \leq 0,032$) kann das entsprechende Fließgesetz aus der Navier–Stokes–Gleichung abgeleitet werden (LOUIS (1967)[140]). Die über den Spaltquerschnitt gemittelte Geschwindigkeit ergibt sich danach zu:

$$\underline{v}_f = -\frac{1}{\eta} \frac{(2a)^2}{12} \cdot \nabla(p + \rho g z) \quad (\rho = \text{const.}) \quad (2.13)$$

Glg. 2.13 wird auch als Hagen–Poiseuille–Gesetz bezeichnet. Ein Vergleich mit Glg. 2.8 macht deutlich, dass beide Gleichungen ineinander überführt werden können, wenn die Komponenten des Permeabilitätstensors aus Glg. 2.13 abgeleitet werden:

$$k_{0xx} = k_{0yy} = \frac{(2a)^2}{12} = \frac{b^2}{12} \quad \text{mit } b = 2a \quad (2.14)$$

Integration von Glg. 2.14 über die Kluftöffnungsweite b führt auf den Volumenstrom Q_K pro Meter Kluftbreite:

$$Q_K = -\frac{1}{\eta} \frac{b^3}{12} \cdot \nabla(p + \rho g z) \quad (2.15)$$

Da der Volumenstrom Q_K proportional ist zur dritten Potenz der Kluftöffnungsweite b , wird Glg. 2.15 auch als *cubic law* bezeichnet (SNOW (1965)[196]). Fließgesetze für turbulente Strömungen und für raue Kluftwandungen ($k/D_h > 0,032$) werden von LOUIS (1967)[140] aufgeführt. Im Folgenden soll von verfüllten Klüften oder gegebenenfalls von unverfüllten Klüften mit glatten Wänden und einer laminaren Strömung ausgegangen werden.

2.2 Transport

Für das aus Glg. 2.11 und Glg. 2.8 bekannte Strömungsfeld kann der Transport eines idealen Tracers wie folgt beschrieben werden:

$$\frac{\partial c}{\partial t} + \nabla \cdot (\underline{v}_a c) - \nabla \cdot (\underline{D}_m \nabla c) + \nabla \cdot (\underline{J}) = 0 \quad (2.16)$$

In der Gleichung steht c für die Konzentration, \underline{v}_a für die Abstandsgeschwindigkeit, \underline{D}_m für die molekulare Diffusion und \underline{J} für den dispersiven Massenfluss. Der zweite Term auf der linken Seite beschreibt den advektiven, der dritte Term den diffusiven und der vierte Term den dispersiven Anteil. Adsorption und Reaktion werden nicht berücksichtigt.

Als Advektion wird der Transport des gelösten Stoffes mit der Abstandsgeschwindigkeit bezeichnet (Abb. 2.1). Die Abstandsgeschwindigkeit gibt an, mit welcher mittleren Geschwindigkeit ein Teilchen eine Wegstrecke Δs in der Zeit Δt durchläuft:

$$\underline{v}_a = \Delta s / \Delta t \approx \underline{v}_f / n_e \quad (2.17)$$

Die Wegstrecke Δs ist dabei immer die direkte Verbindung zwischen zwei (Mess-) Punkten und im Allgemeinen deutlich kürzer als die Weglänge entlang der tatsächlichen Bahnlinie des Teilchens. Mit der Filtergeschwindigkeit \underline{v}_f ist die Abstandsgeschwindigkeit über die effektive (durchflusswirksame) Porosität n_e verbunden. Ein Tracerpuls, der rein advektiv durch einen homogenen Raum bewegt wird, erfährt in seiner Form keine Veränderung.

Die molekulare Diffusion kann als Mischungsvorgang auf mikroskopischer Ebene verstanden werden. Sie führt unabhängig von der Fluidströmung aufgrund der Brown'schen Molekularbewegung zu einem Konzentrationsausgleich. Die Brown'sche Molekularbewegung impliziert, dass die Bewegung eines Partikels wenig oder keine räumliche Korrelation aufweist. Es lässt sich zeigen, dass sich die Partikelbewegung aus der Superposition sehr vieler voneinander unabhängiger Zufallsgrößen ergibt und damit nach dem *zentralen Grenzwertsatz* als annähernd normalverteilt bezeichnet werden kann. Die Konzentrationsverteilung aufgrund molekularer Diffusion kann daher durch eine Gauß'sche Normalverteilung erfasst werden. (z.B. BENSON (1998)[16]). Ihre mathematische Beschreibung erfolgt mit Hilfe des 1. Fick'schen Gesetzes, wonach die diffusive Stromdichte proportional zum Konzentrationsgradienten angenommen wird. Die diffusive Ausbreitung des Stoffes erfolgt in Richtung der niedrigeren Konzentration (Abb. 2.1). In porösen Medien wird die Diffusion beim Übergang auf die Makroskala von der Verwundenheit des Porenraums (Tortuosität) beeinflusst. Der effektive Diffusionskoeffizient für ein poröses Medium ist demnach vom molekularen Diffusionskoeffizienten, der die Diffusion im freien Flüssigkeitsraum charakterisiert, und der Tortuosität abhängig (z.B. KRÖHN (1991)[124], BARLAG (1997)[9]).

Als Dispersion wird der Massenfluss bezeichnet, der über den auf der mittleren Abstandsgeschwindigkeit basierenden advektiven Anteil hinaus aufgrund der Geschwindigkeitsfluktuationen innerhalb des Mittelungsvolumens (REV) stattfindet. Das Auftreten der Geschwindigkeitsfluktuationen ist je nach Größe des Mittelungsvolumens unterschiedlich begründet. Innerhalb einer Pore verursacht das Profil der Geschwindigkeit die Fluktuationen. Umfasst das Mittelungsvolumen mehrere Poren, so verstärkt die Variabilität der Porengröße sowie die Umlenkung der Fließwege am Korngerüst die Schwankungen in der Geschwindigkeit (korngerüstbedingte Dispersion). Bei einer weiteren Vergrößerung des Mittelungsvolumens bestimmt das Auftreten von größerskaligen Inhomogenitäten (z.B. Sand- oder Tonlinsen, Klüfte) die heterogene Geschwindigkeitsverteilung (Makrodispersion).

Die Erfassung der Dispersion ist nicht unproblematisch und immer noch Gegenstand umfangreicher Forschungsarbeiten. Im einfachsten Fall wird sie analog zur molekularen Diffusion durch einen Fick'schen Ansatz beschrieben:

$$\underline{J} = -\underline{D}_D \nabla c \quad (2.18)$$

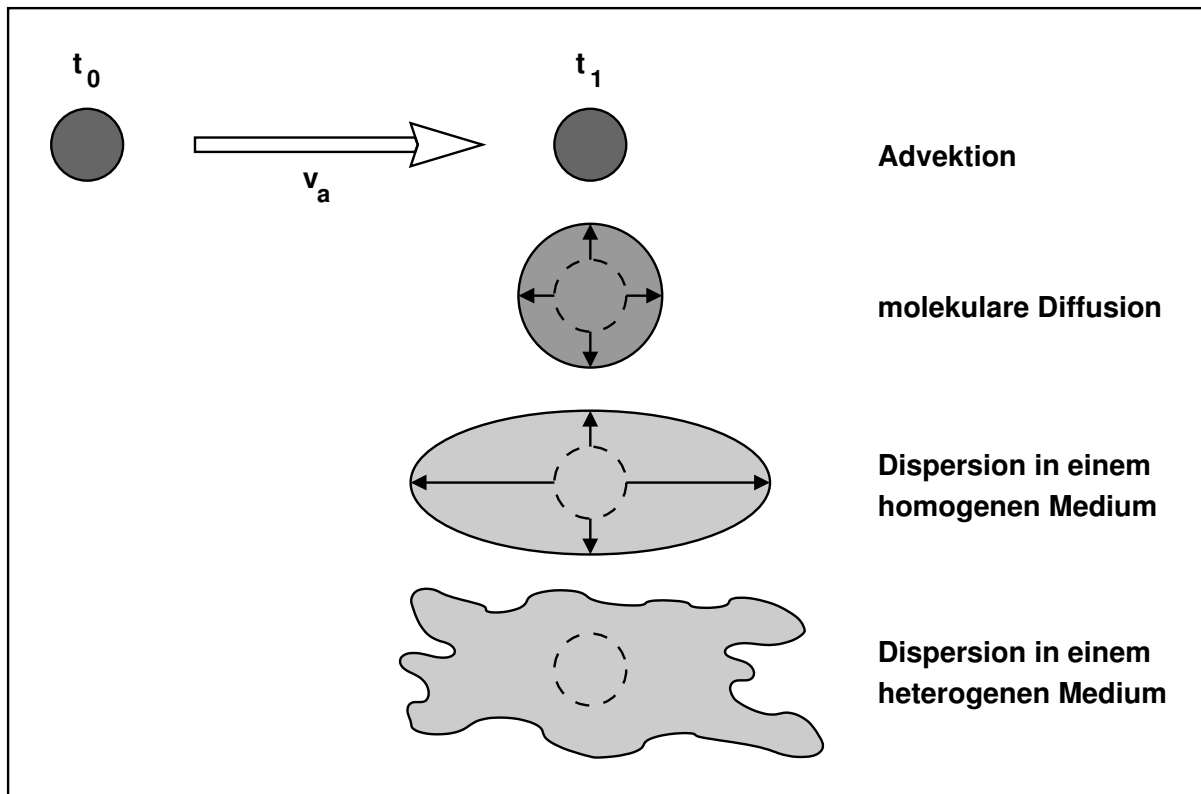


Abbildung 2.1: Wirkung ausgewählter Transportprozesse auf einen kreisförmigen Tracerpuls

$\underline{\underline{D}}_D$ ist im allgemeinen Fall ein Tensor vierter Stufe. Für zwei Raumdimensionen leitet SCHEIDEGGER (1961)[185] daraus einen zweistufigen Tensor ab. Dieser kann aufgrund der formal gleichen mathematischen Beschreibung von Diffusion und Dispersion mit dem Tensor der molekularen Diffusion zu einem Tensor der hydrodynamischen Dispersion zusammengefasst werden:

$$\underline{\underline{D}} = \underline{\underline{D}}_m + \underline{\underline{D}}_D = \begin{bmatrix} D_{xx} & D_{xy} \\ D_{yx} & D_{yy} \end{bmatrix} \quad (2.19)$$

mit den Komponenten

$$\begin{aligned} D_{xx} &= \alpha_l \frac{v_{ax}^2}{|v_a|} + \alpha_t \frac{v_{ay}^2}{|v_a|} + D_m \\ D_{xy} = D_{yx} &= (\alpha_l - \alpha_t) \frac{v_{ax} v_{ay}}{|v_a|} \\ D_{yy} &= \alpha_l \frac{v_{ay}^2}{|v_a|} + \alpha_t \frac{v_{ax}^2}{|v_a|} + D_m \end{aligned} \quad (2.20)$$

Die Indizes x und y geben die entsprechende Ausrichtung im Koordinatensystem an, α_l steht für die longitudinale und α_t für die transversale Dispersivität. Da die einzelnen Tensoreinträge von den Geschwindigkeitskomponenten abhängen, ist Dispersion bis auf wenige Sonderfälle auch im isotropen Medium immer anisotrop (Abb. 2.1). Im dreidimensionalen Fall lässt sich

für den isotropen Fall ein analoger Tensor angeben (BEAR (1972)[15]). Eine Übersicht über allgemeinere Formulierungen des Dispersionstensors gibt KINZELBACH (1992)[115].

Die Gültigkeit des Fick'schen Ansatzes ist für die korngerüstbedingte Dispersion in homogenen porösen Medien in zahlreichen Säulenversuchen bestätigt worden. Der Ansatz kann auch für die Bestimmung der Makrodispersion verwendet werden, unter der Voraussetzung, dass die Heterogenitäten, die kleiner sind als das Mittelungsvolumen, innerhalb des Mittelungsvolumens statistisch verteilt sind und dass die Heterogenitäten, die größer sind als das Mittelungsvolumen, explizit beschrieben werden. Daraus kann abgeleitet werden, dass der Dispersionseffekt in der Regel um so kleiner wird, je detaillierter die zugrunde liegende Struktur erfasst wird (KINZELBACH (1992)[115]).

Obwohl die auf den Glgn. 2.18 – 2.20 basierende Theorie zur Beschreibung der Makrodispersion unter realistischen Bedingungen nur eingeschränkt gültig ist, wird sie häufig verwendet. TSUBOYAMA, SIDLE, NOGUCHI & HOSODA (1994)[208] sowie SIDLE, NILSSON, HANSEN & FREDERICA (1998)[192] interpretierten Daten aus Feldexperimenten, indem sie die longitudinale hydrodynamische Dispersion über ein Least-Square-Verfahren aus den gemessenen Durchbruchkurven ermittelten. In Abhängigkeit von der Konnektivität der Heterogenitäten untereinander konnte für einen Teil der Messpunkte eine befriedigende Übereinstimmung zwischen experimentellen und theoretischen Werten erzielt werden. TSANG, TSANG, HALE & DVERSTORP (1996)[206] verwendeten ein stochastisches Modell mit Durchlässigkeitswerten, die über mehrere Größenordnungen variieren. An diesem Modell wurden umfangreiche Particle-Tracking-Simulationen auf der Basis unterschiedlicher Korrelationslängen durchgeführt, und für jede der ermittelten Durchbruchkurven wurde ebenfalls über ein Least-Square-Verfahren ein skalarer Dispersionskoeffizient bestimmt. Anschließend wurden Mittelwert und Standardabweichung des Dispersionskoeffizienten errechnet. NEUNHÄUSERER, HEMMINGER & HELMIG (2000)[162] ermittelten aus Transportsimulationen an diskreten Kluft- und Kluft-Matrix-Systemen Dispersionstensoren, die als Anhaltswert für eine Kontinuumsmodellierung dienen.

Bei Anwendung der Dispersionstheorie in Form der Glgn. 2.18 – 2.20 wird implizit vorausgesetzt, dass die Makrodispersion eine konstante Größe ist, die allein von der Geschwindigkeit und von den Dispersivitäten α_l und α_t abhängt. Diese wiederum werden als intrinsische Eigenschaft des zugrunde liegenden porösen Mediums begriffen. Zahlreiche Messreihen in Labor- und Feldversuchen sowie numerische Simulationen zeigen jedoch, dass die Dispersion abhängig sowohl von der Längen- als auch von der Zeitskala ist. Graphische Darstellungen mit Übersichtscharakter und Auswertungen der ermittelten Daten finden sich z.B. bei GELHAR, WELTY & REHFELDT (1992)[70], KINZELBACH (1992)[115] und KOBUS, SCHÄFER, SPITZ & HERR (1992)[117]. Daraus ergibt sich im Wesentlichen ein systematischer Anstieg der longitudinalen Dispersivität mit wachsender Skalengröße. Der entsprechende Prozess wird in der Literatur als *anomale Dispersion* (BERKOWITZ & SCHER (1995)[21]) oder *Nicht-Fick'sche Dispersion* (HASSANIZADEH (1996)[83]) bezeichnet. Abb. 2.2 zeigt Beispiele für Fick'schen und Nicht-Fick'schen Transport. Abb. 2.2 a) stellt die Durchbruchkurve für einen Punkt x in einem homogenen Medium dar, für die der Fick'sche Ansatz gültig ist. Wird die Konzentrationsverteilung nicht über die Zeit, sondern über den Ort aufgetragen, so ergibt

sich analog zur molekularen Diffusion die Form einer Gauß'schen Verteilung. Abb. 2.2 b) enthält eine Durchbruchskurve für ein mäßig heterogenes Medium, Abb. 2.2 c) für ein stark heterogenes Medium mit ausgeprägten Fließwegen (Klüften). In beiden Fällen ist die frühere Erstankungszeit, der vorgezogene Peak und das ausgeprägte Tailing auffällig. Abb. 2.2 d) zeigt einen Doppelpeak, der auf zwei unterschiedliche dominierende Fließpfade hinweist.

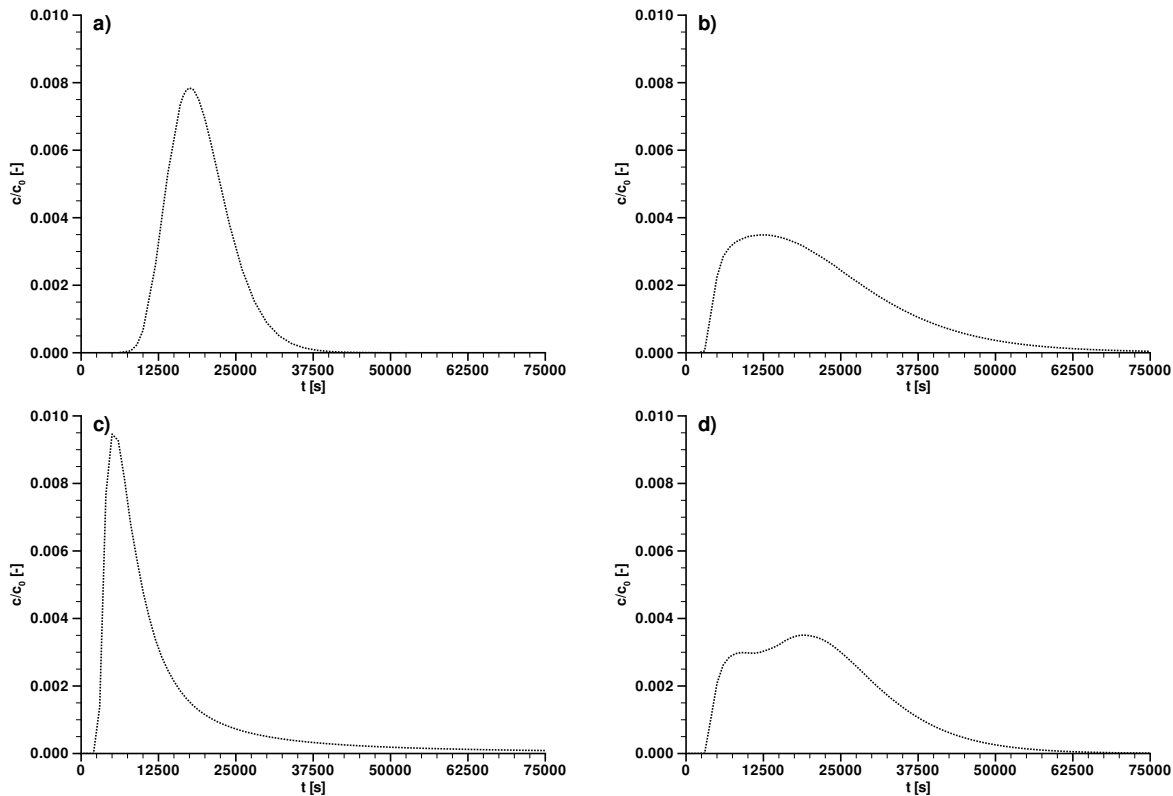


Abbildung 2.2: Durchbruchskurven. Beispiele für a) Fick'schen und b) – d) Nicht-Fick'schen Transport

Angesichts des Nicht-Fick'schen Verhaltens der Dispersion sind eine Reihe alternativer Ansätze entstanden, die häufig auf stochastischen Analysen beruhen. Die dem Fick'schen Dispersionsansatz zugrunde liegende Annahme ist, dass zwischen den Richtungen, die ein Fluidpartikel in zwei aufeinanderfolgenden Zeitschritten einschlägt, keine Korrelation besteht. Wird jedoch eine solche Korrelation eingeführt, ergeben sich Formulierungen, die eine anwachsende Dispersivität beschreiben können. SCHEIDEGGER (1960)[184] leitete für den eindimensionalen Fall die folgende Gleichung ab:

$$\frac{\partial c}{\partial t} + \underline{v}_a \frac{\partial c}{\partial x} - \underline{D}_D \frac{\partial^2 c}{\partial x^2} = -A \left(\frac{\partial^2 c}{\partial t^2} + 2\underline{v}_a \frac{\partial^2 c}{\partial t \partial x} + \underline{v}_a^2 \frac{\partial^2 c}{\partial x^2} \right) \quad (2.21)$$

A ist dabei ein Maß für die Korrelation. Glg. 2.21 gilt für konstante Geschwindigkeit \underline{v}_a . SCHEIDEGGER (1960)[184] bezeichnete die Ausbreitung der Partikel unter Annahme einer Korrelation als *Dispersion mit Erinnerung*. Eine Analogie zu Glg. 2.16 lässt sich dann herstellen, wenn

gilt (HASSANIZADEH (1996)[83]):

$$J = -\underline{D} \frac{\partial c}{\partial x} - A \frac{\partial J}{\partial t} - A v_a \frac{\partial J}{\partial x} \quad (2.22)$$

Ein Fick'scher Ansatz ist demnach nur gültig, wenn die letzten beiden Terme auf der rechten Seite von Glg. 2.22 vernachlässigbar klein sind.

Allgemeine Konzepte für die Beschreibung der Makrodispersion im dreidimensionalen Raum werden z.B. in den Arbeiten von GELHAR & AXNESS (1983)[69] und DAGAN (1984)[51] aufgestellt. Die Theorie von GELHAR & AXNESS (1983)[69] liefert den Makrodispersivitätstensor als Funktion der räumlichen Variabilität und Autokorrelation eines lokal isotropen Durchlässigkeitsbeiwerts. Im Allgemeinen wird davon ausgegangen, dass die longitudinale Dispersivität mit dem Fließweg ansteigt und in ausreichendem Abstand asymptotisch einen konstanten Wert annimmt, sodass der Fick'sche Ansatz wieder gültig wird (z.B. GELHAR & AXNESS (1983)[69], DAGAN (1984)[51], KINZELBACH (1992)[115]). Überlegungen u.a. von NEUMAN (1990)[153] (und Referenzen darin) ebenso wie die Untersuchungen von TSANG, TSANG, HALE & DVERSTORP (1996)[206] deuten jedoch darauf hin, dass solch ein asymptotischer Grenzwert gegebenenfalls erst sehr spät oder gar nicht auftreten kann. Demnach erfahren die Partikel im Verlauf ihrer Ausbreitung Veränderungen durch immer andere und immer größere Inhomogenitäten, sodass sich ihre Bewegung unter Umständen immer im Übergangsbereich befindet, ohne je ein asymptotisches Verhalten zu erreichen.

Um den Einfluss der Variation der Bodeneigenschaften über mehrere Skalen auf die Geschwindigkeitsverteilung und damit den makroskopischen Transport analysieren zu können, erstellten GRINDROD & IMPEY (1993)[75] Modellgebiete poröser Medien, deren Transmissivität sie über einen fraktalen Ansatz ermittelten, und führen darauf Particle-Tracking-Simulationen aus. Die so entstandenen Durchbruchkurven charakterisierten sie mit Hilfe eines CHANNEL-NETWORK-Ansatzes, der im Kern auf der Formulierung einer geeigneten Dichteverteilung für die Partikelgeschwindigkeiten beruht. Andere Arbeiten verwenden stochastische Ansätze, die geologische Formationen als statistisch heterogen über mehrere Skalen betrachten und daraus Transportgleichungen ableiten, die räumlich und/oder zeitlich nichtlokal sind, d.h. in allgemeinerer Form als SCHEIDEGGER (1960)[184] in Glg. 2.21 die Historie der Partikelbewegung einbeziehen (z.B. NEUMAN (1993)[154], CUSHMAN & GINN (1993)[50]). BERKOWITZ & SCHER (1995), (1998)[21][22] und BERKOWITZ, SCHER & SILLIMAN (2000)[23] entwickelten einen Ansatz zur Beschreibung anomaler Dispersion auf der Basis eines *Continuous Time Random Walk (CTRW)*-Formalismus. Kernpunkte dieses Verfahrens sind die Erfassung der Bodenstruktur und der Geschwindigkeit mit Hilfe geeigneter Verteilungsfunktionen sowie die Projektion der Partikelbewegung auf eine Wahrscheinlichkeitsdichtefunktion, die die Wahrscheinlichkeit pro Zeitschritt für den Übergang eines Partikels von einem Ort zum nächsten beschreibt. NEUMAN & SCHER (1995)[155] wiesen außerdem nach, dass die Annahme einer Funktion $D(t)$, die in der Zeit nur lokal ist (z.B. GLIMM, LINDQUIST, PEREIRA & ZHANG (1993)[74]), einen anomalen Dispersionsprozess nicht korrekt erfasst.

Alternativ dazu leitete HASSANIZADEH (1996)[83] aus der Massenbilanz- und Impulsbilanzgleichung für eine gelöste Substanz eine allgemeine Beziehung für den dispersiven Massen-

fluss J ab. Es lässt sich zeigen, dass diese Theorie für den Nicht-Fick'schen Transport mit den entsprechenden Annahmen und Vereinfachungen sowohl den Fick'schen Transport als auch nichtlokale Dispersionstheorien einschließt. BENSON (1998)[16] und BENSON, WHEATCRAFT & MEERSCHAERT (2000)[17][18] wählten für die Transportbeschreibung eine Fokker-Planck-Gleichung, von der die konventionelle Advektions-Dispersions-Gleichung eine Unterklasse ist, und beschrieben die Ortsveränderung der Partikel auf der Basis der Lévy-Bewegung. Die Herleitung führt auf eine fraktionale Advektions-Dispersions-Gleichung, die im einfachsten Fall ein Analogon zu Glg. 2.16 bildet, wobei die Ableitung des Dispersionstensors die fraktionale Ordnung α (z.B. $\alpha = 1.65$) hat:

$$\frac{\partial c}{\partial t} + \nabla \cdot (\underline{v}_a c) - \underline{\underline{D}} \nabla^\alpha c = 0 \quad (2.23)$$

Die fraktionalen Ableitungen entsprechen nichtlokalen Operatoren, die die räumliche und/oder zeitliche Historie der Partikelbewegung beinhalten. Speziell die räumliche fraktionale Ableitung beschreibt Partikel, die sich mit einer großräumigen Korrelation oder stark variierender Geschwindigkeit bewegen (BENSON, WHEATCRAFT & MEERSCHAERT (2000)[18]). Die konventionelle Advektions-Dispersions-Gleichung ist mit $\alpha = 2$ ein Sonderfall von Glg. 2.23.

In Ermangelung anerkannter endgültiger Lösungen des Dispersionsproblems wird im weiteren Verlauf der vorliegenden Arbeit eine konventionelle Advektions-Dispersions-Gleichung im Sinne der Glgn. 2.16 – 2.20 verwendet:

$$\frac{\partial c}{\partial t} + \nabla \cdot (\underline{v}_a c) - \nabla \cdot (\underline{\underline{D}} \nabla c) = 0 \quad (2.24)$$

Es wird davon ausgegangen, dass der dadurch entstehende Fehler klein ist, da für die einzelnen Modellgebiete eine ausreichende Auflösung der Inhomogenitäten durch den diskreten Modellansatz angenommen wird. Glg. 2.24 hat in der aufgeführten Form im mathematischen Sinn einen gemischt parabolisch – hyperbolischen Charakter. Dominiert der diffusiv – dispersive Anteil, überwiegt die stabile parabolische, bei starker Advektion hingegen die hyperbolische Form der Gleichung.

2.3 Anfangs- und Randbedingungen

Die in Kap. 2.1 und Kap. 2.2 aufgeführten partiellen Differentialgleichungen beschreiben jeweils ein Anfangs- und Randwertproblem, für dessen eindeutige Lösung die Angabe problemspezifischer Randbedingungen und im instationären Fall die Vorgabe von Anfangsbedingungen erforderlich ist.

Die Anfangsbedingungen beschreiben den Zustand des in Frage stehenden physikalischen Prozesses im Lösungsgebiet Ω zu Beginn des betrachteten Zeitraums:

$$u(\underline{x}, t = 0) = u_0(\underline{x}) \quad \text{für } (\underline{x}) \in \Omega \quad (2.25)$$

Die Randbedingungen koppeln die Lösung des betrachteten Systems im Gebiet Ω an die Verhältnisse im umgebenden Raum. Dazu wird der Gebietsrand $\partial\Omega$ in Teilbereiche gegliedert:

$$\partial\Omega = \Gamma_D \cup \Gamma_N \cup \Gamma_C \cup \dots \cup \Gamma_n \quad (2.26)$$

Es können u.a. folgende Typen von Randbedingungen (RBD) definiert werden:

$$\begin{aligned} u &= u_D && \text{auf } \Gamma_D && \text{(Dirichlet'sche RBD)} \\ \frac{\partial u}{\partial \underline{n}} &= u_N && \text{auf } \Gamma_N && \text{(Neumann'sche RBD)} \\ \frac{\partial u}{\partial \underline{n}} + \gamma u &= u_C && \text{auf } \Gamma_C && \text{(Cauchy'sche RBD)} \end{aligned} \quad (2.27)$$

Dirichlet'sche Randbedingen werden auch als Randbedingungen erster Art oder wesentliche Randbedingungen bezeichnet. Auf dem Rand Γ_D soll die Unbekannte u einen vorgegebenen Wert u_D annehmen. Neumann'sche Randbedingungen sind Randbedingungen zweiter Art oder auch natürliche Randbedingungen, bei denen die Normalkomponente des Flusses über den Rand festgesetzt wird, $\partial u / \partial \underline{n}$ stellt dabei die Ableitung in Richtung der Außennormalen \underline{n} dar. Die gemischten Cauchy-Randbedingungen oder Randbedingungen dritter Art gehen für den Fall $\gamma = 0$ in eine Neumann'sche Randbedingung über. Cauchy'sche Randbedingungen werden im Rahmen dieser Arbeit nicht behandelt.

3 Diskretisierungsansätze

Die in Kap. 2 hergeleiteten Bilanzgleichungen lassen sich nur für einige bestimmte Problemstellungen und spezielle Rand- und Anfangsbedingungen analytisch lösen. Die Behandlung allgemeiner Aufgaben erfolgt daher in der Regel mit Hilfe numerischer Näherungsverfahren. Dabei wird das Modellproblem in Raum und Zeit diskretisiert, und der Wert der Unbekannten oder des Unbekanntenvektors wird nur für bestimmte (diskrete) Punkte ermittelt, die im Allgemeinen durch ein vorzugebendes Berechnungsgitter definiert werden. Die dazwischenliegenden Werte werden interpoliert. Die Art der Interpolation hängt vom gewählten Diskretisierungsverfahren ab. Das zur Anwendung kommende numerische Schema muss die wesentlichen Aspekte und Eigenschaften des zugrunde liegenden physikalischen Systems wie beispielsweise Heterogenitäten oder Schockfronten korrekt erfassen und wiedergeben können.

Für die Approximation der Modellgleichungen gemäß Kap. 2 existiert eine große Anzahl numerischer Ansätze, die sich im Wesentlichen in Lagrange'sche, Euler-Lagrange'sche und Euler'sche Formulierungen einteilen lassen.

- Euler'sche Ansätze basieren auf der Betrachtung der physikalischen Prozesse an einem ortsfesten Kontrollvolumens zu einem bestimmten Zeitpunkt. Zu den am weitesten verbreiteten Näherungsverfahren zählen hier die *Finite-Differenzen-Methode (FDM)*, die *Finite-Volumen-Methode (FVM)* und die *Finite-Elemente-Methode (FEM)*.
- Lagrange'sche Ansätze beschreiben die Partikelbewegung entlang der Charakteristik des advektiven Transports. In diese Klasse gehören die *particle-tracking-* und die *random-walk-*Modelle. Erstere berechnen den rein advektiven Stofftransport, indem sie die Bewegung der dem System zugeführten Partikel entlang ihrer jeweiligen Bahnlinie verfolgen. Letztere berücksichtigen zusätzlich diffusive oder dispersive Effekte durch Kombination des advektiven Schritts mit einem über eine normalverteilte Zufallsvariable ermittelten diffusiv/dispersiven Schritt.
- Euler-Lagrange'sche Ansätze berechnen den hyperbolischen advektiven Anteil der Transportgleichung mit einem Lagrange'schen Verfahren und den parabolischen Anteil mit einem Euler-Verfahren. Hierzu gehören beispielsweise die *Method of Characteristics (MOC)* und ihre Derivate (*MMOC: Modified Method of Characteristics*, *HMOC: Hybrid Method of Characteristics*) sowie die *Eulerian-Lagrangian Localized Adjoint Methods (ELLAM)*.

In diesem Kapitel wird die Eignung numerischer Diskretisierungsansätze für die diskrete Modellierung von Strömungs- und Transportprozessen in Kluft-Matrix-Systemen im Sinne der in Kap. 1.4 gestellten Anforderungen diskutiert. Dabei wird die spezielle Struktur beliebig

geklüfteter Systeme, die sich im Allgemeinen in unstrukturierten Gittern für die räumliche Diskretisierung des Modellgebiets sowie Elementen unterschiedlicher Dimension im niederdimensionalen Fall bzw. sehr langen und schmalen Kluftelementen im äquidimensionalen Fall widerspiegelt, berücksichtigt. Wie aus den Erläuterungen im vorherigen Absatz hervorgeht, sind die Lagrange'schen und Euler-Lagrange'schen Verfahren für die Approximation gemischt parabolisch-hyperbolischer Gleichungen entwickelt worden und somit für die rein parabolische Strömungsgleichung nicht geeignet. Hinsichtlich der Behandlung der Transportgleichung erscheinen Lagrange'sche und Euler-Lagrange'sche Formulierungen gleichermaßen problematisch, insbesondere für die diskrete Modellierung geklüftet-poröser Systeme. Die räumlichen Diskretisierung eines beliebig geklüfteten Modellgebiets impliziert in der Regel stark unstrukturierte Gitter, sodass bei Verwendung der MOC Fehler in der Massenbilanz erwartet werden können (ZHENG & WANG (1999)[217]). Die ELLAM hingegen ist massenkonservativ, führt jedoch auf relativ große Gleichungssysteme und ist rechentechnisch sehr aufwändig (z.B. CIRPKA (1996)[39], CIRPKA (1997)[40]). Particle-Tracking-Modelle sind auf diskrete Kluft-Matrix-Modelle grundsätzlich schwierig anzuwenden. Insbesondere bei niederdimensionalen Darstellungen können aus einer Kluft heraus Strom- und Bahnlinien nicht eindeutig verfolgt werden. Beim äquidimensionalen Ansatz ist dies möglich. Auch hier lässt jedoch die komplexe Struktur des Gitters eine semianalytische Berechnung der Bahnlinie nach POLLOCK (1988)[174] (dazu z.B. auch SCHAFER-PERINI & WILSON (1991)[183], DATTA-GUPTA & KING (1995)[52]) nicht ohne weiteres zu. CORDES & KINZELBACH (1992)[47] leiteten die von POLLOCK (1988)[174] für Rechtecke ermittelte semianalytische Lösung für beliebige Vierecke, nicht jedoch für Dreiecke ab. Alternativ dazu kann eine numerische Bestimmung der Bahnlinie erfolgen, die jedoch in Anbetracht der sehr schmalen Kluftelemente und der gegebenenfalls starken Stromlinienkrümmungen aufwändig ist.

Im weiteren Verlauf sollen daher ausschließlich Euler'sche Verfahren für die Diskretisierung der Strömungs- und Transportprozesse in geklüftet-porösen Medien diskutiert werden. Die oben aufgeführten Finite-Differenzen-Verfahren, die auf der Approximation der Differentialquotienten durch Differenzenquotienten basieren, benötigen strukturierte Gitter in einem orthogonalen Koordinatensystem und sind in Raumrichtung für die vorliegenden unstrukturierten Netze im Wesentlichen nicht einsetzbar. Zudem ist die Lösung der Differenzengleichung nicht notwendigerweise massenkonservativ. Es werden daher für die Ortsdiskretisierung Finite-Volumen- und Finite-Elemente-Verfahren betrachtet. Dabei sollen die Methoden an der folgenden allgemeinen Form eines Erhaltungssatzes beschrieben werden:

$$a \frac{\partial u}{\partial t} + \nabla \cdot (\underline{E}(u)) - r = 0 \quad (3.1)$$

In Glg. 3.1 steht u für die betrachtete Zustandsvariable, $\underline{E}(u)$ für einen von u abhängigen Fluss, r für einen Quell- und Senkterm und a für einen Koeffizienten. Bezogen auf die Strömungsgleichung repräsentiert u den Druck p , $\underline{E}(u)$ die Filtergeschwindigkeit \underline{v}_f , r die Quelldichte q und a den Faktor $S_0/\rho g$. Die Transportgleichung ergibt sich, wenn für u die Konzentration c und für $\underline{E}(u)$ der Massenfluss $\underline{v}_a c - \underline{D} \nabla c$ eingesetzt wird. r ermöglicht hier die Erfassung reaktiver Quellen und Senken, die jedoch in der vorliegenden Arbeit nicht berücksichtigt werden.

3.1 Eigenschaften von Diskretisierungsverfahren

Die Beurteilung von Diskretisierungsverfahren hinsichtlich ihrer Eignung, ein bestimmtes Modellproblem zu lösen, erfolgt üblicherweise auf der Basis numerischer Kriterien wie Konsistenz, Stabilität und Konvergenz. Weiterhin sollte das zur Anwendung kommende Verfahren dem physikalischen Charakter der Differentialgleichung gerecht werden und ein monotonen Lösungsverhalten aufweisen. Der erforderliche rechentechnische Aufwand und die benötigte Rechenzeit spielen ebenfalls eine Rolle. Im Rahmen der vorliegenden Arbeit liefert ein Vergleich der Ergebnisse dieser Beurteilung für unstrukturierte Gitter mit den Anforderungen in Kap. 1.4 eine Aussage über die Anwendbarkeit des jeweiligen Verfahrens auf diskret formulierte Kluft-Matrix-Systeme.

Die Konsistenz eines Verfahrens ist gewährleistet, wenn bei Verfeinerung der Diskretisierung in Raum und Zeit die Differenz zwischen der analytisch exakten Lösung der Differentialgleichung und der numerischen Lösung gegen Null geht. Diese Bedingung wird in der Regel durch eine Taylorreihenentwicklung des numerischen Schemas und Betrachtung der Restglieder überprüft. Damit wird auch die Konsistenzordnung des Verfahrens bzw. seine Genauigkeit bestimmt. Anzumerken ist, dass die Taylorreihenentwicklung auf einem regelmäßigen Gitter durchgeführt wird und die ermittelte Konsistenzordnung nicht zwingend auch für unregelmäßige Gitter gültig ist. Außerdem ist eine Taylorreihenanalyse grundsätzlich nur für stetig differenzierbare Funktionen möglich. Weist das System Diskontinuitäten auf (z.B. eine Punktquelle), so ist eine Konsistenzanalyse kein hinreichendes Maß für die Genauigkeit des Verfahrens.

Ein Verfahren wird als stabil bezeichnet, wenn ein lokaler Approximationsfehler nicht durch den numerischen Ansatz selbst verstärkt wird. Für den Nachweis der Stabilität einer Diskretisierungsmethode kann die von-Neumann-Analyse verwendet werden. Dabei wird ein Fourierreihen-Ansatz für den Fehler im Raum gemacht und untersucht, wie unterschiedliche Frequenzen durch das Verfahren approximiert werden. Werden bestimmte Frequenzen verstärkt, so ist das Verfahren in diesem Bereich instabil. Die von-Neumann-Analyse ist generell nur für lineare Probleme gültig. Bezüglich der Advektions-Dispersions-Gleichung existieren zwei allgemein anerkannte Stabilitätskriterien, die Courant-Zahl Cr , auch Courant-Friedrich-Lewy-Kriterium, und die Neumann-Zahl Ne . Beide lassen sich für eine explizite Zeitdiskretisierung (Kap. 3.4) über eine von-Neumann-Analyse ermitteln. Es gilt bei einer Ortsschrittweite Δx und einer Zeitschrittweite Δt für den advektiven Transport:

$$Cr = \frac{|\underline{v}_a| \Delta t}{\Delta x} \stackrel{!}{\leq} 1 \quad (3.2)$$

Die Bedingung führt auf eine Begrenzung der Zeitschrittweite für den advektiven Transport:

$$\Delta t \stackrel{!}{\leq} \frac{\Delta x}{|\underline{v}_a|} \quad (3.3)$$

Glg. 3.2 kann anschaulich so interpretiert werden, dass ein Teilchen mit $|\underline{v}_a|$ im Zeitraum Δt über eine Strecke Δx konvektiert wird. Entspricht Δx der Ortsschrittweite des zugrunde liegenden Gitters, so wird das Teilchen genau von einem Gitterpunkt zum nächsten transportiert

und so bei jedem Zeitschritt von der Ortsdiskretisierung erfasst. Entsprechend gilt bei expliziter Zeitintegration für den dispersiven Transport:

$$Ne = \frac{D\Delta t}{\Delta x^2} \stackrel{!}{\leq} \frac{1}{2} \quad (3.4)$$

Bei impliziter Zeitintegration (Kap. 3.4) ist die Lösung für beliebig große Zeitschritte stabil. Das Einhalten des Courant-Kriteriums führt aber auch hier für bestimmte Verfahren der Ortsdiskretisierung (z.B. Boxverfahren mit *Fully Upwinding*, Kap. 3.2) dazu, dass sich bestimmte Terme des Restgliedes der Taylorreihenentwicklung (Abbruchfehler) gegenseitig aufheben, sodass eine größere Genauigkeit erreicht wird.

Ein hinreichendes, aber nicht notwendiges Kriterium für die Stabilität eines Verfahrens ist seine Monotonie. Ein numerisches Schema wird als Monotonie erhaltend bezeichnet, wenn im zeitlichen Verlauf der Simulation im Modellgebiet keine neuen lokalen Extrema entstehen können und die Werte lokaler Minima/Maxima nicht kleiner/größer werden. Monoton auf- oder absteigende Bereiche bleiben über den gesamten Berechnungszeitraum erhalten. Es lässt sich zeigen, dass die Einhaltung der Monotonie letztlich die Einhaltung der Entropiebedingung bedeutet (LEVEQUE (1992)[134]). Das Kriterium ist, obwohl nicht notwendig, für viele Anwendungen sinnvoll, weil numerische Oszillationen gegebenenfalls zu physikalisch unsinnigen Ergebnissen führen können, für die im Kontext dieser Arbeit vorgenommene Transportdiskretisierung beispielsweise zu negativen Konzentrationen.

Konvergent ist ein Verfahren, wenn über den gesamten betrachteten Zeitraum im gesamten Lösungsgebiet die approximierte Lösung bei einer Verfeinerung der Diskretisierung gegen die Lösung der Differentialgleichung konvergiert. Das ist im allgemeinen Fall theoretisch kaum zu beweisen. Für lineare Anfangswertprobleme besagt das Lax'sche Äquivalenztheorem, dass die in Frage stehende Diskretisierungsmethode konvergent ist, wenn sie konsistent und stabil ist.

Um den physikalischen Charakter der zu diskretisierenden Differentialgleichung richtig zu erfassen und zu erhalten, muss ein numerisches Verfahren massenkonservativ sein. Dies bedeutet, dass die zeitliche Änderung der Masse in einem zu definierenden Kontrollraum gleich der Differenz aus ein- und ausströmender Masse ist. Die ein- bzw. ausströmende Masse setzt sich dabei aus dem advektiven und dem konvektiven Fluss über den Rand des Kontrollvolumens und vorgegebenen Quellen oder Senken zusammen. Ein Verfahren kann global, das heißt am Gesamtsystem, oder lokal, das heißt am Element oder am Patch, massenkonservativ sein.

Des Weiteren müssen Schockfronten, die bei dominant advektivem Transport auftreten, richtig konvektiert werden. Das Verhältnis von Advektion zu Dispersion kann mit Hilfe der Peclet-Zahl Pe bewertet werden:

$$Pe = \frac{|\underline{v}_a|\Delta l}{D} \quad (3.5)$$

Die Größe Δl ist eine charakteristische Länge. Wird sie in Bezug auf ein Berechnungsgitter angegeben, heißt Pe auch Gitter-Peclet-Zahl. Im eindimensionalen Fall entspricht Δl der Ele-

mentlänge Δx . Die Peclet-Zahl ist von großer Bedeutung für das Lösungsverhalten des gesamten numerischen Verfahrens, da sie den Charakter der Differentialgleichung in jedem einzelnen Element beschreibt. Bei kleinen Peclet-Zahlen ($Pe \ll 1$) dominiert der diffusiv-dispersive, bei großen Peclet-Zahlen ($Pe \gg 1$) der advective Anteil. Anschaulich kann dies an der analytischen Lösung der eindimensionalen stationären Advektions-Dispersions-Gleichung

$$\frac{u - u_i}{u_j - u_i} = \frac{e^{Pe x/\Delta x} - 1}{e^{Pe} - 1} \quad (3.6)$$

dargestellt werden, die in Abb. 3.1 grafisch für unterschiedliche Peclet-Zahlen aufgetragen ist. Der grau unterlegte Bereich kennzeichnet das Lösungsgebiet der Kurvenschar von Glg. 3.6. Es wird deutlich, dass die Lösung bei parabolischen Problemen einen linearen Verlauf zwischen den Knoten eines Elements aufweist, während sich bei zunehmender Advektion eine Schockfront ausbildet, die im Extremfall ($|Pe| = \infty$) zur Sprungfunktion wird.

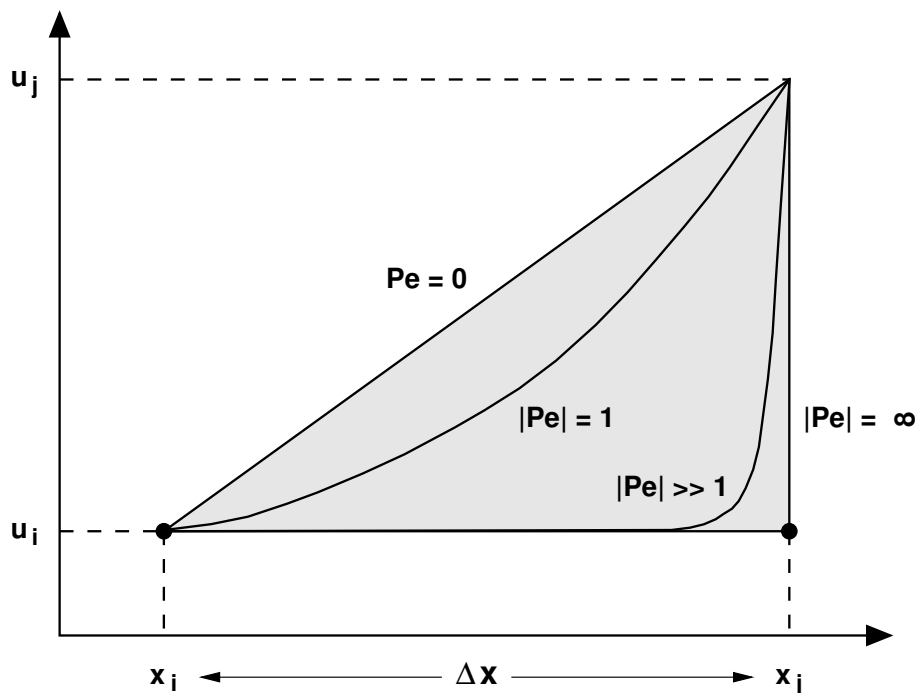


Abbildung 3.1: Analytische Lösung der eindimensionalen Advektions-Dispersions-Gleichung für unterschiedliche Peclet-Zahlen (HELMIG (1997)[85], modifiziert)

Ein Diskretisierungsverfahren, das für die Approximation der Transportgleichung eingesetzt wird, muss in der Lage sein, sowohl die Sprungfunktion bei reiner Advektion als auch den linearen Verlauf bei reiner Dispersion sowie den gesamten Übergangsbereich wiederzugeben. Dies gilt insbesondere für die hier zu behandelnden Kluft-Matrix-Systeme, bei denen aufgrund der Heterogenität der zugrunde liegenden Gebietseigenschaften davon auszugehen ist, dass advective und dispersive Bereiche gleichzeitig in einem System auftreten.

3.2 Finite-Volumen-Verfahren

Finite-Volumen-Verfahren unterteilen das Modellgebiet in Kontrollvolumina, für die jeweils die Mittelwerte der betrachteten Zustandsgröße approximiert werden. Es wird zwischen zellenzentrierten und knotenzentrierten Finite Volumen unterschieden. Bei zellenzentrierten Finite Volumen wird ein Gitter über das Lösungsgebiet gelegt, dessen Knoten die Ecken und dessen Kanten die Ränder der Kontrollvolumina bilden (Abb. 3.2, links). Die gesuchten Zustandsgrößen werden für die Gitterzellen ermittelt. Knotenzentrierte Finite Volumen hingegen approximieren ihre Unbekannten an den Knoten des Gitters, die zugehörigen Kontrollvolumina setzen sich aus den entsprechenden Anteilen der am jeweiligen Knoten anliegenden Elemente zusammen (Abb. 3.2, rechts). Knotenzentrierte haben gegenüber zellenzentrierten Finite-Volumen-Schemata den Vorteil, dass sie leichter auf beliebig unstrukturierten Gittern eingesetzt werden können. Außerdem können Randbedingungen in knotenzentrierte Verfahren auf natürliche Weise eingebunden werden, da die Werte direkt für die Knoten am Rand angesetzt werden und nicht in der ersten Zelle. Zellenzentrierte Ansätze sind im Allgemeinen besser geeignet, wenn es darum geht, den Wechsel von Materialeigenschaften zu erfassen, da Materialeigenschaften häufig ebenfalls zellenorientiert vorgegeben werden.

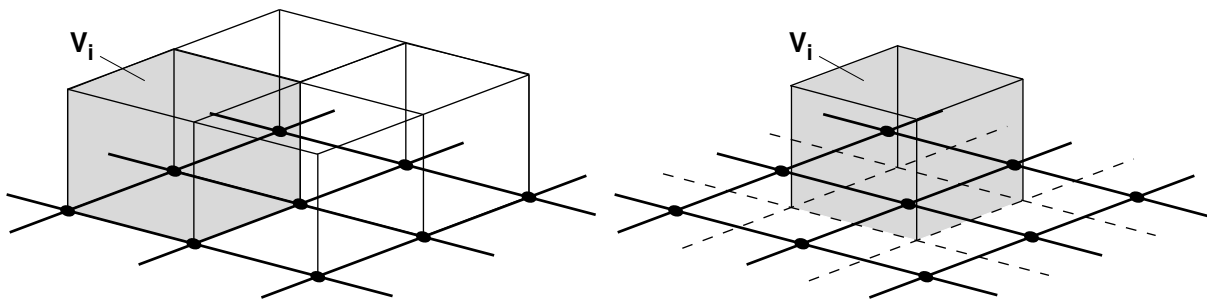


Abbildung 3.2: Finite Volumen mit zugehörigen Kontrollvolumen V_i . Links: Zellenzentriert. Rechts: Knotenzentriert.

Die prozessbeschreibende Differentialgleichung, hier die allgemeine Form eines Erhaltungssatzes nach Glg. 3.1, wird über die einzelnen Kontrollvolumina integriert:

$$\int_{V_i} a \frac{\partial u}{\partial t} dV + \oint_{\Gamma_i} \underline{F}(u) \cdot \underline{n} dA - \int_{V_i} r dV = 0 \quad (3.7)$$

V_i ist das Volumen und Γ_i der Rand des Kontrollvolumens i . Eine Einpunkt-Integration von Glg. 3.7 führt auf:

$$a \frac{\partial \hat{u}_i}{\partial t} V_i + \sum_{j=1}^{n_A} A_j \underline{F}(u) \cdot \underline{n}_j - V_i r = 0 \quad (3.8)$$

Hierbei stellt \hat{u}_i den Mittelwert der Unbekannten u im Kontrollvolumen i dar, n_A die Anzahl der Ränder des Kontrollvolumens i , A_j die Fläche des jeweiligen Randes j und \underline{n}_j den zugehörigen auswärts gerichteten Normalenvektor. Bei expliziter Zeitintegration kann der Wert \hat{u}_i^{m+1} zum neuen Zeitpunkt t^{m+1} für jedes Kontrollvolumen mit Hilfe von Glg. 3.8 bestimmt werden. Im impliziten Fall ergibt sich das zu lösende Gesamtsystem aus der Summe der

Gln. 3.8 über alle Kontrollvolumina des Untersuchungsgebiets. Aus Gln. 3.8 wird deutlich, dass eine Bilanzierung aller Zu- und Abflüsse an jedem einzelnen Kontrollvolumen erfolgt. Auf diese Weise werden die Erhaltungsgleichungen für jedes Kontrollvolumen erfüllt. Das Verfahren ist also massenkonservativ am Patch und damit auch im Gesamtgebiet.

Um Gln. 3.8 für jedes Kontrollvolumen aufstellen zu können, müssen die Flüsse $\underline{F}(u)$ über die Ränder ermittelt werden. Im Fall der Grundwasserströmung und des diffusiv-dispersiven Transports kann der Fluss zunächst proportional zum senkrecht auf dem Rand stehenden räumlichen Gradienten der Unbekannten u angesetzt werden (Abb. 3.3, links):

$$F_{i+1/2,j} = \underline{F}(u) \cdot \underline{n}_{i+1/2,j} = B \left. \frac{\partial u}{\partial x} \right|_{i+1/2,j} \quad (3.9)$$

B repräsentiert allgemein einen Koeffizienten, der in der Grundwasserströmung die Permeabilität und im Transport die Dispersion darstellt. Im zweidimensionalen Raum handelt es sich um den entsprechenden Wert auf der Hauptdiagonalen des zugehörigen Tensors $\underline{\underline{B}}$. Der Gradient zwischen den Zellen i, j und $i + 1, j$ lässt sich wie folgt approximieren:

$$\left. \frac{\partial u}{\partial x} \right|_{i+1/2,j} \approx \frac{2(u_{i+1,j} - u_{i,j})}{\Delta x_{i,j} + \Delta x_{i+1,j}} \quad (3.10)$$

Dabei steht $\Delta x_{i,j}$ für die Gitterweite der Zelle i, j und $\Delta x_{i+1,j}$ für die Gitterweite der Zelle $i + 1, j$ in x-Richtung. Angewendet auf alle vier Ränder einer Zelle eines Rechteckgitters ergibt sich auf diese Weise eine 5-Punkt-Differentiation (Abb. 3.3, links).

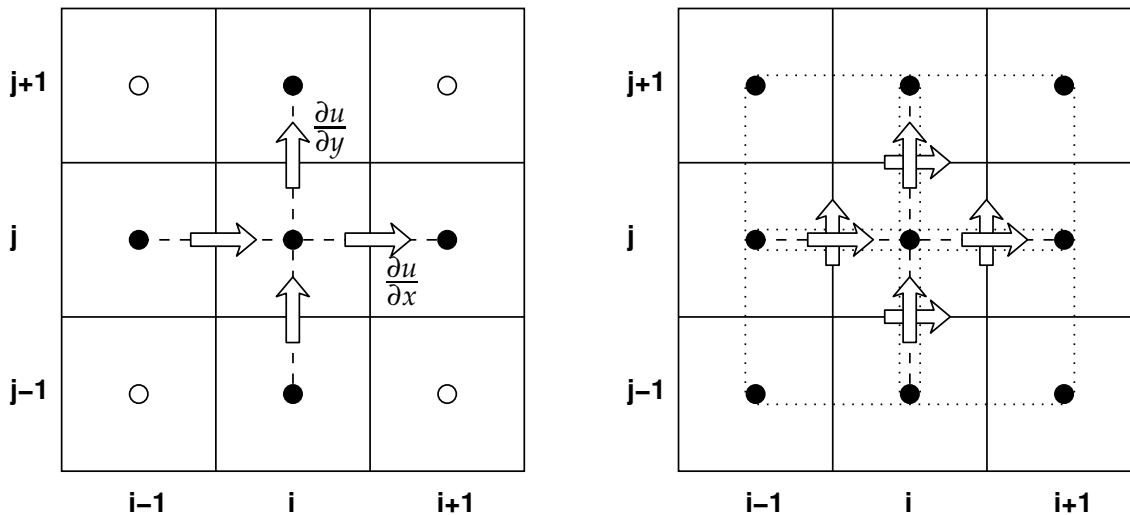


Abbildung 3.3: Finite Volumen: Gradienten für die Ermittlung der Flüsse zwischen den Zellen. Links: 5-Punkt-Differentiation. Rechts: 9-Punkt-Differentiation.

Ist $\underline{\underline{B}}$ im zweidimensionalen Raum ein Tensor, dessen Nebendiagonaleinträge $B_{xy} = B_{yx}$ ungleich Null sind, so können diese mit Hilfe des parallel zum jeweiligen Zellenrand verlaufenden räumlichen Gradienten der Zustandsgröße u erfasst werden:

$$F_{i+1/2,j} = \underline{F}(u) \cdot \underline{n}_{i+1/2,j} = B_{xx} \left. \frac{\partial u}{\partial x} \right|_{i+1/2,j} + B_{xy} \left. \frac{\partial u}{\partial y} \right|_{i+1/2,j} \quad (3.11)$$

B_{xx} ist das Hauptdiagonalelement des Tensors \underline{B} in x -Richtung. Der Gradient parallel zum Rand wird bestimmt mit:

$$\left. \frac{\partial u}{\partial y} \right|_{i+1/2,j} \approx \frac{u_{i,j+1} - u_{i,j-1} + u_{i+1,j+1} - u_{i+1,j-1}}{\Delta y_{i,j-1} + 2\Delta y_{i,j} + \Delta y_{i,j+1}} \quad (3.12)$$

Daraus ergibt sich ein Einfluss der Diagonalzellen $i + 1, j + 1$ und $i + 1, j - 1$ auf den Fluss zwischen den Zellen i, j und $i + 1, j$ (und umgekehrt). Analoges gilt bei einem Rechteckgitter für die anderen Zellenränder, was auf eine 9-Punkt-Differentiation führt (Abb. 3.3, rechts). Es lässt sich zeigen, dass eine solche Approximation der dispersiven Transportflüsse im Bereich von Punktquellen nicht unbedingt Monotonie erhaltend ist. Werden die gemischten Ableitungen nicht berücksichtigt (5-Punkt-Differentiation), so bleibt die Konzentrationsverteilung monoton, es tritt jedoch eine starke künstliche Querdiffusion auf (CIRPKA (1997)[40]).

Die Flüsse gemäß Glg. 3.9 bzw. Glg. 3.11 lassen sich für Koeffizienten B bzw. \underline{B} , die über das gesamte Lösungsgebiet konstant sind, sofort ermitteln. Andernfalls muss eine geeignete Mittelung durchgeführt werden. Üblicherweise werden die Materialeigenschaften im Element definiert. Für zellenzentrierte Verfahren, bei denen der Fluss am Interface zwischen zwei Zellen bestimmt wird, bietet es sich daher im eindimensionalen Fall an, den Koeffizienten $B_{i+1/2}$ als abstandsgewichtetes harmonisches Mittel anzusetzen:

$$B_{i+1/2,j} = \frac{B_i B_{i+1} (\Delta x_i + \Delta x_{i+1})}{B_i \Delta x_{i+1} + B_{i+1} \Delta x_i} \quad (3.13)$$

Dies ist physikalisch sinnvoll, da $B_{i+1/2}$ zu Null wird, wenn B_i oder B_{i+1} Null ist. Knotenzentrierte Verfahren beinhalten automatisch eine arithmetische Mittelwertbildung, da hier die Flüsse der Elementanteile am Knoten aufaddiert werden. Daher ist die arithmetische Mittelung auch leicht auf mehrdimensionale Probleme zu übertragen. Die harmonische Mittelung ist im \mathbb{R}^n , $n \geq 2$ nur für die Hauptdiagonalelemente von \underline{B} korrekt. Um die Mittelung der Nebendiagonalelemente zu umgehen, kann eine Achsentransformation auf die Richtung des in Frage stehenden Interfaces vorgenommen werden. Dies ist allerdings aufwändig. Eine knotenzentrierte Finite-Volumen-Formulierung erscheint deshalb und auch wegen der einfacheren Anwendbarkeit auf unstrukturierten Gittern und der geradlinigeren Beschreibung der Randbedingungen als geeigneter für die Diskretisierung von Kluft-Matrix-Systemen.

Die advektiven Flüsse der Transportgleichung sind proportional zum Wert der gesuchten Zustandsgröße u :

$$F_{i+1/2,j} = \underline{v}_{a,i+1/2,j} \cdot \underline{n}_{i+1/2,j} \cdot u_{i+1/2,j} \quad (3.14)$$

Die Abstandsgeschwindigkeit $\underline{v}_{a,i+1/2,j}$ ergibt sich aus der Strömungsberechnung. Um die Unbekannte $u_{i+1/2,j}$ zu bestimmen, können beispielsweise zentrale Differenzen oder ein *Upwinding* eingesetzt werden:

$$u_{i+1/2,j}^{zd} = \frac{u_{i,j} + u_{i+1,j}}{2} \quad (\text{zentrale Differenzen}) \quad (3.15)$$

$$u_{i+1/2,j}^{up} = \begin{cases} u_{i,j} & \text{für } \underline{v}_{a,i+1/2,j} > 0 \\ u_{i+1,j} & \text{für } \underline{v}_{a,i+1/2,j} < 0 \end{cases} \quad (\text{Upwinding}) \quad (3.16)$$

Beide Varianten können auch miteinander kombiniert werden:

$$u_{i+1/2,j} = \alpha u_{i+1/2,j}^{up} + (1 - \alpha) u_{i+1/2,j}^{zd} \quad \text{mit } 0 \leq \alpha \leq 1 \quad (3.17)$$

Für den Upwinding-Parameter $\alpha = 1$ wird ein *Fully Upwinding* erreicht. Eine Taylorreihenanalyse des Verfahrens zeigt, dass durch das Upwinding künstliche Diffusion der Größe $\alpha \cdot \underline{v}_a \Delta x / 2$ (im eindimensionalen Fall) in das System eingebracht wird, die eine Stabilisierung der Lösung advektiv dominierter Prozesse bewirkt (LANTZ (1971)[128], LEONARD (1979)[132]). Für $\alpha = 1$ (Fully Upwinding) ist das Verfahren für den advektiven Anteil daher nur von erster Ordnung genau. Die zentrale Wichtung hingegen führt keine künstliche Diffusion ein. Sie erzeugt jedoch Oszillationen, wenn die Peclet-Zahl den Wert von zwei überschreitet.

Das Verfahren ist in der beschriebenen Form grundsätzlich sowohl für zellen- als auch für knotenzentrierte Finite Volumen einsetzbar. Häufig werden knotenzentrierte Finite Volumen jedoch analog zu den Galerkin-Finite-Elemente-Verfahren mit Hilfe der gewichteten Residuen (Kap. 3.3) abgeleitet (z.B. HELMIG (1997)[85]). Das hat den Vorteil, dass durch die bilineare Interpolation im Element die Gradienten der Zustandsgrößen an den Grenzflächen zwischen zwei Kontrollvolumina auch bei unstrukturierten Gittern direkt ermittelt werden. Um die Finiten Volumen aufzuspannen, wird jedes Element in knotenbezogene Subkontrollvolumen unterteilt, die im \mathbb{R}^2 durch jeweils den entsprechenden Elementknoten, die Seitenmittelpunkte der Elementkanten und den Elementschwerpunkt definiert werden (Abb. 3.4, links). Der Fluss senkrecht zu den Rändern des Kontrollvolumens wird an den Integrationspunkten mit einer Einpunktintegration über das Interface der zugehörigen Subkontrollvolumen bestimmt (Abb. 3.4, Mitte).

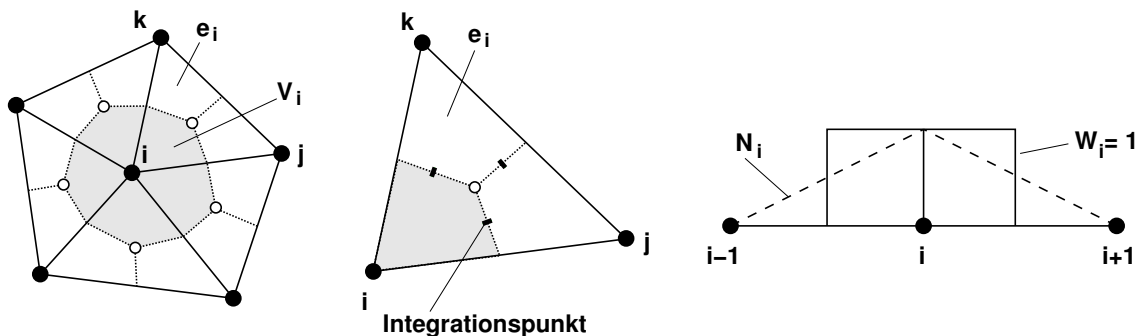


Abbildung 3.4: Patch am Knoten i mit Box V_i , Integrationspunkte, Ansatz- und Wichtungsfunktion für den Knoten i

Im Kontext einer Galerkin-Finite-Elemente-Herleitung auf der Grundlage der gewichteten Residuen (s. dazu Kap. 3.3):

$$\int_{\Omega} \underline{W} \cdot \epsilon dV = 0, \quad \text{wobei} \quad \epsilon = \mathcal{D}(\tilde{u}) \neq 0 \quad \text{und} \quad \tilde{u} = \underline{N} \cdot \hat{u}, \quad (3.18)$$

\tilde{u} ist die Näherungslösung von u , \underline{N} die Ansatzfunktion mit einem Eintrag pro Knoten, \hat{u} der Vektor der Unbekannten an den Knoten und ϵ das zu wichtende Residuum, entspricht dies einer Formulierung mit den Wichtungsfunktionen (Abb. 3.4, rechts)

$$\underline{W}(\underline{x}) = \begin{cases} 1 & \text{für } \underline{x} \in V_i \\ 0 & \text{für } \underline{x} \notin V_i \end{cases}. \quad (3.19)$$

Die diskretisierte Strömungsgleichung 2.11 lautet dann für den Patch eines Knotens i:

$$\begin{aligned} \frac{S_0}{\rho g} \int_{V_i} W_i \cdot \frac{\partial(N_i \cdot \hat{p}_i)}{\partial t} dV - \int_{V_i} W_i \nabla \cdot \left(\frac{1}{\eta} \underline{K}_0 \nabla(N_i \cdot \hat{p}_i) \right) dV \\ - \int_{V_i} W_i \nabla \cdot \left(\frac{1}{\eta} \underline{K}_0 \nabla(\rho g z) \right) dV - \int_{V_i} W_i q dV = 0, \end{aligned} \quad (3.20)$$

und die diskretisierte Transportgleichung 2.24 entsprechend:

$$\int_{V_i} W_i \cdot \frac{\partial(N_i \cdot \hat{c}_i)}{\partial t} dV + \int_{V_i} W_i \nabla \cdot (\underline{v}_a \cdot N_i \cdot \hat{c}_i) dV - \int_{V_i} W_i \nabla \cdot (\underline{D} \nabla(N_i \cdot \hat{c}_i)) dV = 0. \quad (3.21)$$

Dabei bezeichnet \hat{p}_i bzw. \hat{c}_i den Knotenfreiwert der entsprechenden Zustandsgröße, N_i die Ansatz- und W_i die Wichtungsfunktion am Knoten i . Nach Anwendung der partiellen Integration auf den zweiten und dritten Term der linken Seite von Glg. 3.20 und unter Verwendung der Beziehung 3.19 ergibt sich für die Diskretisierung der Strömungsgleichung 2.11:

$$\begin{aligned} \frac{S_0}{\rho g} \frac{\partial \hat{p}_i}{\partial t} \int_{V_i} W_i N_i dV - \hat{p}_i \oint_{\Gamma_i} \frac{1}{\eta} W_i \underline{K}_0 \nabla(N_i) \underline{n} dA \\ - \oint_{\Gamma_i} \frac{1}{\eta} W_i \underline{K}_0 \nabla(\rho g z) \underline{n} dA - \int_{V_i} W_i q dV = 0 \end{aligned} \quad (3.22)$$

mit dem Normalenvektor \underline{n} senkrecht auf dem Rand Γ_i des Kontrollvolumens V_i . Die Diskretisierung der Transportgleichung 2.24 verläuft analog, mit partieller Integration für den zweiten und dritten Term auf der linken Seite von Glg. 3.21:

$$\frac{\partial \hat{c}_i}{\partial t} \int_{V_i} W_i N_i dV + \hat{c}_i \oint_{\Gamma_i} W_i \underline{v}_a N_i \underline{n} dA - \hat{c}_i \oint_{\Gamma_i} W_i \underline{D} \nabla(N_i) \underline{n} dA = 0 \quad (3.23)$$

Die Näherungslösung $\tilde{u}_i = N_i \cdot \hat{u}_i$ wird für den Akkumulationsterm sowie den Flussterm der Grundwasserströmung bzw. den Dispersionsterm des Transports mit linearen Ansatzfunktionen ermittelt (Abb. 3.4, rechts). Der Advektionsterm der Transportgleichung wird wie in Glg. 3.17 oberstrom gewichtet, d.h. es wird der Konzentrationswert des in Bezug auf den Fluss am Integrationspunkt oberstromigen Knotens für die Diskretisierung verwendet:

$$c = (1 - \alpha_{ij})c_{ij} + \alpha_{ij}c_{up} \quad (3.24)$$

mit $\alpha_{ij} = 1$ (Fully Upwinding) und

$$c_{up} = \begin{cases} c_i & \text{für } \underline{v}_{ij} > 0 \\ c_j & \text{für } \underline{v}_{ij} < 0 \end{cases} \quad (3.25)$$

Dabei ist c_{ij} der Konzentrationswert am Integrationspunkt des Subkontrollvolumen-Interfaces zwischen den Knoten i und j , α_{ij} der Upwinding-Parameter an eben dieser Stelle und \underline{v}_{ij} der Geschwindigkeitsvektor zwischen den Knoten i und j .

Das hier im Rahmen einer Galerkin-Finite-Elemente-Methode hergeleitete knotenzentrierte Finite-Volumen-Verfahren wird auch als Boxverfahren oder Teilgebietskollokationsmethode bezeichnet (HELMIG (1997)[85]). Im weiteren Verlauf der Arbeit soll für diesen Ansatz der Begriff *Boxverfahren* verwendet werden.

3.2.1 TVD–Verfahren

Wie bereits angedeutet, sind für dominant–advective Prozesse (Peclet–Zahlen größer zwei) lineare Diskretisierungsverfahren mit einer Genauigkeit von erster Ordnung monoton und stabil. Sie führen jedoch, um diese Stabilität zu erreichen, künstliche Dispersion in das System ein, die zu einer starken Verschmierung der Front beiträgt. Lineare Diskretisierungsverfahren zweiter Ordnung tragen keine künstliche Diffusion ein, bilden jedoch im Bereich scharfer Fronten Oszillationen aus. Lösungen, die bei minimaler künstlicher Dispersion monoton sind, können nur mit Hilfe nichtlinearer Schemata, sogenannter *high resolution schemes*, erzielt werden. Dazu gehören die TVD–Verfahren (*TVD: total variation diminishing*), die auf einem Ansatz von Godunov basieren. Das TVD–Konzept wurde von HARTEN (1983, 1984)[80][81] eingeführt und u.a. von HIRSCH (1990)[96] ausführlich diskutiert. Grundsätzlich handelt es sich dabei um eine Lockerung der Monotoniebedingung. Ein TVD–Verfahren wird als *Monotonie erhaltend* bezeichnet, d.h. lokale Minima bzw. Maxima werden nicht kleiner bzw. größer, es entstehen keine neuen lokalen Extrema, und monotone Lösungsbereiche werden als solche konvektiert. Dieses Beschränkungsprinzip ist hinreichend, um die Konvergenz der numerischen Lösung eines Diskretisierungsverfahrens gegen die schwache Form der zu lösenden Erhaltungsgleichung sicherzustellen. Die Entropie–Bedingung ist jedoch nicht zwingend erfüllt (HIRSCH (1990)[96]).

Der Ansatz von Godunov beruht auf der Idee, Gleichungen mit hyperbolischem Charakter mit Hilfe des aus der Gasdynamik bekannten Riemann–Problems in Zellen zu lösen. Im ein-dimensionalen Fall reduziert sich das komplexe Riemann–Problem auf die Aussage, dass eine Zustandsgröße mit einer zugrunde liegenden Geschwindigkeit (im Falle der rein advektiven Transportgleichung mit \underline{v}_n) durch das System transportiert wird. Das Godunov–Verfahren lässt sich in drei Schritte gliedern:

- Konstruktion einer konstanten Verteilungsfunktion $\tilde{c}(x, t_n)$ aus dem gegebenen Mittelwert der gesuchten Zustandsgröße c_i^n für jede Zelle zum Zeitpunkt n (Abb. 3.5, links)
- Exakte Lösung des Erhaltungssatzes (Glg. 3.8) mit Hilfe von $\tilde{c}(x, t_n)$, um $\tilde{c}(x, t_{n+1})$ zum Zeitpunkt $n + 1$ zu bestimmen (Abb. 3.5, Mitte)
- Berechnung des Mittelwertes c_i^{n+1} aus $\tilde{c}(x, t_{n+1})$ für jede Zelle zum Zeitpunkt $n + 1$ (Abb. 3.5, rechts)

Aus Abb. 3.5 ist leicht zu ersehen, dass sich für $Cr = 1$ die exakte Lösung des Problems ergibt, da nur dann der Inhalt einer Gitterzelle vollständig in die nächste transportiert wird. Courant–Zahlen kleiner eins führen aufgrund der Mittelwertbildung in dritten Schritt des Verfahrens zu einer Verschmierung des Konzentrationsprofils. Bei Courant–Zahlen größer eins kommt es zu Oszillationen, weil die innerhalb einer Zelle vorliegende Information immer nur in die nächste Zelle transportiert werden kann. Der über die Zeitschrittweite Δt integrierte Fluss zwischen zwei Zellen ergibt sich zu:

$$F_{i-1/2} = \underline{v}_{a,i-1/2} \Delta t c_i^n \quad (3.26)$$

Daraus lässt sich eine Analogie zu dem im vorigen Kapitel vorgestellten Finite–Volumen–Ansatz mit Fully Upwinding ablesen. Die Schritte des Godunov–Verfahrens in der vorgestellten Form sind Monotonie erhaltend, da kein Schritt neue Extremwerte erzeugen kann. Es

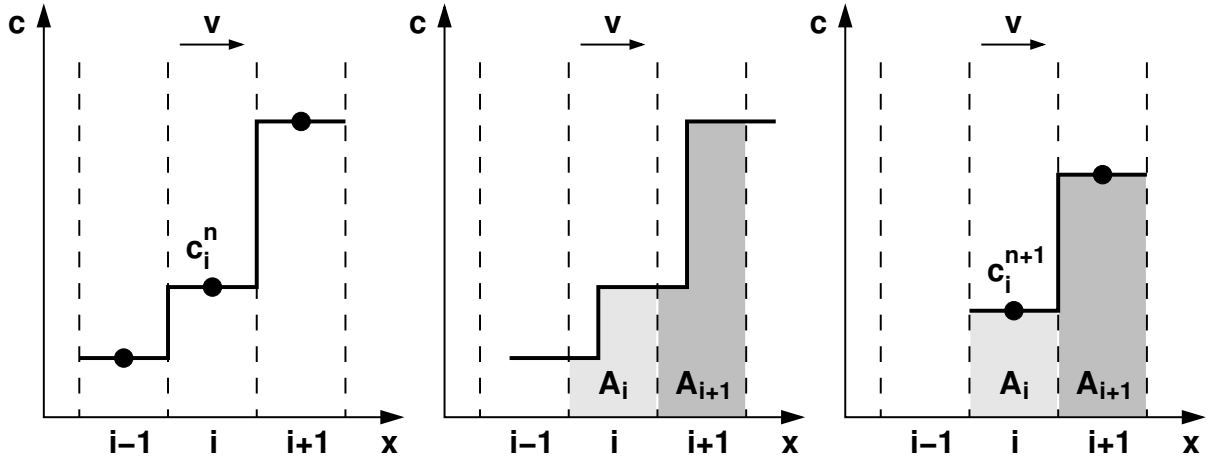


Abbildung 3.5: Godunov-Verfahren für konstante Verteilungsfunktionen

handelt sich also sowohl bei der Fully Upwinding-FVM als auch beim Godunov-Verfahren um monotone, lineare Diskretisierungsverfahren, die das Beschränkungsprinzip erfüllen, jedoch nur von erster Ordnung genau sind.

Um ein Monotonie erhaltendes Schema mit einer Genauigkeit von zweiter Ordnung zu erhalten, kann der Godunov-Ansatz erweitert werden, indem im ersten Schritt statt einer konstanten eine lineare Verteilungsfunktion gewählt wird. Der Fluss zwischen zwei Zellen berechnet sich dann bei expliziter Zeitintegration zu:

$$F_{i-1/2} = \underline{v}_{a,i-1/2} \Delta t \left(c_{i-1}^n + s_{i-1}^n \left(\frac{\Delta x_{i-1} - \underline{v}_{a,i-1/2} \Delta t}{2} \right) \right) \quad (3.27)$$

bzw. in der semidiskreten Form für einen bestimmten Zeitpunkt t :

$$F_{i-1/2,t} = \underline{v}_{a,i-1/2,t} (c_{i-1,t} + s_{i-1,t} \Delta x_{i-1}/2) \quad (3.28)$$

Für die semidiskrete Form wird die exakte Lösung des Riemann-Problems durch eine numerische Integration in Zeitrichtung ersetzt, die z.B. implizit sein kann. Entscheidende Bedeutung kommt der Wahl des Gradienten s zu. Im Folgenden werden vier mögliche Definitionen (HIRSCH (1990)[96], CIRPKA (1997)[40]) aufgeführt:

$$\begin{aligned} s_{lin}^{down} &= \frac{2(c_{i+1} - c_i)}{\Delta x_{i+1} + \Delta x_i} & s_{lin}^{up} &= \frac{2(c_i - c_{i-1})}{\Delta x_i + \Delta x_{i-1}} \\ s_{max}^{down} &= \frac{2(c_{i+1} - c_i)}{\Delta x_i} & s_{max}^{up} &= \frac{2(c_i - c_{i-1})}{\Delta x_i} \end{aligned} \quad (3.29)$$

Bei Verwendung von $s = s_{lin}^{down}$ ergibt sich ein dem Lax-Wendroff-Verfahren, für $s = s_{lin}^{up}$ ein dem Beam-Warming-Verfahren entsprechendes Schema. Beide Verfahren, die für Finite Differenzen bzw. Finite Volumen entwickelt worden sind, haben eine Konsistenz von zweiter Ordnung in Zeit und Raum. Es lässt sich zeigen, dass für jeden Gradienten zwischen s_{lin}^{up} und s_{lin}^{down}

eine Konsistenz zweiter Ordnung angenommen werden kann. Wird eine Krümmung

$$\theta = \frac{s_{lin}^{up}}{s_{lin}^{down}} \quad (3.30)$$

angesetzt, so können die aus den übrigen Gradienten s resultierenden Krümmungen mit

$$\Psi = \frac{s}{s_{lin}^{down}} \quad (3.31)$$

im Verhältnis dazu aufgetragen werden. Abb. 3.6, links, zeigt die auf s_{lin}^{down} bezogenen Gradienten s als Funktion der Krümmung θ und grau unterlegt den Bereich zweiter Ordnung. Gleichzeitig muss, da der erste Schritt des Godunov-Ansatzes bei nicht-konstanten Verteilungsfunktionen nicht zwingend Monotonie erhaltend ist, sichergestellt werden, dass durch die Wahl des Gradienten s keine neuen Extrema erzeugt werden. Dies führt auf folgende Beschränkungen:

- Innerhalb einer Zelle, die ein lokales Extremum enthält ($\theta = 0$), muss die Konzentrationsverteilung konstant sein ($s = 0$).
- Für alle Zellen in monoton aufsteigenden bzw. monoton abfallenden Bereichen muss gelten: $|s| \leq \min(|s_{max}^{down}|, |s_{max}^{up}|)$. Auf diese Weise werden durch die Rekonstruktion der Verteilungsfunktion keine örtlichen Konzentrationen außerhalb des Bereichs $[c_{i-1}, c_{i+1}]$ erzeugt.

In Abb. 3.6, rechts, ist das Ψ - θ -Diagramm mit dem grau unterlegten Bereich, in dem die Gradienten TVD-Eigenschaften besitzen, dargestellt. Verfahren, die auf diese Weise konstruiert werden, heißen auch *slope-limiter*-Verfahren. Sie sind nichtlinear, da die Wahl des Gradienten von der Konzentrationsverteilung und damit von der Lösung abhängt.

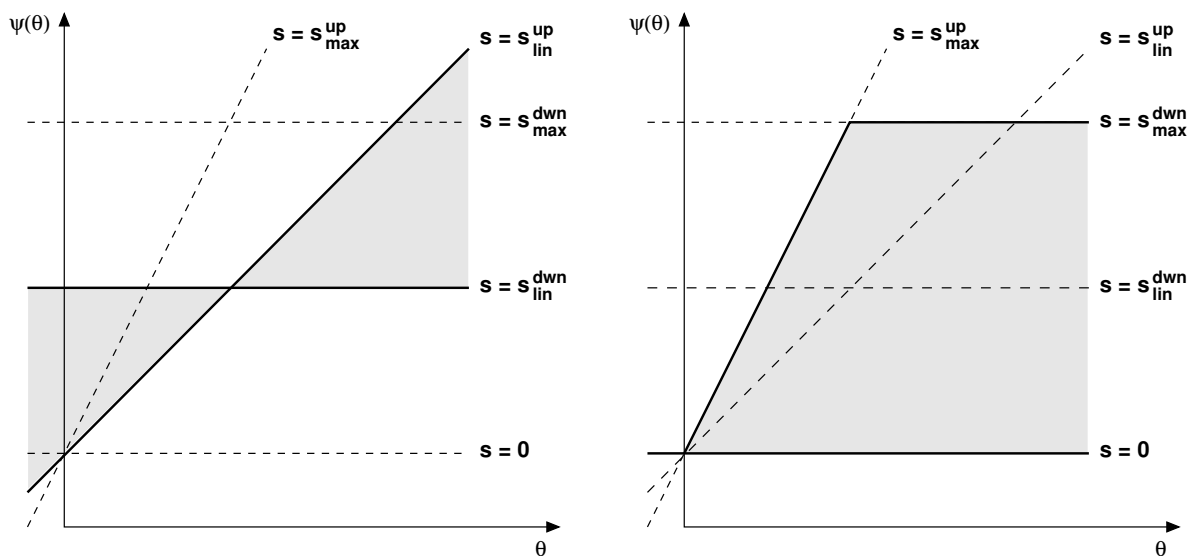


Abbildung 3.6: Links: Region zweiter Ordnung. Rechts: Region mit TVD-Eigenschaften.

Eine Überlagerung der beiden Diagramme in Abb. 3.6 macht deutlich, dass Gradienten existieren, mit deren Hilfe Diskretisierungsverfahren definiert werden können, die TVD-Eigenschaften besitzen und von zweiter Ordnung genau sind. Die entsprechenden Bereiche sind in Abb. 3.7 grau gekennzeichnet. Es wird darauf hingewiesen, dass die Konsistenz zweiter Ordnung nur global erreicht wird. Wie aus den im vorherigen Absatz aufgeführten Beschränkungen hervorgeht, wird der Gradient s für Zellen, die lokale Extrema enthalten, zu Null, sodass lokal eine Genauigkeit von erster Ordnung vorliegt. Darauf basierend sind eine Reihe von Limiter-Funktionen entwickelt worden, die Monotonie erhaltende Verfahren zweiter Ordnung erzeugen (z.B. HIRSCH (1990)[96], LEVEQUE (1992)[134]).

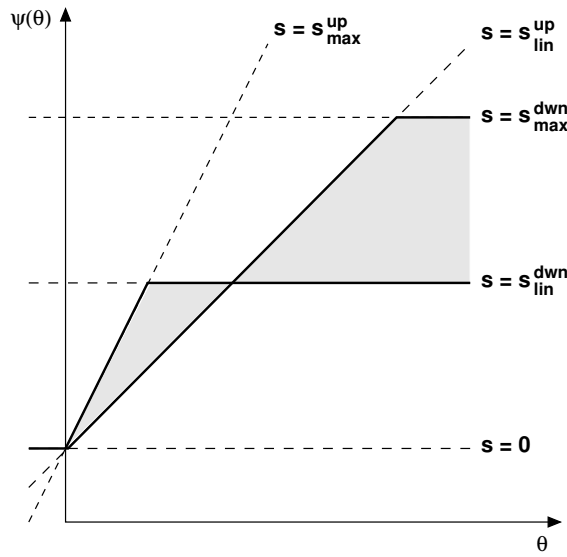


Abbildung 3.7: Region zweiter Ordnung mit TVD-Eigenschaften

Eine Funktion, die den unteren Rand der TVD-Region zweiter Ordnung abdeckt, ist der *min-mod slope limiter*:

$$\begin{aligned}
 s &= 0 && \text{für} && s_{lin}^{down} \cdot s_{lin}^{up} < 0 \\
 s &= s_{lin}^{up} && \text{für} && s_{lin}^{up} < s_{lin}^{down} \quad \text{und} \quad s_{lin}^{down} \cdot s_{lin}^{up} > 0 \\
 s &= s_{lin}^{down} && \text{für} && s_{lin}^{up} > s_{lin}^{down} \quad \text{und} \quad s_{lin}^{down} \cdot s_{lin}^{up} > 0
 \end{aligned} \tag{3.32}$$

Roe's *Superbee limiter* folgt dem oberen Rand:

$$s = \max \left\{ 0, \min \left(s_{max}^{up}, s_{lin}^{down} \right), \min \left(s_{lin}^{up}, s_{max}^{down} \right) \right\} \tag{3.33}$$

Die β -*limiter* interpolieren für $0 \leq \beta \leq 1$ linear zwischen diesen beiden Varianten:

$$s = \max \left\{ 0, \min \left(s_{\beta}^{up}, s_{lin}^{down} \right), \min \left(s_{lin}^{up}, s_{\beta}^{down} \right) \right\} \tag{3.34}$$

$$\begin{aligned} \text{mit} \quad s_{\beta}^{dwn} &= (1 - \beta)s_{lin}^{dwn} + \beta s_{max}^{dwn} \\ \text{und} \quad s_{\beta}^{up} &= (1 - \beta)s_{lin}^{up} + \beta s_{max}^{up} \end{aligned}$$

Van Leer's *limiter* schließlich ergibt sich aus dem harmonischen Mittel der linearen ober- und unterstromigen Gradienten:

$$\begin{aligned} s &= 0 & \text{für} \quad s_{lin}^{dwn} \cdot s_{lin}^{up} < 0 \\ s &= \frac{2 s_{lin}^{up} s_{lin}^{dwn}}{s_{lin}^{up} + s_{lin}^{dwn}} & \text{für} \quad s_{lin}^{dwn} \cdot s_{lin}^{up} > 0 \end{aligned} \tag{3.35}$$

Die Übertragung der eindimensionalen *slope-limiter*-Verfahren auf den mehrdimensionalen Fall ist schwierig und führt nicht immer zu befriedigenden Ergebnissen. Für strukturierte Netze schlägt HIRSCH (1990)[96] vor, zweidimensionale Probleme in zwei eindimensionale Probleme bezogen auf Reihen und Spalten zu zerlegen und die Teilprobleme einzeln zu lösen. Die Entkopplung bewirkt einen zusätzlichen Approximationsfehler. Die zur Modellierung beliebig geklüfteter Systeme verwendeten Netze sind im Allgemeinen unstrukturiert und lassen sich nicht nach Reihen und Spalten ordnen, der Weg ist damit hier nicht gangbar. Ist das Netz nicht an den Stromlinien orientiert, müssen zur Ermittlung der Massenflüsse über die Ränder der Kontrollvolumen die Gradienten gegebenenfalls nicht nur in einer, sondern in mehreren oberstromigen Zellen berücksichtigt werden. Bei Anwendung der semidiskreten Form muss der räumliche Gradient der Konzentration innerhalb einer Zelle für beide Raumrichtungen angegeben werden. Dies ist generell auf der Grundlage der beschriebenen Limiter-Funktionen möglich, erzeugt jedoch ein großes nichtlineares Gleichungssystem, das vergleichsweise aufwändig zu lösen ist. CIRPKA (1997)[40] führt daher stromlinienorientierte Netze ein, die das mehrdimensionale Problem auf eine Gruppe quasi-eindimensionaler Probleme in Stromröhren reduzieren, die unabhängig voneinander gelöst werden können. Dieses Verfahren führt in porösen Medien auf sehr gute Ergebnisse, ist jedoch auf die hier untersuchten Kluff-Matrix-Systeme bei niederdimensionaler Diskretisierung gar nicht und bei äquidimensionaler Diskretisierung nur schwer anzuwenden. Im niederdimensionalen Fall verhindern die Kluftelemente niedrigerer Dimension die Bestimmung eines stromlinienorientierten Netzes. Im äquidimensionalen Fall bewirken die Klüfte eine sehr starke Bündelung der Stromlinien, sodass die Generierung eines stromlinienorientierten Netzes insbesondere für komplexere Kluffsysteme nur schwer möglich ist.

3.2.2 Wesentlich nicht-oszillierende Verfahren

Wesentlich nicht-oszillierende Verfahren (*ENO (Essentially non-oscillatory) Schemes*) verwenden für die Konstruktion einer Verteilungsfunktion Polynome mindestens $(p - 1)$ -Grades, um eine Genauigkeit p -ter Ordnung zu erreichen. Es wird für jede Zelle eine Umgebung (ein *Differenzenstern*) gesucht, die groß genug ist, um das Polynom interpolieren zu können, und die gleichzeitig keine Unstetigkeiten enthält. Die Interpolation des Polynoms beruht dabei auf den Zellmittelwerten der jeweils beteiligten Zellen. Die Ermittlung dieser Umgebung spielt eine Schlüsselrolle für das Verfahrens. Es wird aus allen Differenzensternen um eine Zelle i , die

ein Polynom mindestens $(p - 1)$ -Grades ermöglichen, derjenige ausgesucht, dessen Interpolationspolynom am wenigsten oszilliert. Dieses Interpolationspolynom wird verwendet, um die Werte der gesuchten Zustandgröße u am Zellinterface und darauf aufbauend die Flüsse von einer Zelle in die nächste zu bestimmen. Der Algorithmus ist hochgradig nichtlinear.

Das ENO-Konzept wurde ursprünglich von HARTEN, ENQUIST, OSHER & CHAKRAVARTHY (1987)[82] eingeführt und ist seitdem vielfach adaptiert und erweitert worden. Eine der angesichts der damit verbundenen umfangreichen Literatur vielleicht wichtigsten Modifikationen ist das WENO (*Weighted ENO*)-Schema. SHU (1997)[190] gibt eine detaillierte Einführung und Übersicht zu ENO- und WENO-Strategien. Bei der Anwendung des ENO-Ansatzes kann es trotz Verwendung von Polynomen hohen Grades zu einem Einbruch der Genauigkeit kommen. Dieser beruht auf Instabilitäten, die dadurch hervorgerufen werden, dass z.B. aufgrund von Rundungsfehlern im Bereich kleiner Zahlen das ausgewählte Polynom für eine bestimmte Zelle von Zeitschritt zu Zeitschritt wechselt. Da für jede Zelle ein eigener Differenzenstern ausgewählt wird und dieser von Zelle zu Zelle verschieden sein kann, sind überdies die sich ergebenden numerischen Flüsse zwischen den Zellen nicht glatt. Bei den WENO-Verfahren wird daher nicht für jede Zelle genau ein Interpolationspolynom bestimmt, sondern alle in Frage kommenden Polynome werden verwendet, wobei ihr Einfluss gewichtet wird. Das Gewicht ist um so größer, je weniger das entsprechende Polynom oszilliert. Die Summe aller Gewichte einer Zelle addiert sich zu eins, und das eigentliche Rekonstruktionspolynom wird aus der Summe der gewichteten Polynome gebildet. Da auf diese Weise in glatten Lösungsbereichen alle Zellen des Differenzensternes genutzt werden, kann eine Genauigkeit von $(2p - 1)$ -ter Ordnung (im eindimensionalen Raum) erreicht werden.

ENO- und WENO-Ansätze können mit kleinen Modifikationen sowohl auf Finite Differenzen als auch auf Finite Volumen angewendet werden. Voraussetzung für ein massenkonservatives Finite-Differenzen-Verfahren auf ENO-/WENO-Basis ist ein regelmäßiges, im mehrdimensionalen Raum strukturiertes Gitter, während die Finite-Volumen-Formulierung grundsätzlich auf beliebigen Gittern anzuwenden ist. Bei mehrdimensionalen Modellproblemen kann für alle Varianten eine richtungsbezogene eindimensionale Berechnung (*directional split*) durchgeführt werden. ENO- und WENO-Konzepte für unstrukturierte Gitter konzentrieren sich auf Finite Volumen (z.B. ABGRALL (1994)[2], SONAR (1997)[197] für ENO, HU & SHU (1998)[99] und FRIEDRICH (1999)[63] für WENO). Die daraus resultierenden Lösungen sind sehr gut, leider jedoch gerade für mehr als eine Raumdimension und Interpolationspolynome mit $p \geq 2$ rechentechnisch sehr teuer (z.B. SHU (1997)[190]). In Bezug auf die Modellierung physikalischer Prozesse in geklüftet-porösen Medien sind sie damit zur Zeit noch insbesondere für instationäre Transportsimulationen unbrauchbar. Eine Beschleunigung der Verfahren ist Gegenstand aktueller Forschung (z.B. SCHRÖDER-PANDER, SONAR & FRIEDRICH (2000)[187]).

3.2.3 Flux-Corrected Transport

Das Flux-Corrected Transport Verfahren (FCT-Verfahren) gehört in die Klasse der *flux limiter* und wurde von BORIS & BOOK (1973)[27] eingeführt. Es handelt sich um ein nichtlineares monotonen Schema höherer Ordnung, das auf mehrdimensionale Problemstellungen erweitert werden konnte (ZALESAK (1979)[216]). Dabei wird ein monotonen Verfahren niedriger Ord-

nung mit einem Verfahren höherer Ordnung kombiniert. Es wird für jeden Zeitschritt mit beiden Verfahren eine Lösung ermittelt. In einem anschließenden Begrenzungsschritt werden die Flüsse höherer Ordnung so bestimmt, dass im Vergleich mit der Lösung zum alten Zeitschritt und mit der monotonen Lösung des Ansatzes niedriger Ordnung keine neuen Extrema entstehen. Das Prinzip ist in Abb. 3.8 dargestellt. Der FCT-Algorithmus besteht im Wesentlichen aus den folgenden fünf Schritten:

- Ermittlung der Massenflüsse jeweils für das Verfahren niedriger und höherer Ordnung.
- Bestimmung der antidiffusiven Flüsse für jede Zelle; diese ergeben sich als Differenz der Flüsse höherer und niedriger Ordnung.
- Begrenzung der antidiffusiven Flüsse durch Multiplikation mit einem zu bestimmenden Faktor T , wobei gilt: $0 \leq T \leq 1$. T ist für jeden Rand einer Zelle getrennt zu berechnen.
- Bestimmung des Korrekturwertes für jede Zelle aus der Summe aller begrenzten antidiffusiven Flüsse der jeweiligen Zelle.
- Ermittlung der korrigierten Lösung durch Addition des Korrekturwertes auf die Lösung des Verfahrens niedriger Ordnung für jede Zelle.

Der beschriebene Algorithmus ist nichtlinear. Seine Linearisierung ist jedoch durch das verwendete Prädiktor-Korrektor-Schema im mehrdimensionalen Fall deutlich einfacher als bei einem *slope limiter*-Verfahren, dessen implizite Zeitintegration ein Linearisierungsverfahren erfordert (CIRPKA (1997)[40]).

Es muss noch die Bestimmung des Korrekturfaktors T geklärt werden. Der jeweilige Wert am Zellenrand ergibt sich aus folgenden Schritten:

- Addition aller positiven bzw. aller negativen antidiffusiven Flüsse für eine Zelle.
- Definition der maximal bzw. minimal zulässigen antidiffusiven Flüsse in Abhängigkeit der Lösungswerte in der betrachteten und den daran anliegenden Zellen zum alten Zeitpunkt und zum aktuellen Zeitpunkt für das Verfahren niedriger Ordnung.
- Bestimmung des Verhältnisses von zulässigen zu tatsächlich vorhandenen antidiffusiven Flüssen für die jeweilige Zelle.
- Ermittlung des Korrekturfaktors T in Abhängigkeit des soeben bestimmten Verhältnisses und der Richtung des antidiffusiven Flusses über den jeweiligen Zellenrand.

Das FCT-Verfahren ist genau dann monoton, wenn das Verfahren niedriger Ordnung monoton ist. Das Lösungsverhalten entspricht in Gebieten glatter Konzentrationsverteilungen annähernd dem Diskretisierungsansatz höherer Ordnung und im Bereich scharfer Fronten eher dem Diskretisierungsansatz niedriger Ordnung. Werden zwei Verfahren gewählt, die auch für die Simulation physikalischer Prozesse auf unstrukturierten Gittern geeignet sind, und ist das Verfahren niedriger Ordnung auf dem unstrukturierten Gitter monoton, so lässt sich das FCT-Schema für die Modellierung von Kluft-Matrix-Systemen einsetzen.

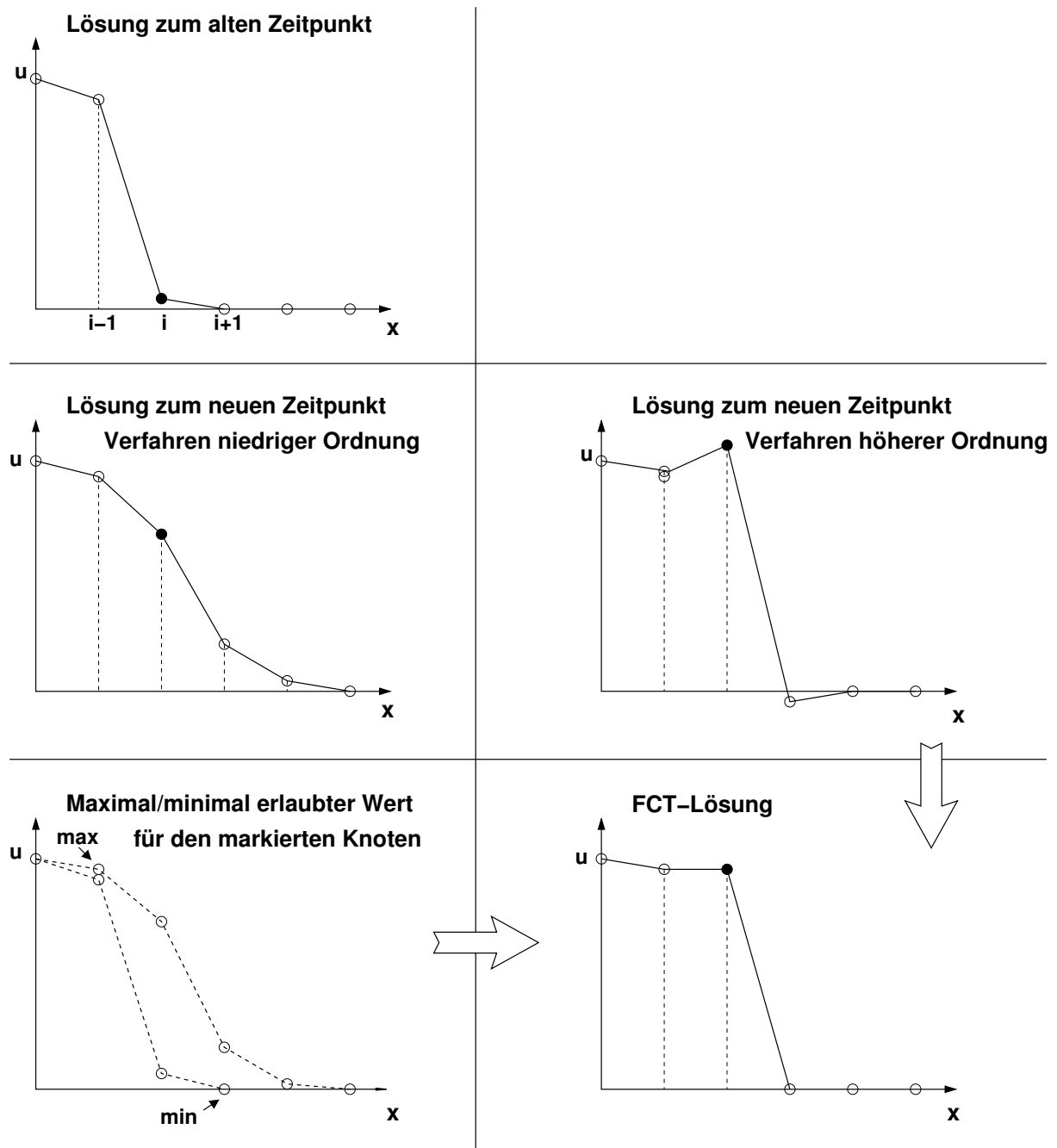


Abbildung 3.8: Flux-Corrected Transport Verfahren (CIRPKA & HELMIG (1996)[41])

3.3 Finite-Elemente-Verfahren

Bei der Methode der Finiten Elemente wird das zu untersuchende Gebiet einer räumlichen Diskretisierung unterzogen, d.h., es wird in geeignete Teilgebiete zerlegt, die als Elemente bezeichnet werden. Die Elemente bilden ein Netz oder Gitter, an dessen Knoten im einfachsten Fall sowohl die räumlichen Koordinaten als auch die gesuchten Zustandsgrößen definiert

werden. Werte innerhalb eines Elements werden mit Hilfe von Ansatzfunktionen zwischen den Knotenwerten interpoliert. „Geeignete“ Elemente sind solche, die die grundlegende Geometrie und Struktur des Modellgebiets hinreichend genau erfassen, und die in sich keine starken Verzerrungen aufweisen (s. dazu Kap. 5.2.1). Als Elementgeometrien bieten sich in 1D Stabelemente, in 2D Drei- und Vierecke und in 3D Tetraeder oder Prismen an. Eine beliebige Kopplung der Elementtypen auch unterschiedlicher Dimension zur Approximation komplexer geologischer Strukturen ist möglich. Voraussetzung dafür ist, dass die Ansatzfunktionen zweier benachbarter Elemente auf dem gemeinsamen Rand identisch sind (HELMIG (1997)[85]). Aufgrund der Flexibilität bei der Wahl der Elementgeometrien sind Finite-Elemente-Schemata hinsichtlich der räumlichen Diskretisierung geeignet für die diskrete Modellierung beliebig geklüfteter Systeme sowohl in niederdimensionaler als auch in äquidimensionaler Form, die einzelnen Formulierungen müssen jedoch auf ihr Lösungsverhalten bei der Approximation von Strömungs- und Transportprozessen untersucht werden.

Es soll nun für den allgemeinen Erhaltungssatz nach Glg. 3.1 eine Näherungslösung \tilde{u} im betrachteten Gebiet Ω so bestimmt werden, dass die exakte Verteilung der Unbekannten u in einem globalen Sinn möglichst gut approximiert wird. Dazu wird folgende Beziehung eingeführt:

$$\tilde{u} = \underline{N} \cdot \hat{u} \quad (3.36)$$

\hat{u} ist der Vektor der diskreten Unbekannten an den n_{nd} Knoten im Gebiet, und \underline{N} enthält n_{nd} linear unabhängige Ansatzfunktionen, mit deren Hilfe \tilde{u} zwischen den Knotenwerten \hat{u} interpoliert wird. Damit Glg. 3.36 für beliebige \hat{u} gültig ist, müssen die Ansatzfunktionen der Lagrange'schen Interpolationsbedingung genügen, d.h. eine Ansatzfunktion N_i muss am Knoten $j = i$ eines Elementes e gleich eins sein und an den anderen Knoten $j \neq i$ von e zu Null werden. Gleichzeitig muss die Summe aller Ansatzfunktionen an jeder Stelle im Element eins ergeben. Die Ansatzfunktionen stellen damit einen lokalen Träger da, der nur für jeweils diejenigen Elemente von Null verschieden ist, die einen Knotenpunkt i gemeinsam haben. Im Rahmen dieser Arbeit wird, wenn nicht anders gekennzeichnet, von (multi-)linearen Ansatzfunktionen ausgegangen.

Wird Glg. 3.36 in die zu approximierende Differentialgleichung 3.1 eingesetzt, so kann diese im Allgemeinen nicht mehr an allen Punkten im Gebiet exakt erfüllt werden. Es entsteht das Residuum ϵ :

$$\mathcal{D}(\tilde{u}) = a \frac{\partial \tilde{u}}{\partial t} + \nabla \cdot (\underline{F}(\tilde{u})) - r = \epsilon \quad (3.37)$$

Die beste Näherungslösung \tilde{u} ergibt sich demnach, wenn ϵ minimal wird. Dazu wird das Residuum mit Hilfe einer noch zu diskutierenden Wichtungsfunktion \underline{W} auf die Knoten verteilt und gefordert, dass es im integralen Mittel zu Null werden soll:

$$\int_{\Omega} \underline{W} \cdot \epsilon dV = \underbrace{\int_{\Omega} \underline{W} \cdot a \frac{\partial \tilde{u}}{\partial t} dV}_{\text{Term I}} + \underbrace{\int_{\Omega} \underline{W} \{ \nabla \cdot (\underline{F}(\tilde{u})) \} dV}_{\text{Term II}} - \underbrace{\int_{\Omega} \underline{W} r dV}_{\text{Term III}} = 0 \quad (3.38)$$

mit

$$\int_{\Omega} \underline{W} \cdot \epsilon dV = \sum_1^{n_{el}} \int_{V_{el}} \underline{W} \cdot \epsilon dV, \quad (3.39)$$

wobei n_{el} für die Anzahl der Elemente im Lösungsgebiet steht. Term I in Glg. 3.38 wird in diesem Zusammenhang als Massenterm eingeführt, Term II als Flussterm und Term III als Quell- und Senkterm. Die beschriebene Vorgehensweise entspricht der *Methode der gewichteten Residuen*. Nach partieller Integration des Flussterns in Glg. 3.38 und Ersetzen von \tilde{u} durch $\underline{N} \cdot \hat{u}$ ergibt sich:

$$\int_{\Omega} \underline{W} \cdot a \frac{\partial(\underline{N} \cdot \hat{u})}{\partial t} dV - \int_{\Omega} \nabla(\underline{W}) \underline{F}(\underline{N} \cdot \hat{u}) dV + \oint_{\Gamma} \underline{W} \underline{F}(\underline{N} \cdot \hat{u}) \underline{n} dA - \int_{\Omega} \underline{W} r dV = 0 \quad (3.40)$$

Glg. 3.40 wird auch als die *schwache Form* oder *Integralform* der Erhaltungsgleichung 3.1 bezeichnet. Aus Gründen der Massenkonservativität wird gefordert, dass die Summe der gewichteten Massenflüsse über den Rand für innere Knoten zu Null wird. Das Randintegral in Glg. 3.40 wird daher im Innern des Modellgebiets zu Null gesetzt. Auf dem Gebietsrand beschreibt es als Neumann'sche Randbedingung den Normalenfluss über den Rand. Wird Glg. 3.40 auf Glg. 2.11 angewendet, so führt dies auf eine FE-Diskretisierung für die Strömung:

$$\begin{aligned} \frac{S_0}{\rho g} \frac{\partial \hat{p}}{\partial t} \int_{\Omega} \underline{W} \underline{N} dV + \hat{p} \int_{\Omega} \nabla(\underline{W}) \left(\frac{1}{\eta} \underline{K}_0 \nabla(\underline{N}) \right) dV \\ = - \int_{\Omega} \nabla(\underline{W}) \left(\frac{1}{\eta} \underline{K}_0 \nabla(\rho g z) \right) dV - \oint_{\Gamma} \underline{W} \underline{v}_f \underline{n} dA + \int_{\Omega} \underline{W} q dV \end{aligned} \quad (3.41)$$

Entsprechend gilt für die Transportgleichung 2.24:

$$\begin{aligned} \frac{\partial \hat{c}}{\partial t} \int_{\Omega} \underline{W} \underline{N} dV - \hat{c} \left(\int_{\Omega} \nabla(\underline{W}) \underline{v}_a \underline{N} dV - \int_{\Omega} \nabla(\underline{W}) \underline{D} \nabla(\underline{N}) dV - \oint_{\Gamma_{out}} \underline{W} \underline{v}_a \underline{N} \underline{n} dA \right) \\ = - \hat{c}_{in} \oint_{\Gamma_{in}} \underline{W} \underline{v}_a \underline{N} \underline{n} dA + \hat{c} \oint_{\Gamma} \underline{W} \underline{D} \nabla(\underline{N}) \underline{n} dA \end{aligned} \quad (3.42)$$

Auch hier entfallen die Randintegrale im Gebietsinnern. Der advective Massenfluss über den Rand wird bestimmt als das Produkt von Konzentration am Rand und Volumenfluss des Trägerfluids über den Rand. Letzterer ist aus der Strömungsberechnung bekannt. Die Konzentration am Zuflussrand wird im Allgemeinen als Dirichlet'sche Randbedingung vorgegeben, während die Konzentration am Abflussrand als unbekannter Knotenwert in das zu lösende Gleichungssystem aufgenommen wird. Die Randintegrale des dispersiven Massenflusses werden häufig auch auf dem Gebietsrand zu Null gesetzt, wobei davon ausgegangen wird, dass der dadurch entstehende Fehler zumindest für advektionsdominierte Modellprobleme hinreichend klein ist.

In Glg. 3.42 wird der gesamte Massenfluss auf der Basis einer schwachen Formulierung beschrieben. Dies wird als *Divergenzform* bezeichnet. Die *konvektive Form* ergibt sich, wenn nur der diffusiv-dispersive Massenfluss einer partiellen Integration unterzogen wird. Daraus resultiert im Wesentlichen eine unterschiedliche Beschreibung der Neumann'schen Randbedingungen (z.B. DIERSCH (2002)[55]). Grundsätzlich stellt eine schwache Formulierung weniger Anforderungen an die Glattheit der Lösung. Die Verwendung der Divergenzform ist

daher für bestimmte Modellprobleme (z.B. springende Koeffizienten, Verdichtungsstöße in der Gasdynamik) gegebenenfalls vorteilhafter.

Die Formulierung der Massenmatrix gemäß Glg. 3.41 bzw. Glg. 3.42

$$\underline{\underline{M}} = \int_{\Omega} \underline{W} \underline{N} dV \quad (3.43)$$

sorgt für eine konsistente Verteilung der Masse über den Patch eines Knotens i . Es hat sich jedoch gezeigt, dass insbesondere für nichtlineare Modellprobleme eine Massenmatrix in Diagonalform, wie sie beispielsweise durch Finite-Volumen-Ansätze erzeugt wird, stabilere und bessere Ergebnisse hervorbringt (z.B. CIRPKA (1996)[39], HELMIG (1997)[85]). Im Fall der FEM kann eine Diagonalform der Massenmatrix erzielt werden, indem jeweils alle Zeileneinträge eines Knotens aus der konsistenten Massenmatrix auf den Diagonalkoeffizienten aufaddiert werden. Dies entspricht einer Konzentration der Speichereigenschaften eines Netzes auf die Knotenpunkte (*mass lumping*).

Die räumliche Integration von Glg. 3.41 und Glg. 3.42 wird ebenso wie die Bestimmung der räumlichen Ableitungen der Ansatz- und Wichtungsfunktionen elementweise im Sinne von Glg. 3.39 auf der Basis des *isoparametrischen Konzeptes* durchgeführt. Die Geometrie wird mit den gleichen Ansatzfunktionen wie die betrachteten Zustandsgrößen approximiert:

$$\underline{\tilde{x}} = \underline{N} \cdot \underline{\hat{x}} \quad (3.44)$$

$\underline{\tilde{x}}$ ist dabei die Näherung der globalen \underline{x} -Koordinaten, und $\underline{\hat{x}}$ enthält die globalen Koordinaten aller Knoten eines Elements. Dann erfolgt mit Hilfe der Jacobi-Matrix

$$\underline{J} = \frac{\partial \underline{\tilde{x}}}{\partial \underline{r}} = \frac{\partial \underline{N}}{\partial \underline{r}} \cdot \underline{\hat{x}} = \nabla_r(\underline{N}) \cdot \underline{\hat{x}} \quad (3.45)$$

eine Transformation der globalen \underline{x} -Koordinaten auf das jeweilige lokale \underline{r} -Einheitskoordinatensystem $[0;1]$ im \mathbb{R}^n des Referenzelements. Daraus ergibt sich:

$$\nabla(\underline{N}) = \underline{J}^{-1} \nabla_r(\underline{N}) \quad (3.46)$$

mit $\underline{N} = f(\underline{r})$ und $\underline{r} = \{r, s, t\}$ sowie

$$\int_{\Omega} dV = \int_0^1 \int_0^1 \int_0^1 \det(\underline{J}) dr ds dt. \quad (3.47)$$

Die Auswertung der Integrale kann für beliebige Geometrien mit Hilfe eines numerischen Integrationsverfahrens (z.B. Gauß'sche Quadratur) erfolgen. Für eine ausführliche Darstellung der mathematischen Grundlagen der FEM wird auf ZIENKIEWICZ (1971)[218], BATHE (1986)[14] oder SCHWARZ (1991)[189] verwiesen. Einen Überblick über Finite Elemente und ihre Anwendung in der Hydrologie geben beispielsweise PINDER & GRAY (1977)[173].

Wie aus den Glgn. 3.38 – 3.42 sowie den zugehörigen Ausführungen ersichtlich wird, hängt die Qualität der Finite-Elemente-Lösung außer von der Wahl der Ansatzfunktion \underline{N} wesentlich auch von der Form der Wichtungsfunktion \underline{W} ab. Im Folgenden sollen daher einige spezielle Formulierungen der Finite-Elemente-Methode, die sich für bestimmte Wichtungsfunktionen \underline{W} ergeben, aufgeführt werden.

3.3.1 Standard-Galerkin-Verfahren

Das Standard-Galerkin-Verfahren, auch Bubnov-Galerkin-Verfahren genannt, arbeitet mit Wichtungsfunktionen, die identisch zu den Ansatzfunktionen sind:

$$\underline{W} = \underline{N} \quad (3.48)$$

Abb. 3.9 zeigt Ansatz- und Wichtungsfunktion für einen Knoten i im eindimensionalen Fall. Das Verfahren ist ähnlich dem zentralen Differenzenansatz bei Finite-Differenzen- und Finite-Volumen-Methoden für elliptische und parabolische Probleme geeignet, wohingegen es analog zu einer Finite-Volumen-Formulierung mit zentralen Differenzen (Kap. 3.2) bei der Lösung dominant hyperbolischer Differentialgleichungen ($Pe \geq 2$) zu Oszillationen führt (z.B. HELMIG (1997)[85]) und damit nicht zur Approximation stark advektiver Transportprobleme eingesetzt werden kann. Der Standard-Galerkin-Ansatz weist eine Genauigkeit von zweiter Ordnung im Raum auf und ist massenkonservativ für das Gesamtgebiet, nicht jedoch unbedingt am Patch.

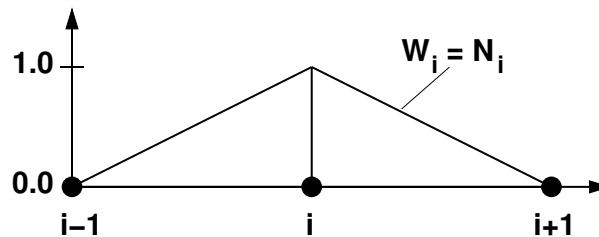


Abbildung 3.9: Standard-Galerkin-Verfahren: Ansatzfunktion N_i und Wichtungsfunktion W_i am Knoten i

3.3.2 Taylor-Galerkin-Verfahren

Das Taylor-Galerkin-Verfahren stellt eine Übertragung des aus der Familie der Finite-Differenzen- und Finite-Volumen-Ansätze bekannten Lax-Wendroff-Verfahrens auf die Finiten Elemente dar. Für die rein advektive Transportgleichung:

$$\frac{\partial c}{\partial t} + \underline{v}_a \nabla c = 0 \quad (3.49)$$

können auf der Basis beispielsweise des Standard-Galerkin-Verfahrens für einen beliebigen Kollokationspunkt Θ der Zeitintegration über eine Taylorreihenanalyse und mit Hilfe einer Reihe von Umformungen folgende Fehlerterme identifiziert werden (DONEA (1984)[56], GÄRTNER (1987)[66], KRÖHN (1991)[124]):

$$e_1(\Theta) = \Delta t \left[\frac{1}{2} - \Theta \right] (\underline{v}_a \nabla (\underline{v}_a \nabla c)) \quad (3.50)$$

$$e_2(\Theta) = \frac{\Delta t^2}{2} \left[\frac{1}{3} - \Theta \right] \left(\underline{v}_a \nabla \left(\underline{v}_a \nabla \left(\frac{\partial c}{\partial t} \right) \right) \right) \quad (3.51)$$

Für $\Theta = 0$ ergibt sich eine explizite Zeitintegration (Kap. 3.4). Fehler e_1 enthält Terme aus der Taylorreihenentwicklung mit zweiten Ableitungen und wirkt in diesem Fall wie ein künstlicher Diffusionsterm. Fehler e_2 , der Terme mit dritten Ableitungen beinhaltet, verursacht

Phasenfehler in der numerischen Lösung und führt so gegebenenfalls zu Instabilitäten. Bei einer Crank–Nicholson–Zeitintegration mit $\Theta = 0.5$ wird e_1 zu Null, sodass allein durch die Wahl von Θ eine Konsistenz von zweiter Ordnung in Zeitrichtung erreicht wird. Der Phasenfehler allerdings verbleibt.

Werden die Defekte nach Glg. 3.50 und Glg. 3.51 mit umgekehrtem Vorzeichen in die Systemgleichungen integriert und approximiert, so werden die entsprechenden Fehler eliminiert, und es entsteht ein Schema, das bei expliziter Zeitintegration ($\Theta = 0$) für eindimensionale Modellprobleme mit uniformer Schrittweite Δx eine Genauigkeit von dritter, für $\Theta = 0.5$ (Crank–Nicholson) sogar eine Genauigkeit von vierter Ordnung aufweist (DONEA (1984)[56]). Da beide Fehlerterme zweite Ableitungen nach dem Ort enthalten, muss bei der Approximation mit einer schwachen Formulierung gearbeitet werden. Vorhandene dispersive Terme können mit dem dafür geeigneten Standard–Galerkin–Verfahren diskretisiert und der Taylor–Galerkin–Formulierung für den advektiven Transport hinzugefügt werden. Wegen der zugrunde liegenden Taylorreihenentwicklung ist das beschriebene Verfahren jedoch nicht für unstrukturierte Gitter und Diskontinuitäten und damit nicht für die diskrete Modellierung beliebig geklüfteter Systeme geeignet. Ähnlich wie das Lax–Wendroff–Verfahren ist auch der Taylor–Galerkin–Ansatz nur bedingt stabil (DONEA, QUARTAPELLE & SELMIN (1987)[57]).

3.3.3 Petrov–Galerkin–Verfahren

Die Klasse der Petrov–Galerkin–Ansätze beruht auf der Adaption der Upwind–Techniken aus dem Bereich der Finite–Differenzen–/ Finite–Volumen–Schemata für Finite Elemente. Ebenso wie das zuvor beschriebenen Taylor–Galerkin–Verfahren werden auch Petrov–Galerkin–Verfahren mit dem Ziel formuliert, eine stabilere Approximation hyperbolischer Gleichungen zu erreichen. Während jedoch die Korrektur beim Taylor–Galerkin–Ansatz aus einer Taylorreihenentwicklung in Zeitrichtung und Wiedereinsetzen der Fehlerterme mit umgekehrtem Vorzeichen in die Ausgangsgleichung resultiert, wird beim Petrov–Galerkin–Verfahren künstliche Diffusion erzeugt, indem die Wichtungsfunktion $\underline{W} = \underline{N}$ durch Addition eines Polynoms modifiziert wird. Das Integral über das Polynom sollte den Wert eins nicht überschreiten (Fully Upwinding), und die Summe der modifizierten Wichtungsfunktionen aller Knoten eines Elements muss den Wert eins ergeben. CHRISTIE, GRIFFITHS, MITCHELL & ZIENKIEWICZ (1976)[38] entwickelten eine Wichtungsfunktion \underline{W} mit Upwinding–Eigenschaften für die stationäre Form der Advektions–Diffusions–Gleichung durch Einführung eines quadratischen Terms:

$$\begin{aligned} W_1 &= N_1 - \alpha F_Q \\ W_2 &= N_2 + \alpha F_Q \end{aligned} \tag{3.52}$$

mit einem Upwinding–Parameter α und dem quadratischen Polynom:

$$F_Q = \frac{3}{4} (1 + r) (1 - r), \tag{3.53}$$

wobei r eine lokale Koordinate $[0; 1]$ des Einheitslements im eindimensionalen Raum ist. Die resultierenden Ansatz– und Wichtungsfunktionen sind in Abb. 3.10 dargestellt.

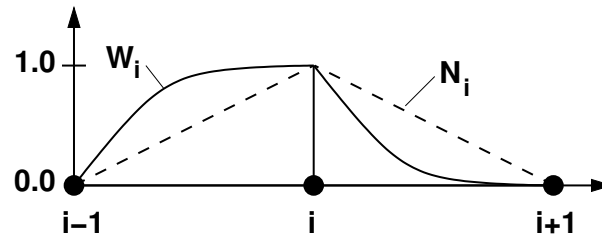


Abbildung 3.10: Petrov–Galerkin–Verfahren: Ansatzfunktion N_i und Wichtungsfunktion W_i am Knoten i nach Glg. 3.52

Zur Stabilisierung zeitabhängiger Probleme stellten WESTERINK & SHEA (1989)[211] Petrov–Galerkin–Verfahren höherer Ordnung vor. Die verwendeten Wichtungsfunktionen werden mit Hilfe von Polynomen ermittelt, deren Ordnung um zwei höher ist als die der zugehörigen Ansatzfunktionen. Für lineare Ansatzfunktionen führt dies im eindimensionalen Fall auf einen kubischen Zusatzterm F_K der Form:

$$F_K = \frac{5}{8} r(r+1)(r-1) \quad (3.54)$$

Beide Ansätze können auch miteinander kombiniert werden:

$$\begin{aligned} W_1 &= N_1 - \alpha F_Q - \beta F_K \\ W_2 &= N_2 + \alpha F_Q + \beta F_K \end{aligned} \quad (3.55)$$

Es lässt sich zeigen, dass das quadratische Polynom sowohl den Massenterm als auch den Advektionsterm beeinflusst, während der kubische Term nur den Massenterm und damit den zeitabhängigen Anteil betrifft (WESTERINK & SHEA (1989)[211]). Im Gegensatz zum quadratischen Term wird durch den kubischen Term auch keine künstliche Diffusion erzeugt. Beide Polynome sorgen jedoch für eine Verbesserung des Phasenfehlers. Wird die (quadratisch) modifizierte Wichtungsfunktion nur auf den advektiven Term angewendet, ergibt sich ein *inkonsistentes Petrov–Galerkin–Verfahren*.

Eine Erweiterung auf den zweidimensionalen Raum lässt sich durch Multiplikation der eindimensionalen Wichtungsfunktionen in beide Raumrichtungen erreichen (CANTEKIN & WESTERINK (1990)[36]). In Fall quadratischer Zusatzterme wird für jede Raumrichtung ein Upwinding–Parameter α_i benötigt. Dieser Ansatz führt jedoch im Allgemeinen künstliche Diffusion quer zur Strömungsrichtung (*crosswind diffusion*) in das System ein, die nicht erwünscht ist. Um Querdiffusion zu vermeiden, können die richtungsbezogenen Koeffizienten α_i in Abhängigkeit vom lokalen Stromlinienverlauf bestimmt werden:

$$\alpha_i = \alpha \frac{\underline{v}_a \cdot \underline{e}_i}{|\underline{v}_a|} \quad (3.56)$$

mit α_i , $i = r, s$, als Upwinding–Parameter in Richtung der lokalen Elementkoordinaten und \underline{e}_i als dem Einheitsvektor der jeweiligen lokalen Koordinate im globalen Koordinatensystem. Verwendung von Glg. 3.56 führt auf eine künstliche Diffusionsmatrix, die invariant gegenüber Drehungen des Koordinatensystems ist und damit keine *crosswind diffusion* erzeugt

(CANTEKIN & WESTERINK (1990)[36]). Für kubische Zusatzterme ist diese Vorgehensweise nicht geeignet, da sich insbesondere für größere Courant-Zahlen die gemischten Fehlerterme aus der Taylorreihenentwicklung bemerkbar machen. CANTEKIN & WESTERINK (1990)[36] schlagen daher alternativ für die kubische Modifikation der bilinearen Wichtungsfunktionen Polynomansätze vor, die für die Haupttrichtungen Terme von dritter Ordnung und zur Elimination der gemischten Fehlerterme zusätzlich Terme sechster Ordnung enthalten.

Es bleibt die Bestimmung der Upwinding-Parameter α und β zu klären. Insbesondere durch das Upwinding mit einem quadratischen Zusatzterm wird analog zum Finite-Volumen-Verfahren (Kap. 3.2) künstliche Diffusion mit einem Faktor $\alpha \cdot \underline{v}_a \Delta x / 2$ in das System eingebracht. Eine Überschätzung des Parameters α erzeugt einen zu großen Betrag an künstlicher Diffusion, während bei einer Unterschätzung gegebenenfalls nicht alle Instabilitäten ausgeglichen werden können. Für eindimensionale stationäre Modellprobleme lässt sich α optimal bestimmen in dem Sinn, dass es auf eine am Knoten exakte Lösung führt (CHRISTIE, GRIFFITHS, MITCHELL & ZIENKIEWICZ (1976)[38]):

$$\alpha_{opt} = \coth\left(\frac{Pe}{2}\right) - \frac{2}{Pe} \approx \sqrt{\frac{Pe^2}{36 + Pe^2}} \quad (3.57)$$

Im instationären Fall gibt es keine entsprechende Definition für α . Anwendung von Glg. 3.57 bewirkt auch hier eine Unterdrückung von Oszillationen, führt jedoch aufgrund zu hoher künstlicher Diffusion zu einer Verschmierung der Fronten. NOORISHAD, TSANG, PERROCHET & MUSY (1992)[164] definierten auf der Basis einer Taylorreihenanalyse für das von ihnen verwendete Crank-Nicholson Galerkin-Verfahren in Abhängigkeit von Courant- und Peclet-Zahl folgende Beziehung:

$$\alpha_{opt} = \begin{cases} 0 & \text{für } Cr \cdot Pe \leq 2 \\ Cr - 2/Pe & \text{für } Cr \cdot Pe > 2 \end{cases} \quad (3.58)$$

Alternativ dazu können, wie bereits angesprochen, zur Verbesserung des Lösungsverhaltens zeitabhängiger Probleme Wichtungsfunktionen mit kubischem Polynom bestimmt werden. Den zugehörige Upwinding-Parameter β ermittelten WESTERINK & SHEA (1989)[211] für rein advective Systeme zu

$$\beta = 2 Cr^2 \quad (3.59)$$

bzw. CANTEKIN & WESTERINK (1990)[36] im zweidimensionalen Raum zu

$$\beta_x = 2 Cr_x^2 \quad \beta_y = 2 Cr_y^2 \quad \beta_{xy} = Cr_x Cr_y \quad (3.60)$$

mit Cr_x und Cr_y als Courant-Zahlen in die entsprechenden Raumrichtungen des globalen Koordinatensystems. Für advektiv-diffusive Probleme empfehlen WESTERINK & SHEA (1989)[211] im 1D-Fall die Verwendung kleiner α -Werte (z.B. $\alpha = 0.1$) unter Beibehaltung der Definition für β gemäß Glg. 3.59, um eine kontrollierte Dämpfung der höherfrequenten Anteile der Lösung zu erzeugen, ohne überflüssige künstliche Diffusion einzuführen.

Wird das inkonsistente Petrov-Galerkin-Verfahren mit einem Finite-Volumen-Schema mit Upwinding verglichen, so verhalten sich diese bei Betrachtung eindimensionaler Probleme

gleich. Wird der Upwinding-Parameter α optimal gewählt, so handelt es sich um ein monotoneres Verfahren, das allerdings gleichzeitig (im instationären Fall in Abhängigkeit von der Zeitintegration und der Zeitschrittwahl) ein hohes Maß an numerischer Dispersion erzeugt. Bei mehrdimensionalen Problemen sind inkonsistentes Petrov-Galerkin-Verfahren und Finite-Volumen-Ansatz mit Upwinding nicht mehr äquivalent. Das Upwinding erzeugt im Kontext der Finite-Volumen-Approximation einen Tensor der künstlichen Dispersion, der nur auf den Hauptdiagonalen besetzt ist, während beim inkonsistenten Petrov-Galerkin-Verfahren auch seine Nebendiagonalen besetzt sind. Beim inkonsistenten Petrov-Galerkin-Verfahren kann daher bei günstiger Wahl der Upwinding-Koeffizienten eine Begrenzung der numerischen Dispersion auf die Strömungsrichtung erreicht werden, im Bereich von Diskontinuitäten können jedoch Oszillationen auftreten, die zu negativen Konzentrationswerten in der Lösung der Transportgleichung führen. Das Finite-Volumen-Verfahren mit Upwinding hingegen erzeugt auf Netzen, die nicht stromlinienorientiert sind, numerische Querdispersion, die die Lösung stark verschmiert, aber Oszillationen meidet (CIRPKA (1996)[39]).

Das *Streamline-Upwind Petrov-Galerkin-Verfahren (SUPG)* arbeitet mit Wichtungsfunktionen, die im Gegensatz zu den bisher beschriebenen Petrov-Galerkin-Ansätzen nicht mit Polynomen höheren, sondern mit Funktionen niedrigeren Grades als dem der Ansatzfunktion modifiziert werden (z.B. HUGHES & BROOKS (1982)[102], HELMIG (1993)[84]). Die entsprechenden Ansatz- und Wichtungsfunktionen sind am eindimensionalen Beispiel in Abb. 3.11 dargestellt.

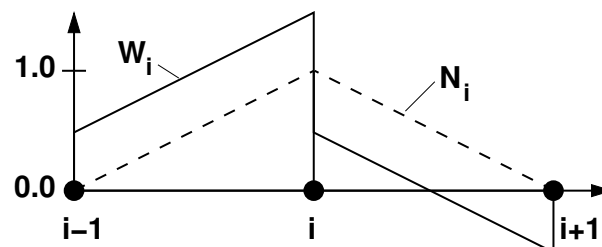


Abbildung 3.11: Streamline-Upwind Petrov-Galerkin-Verfahren: Ansatzfunktion N_i und Wichtungsfunktion W_i am Knoten i

Das Upwinding wird an der Charakteristik des advektiven Transports orientiert, indem die Störung der Wichtungsfunktion aus dem Geschwindigkeitsfeld und der Ableitung der Ansatzfunktion bestimmt wird:

$$\underline{W} = \underline{N} + \tau \cdot (\underline{v}_a(\nabla(\underline{N}))) \quad (3.61)$$

Auf diese Weise wird der Eintrag von *crosswind diffusion* bei zweidimensionalen Modellproblemen vermieden. Der Parameter τ kann als Upwinding-Koeffizient verstanden werden und muss durch eine Taylorreihen- oder Stabilitätsanalyse bestimmt werden. Mit dem Upwinding-Parameter α ist er über die folgende Beziehung verbunden:

$$\tau = \alpha \frac{h}{2|\underline{v}_a|}, \quad (3.62)$$

wobei h ein Maß für die Elementgröße ist. Im eindimensionalen Fall gilt $h = \Delta x$. Im Gegensatz zum inkonsistenten Petrov–Galerkin–Verfahren wird hier die mit dem Zusatzterm gestörte Wichtungsfunktion auf alle Terme der zu diskretisierenden Differentialgleichung angewendet. Diese konsistente Formulierung reduziert den Eintrag künstlicher Diffusion in das System (CIRPKA (1996)[39], PAPASTAVROU (1998)[170]). Bei dominant advektiven Transportproblemen ermöglicht das SUPG–Verfahren daher eine steile Approximation der Konzentrationsfront. Allerdings treten im Bereich der Front Über– und Unterschwinger auf, die zwar nicht mit der Zeit anwachsen, aber auf unerwünschte negative Konzentrationswerte führen.

3.3.4 Flux–Corrected Transport

Das in Kap. 3.2.3 vorgestellte Flux–Corrected Transport Verfahren für Finite Volumen wurde von PARROTT & CHRISTIE (1986)[171] auf die Finite–Elemente–Methode übertragen (siehe dazu z.B. auch LÖHNER, PERAIRE & VAHDATI (1987)[135]). Der Algorithmus ist grundsätzlich der gleiche wie für Finite Volumen, mit dem Unterschied, dass nicht Zellen, sondern Knoten mit dem jeweils dazugehörigen Patch betrachtet werden:

- Ermittlung der Lösung für das Verfahren niedriger und das Verfahren höherer Ordnung für einen bestimmten Zeitschritt.
- Da bei der FEM die Massenmatrix für das Verfahren niedriger und höherer Ordnung unterschiedlich sein kann, muss diese bei der Berechnung der Korrektur berücksichtigt werden. Es wird daher elementweise der Beitrag des jeweiligen Elements, bestehend aus Massen–, Fluss– und gegebenenfalls Quell– und Senkterm, zu seinen Knoten bestimmt. Die antidiffusiven Beiträge eines Elements ergeben sich aus der Differenz der Beiträge der Verfahren niedriger und höherer Ordnung.
- Begrenzung der antidiffusiven Beiträge eines Elements durch einen Faktor T_{el} , der analog zum Faktor T des FCT–Verfahrens für Finite Volumen bestimmt wird (Kap. 3.2.3). Als Vergleichswerte werden dabei nicht die Werte der Zustandsgrößen der umliegenden Zellen herangezogen, sondern die aller Knoten, die über ein Element mit dem betrachteten Knoten i verbunden sind.
- Bestimmung des Korrekturwertes für jeden Knoten i aus der Summe aller begrenzten antidiffusiven Beiträge der anliegenden Elemente für diesen Knoten.
- Ermittlung der korrigierten Lösung durch Addition des Korrekturwertes auf die Lösung des Verfahrens niedriger Ordnung für jeden Knoten.

Wird als Verfahren niedriger Ordnung ein monotones Schema gewählt, so erfüllt das auf Finiten Elementen basierende Flux–Corrected Transport Verfahren die in Abb. 1.5 aufgestellten Anforderungen an die Transportdiskretisierung.

3.3.5 Gemischte Finite–Elemente–Verfahren

Bei den bisher aufgeführten linearen Finite–Elemente–Verfahren wird die gesuchte Größe u kontinuierlich, ihre Ableitung ∇u jedoch nur diskontinuierlich approximiert. Wird beispielsweise im Fall der Strömungsgleichung 2.11 u als Druck p und ∇u (bzw. $\underline{F}(u) = \underline{B}\nabla u$ mit \underline{B}

als allgemeinem Koeffiziententensor) als Filtergeschwindigkeit \underline{v}_f verstanden, so ergibt sich daraus, dass die Flüsse über die Elementkanten nicht zwingend stetig bestimmt werden. Im Hinblick auf die in Kap. 1.4 an die Geschwindigkeitsverteilung gestellten Anforderungen (möglichst genaue Approximation, da sensitive Eingangsgröße für den Transport) und auf die Möglichkeiten, die sich aufgrund der äquidimensionalen Behandlung von Kluft und Matrix anbieten (Flusserhaltung am Kluft-Matrix-Interface, Particle-Tracking-Methoden), ist eine bessere Näherungslösung für die Geschwindigkeit erwünscht. Dazu wird im Folgenden die Klasse der gemischten Finiten Elemente vorgestellt.

Grundgedanke der für elliptische und parabolische Problemstellungen entwickelten gemischten Finiten Elemente ist, eine unbekannte Größe u sowie ihre Ableitung ∇u bzw. das damit verbundene Geschwindigkeitsfeld gleichzeitig zu approximieren. Dabei soll die Geschwindigkeit innerhalb eines Elements sowie ihre Normalenkomponenten an den Kanten zwischen zwei Elementen kontinuierlich beschrieben werden. Die zugehörige Verfahrensklasse wird u.a. in den Arbeiten von CHAVENT & ROBERTS (1991)[37], BREZZI & FORTIN (1991)[33] und HOTEIT, ERHEL, MOSÉ, PHILIPPE & ACKERER (2001)[97] ausführlich dargestellt und diskutiert. An dieser Stelle soll nur der einfachste Fall, der von RAVIART & THOMAS (1977)[177] eingeführte Approximationsräume nullter Ordnung (\mathcal{RT}_0) verwendet, behandelt werden. Die Gradienten ∇u und die damit verbundenen Flüsse werden im \mathcal{RT}_0 an den Kanten der Elemente definiert, während die Unbekannte u im Elementschwerpunkt approximiert wird und konstant über das Element ist. Im Gegensatz zu den knotenorientierten Finiten Elementen ist daher bei den gemischten Finiten Elementen die Größe u diskontinuierlich.

Dementsprechend hat die Ansatz- und Wichtungsfunktion N_u zur Approximation der Größe u im gesamten Element konstant einen Wert von eins. $\underline{\underline{N}}_F$ enthält n_{ed} vektorwertige Ansatz- bzw. Wichtungsfunktionen für die Flüsse an den Kanten, wobei n_{ed} die Anzahl der Kanten darstellt. Im lokalen Koordinatensystem (r, s) ist $\underline{\underline{N}}_F$ für ein Viereck wie folgt definiert (siehe auch Abb. 3.12, links):

$$\underline{\underline{N}}_F = \begin{bmatrix} 0 & r & 0 & r-1 \\ s-1 & 0 & s & 0 \end{bmatrix} \quad (3.63)$$

bzw. für ein Dreieck (Abb. 3.12, Mitte):

$$\underline{\underline{N}}_F = \begin{bmatrix} r & r & r-1 \\ s-1 & s & s \end{bmatrix} \quad (3.64)$$

Damit lassen sich die Komponenten der Geschwindigkeit im Element linear aus den Kantenflüssen $\underline{\underline{Q}}_K$ interpolieren:

$$\underline{\underline{F}}(u) = \underline{\underline{N}}_F \cdot \underline{\underline{Q}}_K \quad (3.65)$$

bzw. in lokalen Koordinaten (r, s) :

$$\underline{\underline{F}}(u) = \underline{\underline{N}}_F \cdot \underline{\underline{Q}}_K \quad (3.66)$$

Abb. 3.12, rechts, zeigt beispielhaft ein interpoliertes Geschwindigkeitsfeld. Es wird deutlich, dass sich die x-Komponente der Geschwindigkeit linear mit x und die y-Komponente linear mit y ändert. Die Komponente normal zum Elementrand bleibt konstant.

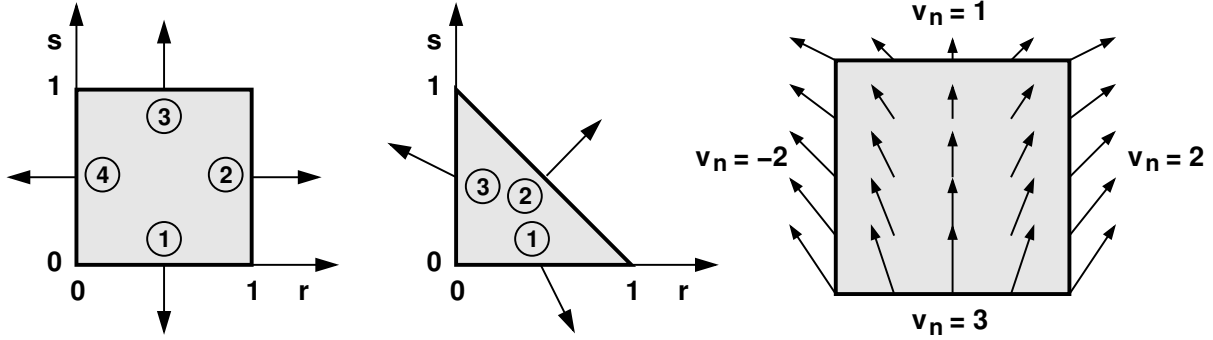


Abbildung 3.12: Ansatzfunktionen im \mathcal{RT}_0 für viereckiges (links) und dreieckeckiges (mitte) Referenzelement sowie Beispiel einer Geschwindigkeitsverteilung im \mathcal{RT}_0 für ein Viereckselement (rechts).

Die globale Ansatzfunktion $\underline{\underline{N}}_F$ lässt sich ebenso wie die globale Geschwindigkeit $\underline{\underline{F}}(u)$ mittels einer Piola-Transformation aus den lokalen Werten bestimmen. Die Piola-Transformation erhält dabei die Normalenkomponente des ihr unterworfenen Vektors am Elementrand (BREZZI & FORTIN (1991)[33]):

$$\underline{\underline{N}}_F = \frac{1}{\Delta z \det(\underline{\underline{J}})} \underline{\underline{J}} \underline{\underline{N}}_F \quad (3.67)$$

$$\underline{\underline{F}}(u) = \frac{1}{\Delta z \det(\underline{\underline{J}})} \underline{\underline{J}} \underline{\underline{F}}(u) \quad (3.68)$$

Δz entspricht der Elementdicke im zweidimensionalen Raum und $\underline{\underline{J}}$ der Jacobi-Matrix nach Glg. 3.45.

Um die Größe u und ihre Ableitung ∇u gleichzeitig als Unbekannte zu erhalten, wird für die Erhaltungsgleichung 3.1 u und für das zugehörige Fließgesetz $\underline{\underline{F}}(u)$ bzw. über Glg. 3.65 die Kantenflüsse $\underline{\underline{Q}}_K$ als Primärvariable angesetzt. Unter Verwendung der Galerkin-Methode gemäß Glg. 3.38 und mit den Ansatz- und Wichtungsfunktionen nach Glg. 3.63 bzw. Glg. 3.64 und Glg. 3.67 ergibt sich für die Kontinuitätsgleichung 3.1:

$$\frac{\partial \hat{u}}{\partial t} \underbrace{\int_{\Omega} N_u a N_u dV}_S + \underbrace{\int_{\Omega} N_u \nabla \cdot (\underline{\underline{N}}_F) dV}_{\underline{\underline{C}}} \underline{\underline{Q}}_K - \underbrace{\int_{\Omega} N_u r dV}_R = 0 \quad (3.69)$$

und für das Fließgesetz $\underline{\underline{B}}^{-1} \underline{\underline{F}}(u) + \nabla u = 0$ mit partieller Integration des zweiten Terms:

$$\underbrace{\int_{\Omega} \underline{\underline{N}}_F \underline{\underline{B}}^{-1} \underline{\underline{N}}_F dV}_{\underline{\underline{A}}} \underline{\underline{Q}}_K - \underbrace{\int_{\Omega} \nabla \cdot (\underline{\underline{N}}_F) N_u dV}_{\underline{\underline{C}}} \hat{u} + \underbrace{\oint_{\Gamma} \underline{\underline{N}}_F \underline{\underline{n}} u dA}_{\hat{u}_{\Gamma}} = 0 \quad (3.70)$$

\hat{u}_{Γ} stellt dabei den Wert der Größe u auf dem Rand dar. Glg. 3.69 und Glg. 3.70 können in Matrixform geschrieben werden:

$$\begin{bmatrix} S & 0 \\ 0 & 0 \end{bmatrix} \begin{bmatrix} \partial \hat{u} / \partial t \\ \partial \underline{\underline{Q}}_K / \partial t \end{bmatrix} - \begin{bmatrix} 0 & -\underline{\underline{C}} \\ -\underline{\underline{C}} & \underline{\underline{A}} \end{bmatrix} \begin{bmatrix} \hat{u} \\ \underline{\underline{Q}}_K \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} R \\ \hat{u}_{\Gamma} \end{bmatrix} \quad (3.71)$$

Wird in Zeitrichtung beispielsweise ein implizites Integrationsverfahren (Kap. 3.4) angesetzt, und wird mit Δt die Länge eines Zeitschritts sowie mit n der aktuelle Zeitschritt bezeichnet, so ergibt sich für Glg. 3.71:

$$\begin{bmatrix} S & \Delta t \underline{C} \\ \Delta t \underline{C} & -\Delta t \underline{A} \end{bmatrix} \begin{bmatrix} \hat{u}^{n+1} \\ \hat{Q}_K^{n+1} \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} S & 0 \\ 0 & 0 \end{bmatrix} \begin{bmatrix} \hat{u}^n \\ \hat{Q}_K^n \end{bmatrix} + \Delta t \begin{bmatrix} R^{n+1} \\ \hat{u}_\Gamma^{n+1} \end{bmatrix} \quad (3.72)$$

Die Koeffizientenmatrix der linken Seite ist symmetrisch, aber indefinit (HOTEIT, ERHEL, MOSÉ, PHILIPPE & ACKERER (2001)[97]). Im instationären Fall ($S \neq 0$) kann S leicht invertiert werden, so dass die Unbekannten \hat{u} und \hat{Q}_K durch Konstruktion eines Schurkomplement-Systems getrennt werden können und sich das Problem auf die Lösung zweier linearer Systeme reduziert:

$$(\underline{A} + \Delta t \underline{C} S^{-1} \underline{C}) \hat{Q}_K^{n+1} = \underline{C} (\hat{u}^n + \Delta t S^{-1} R^{n+1}) - \hat{u}_\Gamma^{n+1} \quad (3.73)$$

$$S \hat{u}^{n+1} = S \hat{u}^n + \Delta t R^{n+1} - \Delta t \underline{C} \hat{Q}_K^{n+1} \quad (3.74)$$

Für sehr kleine S ($S \rightarrow 0$) bzw. $S = 0$ (stationäres Problem) muss dagegen das Gleichungssystem 3.72 gelöst werden. Lineare Gleichungssysteme dieser Art mit symmetrischer, aber indefiniter Matrix werden auch als *Sattelpunktproblem* bezeichnet. Dafür existieren zwar Lösungsverfahren, diese sind jedoch im Allgemeinen sehr aufwändig. Häufig wird daher eine *Hybridisierung* der gemischten Finiten Elemente vorgenommen. Die Vorgehensweise geht auf FRAEIJIS DE VEUBEKE (1965)[62] zurück. Von ARNOLD & BREZZI (1985)[6] und BREZZI & FORTIN (1991)[33] wurden dazu Untersuchungen durchgeführt und a-priori Fehlerschätzer und Postprocessing-Techniken vorgestellt. HOTEIT, ERHEL, MOSÉ, PHILIPPE & ACKERER (2001)[97] analysierten die Eigenschaften von gemischten und gemischt-hybriden Finite-Elemente-Verfahren und verglichen sie hinsichtlich der Zuverlässigkeit der Ergebnisse und der benötigten Rechenzeit.

Bei der Hybridisierung wird als zusätzliche Unbekannte \hat{u}_K der Wert der Größe u an der Elementkante eingeführt und das Gleichungssystem anschließend danach aufgelöst. \hat{u}_K ist im \mathcal{RT}_0 ebenso wie der Kantenfluss \hat{Q}_K konstant entlang der Elementkante. Somit entspricht die Anzahl der Freiheitsgrade im System der Anzahl der Elementkanten. Es werden folgende Bedingungen eingeführt:

- (1) Die gesuchte Größe u an der gemeinsamen Kante i bzw. j zweier benachbarter Elemente e und e' ist identisch (Kontinuität der Unbekannten u): $\hat{u}_{K,i}^e = \hat{u}_{K,j}^{e'}$
- (2) Der Fluss an der gemeinsamen Kante i bzw. j zweier benachbarter Elemente e und e' ist umgekehrt gleich groß (Kontinuität der Flüsse): $\hat{Q}_{K,i}^e + \hat{Q}_{K,j}^{e'} = 0$
- (3) An Dirichlet-Rändern Γ_D entspricht der Wert von u an Kante der zugehörigen Randbedingung: $\hat{u}_{K,i}^e = \hat{u}_{D,i}^e$
- (4) An Neumann-Rändern Γ_N entspricht der Fluss an der Kante der Flussrandbedingung: $\hat{Q}_{K,i}^e = \hat{Q}_{N,i}^e$

Bedingung (1) hat zur Folge, dass im Allgemeinen der Wert von \hat{u}_K^e nicht identisch ist mit dem Wert von \hat{u}_E^e innerhalb des Elements e , da sich die Werte \hat{u}_E^e und $\hat{u}_E^{e'}$ zweier benachbarter Elemente e und e' unterscheiden können.

Um aus Glg. 3.69 und Glg. 3.70 ein gemischt-hybrides Gleichungssystem zu erhalten, wird Glg. 3.70 nach \hat{Q}_K umgestellt und der Randintegralterm als zusätzliche Unbekannte \hat{u}_K interpretiert:

$$\hat{Q}_K = \underline{\underline{A}}^{-1} \underline{\underline{C}} \hat{u} - \underline{\underline{A}}^{-1} \hat{u}_K \quad (3.75)$$

Damit wird \hat{Q}_K in Glg. 3.69 eliminiert:

$$S \frac{\partial \hat{u}}{\partial t} + \underline{\underline{C}} \underline{\underline{A}}^{-1} \underline{\underline{C}} \hat{u} - \underline{\underline{C}} \underline{\underline{A}}^{-1} \hat{u}_K = R \quad (3.76)$$

Anschließend wird \hat{Q}_K in Glg. 3.75 komponentenweise mit Hilfe der Bedingungen (2) und (4) ersetzt. Es ergibt sich:

$$\begin{bmatrix} S & 0 \\ 0 & 0 \end{bmatrix} \begin{bmatrix} \partial \hat{u} / \partial t \\ \partial \hat{u}_K / \partial t \end{bmatrix} + \begin{bmatrix} \underline{\underline{C}} \underline{\underline{A}}^{-1} \underline{\underline{C}} & -\underline{\underline{C}} \underline{\underline{A}}^{-1} \\ -\underline{\underline{C}} \underline{\underline{A}}^{-1} & \underline{\underline{A}}^{-1} \end{bmatrix} \begin{bmatrix} \hat{u} \\ \hat{u}_K \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} R \\ -\hat{Q}_N \end{bmatrix} \quad (3.77)$$

Ein implizites Differenzenverfahren in Zeitrichtung führt auf:

$$\begin{bmatrix} S + \Delta t \underline{\underline{C}} \underline{\underline{A}}^{-1} \underline{\underline{C}} & -\Delta t \underline{\underline{C}} \underline{\underline{A}}^{-1} \\ -\Delta t \underline{\underline{C}} \underline{\underline{A}}^{-1} & \Delta t \underline{\underline{A}}^{-1} \end{bmatrix} \begin{bmatrix} \hat{u}^{n+1} \\ \hat{u}_K^{n+1} \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} S & 0 \\ 0 & 0 \end{bmatrix} \begin{bmatrix} \hat{u}^n \\ \hat{u}_K^n \end{bmatrix} + \Delta t \begin{bmatrix} R^{n+1} \\ -\hat{Q}_N^{n+1} \end{bmatrix} \quad (3.78)$$

Das Gleichungssystem 3.78 ist sowohl für den dargestellten instationären als auch für den stationären Fall ($S = 0$) positiv definit (HOTEIT, ERHEL, MOSÉ, PHILIPPE & ACKERER (2001)[97]). Es kann, da $\zeta = S + \Delta t \underline{\underline{C}} \underline{\underline{A}}^{-1} \underline{\underline{C}}$ (instationär) bzw. $\zeta^* = \underline{\underline{C}} \underline{\underline{A}}^{-1} \underline{\underline{C}}$ (stationär) leicht invertierbar ist, unter Verwendung des Schurkomplements nach \hat{u}_K^{n+1} bzw. \hat{u}_K aufgelöst werden. Die daraus resultierenden entkoppelten Gleichungen lauten für das instationäre Problem:

$$\left(\underline{\underline{A}}^{-1} - \frac{1}{\zeta} \Delta t \underline{\underline{A}}^{-1} \underline{\underline{C}} \underline{\underline{C}} \underline{\underline{A}}^{-1} \right) \hat{u}_K^{n+1} = \frac{1}{\zeta} \underline{\underline{C}} \underline{\underline{A}}^{-1} (S \hat{u}^n + \Delta t R^{n+1}) - \hat{Q}_N^{n+1} \quad (3.79)$$

$$\hat{u}^{n+1} = \frac{1}{\zeta} \Delta t \underline{\underline{C}} \underline{\underline{A}}^{-1} \hat{u}_K^{n+1} + \frac{1}{\zeta} (S \hat{u}^n + \Delta t R^{n+1}) \quad (3.80)$$

Durch Einsetzen von Glg. 3.80 in Glg. 3.75 lässt sich \hat{Q}_K^{n+1} bestimmen:

$$\hat{Q}_K^{n+1} = \left(\frac{1}{\zeta} \Delta t \underline{\underline{A}}^{-1} \underline{\underline{C}} \underline{\underline{C}} \underline{\underline{A}}^{-1} - \underline{\underline{A}}^{-1} \right) \hat{u}_K^{n+1} + \frac{1}{\zeta} \underline{\underline{A}}^{-1} \underline{\underline{C}} (S \hat{u}^n + \Delta t R^{n+1}) \quad (3.81)$$

Und für das stationäre Problem ergibt sich analog:

$$\left(\underline{\underline{A}}^{-1} - \frac{1}{\zeta^*} \underline{\underline{A}}^{-1} \underline{\underline{C}} \underline{\underline{C}} \underline{\underline{A}}^{-1} \right) \hat{u}_K = \frac{1}{\zeta^*} \underline{\underline{C}} \underline{\underline{A}}^{-1} R - \hat{Q}_N \quad (3.82)$$

$$\hat{u} = \frac{1}{\zeta^*} \underline{\underline{C}} \underline{\underline{A}}^{-1} \hat{u}_K + \frac{1}{\zeta^*} R \quad (3.83)$$

Einsetzen von Glg. 3.83 in Glg. 3.75 führt auf $\hat{\underline{Q}}_K$:

$$\hat{\underline{Q}}_K = \left(\frac{1}{\underline{\zeta}^*} \underline{A}^{-1} \underline{C} \underline{C} \underline{A}^{-1} - \underline{A}^{-1} \right) \hat{\underline{u}}_K + \frac{1}{\underline{\zeta}^*} \underline{A}^{-1} \underline{C} R \quad (3.84)$$

Die Schurkomplementmatrix auf der linken Seite von Glg. 3.79 bzw. Glg. 3.82 ist symmetrisch und positiv definit (HOTEIT, ERHEL, MOSÉ, PHILIPPE & ACKERER (2001)[97]) und damit einer großen Anzahl von Lösungsverfahren zugänglich. Im Gegensatz zum gemischten Ansatz ermöglicht der gemischt-hybride Ansatz weiterhin aufgrund der eingeführten Größe $\hat{\underline{u}}_K$ an den Elementkanten eine direkte Definition der Dirichlet-Randbedingungen am Gebietsrand. Zudem weist das gemischt-hybride Verfahren im stationären Fall auch weniger Unbekannte auf, da nur nach den Kantenwerten $\hat{\underline{u}}_K$ aufgelöst wird, während das gemischte Gleichungssystem zusätzlich zu den Kantenflüssen $\hat{\underline{Q}}_K$ die Elementgrößen $\hat{\underline{u}}$ enthält. Allerdings zeigten HOTEIT, ERHEL, MOSÉ, PHILIPPE & ACKERER (2001)[97] für das Strömungsproblem in porösen Medien, dass bei extrem verzerrten Elementgeometrien und/oder sehr großen Unterschieden in der Permeabilität die gemischte Finite-Elemente-Methode zuverlässigere Ergebnisse erzeugt als das hybridisierte Verfahren.

Vergleiche mit den Ergebnissen linearer Finiter Elemente und Finiter Volumen bestätigen, dass mit den gemischten Verfahren eine genauere Geschwindigkeitsapproximation insbesondere in heterogenen Systemen erzielt wird (DURLOFSKY (1994)[58], MOSÉ, SIEGEL, ACKERER & CHAVENT (1994)[149], Kap. 6.2 und Kap. 6.3.3 der vorliegenden Arbeit). Im Gegensatz zu Finite-Elemente-Verfahren, die ihre Unbekannten an den Knoten der Gitternetze definieren, können gemischte / gemischt-hybride Finite Elemente nicht auf niederdimensionale Modellprobleme angewendet werden, da die Bildung einer Komponente normal zur Kluft und somit eine Kopplung zwischen Kluft und Matrix nicht möglich ist. Bei einer äquidimensionalen Formulierung können gemischte / gemischt-hybride Finite Elemente eingesetzt werden, sodass die Forderungen nach einer möglichst exakten Geschwindigkeitsverteilung und einer lokalen Flusserhaltung am Kluft-Matrix-Interface für die Strömungsapproximation in geklüftet-porösen Systemen erfüllt werden.

3.3.6 Diskontinuierliche Galerkin-Verfahren

Die diskontinuierlichen Galerkin (DG)-Verfahren bilden eine Klasse von Diskretisierungsansätzen, die auf der Finite-Elemente-Methode beruhen. Die Lösung der zu diskretisierenden Differentialgleichung wird durch Ansatz- und Wichtungsfunktionen approximiert, die elementweise durch Polynome beliebigen Grades definiert werden. An den Elementkanten sind diese Funktionen unstetig, sodass auch die Lösung dort Diskontinuitäten aufweisen kann. Auf diese Weise können Sprünge oder steile Gradienten in der Lösung sauber erfasst werden. Im Skalarfall entspricht der DG-Ansatz für konstante Polynome dem Finite-Volumen-Ansatz, sodass die DG-Methoden häufig auch als eine Generalisierung monotoner Finite-Volumen-Schemata interpretiert werden (COCKBURN & SHU (1997)[45]). Allerdings ist die diskretisierte Lösung nicht zwingend monoton – sie kann Über- und Unterschwingen aufweisen –, sondern die Mittelwerte der approximierten Lösung über das Element sind monoton (COCKBURN, KARNIADAKIS & SHU (2000)[43]). Die DG-Verfahren sind massenkonservativ. Ihre Genauigkeit hängt grundsätzlich nur von der exakten Lösung ab, da für die Ansatz- und

Wichtungsfunktionen Polynome beliebig hohen Grades gewählt werden können. Aufgrund ihrer Finite-Elemente-Herkunft eignen sich DG-Verfahren für komplizierte Elementgeometrien. Adaptive Strategien und nicht-konforme Gitter können problemlos verwendet werden, da keine Kontinuität zwischen den Elementen nötig ist. Aus diesem Grund kann auch der Grad des approximierenden Polynoms von Element zu Element unterschiedlich sein. Gleichzeitig sind die DG-Methoden auch für höhere Ordnungen gut zu parallelisieren, da der lokale Träger im Vergleich zu anderen Verfahren höherer Ordnung sehr kompakt ist.

Ebenso wie die kontinuierlichen Galerkin-Verfahren basieren auch die DG-Verfahren auf der schwachen Form 3.40 der Erhaltungsgleichung 3.1:

$$\int_{\Omega} \underline{W} \cdot a \frac{\partial(\underline{N} \cdot \hat{u})}{\partial t} dV - \int_{\Omega} \nabla(\underline{W}) \underline{F}(\underline{N} \cdot \hat{u}) dV + \oint_{\Gamma} \underline{W} \underline{F}(\underline{N} \cdot \hat{u}) \underline{n} dA - \int_{\Omega} \underline{W} r dV = 0 \quad (3.85)$$

Das Randintegral in Glg. 3.85, das den Fluss über den (Element-)Rand beschreibt, wird jedoch für Elementkanten im Innern des Modellgebiets nicht zu Null gesetzt, sondern durch einen *numerischen Fluss* ersetzt, der für konstante Polynome vom Grad $p = 0$ ein monotones Schema ergibt. Der numerische Fluss hängt dabei im Allgemeinen von den Werten $\hat{u}_{K,i}^e$ und $\hat{u}_{K,j}^{e'}$ der gesuchten Größe an der gemeinsamen Kante i bzw. j zweier benachbarter Elemente e und e' ab (z.B. COCKBURN & SHU (1997)[45], SHU (2001)[191]). Die Näherungslösung \tilde{u} ergibt sich analog zu Glg. 3.36 mit:

$$\tilde{u} = \underline{N} \cdot \hat{u} \quad (3.86)$$

Im zweidimensionalen Fall und für $p = 2$ lauten die Vektoren \underline{N} und \hat{u} :

$$\underline{N} = \begin{bmatrix} N_1 \\ N_2 \\ N_3 \\ N_4 \\ N_5 \\ N_6 \end{bmatrix} \quad \hat{u} = \begin{bmatrix} \hat{u}_1(t) \\ \hat{u}_2(t) \\ \hat{u}_3(t) \\ \hat{u}_4(t) \\ \hat{u}_5(t) \\ \hat{u}_6(t) \end{bmatrix} \quad (3.87)$$

Die Wahl der Polynome für den Vektor der Ansatzfunktionen \underline{N} ist relativ frei. COCKBURN & SHU (1997)[45] verwenden beispielsweise für ein Viereck die folgenden Beziehungen (modifiziert für lokale Ansatzfunktionen im Referenzelement $[0, 1] \times [0, 1]$):

$$\begin{aligned} N_1 &= 1 \\ N_2 &= 2r - 1 \quad N_3 = 2s - 1 \\ N_4 &= (2r - 1)(2s - 1) \quad N_5 = (2r - 1)^2 - \frac{1}{3} \quad N_6 = (2s - 1)^2 - \frac{1}{3} \end{aligned} \quad (3.88)$$

In Abb. 3.13 sind die Polynome der Ansatzfunktionen beispielhaft für den eindimensionalen Raum und einen Approximationsgrad $p = 2$ dargestellt. Außerdem wird die bereits angesprochene Analogie zwischen diskontinuierlichen Galerkin-Verfahren mit $p = 0$ und zellenzentrierten Finiten Volumen deutlich, denn für $p = 0$ ist $\tilde{u} = N_1 \cdot \hat{u}(t)$.

Die DG-Verfahren wurden von REED & HILL (1973)[178] für den rein advektiven, zeitunabhängigen Transport eingeführt. COCKBURN & SHU entwickelten in einer Reihe von

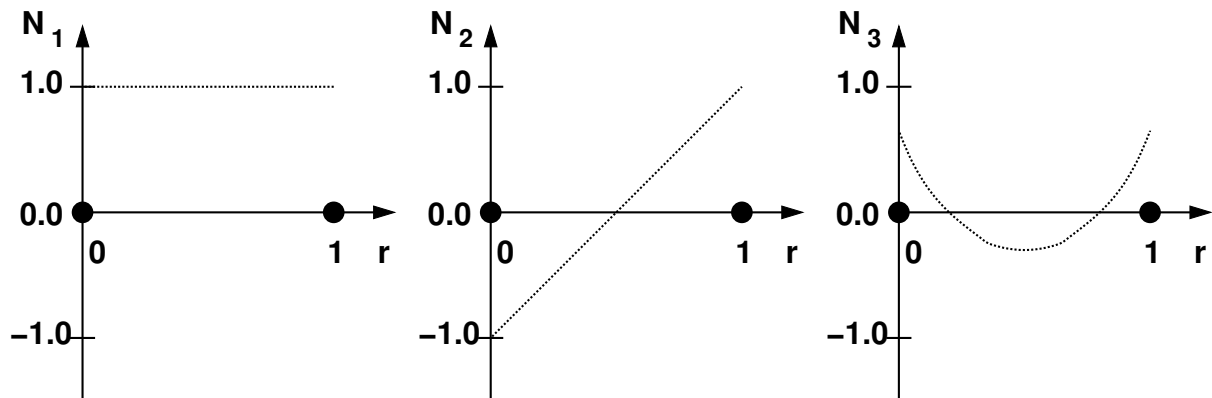


Abbildung 3.13: Polynome der Ansatzfunktionen für diskontinuierliche Galerkin-Verfahren bei einem Approximationsgrad von $p = 2$ im eindimensionalen Raum

Veröffentlichungen eine DG-Formulierung für zeitabhängige, nichtlineare hyperbolische Probleme (z.B. COCKBURN & SHU (1989)[44]). Für die Zeitdiskretisierung wird dabei ein explizites Runge-Kutta-Verfahren (Kap. 3.4) eingesetzt, das für $p > 0$ mit einem speziellen slope limiter stabilisiert wird. Dieser slope limiter hat keine TVD-Eigenschaften (Kap. 3.2.1), sondern ist TVBM (*total variation bounded in the means*) und dadurch in der Lage, eine höhere Approximationsordnung des Verfahrens auch im Bereich lokaler Extrema zu erhalten. Solche Ansätze werden auch als RKDG-Verfahren (Runge-Kutta-Discontinuous-Galerkin-Verfahren) bezeichnet. Eine Übersicht diskontinuierlicher Galerkin-Verfahren geben beispielsweise COCKBURN, KARNIADAKIS & SHU (2000)[43].

Um auch advektiv-dispersive Probleme approximieren zu können, wurde zunächst der DG-Ansatz für den advektiven Transport mit anderen Verfahren wie den gemischt-hybriden Finiten Elementen für den dispersiven Anteil gekoppelt (z.B. SIEGEL, MOSÉ, ACKERER & JAFFRE (1997)[193]). Die Diskretisierung elliptischer Differentialgleichungen mittels diskontinuierlicher Galerkin-Verfahren ist relativ neu (z.B. BASSI & REBAY (1997)[10], COCKBURN & SHU (1998)[46], ODEN, BABUŠKA & BAUMANN (1998)[167]). Die entwickelten Verfahren unterscheiden sich im Wesentlichen hinsichtlich der Behandlung der Randintegrale bzw. der numerische Flüsse. In einer Analyse verschiedener DG-Verfahren für elliptische Probleme unterteilen ARNOLD, BREZZI, COCKBURN & MARINI (2002)[7] die untersuchten Ansätze in zwei Haupttypen, die *primal formulation* und die *flux formulation*. Die *primal formulation* erzeugt mit Hilfe von Straftermen eine schwache Kontinuität der Flüsse über die Elementkanten im Gebietsinnern und der Dirichlet-Randbedingung. Das Verfahren von ODEN, BABUŠKA & BAUMANN (1998) gehört in diese Reihe. Bei der *flux formulation*, mit der auch COCKBURN & SHU (1998)[46] arbeiten, werden die Randintegrale durch geeignete numerische Flüsse ersetzt. Zu Genauigkeit und Stabilität der verschiedenen Verfahren siehe ARNOLD, BREZZI, COCKBURN & MARINI (2002)[7] und Referenzen darin. Insbesondere die Ansätze von ODEN, BABUŠKA & BAUMANN (1998)[167] und COCKBURN & SHU (1998)[46] wurden von SHU (2001)[191] für die Wärmeleitung miteinander verglichen. Das Verfahren von ODEN, BABUŠKA & BAUMANN (1998)[167] weist eine nicht-symmetrische, positiv-semidefinite Koeffizientenmatrix auf und ist erst ab einem Approximationsgrad von $p \geq 2$ stabil. Es benötigt jedoch einen klei-

neren lokalen Träger als die Methode von COCKBURN & SHU (1998)[46]. Die DG-Schemata weisen eine Reihe der Eigenschaften auf, die in Kap. 1.4 für die Modellierung von Strömung und Transport in geklüftet-porösen Medien angefordert wurden (massenkonservativ, hohe Genauigkeit, auf komplexen Geometrien einsetzbar). In Abhängigkeit von der Zeitdiskretisierung sind die Verfahren allerdings für advective Transportprozesse nicht zwingend monoton.

3.4 Zeitdiskretisierung

Die in Kap. 3.2 und Kap. 3.3 aufgeführten Diskretisierungsverfahren nehmen eine Approximation der zu lösenden Differentialgleichung in Raumrichtung vor. Bei instationären Problemstellungen muss die Ableitung in Zeitrichtung ebenfalls diskretisiert werden, wobei eine Anfangsbedingung $\hat{u}(\underline{x}, t_0) = \hat{u}_0$ vorgegeben wird (Anfangswertproblem). Dann existieren im Wesentlichen zwei Lösungsmöglichkeiten:

Zum einen können im Rahmen der Finite-Elemente-Methode Ansatz- und Wichtungsfunktionen gewählt werden, die von Ort und Zeit abhängig sind (z.B. JOHNSON (1992)[110]):

$$\frac{\partial \tilde{u}(\underline{x}, t)}{\partial t} = f\left(\frac{\partial \tilde{u}(\underline{x}, t)}{\partial \underline{x}}\right) \quad \rightsquigarrow \quad \frac{\partial N(\underline{x}, t)}{\partial t} \hat{u} = f\left(\frac{\partial N(\underline{x}, t)}{\partial \underline{x}} \hat{u}\right) \quad (3.89)$$

Zu den Verfahren, die dieses Konzept einsetzen, gehört z.B. die Klasse der *localized adjoint methods (LAM)*. Durch die Einführung der zusätzlichen Dimension t in die Ansatz- und Wichtungsfunktionen wird die Auswertung der Integrale im Element aufwändiger.

Zum anderen kann die semidiskrete Methode oder Linienmethode (*method of lines (MOL)*) verwendet werden. Dabei wird die zu approximierende, orts- und zeitabhängige partielle Differentialgleichung mit Hilfe einer geeigneten räumlichen Diskretisierungsmethode in ein System gewöhnlicher Differentialgleichungen mit dem Unbekanntenvektor \hat{u} und seinen zeitlichen Ableitungen $\partial \hat{u} / \partial t$ überführt:

$$\frac{\partial \tilde{u}(\underline{x}, t)}{\partial t} = f\left(\frac{\partial \tilde{u}(\underline{x}, t)}{\partial \underline{x}}\right) \quad \rightsquigarrow \quad \frac{\partial \hat{u}(t)}{\partial t} = f(\hat{u}(t), t) \quad (3.90)$$

Anschließend wird eine Zeitintegration durchgeführt. Die entsprechenden Methoden lassen sich in Ein- und Mehr-Schritt-Verfahren unterteilen. Bei den Ein-Schritt-Verfahren werden zur Approximation der Zeitableitung nur die Werte des zurückliegenden Zeitschritts t^n und des aktuell zu berechnenden Zeitschritts t^{n+1} berücksichtigt. Zu diesen Verfahren zählen die Taylorreihen- und die Runge-Kutta-Methoden. Die Taylorreihenmethoden basieren auf einer Taylorreihenentwicklung der gesuchten Größe \hat{u} bis zum Grad p , mit dem das System gewöhnlicher Differentialgleichungen approximiert werden soll. Für den Grad $p = 1$ ergeben sich die Euler-Verfahren. Höhere Ansatzgrade sind nur dann sinnvoll, wenn sich die entsprechenden Ableitungen bilden lassen. Eine Möglichkeit, die Bestimmung der Ableitungen höherer Ordnung zu umgehen, bieten die Runge-Kutta-Methoden, die auf einer Linearkombination der rechten Seite von Glg. 3.90, ausgewertet für p verschiedene Werte $\hat{u}(t^m)$, $t^n \leq t^m \leq t^{n+1}$, beruhen. Der Rechenaufwand hängt von der gewählten Approximationsordnung ab.

Mehr-Schritt-Verfahren beziehen die Werte aller j zurückliegenden Zeitschritte t^{n-j} , $j \geq 0$, in die Bestimmung des aktuellen Zeitschritts t^{n+1} ein. Beispielfhaft werden hier die Adams-Bashforth- und Adams-Moulton-Schemata genannt, die die über $\Delta t = t^{n+1} - t^n$ zu integrierende Zeitableitung durch ein Polynom approximieren, das gegebenenfalls frühere Zeitebenen t^{n-j} berücksichtigt. Für $j > 0$ müssen die ersten Schritte in Zeitrichtung mit einem Ein-Schritt-Verfahren gelöst werden, bis genügend Werte zur Verfügung stehen, um ein Polynom der gewählten Ordnung bestimmen zu können. Eine Übersicht über verschiedene Methoden der Zeitintegration im Rahmen der Linienmethode einschließlich einer Diskussion ihrer Stabilitätseigenschaften ist u.a. HIRSCH (1988)[95] zu entnehmen, eine ausführliche Darstellung von Ein- und Mehr-Schritt-Verfahren findet sich in DEUFLHARD & BORNEMANN (2002)[54]. Das in Kap. 3.2.3 für die Finiten Volumen und in Kap. 3.3.4 für die Finiten Elemente vorgestellte Flux-Corrected Transport Verfahren kann nicht in die Linienmethode eingebunden werden, da es auf zwei Lösungen für einen einzelnen Zeitschritt beruht und in die zeitliche Integration eingreift. Die beiden im Rahmen des FCT-Schemas zur Anwendung kommenden Diskretisierungsverfahren können jedoch jeweils mit der Linienmethode approximiert werden (CIRPKA (1997)[40]).

In Abhängigkeit von der Zeitebene, die für die rechte Seite von Glg. 3.89 bzw. Glg. 3.90 gewählt wird, werden die instationären Berechnungsmethoden in explizite und implizite Verfahren unterschieden. Dies soll am Beispiel der Euler-Verfahren erläutert werden, die den Differentialquotienten in Glg. 3.90 durch einen Differenzenquotienten ersetzen. Im expliziten Fall wird die rechte Seite mit Hilfe der Zustandsgröße \hat{u}^n zum bekannten Zeitpunkt t^n ausgewertet:

$$\frac{\hat{u}^{n+1} - \hat{u}^n}{\Delta t} = f(\hat{u}^n) \quad (3.91)$$

Das Verfahren wird als explizites Euler- oder Euler-Prädiktor-Verfahren bezeichnet. Die Berechnung der Unbekannten \hat{u}^{n+1} zum neuen Zeitpunkt t^{n+1} ist verhältnismäßig einfach, da sie ausschließlich auf bekannten Größen der alten Zeitebene t^n beruht. Die Methode ist jedoch nur stabil für Courant-Zahlen $Cr \leq 1$ für den advektiven bzw. Neumann-Zahlen $Ne \leq 0.5$ für den dispersiven Transport (siehe Kap. 3.1), sodass die Zeitschrittwahl beschränkt ist. Eine Taylorreihenanalyse ergibt eine Konsistenz erster Ordnung in der Zeit und zeigt, dass ein antidiffusiver Fehler in die Lösung eingeführt wird. Wird die rechte Seite zum neuen Zeitpunkt t^{n+1} bestimmt, so spricht man von einem impliziten Euler- oder Euler-Korrektor-Verfahren:

$$\frac{\hat{u}^{n+1} - \hat{u}^n}{\Delta t} = f(\hat{u}^{n+1}) \quad (3.92)$$

Die Approximation weist ebenfalls eine Genauigkeit erster Ordnung in Zeitrichtung auf, der Fehler ist jedoch diffusiver Natur. Das Verfahren ist für beliebige Zeitschritte uneingeschränkt stabil. Allerdings sind die unbekanntenen Größen zum Zeitpunkt t^{n+1} untereinander verknüpft, da nun die rechte Seite ebenfalls für die neue Zeitebene entwickelt wird, sodass für jeden neuen Zeitschritt ein Gleichungssystem mit allen Freiheitsgraden gelöst werden muss. Eine Linearkombination beider Verfahren erfolgt durch Einführung eines Kollokationspunktes Θ in der Zeit:

$$\frac{\hat{u}^{n+1} - \hat{u}^n}{\Delta t} = (1 - \Theta) f(\hat{u}^n) + \Theta f(\hat{u}^{n+1}) \quad \text{mit } 0 \leq \Theta \leq 1 \quad (3.93)$$

Für $\Theta = 0$ ergibt sich der explizite, für $\Theta = 1$ der implizite Euler-Ansatz. $\Theta = 0.5$ erzeugt das Crank–Nicholson–Verfahren, das in Zeitrichtung von zweiter Ordnung genau ist. Für das explizite Euler–Verfahren existieren außerdem Ansätze wie das Lax–Wendroff–Verfahren oder das Taylor–Galerkin–Verfahren (Kap. 3.3.2), die durch Berücksichtigung zusätzlicher Fehlerterme eine Genauigkeit höherer Ordnung erreichen. Nach HIRSCH (1988)[95] ist der Algorithmus 3.93 für $\Theta \geq 0.5$ uneingeschränkt stabil für beliebige Zeitschritte, während für $\Theta < 0.5$ in Abhängigkeit von den Eigenschaften des betrachteten physikalischen Prozesses (parabolisch/hyperbolisch) und seiner Ortsdiskretisierung das Schema entweder instabil ist oder eine Zeitschrittrestriktion eingehalten werden muss, um ein stabiles Schema zu erhalten.

Um die Vorteile expliziter und impliziter Verfahren miteinander verbinden zu können, werden häufig Prädiktor–Korrektor–Schemata verwendet. Dabei wird in einem (expliziten) Prädiktor–Schritt eine Lösung \hat{u}_*^{n+1} ermittelt, die in das (ursprünglich implizite) Korrektor–Verfahren eingesetzt wird, um \hat{u}_{**}^{n+1} zu erhalten. Ist der Unterschied zwischen \hat{u}_*^{n+1} und \hat{u}_{**}^{n+1} zu groß, wird der Korrektor–Schritt mit \hat{u}_{**}^{n+1} ein weiteres Mal durchgeführt, ansonsten ist \hat{u}_{**}^{n+1} die Lösung des neuen Zeitschritts \hat{u}^{n+1} . Approximationsmethoden, die miteinander zu einem Predictor–Corrector–Schema verbunden werden, sind beispielsweise das Euler–Prädiktor– und das Euler–Korrektor–Verfahren oder das Adams–Bashforth– und das Adams–Moulton–Verfahren.

3.5 Resümee

In den vorhergehenden Abschnitten dieses Kapitels wurden eine Reihe von Euler–Verfahren aus dem Bereich der Finite–Volumen– und Finite–Elemente–Methoden vorgestellt, mit deren Hilfe eine Approximation der Differentialgleichungen für Strömung und Transport vorgenommen werden kann. Im Folgenden sollen die Vor– und Nachteile dieser Ansätze bezüglich ihrer Anwendung auf diskrete geklüftet–poröse Modellsysteme sowohl in der niederdimensionalen als auch in der äquidimensionalen Formulierung zusammenfassend diskutiert werden.

Die Strömungsgleichung ist elliptischer oder parabolischer Natur und damit aus numerischer Sicht zunächst relativ gutmütig. Da die Geschwindigkeitsverteilung jedoch ein sehr sensibler Parameter für die Transportsimulation ist, wird auf eine möglichst genaue Abbildung der Geschwindigkeit sowie auf eine lokale Flusserhaltung am Kluft–Matrix–Übergang Wert gelegt (siehe auch Kap. 1.4). In dieser Hinsicht geeignete Verfahren sind der zellenorientierte Finite–Volumen–Ansatz sowie die gemischten Finite–Elemente–Methoden, die eine über die Elementkante kontinuierliche Normalenkomponente der Geschwindigkeit erzeugen. Die zellenorientierten Finiten Volumen sind, wie in Kap. 3.2 ausgeführt, nicht leicht auf beliebig unstrukturierten Gittern einsetzbar und damit für die angestrebte diskrete Modellierung von Kluft–Matrix–Systemen keine Alternative. Es bleiben die gemischten Finiten Elemente, die eine gegenüber anderen vorgestellten Verfahren verbesserte Approximation der Geschwindigkeiten ermöglichen. Dabei wird für die Strömungssimulation im Rahmen der vorliegenden Arbeit speziell die hybride Form der gemischten FEM gewählt, die aufgrund ihrer symmetrischen und positiv–definiten Koeffizientenmatrix im Vergleich mit den rein gemischten Finiten Elementen einer größeren Anzahl von Lösungsverfahren zugänglich ist und mit weniger

Unbekannten arbeitet (s. Kap. 3.3.5). Zudem ermöglicht der gemischt–hybride Ansatz eine einfachere Beschreibung der Randbedingungen. Es wird im Hinblick auf die Untersuchungen von HOTEIT, ERHEL, MOSÉ, PHILIPPE & ACKERER (2001)[97] zunächst davon ausgegangen, dass die auftretenden Verzerrungen der Elementgeometrie und die Unterschiede in den Materialeigenschaften von Kluft und Matrix nicht so groß sind, als dass sie die Simulationsergebnisse beeinflussen können. Diese Annahme muss gegebenenfalls überprüft werden.

Da das gemischt–hybride Verfahren bei identischem Gitternetz eine deutlich höhere Anzahl von Unbekannten lösen muss (im \mathbb{R}^2 bei einer überwiegend aus Dreiecken bestehenden Triangulierung des Modellgebiets knapp dreimal so viele Unbekannte), wird alternativ das Boxverfahren für die Strömungssimulation verwendet, um zu untersuchen, ob der zusätzliche Aufwand, der durch die gemischt–hybride Formulierung entsteht, sinnvoll ist. Weiterhin wird das Boxverfahren eingesetzt, um die Geschwindigkeitsverteilung für niederdimensional diskretisierte Gebiete zu bestimmen. Eine Approximation der Strömung mit gemischten Finiten Elementen ist im niederdimensionalen Fall nicht möglich, da keine Komponente normal zur Kluft ermittelt werden kann, die eine Kopplung von Kluft und Matrix zulässt. Ein Vergleich mit den Ergebnissen einer Discontinuous–Galerkin–Diskretisierung der Strömung nach ODEN, BABUŠKA & BAUMANN (1998)[167] wird für ausgewählte Kluft–Matrix–Systeme in NEUNHÄUSERER, REICHENBERGER, GEBAUER & HELMIG (2002)[163] vorgestellt.

Für die Erfassung der advektiv–dispersiven Transportprozesse in geklüftet–porösen Medien wird grundsätzlich ein Verfahren gesucht, das steile Fronten bei geringstmöglicher numerischer Dispersion korrekt erhält, ohne dabei Oszillationen zu erzeugen. Charakteristischerweise muss das gesuchte Verfahren in der Lage sein, den Wechsel in den Transporteigenschaften zwischen Advektion und Dispersion bzw. im mathematischen Sinn zwischen hyperbolisch und parabolisch im Übergangsbereich von Kluft und Matrix zu erfassen und alle Zustände richtig wiederzugeben. Eine zusätzliche Herausforderung bilden die insbesondere für äquidimensional diskretisierte Gebiete stark unstrukturierter Gitter, die die Anwendung einer Reihe vielversprechender Ansätze erschweren oder ganz ausschließen. Die Anforderungen werden daher gewichtet, d.h., ein Verfahren soll in erster Linie monoton sein, da nur so physikalisch sinnvolle Ergebnisse gewährleistet sind (z.B. können durch numerische Oszillationen negative Konzentrationen entstehen), und in zweiter Linie soll das Verfahren eine möglichst geringe numerische Dispersion aufweisen. Natürlich kann die Approximation einer Front durch z.B. h–adaptive Ansätze verbessert werden, sodass Oszillationen günstigstenfalls eliminiert werden (z.B. BARLAG (1997)[9], OCHS, HINKELMANN, NEUNHÄUSERER, SÜSS, HELMIG, GEBAUER & KORNHUBER (2002)[166]). Um jedoch die Monotonie oder zumindest die Monotonieerhaltung einer Lösung zu gewährleisten, sollte bereits das Diskretisierungsverfahren selbst diese Eigenschaft aufweisen.

Aus der Gruppe der Finite–Volumen–Methoden bieten sich in diesem Zusammenhang die knotenzentrierten Finite–Volumen– oder Boxverfahren und der Flux–Corrected Transport Ansatz an. Slope–limiter–Verfahren mit TVD–Eigenschaften sind für unstrukturierte Gitter ausgesprochen ungünstig (Kap. 3.2.1), und die Anwendung von WENO–Schemata erfordert zur Zeit noch einen Aufwand, der in keinem Verhältnis zur gewonnenen Qualität der Ergebnisse steht (Kap. 3.2.2 und FARTHING & MILLER (2001)[60]).

Bezüglich der vorgestellten Finite-Elemente-Methoden bestehen umfangreiche Untersuchungen hinsichtlich ihrer Eigenschaften für ein- und zweidimensionale Gebiete mit (niederdimensionaler) und ohne diskrete Klüftung (z.B. CIRPKA (1996)[39], BARLAG (1997)[9]). Sowohl das Standard- als auch das Taylor-Galerkin-Verfahren erweisen sich für dominant advective Problemstellungen als ungeeignet, da sie relativ starke Oszillationen erzeugen. Das inkonsistente Petrov-Galerkin-Verfahren ist in Abhängigkeit von der numerischen Formulierung und der Definition des Upwinding-Parameters α im eindimensionalen Fall oszillationsfrei, führt im Gegenzug jedoch starke künstliche Diffusion ein. Bei mehrdimensionalen Problemen können bei Anwendung des inkonsistenten Petrov-Galerkin-Verfahrens Oszillationen im Bereich von Diskontinuitäten auftreten, das Verfahren ist dann nicht mehr monoton. Gute Ergebnisse können mit dem Streamline-Upwind Petrov-Galerkin-Verfahren erzielt werden, die Konzentrationsfronten weisen kaum numerische Diffusion auf, und die Oszillationen sind deutlich geringer als bei Standard- und Taylor-Galerkin-Verfahren. BARLAG (1997)[9] verbindet den SUPG-Ansatz mit einer h -adaptiven Diskretisierung. PAPASTAVROU (1998)[170] nimmt eine *Shock-Capturing*-Modifikation des SUPG-Verfahrens vor, um Über- und Unterschwinger zu vermeiden. Das Shock-Capturing überführt allerdings das ursprünglich lineare Problem in ein nichtlineares (Methoden, die monoton oder Monotonie erhaltend sind und gleichzeitig eine scharfe Frontapproximation liefern, sind nichtlinear, s. Kap. 3.2.1), das mit einer gegebenenfalls kostspieligen Iteration gelöst werden muss. Alternativ bietet sich hier wieder ein Flux-Corrected Transport Verfahren an, diesmal auf der Basis Finiter Elemente. Gemischte Finite Elemente werden bei der Transportmodellierung im Allgemeinen nur für den dispersiven Anteil eingesetzt und mit einem geeigneten Verfahren wie z.B. einem DG-Ansatz für den advektiven Anteil gekoppelt (z.B. SIEGEL, MOSÉ, ACKERER & JAFFRE (1997)[193]). Von den Discontinuous-Galerkin-Ansätzen ist zu erwarten, dass sie eine relativ gute Approximation der Transportgleichung liefern. Allerdings sind DG-Verfahren „nur“ TVBM (*total variation bounded in the means*, Kap. 3.3.6), d.h., es können in dominant advektiven Bereichen leichte Über- und Unterschwinger in der Lösung auftreten.

Zusammenfassend können das Boxverfahren, der Flux-Corrected Transport Ansatz sowie das von SIEGEL, MOSÉ, ACKERER & JAFFRE (1997)[193] vorgestellte gemischt-hybride/DG-Verfahren als monotone bzw. Monotonie erhaltende Methode zur Diskretisierung der Transportgleichung auf stark unstrukturierten Gittern verwendet werden. Gegebenenfalls ist auch ein Einsatz reiner DG-Verfahren eine Alternative, Untersuchungen hierüber stehen für die vorliegende Problemklasse diskreter Klüft-Matrix-Systeme noch aus. Neben der Güte der Ergebnisse spielt dabei auch die Effizienz der DG-Ansätze, die für höhere Approximationsgrade eine große Anzahl von Freiheitsgraden pro Element aufweisen, eine Rolle. Hier könnte sich die gute Parallelisierbarkeit der DG-Verfahren auch bei höheren Approximationsgraden als Vorteil erweisen. Die FCT-Verfahren sind rechentechnisch zeitintensiv, da jeder Zeitschritt mit zwei unterschiedlichen Diskretisierungsmethoden gerechnet und anschließend ein Abgleich vorgenommen werden muss. Der gemischt-hybride/DG-Ansatz arbeitet mit einer großen Anzahl Unbekannter und einer expliziten Zweischritt-Zeitdiskretisierung mit slope limiter. Aufgrund der expliziten Formulierung können jedoch viele Rechenschritte lokal durchgeführt werden, sodass an dieser Stelle keine Aussage über den Rechenaufwand des Verfahrens getroffen werden kann. Im Kontext dieser Arbeit wird daher ein Boxverfahren verwendet, um den grundsätzlichen Einfluss der äquidimensionalen Modellierung und der verbesserten

Geschwindigkeitsapproximation auf die Transportsimulation zu untersuchen. In Zeitrichtung wird ein implizites Euler-Verfahren verwendet. In Kap. 4.2 werden einige Möglichkeiten beschrieben, die mit dieser Raum-Zeit-Diskretisierung einhergehende numerische Dispersion zu begrenzen.

4 Verwendete numerische Verfahren

In Kap. 3 sind eine Reihe numerischer Diskretisierungsverfahren vorgestellt worden, von denen das gemischt-hybride Finite-Elemente-Verfahren sowie das knotenzentrierte Finite-Volumen- oder auch Boxverfahren ausgewählt wurden, um Strömungs- und Transportsimulationen an nieder- und äquidimensional formulierten Modellsystemen geklüftet-poröser Medien durchzuführen. An dieser Stelle sollen daher die beiden Verfahrensklassen noch einmal etwas detaillierter dargestellt und auf bestimmte Eigenschaften beispielsweise der Implementierung oder der Diskretisierung selbst eingegangen werden.

4.1 Gemischt-hybride Finite Elemente

Die Methode der gemischt-hybriden Finiten Elemente kann auf der Basis einer äquidimensionalen Diskretisierung für Kluft-Matrix-Systeme eingesetzt werden. Dies ermöglicht eine sehr gute Approximation des Geschwindigkeitsfelds und insbesondere die lokale Flusserhaltung am Kluft-Matrix-Interface, sodass die in Kap. 1.4 aufgeführten Anforderungen an die Strömungsmodellierung erfüllt werden. Auf einer niederdimensionalen Beschreibung des geklüfteten Gebiets ist der Einsatz gemischt-hybrider Finiten Elemente nicht möglich.

Der verwendete gemischt-hybride Ansatz basiert auf einer Implementierung von WIENERS (1997)[212] in die Software-Toolbox *UG* (Kap. 5.3.1 und BASTIAN, BIRKEN, JOHANNSEN, LANG, ECKSTEIN, NEUSS, RENTZ-REICHERT & WIENERS (1997)[11]). Anders als in Kap. 3.3.5 wird hier die zusätzliche unbekannte Größe \hat{u}_K auf der Elementkante als Lagrange-Multiplikator und Bedingung (4) aus Kap. 3.3.5 (Flussrandbedingung: $\hat{Q}_{K,i}^e = \hat{Q}_{N,i}^e$) als dritte Gleichung eingeführt. Gleichzeitig wird mit globalen Ansatzfunktionen der Form

$$\underline{N}_{F,UG} = \begin{bmatrix} 1 & 0 & x_{mk} & 0 \\ 0 & 1 & 0 & y_{mk} \end{bmatrix} \quad (4.1)$$

für Vierecke bzw.

$$\underline{N}_{F,UG} = \begin{bmatrix} 1 & 0 & x_{mk} \\ 0 & 1 & y_{mk} \end{bmatrix} \quad (4.2)$$

für Dreiecke mit (x_{mk}, y_{mk}) als globalen Koordinaten des jeweiligen Kantenmittelpunkts gearbeitet. Der Unbekanntenvektor $\hat{Q}_{K,UG}$ enthält bezogen auf ein Element die Komponenten der Geschwindigkeit am Knoten mit den elementlokalen Koordinaten $(0,0)$ sowie den Gradienten der Geschwindigkeit im Element. Das daraus resultierende gemischt-hybride Gleichungssystem lautet dann:

$$\underline{\underline{C}} \hat{\underline{\underline{Q}}}_{K,UG} - R = 0 \quad (4.3)$$

$$\underline{\underline{A}} \hat{\underline{\underline{Q}}}_{K,UG} - \underline{\underline{C}} \hat{u} + \underline{\underline{D}} \hat{u}_K = 0 \quad (4.4)$$

$$\underline{\underline{D}} \hat{\underline{\underline{Q}}}_{K,UG} = \hat{\underline{\underline{Q}}}_N \quad (4.5)$$

mit

$$\underline{\underline{A}} := \int_{\Omega} \underline{\underline{N}}_{F,UG} \underline{\underline{B}}^{-1} \underline{\underline{N}}_{F,UG} dV \quad (4.6)$$

$$\underline{\underline{C}} := \int_{\Omega} N_u \nabla \cdot (\underline{\underline{N}}_{F,UG}) dV \quad (4.7)$$

$$\underline{\underline{D}}_i := \int_{\Gamma_i} \underline{\underline{N}}_{F,UG} n_i N_u dA \quad \text{mit } i = 1, \dots, n_{ed} \quad (4.8)$$

$$\hat{\underline{\underline{Q}}}_{N,i} := \int_{\Gamma_i} N_u \hat{q}_{N,i} dA \quad \text{mit } i = 1, \dots, n_{ed} \quad (4.9)$$

$$R := \int_{\Omega} N_u r dV \quad (4.10)$$

Die Kantenflüsse $\hat{\underline{\underline{Q}}}_K$ berechnen sich analog zu Glg. 4.5 durch Multiplikation des Vektors $\hat{\underline{\underline{Q}}}_{K,UG}$ mit Matrix $\underline{\underline{D}}$. Da die gemischt-hybriden Finiten Elemente im Kontext dieser Arbeit zur Approximation des stationären Strömungsproblems verwendet werden, wird in Glg. 4.3 auf die Darstellung des zeitabhängigen Terms verzichtet. Bedingung (2) aus Kap. 3.3.5 (Kontinuität der Flüsse) wird durch Berücksichtigung der Matrix $\underline{\underline{D}}$ erzwungen. Die Matrixform der Glgn. 4.3 – 4.5 ergibt sich zu:

$$\begin{bmatrix} \underline{\underline{A}} & -\underline{\underline{C}} & \underline{\underline{D}} \\ -\underline{\underline{C}} & 0 & 0 \\ \underline{\underline{D}} & 0 & 0 \end{bmatrix} \begin{bmatrix} \hat{\underline{\underline{Q}}}_{K,UG} \\ \hat{u} \\ \hat{u}_K \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} 0 \\ -R \\ \hat{\underline{\underline{Q}}}_N \end{bmatrix} \quad (4.11)$$

Die Untermatrix

$$\underline{\underline{G}} = \begin{bmatrix} \underline{\underline{A}} & -\underline{\underline{C}} \\ -\underline{\underline{C}} & 0 \end{bmatrix} \quad (4.12)$$

ist eine Blockmatrix und invertierbar. Damit kann \hat{u}_K durch Konstruktion des Schurkomplementsystems bestimmt werden:

$$[\underline{\underline{D}} \ 0] \underline{\underline{G}}^{-1} \begin{bmatrix} \underline{\underline{D}} \\ 0 \end{bmatrix} \hat{u}_K = [\underline{\underline{D}} \ 0] \underline{\underline{G}}^{-1} \begin{bmatrix} 0 \\ -R \end{bmatrix} - \hat{\underline{\underline{Q}}}_N \quad (4.13)$$

Anschließend lassen sich mit $\zeta^* = \underline{\underline{C}} \underline{\underline{A}}^{-1} \underline{\underline{C}}$ die Elementwerte \hat{u} und die Kantenflüsse $\hat{\underline{\underline{Q}}}_K$ ermitteln:

$$\hat{u} = \frac{1}{\zeta^*} \underline{\underline{C}} \underline{\underline{A}}^{-1} \underline{\underline{D}} \hat{u}_K + \frac{1}{\zeta^*} R \quad (4.14)$$

$$\hat{\underline{\underline{Q}}}_K = \underline{\underline{D}} \left(\frac{1}{\zeta^*} \underline{\underline{A}}^{-1} \underline{\underline{C}} \underline{\underline{C}} \underline{\underline{A}}^{-1} - \underline{\underline{A}}^{-1} \right) \underline{\underline{D}} \hat{u}_K + \frac{1}{\zeta^*} \underline{\underline{A}}^{-1} \underline{\underline{C}} R. \quad (4.15)$$

4.2 Boxverfahren

Das in Kap. 3.2 vorgestellte Boxverfahren ist für die Approximation sowohl der Strömungs- als auch der Transportprozesse auf den unstrukturierten Gittern, die sich für beliebig geklüftete Systeme ergeben, geeignet, wobei die Klüfte nieder- oder äquidimensional formuliert sein können. Wird das Boxverfahren auf die Transportgleichung 2.24 angewendet und mit einem Fully Upwinding ($\alpha_{ij} = 1$) kombiniert, so ergibt sich ein monotones Schema erster Ordnung. Das Upwinding erzeugt einen diffusiven Fehler der Größe $\alpha_{ij} v_{a,x} \Delta x / 2$ im eindimensionalen Raum, der die Monotonie der Lösung advektiv dominierter Prozesse erhält und sie bei expliziter Zeitintegration stabilisiert. Eventuell vorhandene physikalische Dispersionseffekte, die ebenfalls stabilisierend wirken, bleiben dabei allerdings unberücksichtigt, sodass gegebenenfalls mehr numerische Dispersion in das System eingeführt wird als für eine Stabilisierung der Lösung notwendig. Gleichzeitig wird durch das Upwinding insbesondere auf unstrukturierten Gittern ein hohes Maß an numerischer Querdispersion eingetragen. Im Folgenden sollen daher zwei Ansätze zur Reduktion der künstlichen Dispersion näher untersucht werden.

4.2.1 Boxverfahren mit Streamline Upwinding

Die durch das Upwinding eingebrachte numerische Dispersion ist nur in Richtung des advektiven Massenflusses und damit der Stromlinien zur Stabilisierung notwendig. Bei mehrdimensionalen Problemen tritt durch das Upwinding entlang der Elementkanten auch eine künstliche Dispersion quer zur Strömungsrichtung auf (Querdiffusion oder *crosswind diffusion*), die nicht erwünscht ist. Um diese zu reduzieren, kann das Upwinding für das Boxverfahren entlang der Stromlinien durchgeführt werden (Abb. 4.1).

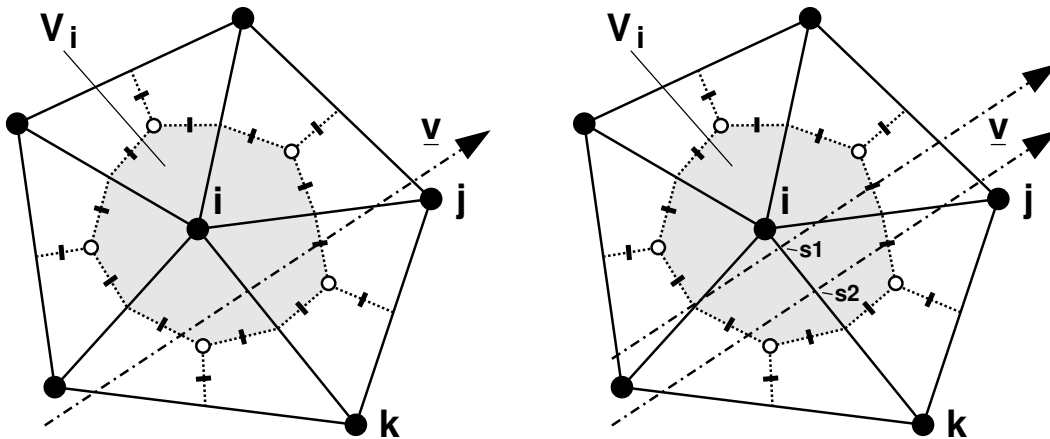


Abbildung 4.1: Patch am Knoten i mit Box V_i . Links: Klassisches Upwinding entlang der Elementkante. Rechts: Streamline Upwinding.

Die Konzentration für das Upwinding an den Integrationspunkten der Subkontrollvolumen (SCV)-Interfaces zwischen den Knoten i und j wird analog zu Glg. 3.24 bestimmt:

$$c = (1 - \alpha_{ij})c_{ij} + \alpha_{ij}c_{up} \quad \text{für } \underline{v}_{ij} > 0 \quad (4.16)$$

mit $\alpha_{ij} = 1$. Der zu verwendende oberstromige Konzentrationswert c_{up} wird in Anlehnung an ein *upwind scheme* erster Ordnung nach RAITHBY (1976)[176] linear zwischen den Knoten i und k interpoliert:

$$c_{up} = (1 - \tilde{\lambda})c_i + \tilde{\lambda}c_k \quad \text{mit} \quad \tilde{\lambda} = \min(1, \lambda) \quad (4.17)$$

$\lambda \leq 1$ stellt das Verhältnis des Abstandes zwischen Knoten i und Schnittpunkt s_1 bzw. s_2 zur Kantenlänge L_{ik} dar (Abb. 4.1, rechts). Wichtig ist, dass s_1 nicht zwischen den Knoten i und j interpoliert wird. In diesem Fall würde es sich nicht mehr um eine Oberstromwichtung handeln. Das *Streamline - Upwind Boxverfahren* ermittelt für ein kartesisches Quadratgitter mit $Cr = (v_a \Delta t) / \Delta x = 1$ die exakte Lösung nicht nur bei Strömung entlang der Elementkanten, sondern auch unter 45° (HIRSCH (1990)[96]). Unter den gleichen Voraussetzungen wird auch die exakte Lösung für ein regelmäßiges Dreiecksgitter (Abb. 4.2) bestimmt, wenn die Stromlinie parallel zu einer Kante des Patches verläuft. In beiden Fällen erzeugt ein Upwinding entlang der Elementkanten ein deutliches Maß an künstlicher Diffusion.

Das Streamline Upwinding bietet neben der Verringerung der Querdiffusion den weiteren Vorteil, dass sich das Upwinding entlang der Stromlinie quasi-eindimensional in Abhängigkeit vom Verhältnis von Advektion und Diffusion durchführen lässt und so das notwendige Maß an künstlicher Längsdiffusion besser bestimmt werden kann (s. auch Kap. 4.2.2).

Die Anwendung des Verfahrens kann jedoch bereits auf strukturierten Gittern, die kein Rechteckraster aufweisen, zu Oszillationen in der Lösung führen. Dazu sei als Beispiel ein Patch aus regelmäßigen gleichseitigen Dreiecken um den Knoten 0 gegeben (Abb. 4.2). Untersucht wird der rein advective Transport.

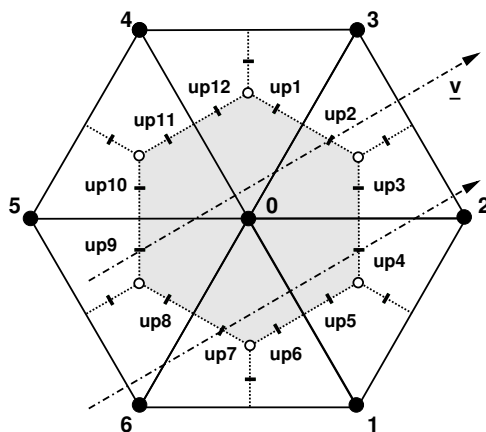


Abbildung 4.2: Patch am Knoten 0, Strömung unter 30°

Die Strömungsrichtung in dem zugehörigen Gebiet sei mit 30° zur Polarachse vorgegeben. Die Konzentration am Knoten 1 sei $c_1 = 1.0[-]$, an den anderen Knoten $c_i = 0.0[-]$ mit $i = 0, 2, 3, 4, 5, 6$. Dann lässt sich die Bilanz für die Box um den Knoten 0 aufstellen:

$$\frac{\partial c_0}{\partial t} = - \frac{1}{V_0 n_e} \sum_{m=1}^{12} Q_m c_{up,m} \quad (4.18)$$

wobei m für die Anzahl der Subkontrollvolumen–Interfaces steht, für die ein Massenfluss bestimmt wird. Für das vorliegenden Beispiel werden die Massenflüsse über die SCV–Interfaces zwischen den Knoten 1 und 0 sowie zwischen den Knoten 4 und 0 zu Null, da die Strömung parallel zu diesen Kanten verläuft, die entsprechenden Werte $c_{up,5}$, $c_{up,6}$, $c_{up,11}$ und $c_{up,12}$ werden daher hier nicht bestimmt. Die oberstromigen Konzentrationswerte zwischen den Knoten 3 und 0 sowie 2 und 0 ergeben sich im Uhrzeigersinn unter der Berücksichtigung der zugrundeliegenden Geometrie, d.h. von $\tilde{\lambda}$, zu:

$$\begin{aligned} c_{up,1} &= \frac{5}{8}c_0 + \frac{3}{8}c_4 \\ c_{up,2} &= \frac{7}{8}c_0 + \frac{1}{8}c_4 \\ c_{up,3} &= \frac{7}{8}c_0 + \frac{1}{8}c_1 \\ c_{up,4} &= \frac{5}{8}c_0 + \frac{3}{8}c_1 \end{aligned} \quad (4.19)$$

und zwischen den Knoten 6 und 0 sowie 5 und 0 zu:

$$\begin{aligned} c_{up,7} &= \frac{7}{8}c_5 + \frac{1}{8}c_6 \\ c_{up,8} &= \frac{5}{8}c_5 + \frac{3}{8}c_6 \\ c_{up,9} &= \frac{5}{8}c_6 + \frac{3}{8}c_5 \\ c_{up,10} &= \frac{7}{8}c_6 + \frac{1}{8}c_5 \end{aligned} \quad (4.20)$$

Weiterhin gilt hier:

$$\begin{aligned} Q_1 &= Q_2 = Q_3 = Q_4 = Q_{SCVF} \\ Q_7 &= Q_8 = Q_9 = Q_{10} = -Q_{SCVF} \\ Q_5 &= Q_6 = Q_{11} = Q_{12} = 0 \end{aligned} \quad (4.21)$$

Mit den Glgn. 4.19 – Glg. 4.21 kann Glg. 4.18 umgeschrieben werden in:

$$\frac{\partial c_0}{\partial t} = \frac{Q_{SCVF}}{V_0 n_e} \left(2c_5 + 2c_6 - 3c_0 - \frac{1}{2}c_1 - \frac{1}{2}c_4 \right) \quad (4.22)$$

Aus Glg. 4.22 wird ersichtlich, dass durch die eingeführte Interpolation neben dem Wert c_0^n die Werte der Knoten 1, 4, 5 und 6 in die Berechnung des Wertes c_0^{n+1} eingehen. c_5 und c_6 haben ein positives, c_1 und c_4 ein negatives Vorzeichen. Mit der oben beschriebenen Anfangsverteilung ergibt sich daher bei Betrachtung des rein advektiven Transports im nächsten Zeitschritt für den Knoten 0 eine negative Konzentration c_0 . Ein analoges Vorgehen für das klassische Boxverfahren mit Fully Upwinding entlang der Elementkanten zeigt, dass dabei neben dem Wert c_0 nur die Werte c_5 und c_6 verwendet werden, und zwar mit positivem Vorzeichen, sodass keine negativen Werte für c_0 auftreten können.

4.2.2 Boxverfahren mit Streamline Orientation

Alternativ dazu kann ein anderer Ansatz verfolgt werden, um die Querdiffusion zu verringern. Der Upwinding-Parameter α_0 , der entlang der Stromlinie definiert ist, wird auf die Richtung des lokalen Flusses über das Interface zwischen den Subkontrollvolumen bzw. bei Dreiecken auf die Parallele zu der Elementkante, die die zum Subkontrollvolumen gehörigen Knoten miteinander verbindet, projiziert (Abb. 4.3).

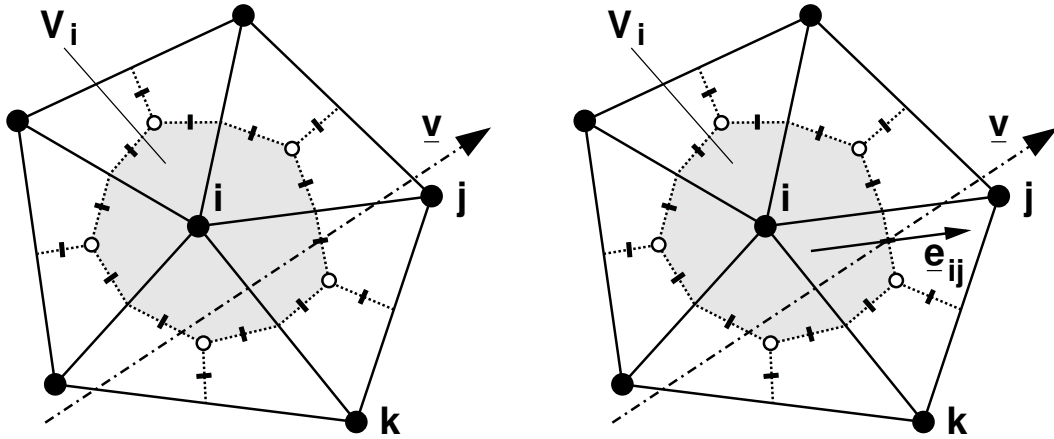


Abbildung 4.3: Patch am Knoten i mit Box V_i . Links: Klassisches Upwinding. Rechts: Projektion von α_0 , das in Richtung von \underline{v}_{ij} definiert ist, auf \underline{e}_{ij} .

Das Upwinding selbst wird weiterhin entlang der Elementkante durchgeführt:

$$c = (1 - \alpha_{ij})c_{ij} + \alpha_{ij}c_i \quad \text{für } \underline{v}_{ij} > 0 \quad (4.23)$$

Die Projektion von α_0 auf die Richtung des lokalen Flusses über den Rand des Subkontrollvolumen-Interfaces mit Hilfe des Vektors \underline{e}_{ij} liefert den gesuchten Upwinding-Parameter α_{ij} :

$$\alpha_{ij} = \alpha_0 \frac{\underline{v}_{ij}}{|\underline{v}_{ij}|} \underline{e}_{ij} \quad (4.24)$$

Um den Eintrag künstlicher Längsdiffusion zu optimieren, wird statt eines Fully Upwinding mit $\alpha_0 = 1$ eine Bestimmung von α_0 in Abhängigkeit des lokalen Prozessverhaltens durchgeführt. Eine Überschätzung des Upwinding-Parameters führt zu einem überhöhten Eintrag künstlicher Diffusion und damit zu einem Verschmieren der Front, während bei einer Unterschätzung Instabilitäten der Lösung gegebenenfalls nicht ausgeglichen werden können. Im eindimensionalen Fall entspricht das Boxverfahren mit Upwinding dem in Kap. 3.3.3 beschriebenen inkonsistenten Petrov-Galerkin-Verfahren. Für eindimensionale, stationäre Probleme kann α_0 daher mit Glg. 3.57 so bestimmt werden, dass es auf eine am Knoten exakte Lösung führt:

$$\alpha_0 = \coth\left(\frac{Pe}{2}\right) - \frac{2}{Pe} \approx \sqrt{\frac{Pe^2}{36 + Pe^2}} \quad (4.25)$$

Da eine Erweiterung auf mehrdimensionale, transiente Problemstellungen nicht auf direktem Wege möglich ist, wird die ebenfalls bereits in Kap. 3.3.3 erläuterte, von NOORISHAD, TSANG, PERROCHET & MUSY (1992)[164] auf der Basis einer Taylorreihenanalyse ursprünglich für ein Crank–Nicholson Galerkin–Verfahren definierte Beziehung für die Berechnung von α_0 auf das hier verwendete implizite Boxverfahren übertragen:

$$\alpha_0 = \begin{cases} 0 & \text{für } Cr \cdot Pe \leq 2 \\ Cr - 2/Pe & \text{für } Cr \cdot Pe > 2 \end{cases} \quad (4.26)$$

Im Gegensatz zum Streamline Upwinding in Kap. 4.2.1, bei dem eine quasi–eindimensionale Betrachtung möglich gewesen wäre, stellt sich hier die Frage nach der Definition von Courant– und Peclet–Zahl im mehrdimensionalen Raum. PAPASTAVROU (1998)[170] gibt eine Übersicht über mögliche Ansätze zur Bestimmung der charakteristischen Länge h^e . Im Folgenden wird eine Definition nach CIRPKA (1996)[39] verwendet, die auf der Transformation von Geschwindigkeit und Dispersionstensor in lokale Koordinaten beruht:

$$Cr = |\underline{v}_{loc}| \cdot \Delta t \quad (4.27)$$

$$Pe = |\underline{v}_{loc}| / \delta_{loc} \quad (4.28)$$

δ_{loc} stellt die skalare Form des lokalen Dispersionstensors dar, die aus der Projektion desselben auf die Richtung der lokalen Geschwindigkeit resultiert:

$$\delta_{loc} = \underline{e}_{vloc} \underline{\underline{D}}_{loc} \underline{e}_{vloc} \quad \text{mit} \quad \underline{e}_{vloc} = \underline{v}_{loc} / |\underline{v}_{loc}| \quad (4.29)$$

Lokale Geschwindigkeit und lokaler Dispersionstensor ergeben sich durch Multiplikation der Globalwerte mit der Jacobi–Matrix:

$$\underline{v}_{loc} = \underline{\underline{J}}^{-1} \underline{v}_a \quad (4.30)$$

$$\underline{\underline{D}}_{loc} = \underline{\underline{J}}^{-1} \underline{\underline{D}} \underline{\underline{J}}^{-1} \quad (4.31)$$

Eine Konsistenzanalyse zeigt, dass das von NOORISHAD, TSANG, PERROCHET & MUSY (1992)[164] beschriebene Verfahren für strukturierte Gitter in Bereichen dominierender Dispersion ($Cr \cdot Pe \leq 2$) eine Genauigkeit von zweiter Ordnung in Zeit und Raum erreicht. In Bereichen mit starker Advektion ist es in Zeitrichtung von zweiter Ordnung, in Ortsrichtung von erster Ordnung genau. Für die hier vorliegenden unstrukturierten Gitter kann eine solche Klassifikation nicht mehr in dieser Eindeutigkeit vorgenommen werden. Hinzu kommt, dass die nach Gleichung (4.27) bzw. (4.28) für den mehrdimensionalen Fall ermittelten Courant– und Peclet–Zahlen nur eine Approximation der tatsächlichen Werte darstellen können. Die mit Gleichung (4.26) ermittelte Lösung wird daher instabil. Wird in Zeitrichtung statt eines Crank–Nicholson–Verfahrens eine voll implizite Finite–Differenzen–Approximation eingesetzt, so ergibt sich für strukturierte Gitter ein Verfahren, das für $Cr \cdot Pe \leq 2$ in der Zeit von zweiter Ordnung und im Raum von erster Ordnung genau ist, für stark advective Bereiche hingegen von erster Ordnung genau in Zeit und Raum. Gegenüber dem Verfahren von NOORISHAD, TSANG, PERROCHET & MUSY (1992)[164] wird hier zusätzlich künstliche Diffusion eingeführt (im eindimensionalen Fall der Größe $v_{ax}^2 \Delta t / 2$), die das Verfahren für einen großen Bereich

von Courant- und Peclet-Zahlen stabil hält. Durch die Wahl des Upwinding-Parameters α_0 in Abhängigkeit von Courant- und Peclet-Zahl verhält sich das vorgestellte Verfahren prozessadaptiv und ist von größerer Genauigkeit als das Boxverfahren mit klassischem Upwinding.

Wird analog zu dem Beispiel in Kap. 4.2.1 die Bilanz für einen Knoten 0 in einem Patch regelmäßiger gleichseitiger Dreiecke (Abb. 4.2) aufgestellt, so ergibt sich bei reiner Advektion und dem Grenzfall $\alpha_{ij} = 0$:

$$\frac{\partial c_0}{\partial t} = \frac{Q_{SCVF}}{V_0 n_e} (c_5 + c_6 - c_2 - c_3) \quad (4.32)$$

Ist mindestens einer der Konzentrationswerte an den Knoten 2 und 3 größer Null, während die anderen Werte Null sind, so ergibt sich auch hier für c_0 im nächsten Zeitschritt ein negativer Konzentrationswert. Im vorliegenden Fall ist die Annahme von $\alpha_{ij} = 0$ etwas scharf, sie zeigt jedoch die Problematik auf. Nach Glg. 4.26 wird sich für α_0 bei reiner Advektion immer ein Wert größer Null ergeben, bei advektiv-dispersiven Prozessen in Abhängigkeit von der vorhandenen physikalischen Dispersion ebenfalls. Problematisch ist hier wie auch schon in Kap. 4.2.1 die Orientierung an der Stromlinie. In Abhängigkeit vom Verlauf der Stromlinie zur Elementkante kann sich nach Glg. 4.24 auch bei reiner Advektion $\alpha_{ij} = 0$ bzw. $\alpha_{ij} < 1$ ergeben, sodass die Monotonie der Konzentrationsverteilung nicht zwingend erhalten bleibt.

Grundsätzlich können auch im Zusammenhang mit dem dispersiven Transport Monotonieprobleme auftreten. Werden bei voll besetzten Dispersionstensenoren im $\mathbb{R}^n, n \geq 2$, die Nebendiagonaleinträge berücksichtigt (9-Punkt-Differentiation), so können sich im Bereich von Diskontinuitäten negative Konzentrationswerte ergeben. Ein absolut monotones Verfahren ist daher erst mit einer 5-Punkt-Differentiation gegeben. Dies führt jedoch auf eine starke künstliche Querdiffusion (CIRPKA (1997)[40]).

Im Weiteren wird zur Approximation der Transportgleichung das Boxverfahren in Verbindung mit der Beziehung 4.26 zur Bestimmung von α_0 und in geeigneten Fällen mit Stromlinienorientierung gemäß Glg. 4.24 herangezogen. Prinzipiell kann α_0 auch für das Boxverfahren mit Streamline Upwinding nach Glg. 4.26 bestimmt und in Glg. 4.16 mit $\alpha_{ij} = \alpha_0$ eingesetzt werden, sodass sich auch hier in Bereichen dominierender Dispersion ein genaueres Verfahren ergibt. Bezüglich der Definition der Peclet- und Courant-Zahl ist diese Vorgehensweise, wie bereits beschrieben, sogar vorteilhaft. Allerdings ist es in Abhängigkeit von der Geometrie und dem Verlauf der Stromlinien möglich, dass zur Bestimmung des oberstromigen Konzentrationswertes c_{up} nach Glg. 4.17 an einem Integrationspunkt nicht nur die Werte des zum Integrationspunkt gehörigen Elements, sondern auch des Nachbarelements bekannt sein müssen (z.B. Abb. 4.1, rechts, Schnittpunkt s1). Dies kann sich als ungünstig erweisen für eine spätere Parallelisierung und insbesondere auch im Hinblick auf die in Kap. 1.4 angesprochene hierarchische Zerlegung in ein Kluft- und ein Matrix-Problem, wenn eine äquidimensionale Diskretisierung des zu untersuchenden Kluft-Matrix-Systems vorgenommen wird.

Nachfolgend soll das Lösungsverhalten des verwendeten Boxverfahrens mit *Streamline Orientation* hinsichtlich der damit eingetragenen numerischen Dispersion an einfachen,

ungeklüfteten Beispielen verdeutlicht werden. Die Approximationseigenschaften des Verfahrens bei Anwendung auf geklüftete Systeme werden in Kap. 6 diskutiert. Der Einfluss des Upwinding auf den Frontverlauf lässt sich an einem eindimensionalen Modellproblem für den advektiv–dispersiven Transport demonstrieren, dem *Heaviside*–Problem. Dabei wird einem System mit konstanter Anfangsbedingung für die Konzentration ein kontinuierlicher Massenfluss mit ebenfalls konstanter Konzentration zugeführt. Für das Heaviside–Problem existiert eine analytische Lösung (OGATA & BANKS (1962)[168]). Im vorliegenden Fall (Abb. 4.4) wird die Anfangsbedingung $c(t = 0)$ im gesamten Gebiet zu Null gesetzt. Es wird ein Fluss von links nach rechts vorgegeben, die Konzentration am Zuflussrand sei aber ebenfalls Null. Stattdessen wird in einem Punkt x_{cin} im Gebiet über den gesamten Simulationszeitraum eine konstante Konzentration c_{in} angesetzt. Auf diese Weise ergibt sich unterstrom von x_{cin} ein Heaviside–Problem, während oberstrom das Verhalten des zur Anwendung kommenden Diskretisierungsverfahrens im Bereich von Diskontinuitäten überprüft werden kann. Die oberstromige Lösung konvergiert gegen die analytische Lösung in Glg. 3.6 der eindimensionalen stationären Advektions–Dispersions–Gleichung (CIRPKA (1996) [39]). Die Modellparameter für das Beispiel in Abb. 4.4 sind Tab. 4.1 zu entnehmen.

| | | | |
|------------|--------------|---|---|
| Geometrie | $L = 6.0[m]$ | $\Delta x = 1.5625 \cdot 10^{-2}[m]$ | $x_{cin} = 0.25[m]$ |
| Strömung | Parameter | $k_0 = 1.3 \cdot 10^{-10}[m^2]$ | $\eta = 0.0013[kg/(ms)]$ |
| | Randbdg. | $p(x = 0.0[m]) = 1.0 \cdot 10^5[Pa]$ | $p(x = 6.0[m]) = 0.994 \cdot 10^5[Pa]$ |
| Transport | Parameter | $n_e = 0.2[-]$ | $D_m = 1.0 \cdot 10^{-19}[m^2/s]$ |
| | | a) $\alpha_l = 1.5625 \cdot 10^{-4}[m]$ | b) $\alpha_l = 1.5625 \cdot 10^{-2}[m]$ |
| | Zeitschritt | $\Delta t = 312.5[s]$ | |
| | Anfangsbdg. | $c(x, t = 0[s]) = 0.0[kg/m^3]$ | |
| | Randbdg. | $c(x = 0.0[m], t) = 0.0[kg/m^3]$ | $c(x = 6.0[m], t) = \text{frei}$ |
| | Zugabe | $c_{in}(x_{cin}, t) = 1.0[kg/m^3]$ | |
| Kennzahlen | $Cr = 1$ | a) $Pe = 100$ | b) $Pe = 1$ |

Tabelle 4.1: Modellparameter für das eindimensionale Modellproblem

Das eindimensionale Modellproblem wurde bei einer konstanten Courant–Zahl von $Cr = 1$ für zwei unterschiedliche Konfigurationen approximiert, für den dominant advektiven Transport mit $Pe = 100$ und für den dominant dispersiven Transport mit $Pe = 1$. Abb. 4.4 zeigt die Ergebnisse für zwei Box–Schemata im Vergleich mit der analytischen Lösung, links für $Pe = 100$ und rechts für $Pe = 1$. Bei dominant advektiven Transport sind die Konzentrationsprofile für beide Varianten des Boxverfahrens identisch, da sich auch für α_0 gemäß Glg. 4.26 ein Fully Upwinding ergibt. Gleichzeitig wird durch die Gegenüberstellung von analytischer und numerischer Lösung deutlich, wie groß der Eintrag numerischer Dispersion ist, der das Schema stabil hält. Die Konzentrationsprofile für den dominant dispersiven Transport zeigen Unterschiede bei den numerischen Ergebnissen. Aufgrund der physikalischen Dispersion wird beim stromlinienorientierten Boxverfahren kein Upwinding durchgeführt, was sich in der im Vergleich mit der analytischen Lösung verbesserten Approximation widerspiegelt.

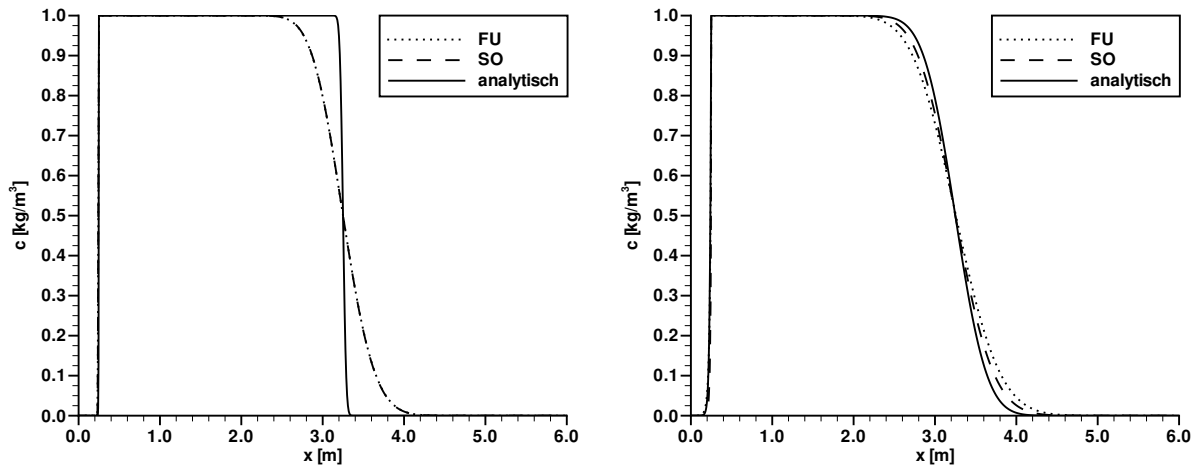


Abbildung 4.4: Konzentrationsverteilung im Modellgebiet nach 60000[s], bestimmt mit analytischer Lösung, Boxverfahren mit Fully Upwinding (FU) und Boxverfahren mit Streamline Orientation (SO). Links: $Pe = 100$. Rechts: $Pe = 1$.

Der Einfluss der prozessadaptiven Wahl von α_0 und der Stromlinienorientierung selbst in Abhängigkeit von der Vernetzung des Modellgebiets wird an einem zweidimensionalen Beispiel dargestellt. Die entsprechenden Parameter sind in Tab. 4.2 gegeben, Abb. 4.5 zeigt das Modellgebiet, links mit Dreiecken, rechts mit Vierecken vernetzt, und bezogen auf das Grobgitter bereits einmal verfeinert. Die Simulationen selbst wurden auf Gitterlevel vier durchgeführt. Die Strömung verläuft parallel zur x -Achse von links nach rechts, die Anfangsbedingung für die Konzentration ist im gesamten Gebiet Null, ebenso die Konzentration am Zuflussrand, es wird ein freier Ausflussrand angesetzt, und analog zum eindimensionalen Modell wird an der Stelle (x_{cin}, y_{cin}) eine über die Zeit konstante Konzentration als Punktquelle vorgegeben.

| | | | |
|------------|----------------------|---|---|
| Geometrie | $A = 1.0[m^2]$ | $\Delta x = \Delta y = 1.5625 \cdot 10^{-2}[m]$ | $x_{cin} = 0.25[m], y_{cin} = 0.5[m]$ |
| Strömung | Parameter | $k_{0xx} = k_{0yy} = 1.3 \cdot 10^{-10}[m^2]$ | $\eta = 0.0013[kg/(ms)]$ |
| | Randbdg. | $p(x = 0.0[m], y) = 1.0 \cdot 10^5[Pa]$ | $p(x = 1.0[m], y) = 0.999 \cdot 10^5[Pa]$ |
| Transport | Parameter | $n_e = 0.2[-]$ | $D_m = 1.0 \cdot 10^{-19}[m^2/s]$ |
| | | a) $\alpha_l = 1.5625 \cdot 10^{-4}[m]$ | $\alpha_t = 1.5625 \cdot 10^{-5}[m]$ |
| | | b) $\alpha_l = 1.5625 \cdot 10^{-2}[m]$ | $\alpha_t = 1.5625 \cdot 10^{-3}[m]$ |
| | Zeitschritt | $\Delta t = 312.5[s]$ | |
| | Anfangsbdg. | $c(x, y, t = 0[s]) = 0.0[kg/m^3]$ | |
| | Randbdg. | $c(x = 0.0[m], y, t) = 0.0[kg/m^3]$ $c(x = 1.0[m], y, t) = \text{frei}$ | |
| | Zugabe | $c_{in}(x_{cin}, y_{cin}, t) = 1.0[kg/m^3]$ | |
| Kennzahlen | $Cr = 1 \dots 1.414$ | a) $Pe = 68.986 \dots 100$ | b) $Pe = 0.6899 \dots 1$ (Dreiecke) |
| | $Cr = 1$ | a) $Pe = 100$ | b) $Pe = 1$ (Vierecke) |

Tabelle 4.2: Modellparameter für das zweidimensionale Modellproblem

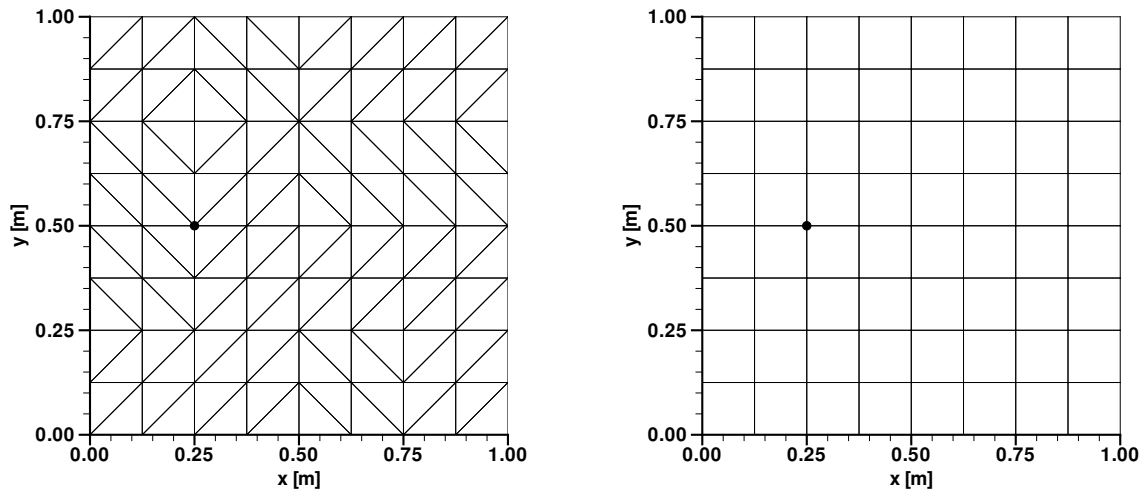


Abbildung 4.5: Modellgebiet mit Vernetzung, Punktquelle. Links: Dreiecke. Rechts: Vierecke.

Abb. 4.6 und Abb. 4.7 zeigen die Resultate für die verschiedenen Upwinding-Strategien auf dem Dreiecksnetz für dominant dispersiven Transport. Ausgehend von der konstant auf $c_{in} = 1.0[\text{kg}/\text{m}^3]$ gehaltenen Punktquelle setzt sowohl Längs- als auch Querdiffusion ein, was zu einem starken Abflachen der Fahne führt. Wird der höchste Punkt der Konzentrationsverteilung c_{top} am Ausstromrand bei $(x = 1.0[\text{m}], y = 0.5[\text{m}])$ betrachtet, so ergeben sich für das Fully Upwinding sehr flache Flanken und der niedrigste Wert c_{top} , für das Fully Upwinding mit reiner Stromlinienorientierung aufgrund der Reduzierung der Querdiffusion deutlich steilere Flanken und ein etwas höherer Wert c_{top} (Abb. 4.6). Wird α_0 in Abhängigkeit von Courant- und Peclet-Zahl bestimmt, so wird die Querdiffusion weiter verringert und c_{top} noch größer (Abb. 4.7). In diesem Fall zeigt eine zusätzliche Stromlinienorientierung keine Wirkung, da die vorhandene physikalische Dispersion ein Upwinding überflüssig macht ($\alpha_0 = 0$).

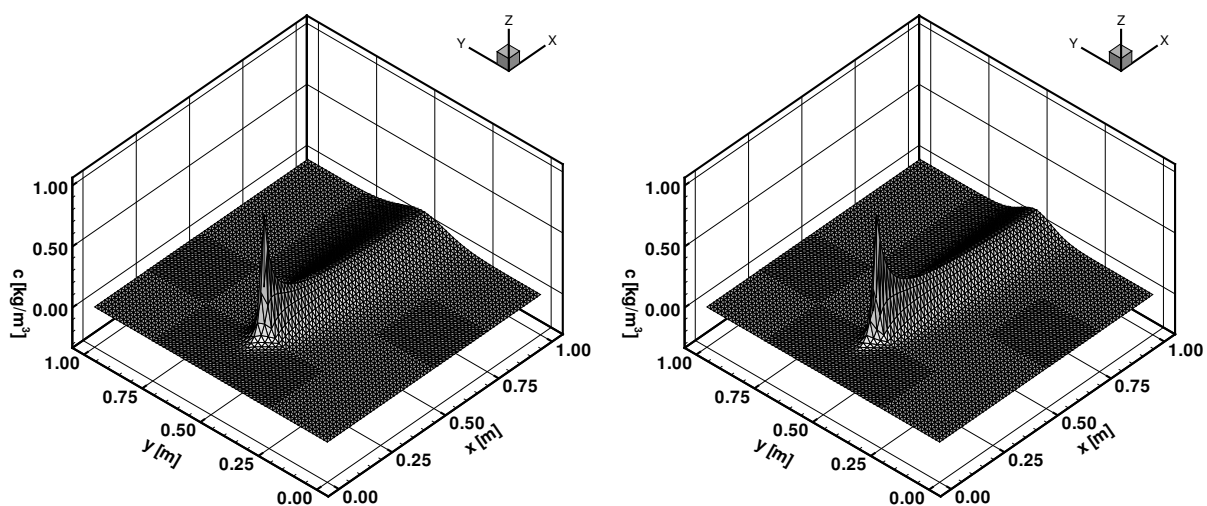


Abbildung 4.6: Dreiecksnetz, $Pe = 0.6899\dots 1$. Links: Fully Upwinding. Rechts: Mit Stromlinienorientierung.

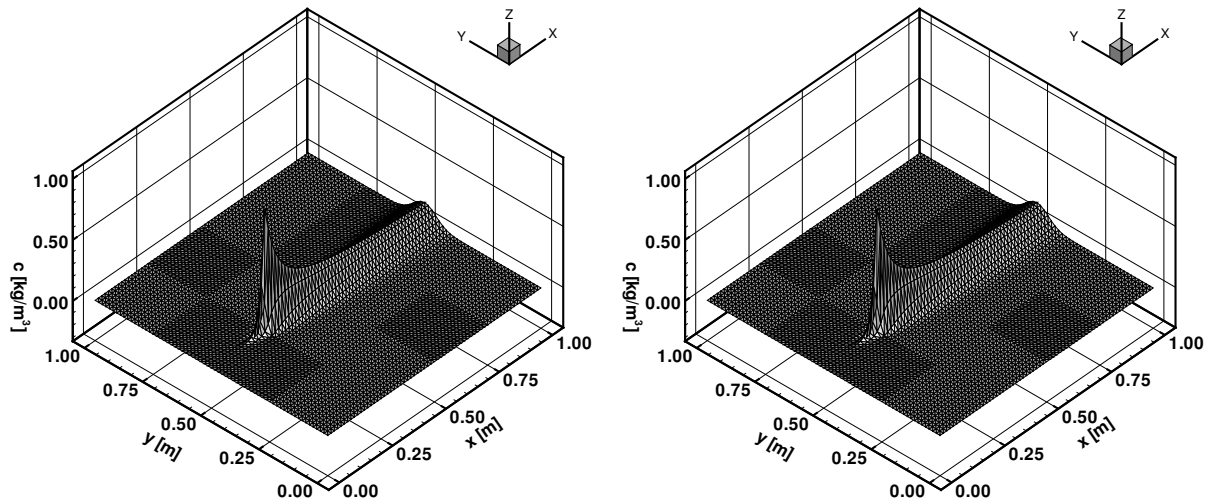


Abbildung 4.7: Dreiecksnetz, $Pe = 0.6899\dots 1$. Links: Prozessadaptives α_0 . Rechts: Prozessadaptives α_0 und Stromlinienorientierung.

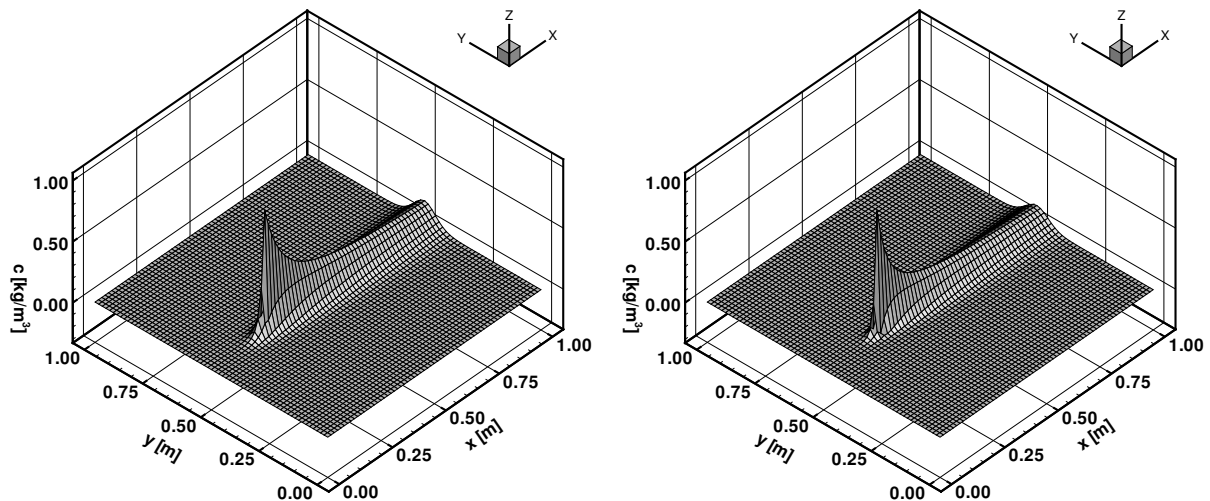


Abbildung 4.8: Vierecksnetz, $Pe = 1$. Links: Fully Upwinding. Rechts: Prozessadaptives α_0 .

Zum Vergleich werden die entsprechenden Ergebnisse auf dem Quadratrasternetz für dominant dispersiven Transport herangezogen (Abb. 4.8). Da hier die Stromlinien immer parallel zu den Elementkanten verlaufen, hat eine Stromlinienorientierung keinen Einfluss auf das Upwinding. Es zeigt sich, dass die steilsten Flanken und der größte Wert für c_{top} durch ein Fully Upwinding ermittelt werden. In diesem Fall wird durch die Advektion keine künstliche Querdiffusion erzeugt, sodass nur der dispersive Anteil für die Ausrundung der seitlichen Flanken der Konzentrationsfahne verantwortlich ist. Wird α_0 aufgrund der vorhandenen physikalischen Dispersion zu Null gesetzt, so wird der Konzentrationswert, der in den advektiven Fluss eingeht, an den Integrationspunkten im Element aus den vier Knotenwerten gemittelt, sodass darüber ein Teil der Masse quer zur Strömung transportiert wird. Dieser Effekt kann vermieden werden, indem die Integrationspunkte auf die Seitenmittelpunkte der

Elementkanten verschoben werden, da dann nicht mehr alle Knotenwerte in die Mittelung eingehen. Dies ist jedoch nicht notwendig, da für den Sonderfall der kantenparallelen Strömung in einem Rasternetz bereits das Fully Upwinding gute Ergebnisse liefert.

Wird ein advektiv dominierter Transport auf dem Dreiecksnetz gerechnet, so unterliegen die Resultate einer starken Querdiffusion, die fast ausschließlich numerischer Natur ist (Abb. 4.9) und durch das Upwinding entlang nicht-stromlinienparalleler Kanten hervorgerufen wird. Eine Stromlinienorientierung kann die Querdiffusion etwas reduzieren, führt jedoch Oszillationen oberstrom der Punktquelle für die Konzentration ein. Die prozessadaptive Bestimmung von α_0 hat aufgrund der hohen Peclet-Zahl nur einen ganz geringen Einfluss.

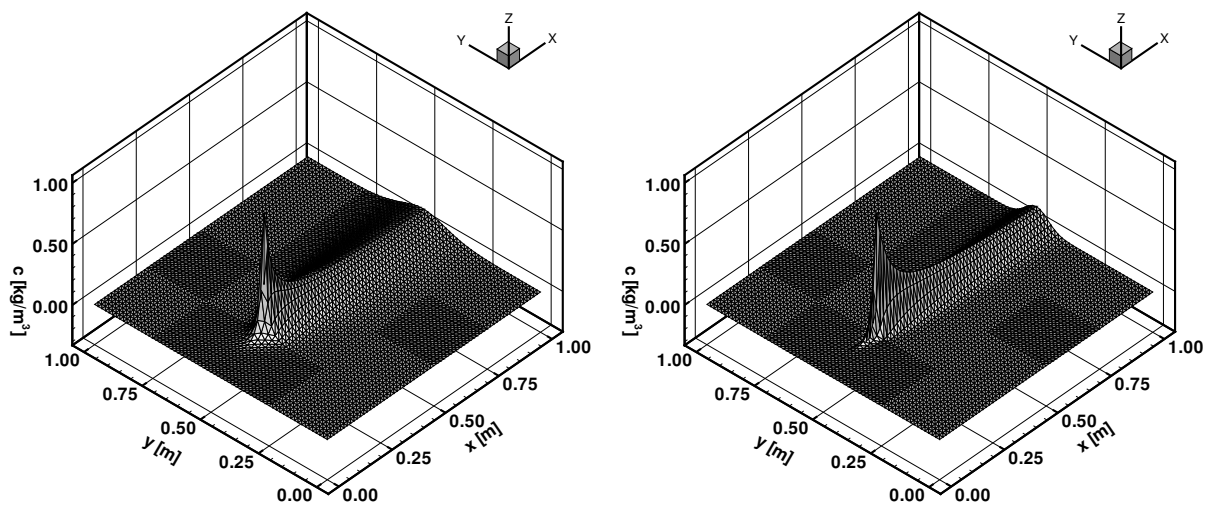


Abbildung 4.9: Dreiecksnetz, $Pe = 68.986\dots 100$. Links: Fully Upwinding. Rechts: Prozessadaptives α_0 und Stromlinienorientierung.

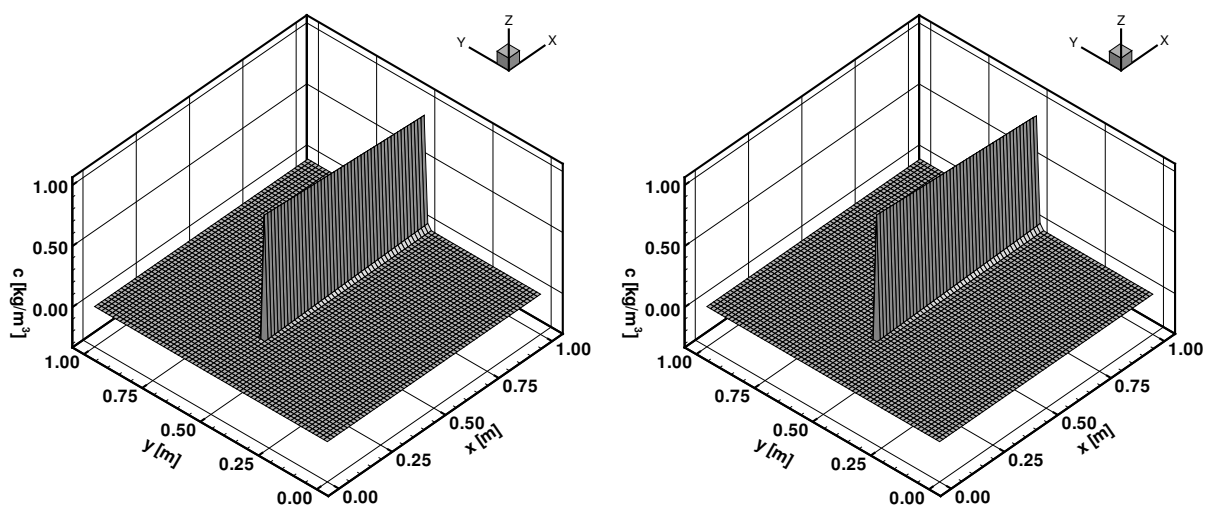


Abbildung 4.10: Vierecksnetz, $Pe = 100$. Links: Fully Upwinding. Rechts: Prozessadaptives α_0 .

Ein Vergleich mit der Approximation des advektiv dominierten Transports auf dem Vierecksnetz macht den Einfluss numerischer Querdiffusion auf das Ergebnis deutlich. Abb. 4.10 zeigt die Resultate für ein Fully Upwinding und prozessadaptives Upwinding. Beide unterscheiden sich kaum, da α_0 in beiden Fällen im Bereich von Eins liegt. Der Konzentrationswert $c_{in} = 1.0[\text{kg}/\text{m}^3]$ der Punktquelle sinkt bis zum Ausstromrand kaum ab, da die auftretende Querdiffusion minimal ist.

Die vorangegangenen Beispiele sollen im Wesentlichen für die Problematik der Transportmodellierung allgemein und insbesondere auf Gittern mit nicht-stromlinienparallelen Kanten (und damit auch auf den für die diskrete Modellierung von Kluft-Matrix-Systemen notwendigerweise unstrukturierten Gittern) sensibilisieren. Unstrukturierte Gitter sind im Rahmen einer diskreten Kluft-Matrix-Modellierung unvermeidbar, insbesondere bei der Anwendung des äquidimensionalen Modellansatzes, der die Behandlung schmaler Kluftelemente beinhaltet (Kap. 1.4). Das verwendete Boxverfahren ist in der Lage, sowohl advektive als auch dispersive Transportprozesse monoton wiederzugeben. Eine Ausnahme davon bildet das direkt Umfeld oberstrom und seitlich von Diskontinuitäten, wo es vor allem im Zusammenhang mit der Stromlinienorientierung des Upwinding-Parameters oder mit der 9-Punkt-Differentiation des in der Regel voll besetzten Dispersionstensors zu Oszillationen kommen kann. Aus diesem Grund wird bei den im Rahmen der vorliegenden Arbeit durchgeführten Transportsimulationen in geklüftet-porösen Systemen in der Regel in den Klüften unabhängig von den lokalen physikalischen Eigenschaften des dominierenden Transportprozesses ein Fully Upwinding durchgeführt. Eine Ausnahme davon bildet das Beispiel der Einzelkluft in Kap. 6.1, das keine Kluftkreuzungen enthält. Bei Kluftkreuzungen, von denen eine Klufftracer führend ist und die andere nicht, stellt die Tracer führende Kluff im Kreuzungsbereich eine Diskontinuität für die Kluff ohne Tracer dar. Wird kein Fully Upwinding in der Kluff ohne Tracer durchgeführt, so können dort oberstrom der Kluftkreuzung Oszillationen auftreten (Kap. 6.2.3). Die Forderung nach einem möglichst geringen Betrag numerischer Dispersion kann vom Boxverfahren auf den hier vorliegenden unstrukturierten, nicht stromlinienorientierten Gittern nicht oder zumindest nicht für den dominant advektiven Transport erfüllt werden. Dies lässt sich nur mit Hilfe (h)-adaptiver Methoden oder aufwändigerer nichtlinearer Diskretisierungsverfahren erreichen (Kap. 3.5). Mit Hilfe des Streamline Orientation Upwinding kann jedoch die numerische Dispersion für den dominant dispersiven Transport reduziert werden. Bezogen auf die Modellierung von Kluft-Matrix-Systeme bedeutet dies, dass in den Klüften, in denen advektive Transportprozesse vorherrschen, ein Verfahren niedriger Ordnung eingesetzt wird, während in der Matrix, in der diffusiv-dispersive Transportprozesse auftreten, das Verfahren höherer Ordnung zum Tragen kommt.

4.3 Berücksichtigung von Randbedingungen

Um die Gleichungen für Strömung und advektiv-dispersiven Transport mit Hilfe von Diskretisierungsverfahren im Modellgebiet approximieren zu können, müssen an den Gebietsrändern Randbedingungen definiert und bei der Prozesssimulation berücksichtigt werden. Im Rahmen der vorliegenden Arbeit werden Dirichlet'sche und Neumann'sche Randbedingungen (Kap. 2.3) verwendet.

Dirichlet-Randbedingungen können im Fall expliziter Zeitintegration jeweils für den aktuell zu berechnenden Zeitschritt als Festwert direkt für die entsprechenden Randknoten, -kanten oder -zellen vorgegeben werden und so die Bestimmung der inneren Freiheitsgrade ermöglichen. Bei impliziter Zeitintegration oder für stationäre Fragestellungen muss ein Gleichungssystem der Form

$$\underline{\underline{A}} \underline{x} = \underline{b} \quad (4.33)$$

gelöst werden, wobei $\underline{\underline{A}}$ die Koeffizientenmatrix, \underline{x} den Unbekanntenvektor und \underline{b} die rechte Seite darstellt. Eine Dirichlet-Randbedingung für den Freiheitsgrad i wird an der Stelle x_i in den Unbekanntenvektor und an der Stelle b_j mit $j = i$ in die rechte Seite eingesetzt. In der Koeffizientenmatrix wird der Eintrag für $A_{i,i}$ zu eins und für alle $A_{i,j}$ und $A_{j,i}$ zu Null gesetzt. Das Produkt $A_{j,i} x_i$ wird auf der rechten Seite von allen b_j mit $j \neq i$ abgezogen. Bei stationären Problemen muss für mindestens einen Freiheitsgrad ein Dirichlet-Wert vorgegeben werden, um eindeutige Lösbarkeit des Gleichungssystems zu gewährleisten.

Neumann-Randbedingungen können für die Strömungsberechnung direkt in die rechte Seite, die Quellen und Senken sowie den Fluss über den Rand enthält, integriert werden. Für den advektiven Transport ist eine Vorgabe von Massenflüssen über den Rand eher ungewöhnlich. Im Allgemeinen wird am Zuflussrand eine Konzentration vorgegeben, die multipliziert mit dem (aus der Strömungssimulation bekannten) Volumenstrom den entsprechenden Massenstrom in das Gebiet ergibt. Dies entspricht einer Dirichlet-Randbedingung für den advektiven Transport. Existiert ein Massenstrom aus dem Gebiet heraus, so ist die Konzentration an den entsprechenden Randwerten häufig nicht bekannt, sondern nur der Volumenstrom des Trägerfluids Q_i . In diesem Fall verbleibt die Konzentration an der Stelle x_i im Unbekanntenvektor, und Q_i wird auf die Hauptdiagonale $A_{i,i}$ der Koeffizientenmatrix addiert. Für den dispersiven Massenfluss kann grundsätzlich analog zur Strömung eine Neumann-Randbedingung vorgegeben werden. Im weiteren Verlauf der Arbeit wird allerdings davon ausgegangen, dass der dispersive Transport über den Rand im Vergleich zum advektiven Transport vernachlässigbar klein ist und somit zu Null gesetzt werden kann (Kap. 3.3).

5 Modellaufbau

Die diskrete Modellierung von Strömungs- und Transportprozessen in geklüftet-porösen Medien beinhaltet eine Reihe von Teilaufgaben, die miteinander verknüpft sind (Abb. 5.1). Bezogen auf die Schritte der Modellbildung nach HELMIG (1997)[85], die den Entwicklungsweg von der Problemstellung über das konzeptionelle, das mathematische und das numerische Modell bis hin zu einem prognosefähigen Hydrosystemmodell darstellen, sind die Punkte der konzeptionellen und der mathematischen Modellbildung hier nicht explizit aufgeführt. Sie sind jedoch durch die Ausführungen in Kap. 1.4 (konzeptionelles Modell) und Kap. 2 (mathematisches Modell) vorgegeben.

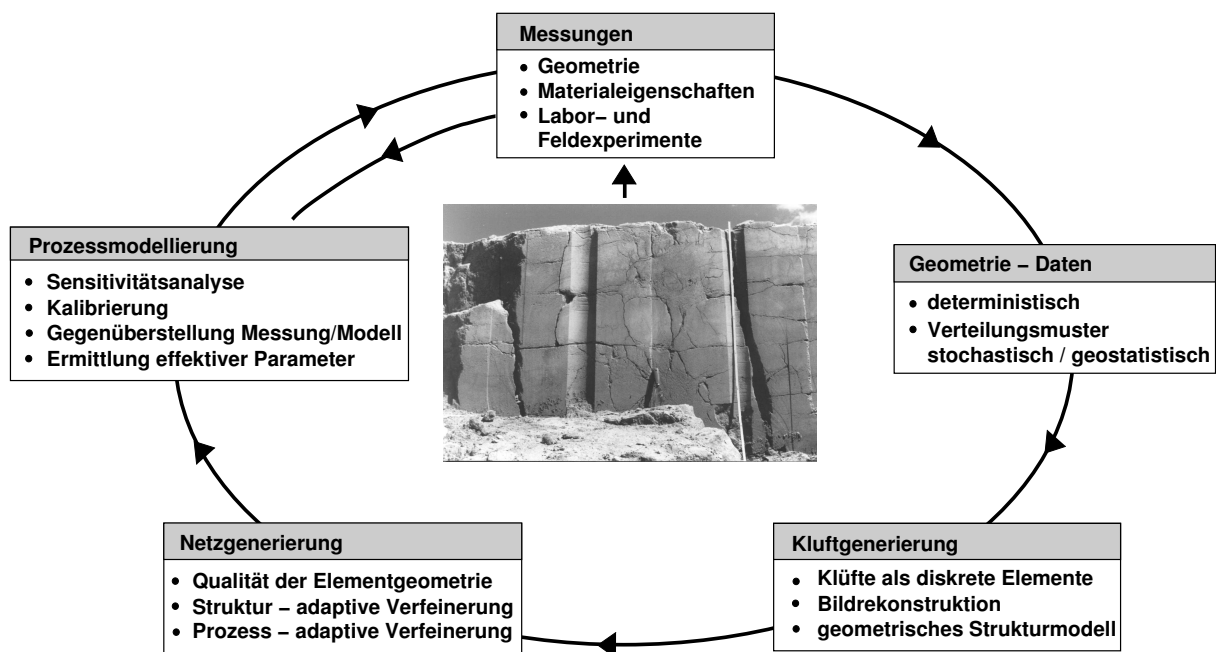


Abbildung 5.1: Teilschritte der Modellbildung für ein geklüftet-poröses Medium (HEMMINGER, NEUNHÄUSERER & HELMIG (2000)[89])

Messungen: Ausgangspunkt der diskreten Modellierung geklüfteter Systeme ist die Beschreibung der Klüfte innerhalb des numerischen Modells sowie die Ermittlung der Materialparameter. Die geometrischen Strukturen von Klufsystemen werden im Allgemeinen durch Ort und Orientierung der Klüfte im Raum, Abmessungen der Kluffseitenflächen, Abstände zwischen den Kluffflächen, Kluffdichte sowie Klufföffnungsweiten beschrieben

(z.B. WOLLRATH (1990)[215], KOSAKOWSKI (1996)[122], KOLDITZ (1997)[118]). WOLLRATH (1990)[215] und SILBERHORN–HEMMINGER (2002)[194] geben eine ausführliche Übersicht über die Möglichkeiten der Gewinnung und der Interpretation solcher Daten. Ihre Ermittlung erfordert einen direkten Zugang zu dem Kluftsystem in Form einer Aufschlusswand, eines offenen Stollenbereiches oder durch Bohrungen. Zudem bietet die Kartierung der freien Flächen bzw. der Mantelabwicklungen eines Bohrkerns eine erste Interpretationsgrundlage für den innenliegenden, nicht sichtbaren Verlauf der Klüfte. Materialparameter wie Porosität oder Permeabilität können ebenfalls in Labor- oder Feldexperimenten bestimmt werden. Dabei ist für die Interpretation der Messdaten oft schon ein Modellansatz erforderlich (z.B. bei der Ermittlung der Dispersivitäten aus gemessenen Durchbruchkurven), sodass diese Parameter bereits mit Unsicherheiten versehen sind. Für die Modellierung ergibt sich hieraus die Notwendigkeit, die Unsicherheiten im Rahmen einer Sensitivitätsanalyse abzuschätzen.

Geometrie–Daten: Bei der Datengewinnung muss nach der Qualität der gewonnenen Informationen differenziert werden. Daten, die man durch direkte Messungen (z.B. geologische Kartierung, Kluftaufnahmen, hydraulische Tests) erhält, sind verhältnismäßig genau, aber auf den Bereich des entsprechenden Bohrlochs oder Aufschlusses beschränkt. Mit geophysikalischen Methoden (z.B. Seismik, Geomagnetik, Geoelektrik) indirekt bestimmte Daten gelten für große Bereiche, sind aber meistens unscharf. Um auf der Basis dieser Informationen räumliche Modelle für Kluftsysteme entwickeln zu können, müssen geeignete Methoden der Geoinformatik (z.B. Geostatistik) eingesetzt werden (KOLDITZ, KASPER & KOSAKOWSKI (1997)[119]). Je nach Art und Umfang der vorliegenden Strukturinformationen gibt es die Möglichkeit der deterministischen und der stochastischen Kluftgenerierung sowie der Kombination beider Ansätze. Der deterministische Ansatz beruht darauf, dass die Lage und Ausdehnung einer Kluft exakt beschrieben werden kann. Hierzu bedarf es einer sehr detaillierten Analyse des Kluftsystems, die oftmals nicht durchführbar ist. Der stochastische Ansatz geht davon aus, dass die im Feld ermittelten Daten bzw. ihre Verhaltensmuster durch geeignete Verteilungsfunktionen beschrieben werden können. Die Verteilungsfunktionen dienen als Grundlage für die Kluftgenerierung. Ein Kluftgeometriemodell, das auf der Basis der stochastischen Generierung erstellt wird, sollte die gleichen statistischen Eigenschaften wie das natürliche System aufweisen. Es stellt damit ein Abbild des Natursystems dar, nicht das Natursystem selbst. Die Durchführung einer geometrischen Charakterisierung von Kluftsystemen auf der Basis einer geostatistischen Analyse beschreibt beispielsweise SILBERHORN–HEMMINGER (2002)[194] für die aus dem DFG–Projekt *Festgesteins–Aquiferanalog: Experimente und Modellierung* gewonnenen Daten (siehe dazu HÖTZL, BÄUMLE, THÜRINGER & WITTHÜSER (2000)[98], SAUTER, LIEDL, TEUTSCH, LEVEN, BARAKA–LOKMANE & MCDERMOTT (2000)[182]).

Kluftgenerierung: Das Erstellen eines Kluftgeometriemodells auf der Basis der oben aufgeführten Daten und Interpretationsansätze, die sogenannte Kluftgenerierung, stellt das wesentliche Bindeglied zwischen der Natur und dem numerischen Modell dar. Sie erfordert neben der breiten Datengrundlage, die durch sorgfältige Datenerhebung und –auswertung gewährleistet werden muss, das Einbeziehen und Umsetzen der verschiedenen Datentypen und Informationen. Eine eingehende Darstellung der verschiedenen Kluftgenerierungsverfahren ist in KOLDITZ (1997)[118] sowie in SILBERHORN–HEMMINGER (2002)[194] gegeben.

Netzgenerierung: Im Rahmen der diskreten Beschreibung eines geklüftet-porösen Mediums hat ein Netzgenerator die Aufgabe, Matrix und Klüfte, die von Hand oder mit einem Klüftgenerator (z.B. KOSAKOWSKI (1996)[122], SILBERHORN-HEMMINGER (2002)[194]) erzeugt wurden, zu vernetzen und so einer anschließenden numerischen Bearbeitung zugänglich zu machen. Die geometrische und physikalische Komplexität solcher Systeme stellt dabei hohe Ansprüche an den Netzgenerator. Die geometrische Komplexität äußert sich zum einen darin, dass die Matrix von den Klüften beliebig in einzelne Blöcke zerschnitten wird. Zum anderen sollen die Klüfte konsistent mit den angrenzenden Matrixblöcken vernetzt werden. Im Fall einer niederdimensionalen Modellierung ist dabei eine Kombination von Elementen unterschiedlicher Dimension (z.B. 2D-Matrix, 1D-Kluft) notwendig, im äquidimensionalen Fall hingegen müssen die Klüfte trotz ihrer ungünstigen Geometrie (Kluftausdehnung \gg Kluftbreite) über die Kluftbreite vernetzt werden. Die physikalische Komplexität beruht auf den unterschiedlichen Eigenschaften von Kluft und Matrix hinsichtlich Durchströmung und Speicherkapazität. Diese können zu hohen Gradienten und starken Konzentrationsfronten im Bereich der Klüfte führen, sodass dort gegebenenfalls eine Verfeinerung des Berechnungsgitters erforderlich ist.

Prozessmodellierung: Auf der Grundlage der räumlich diskretisierten Kluftgeometrien können die Modellgleichungen der ausgewählten physikalischen Prozesse (hier Strömung und idealer Tracertransport) mit Hilfe numerischer Algorithmen gelöst werden. Dabei muss das eingesetzte numerische Modell zunächst anhand analytischer bzw. quasianalytischer Lösungen verifiziert werden, um sicherzustellen, dass es zu einer korrekten Lösung der zugrunde gelegten mathematischen Beziehungen führt. Existiert keine entsprechende analytische/quasianalytische Lösung, so kann zumindest durch sukzessive Gitterverfeinerung und Vergleich der Lösungen eine Konvergenzüberprüfung vorgenommen werden. Im zweiten Schritt muss überprüft werden, ob das erstellte Modell die konkrete Aufgabenstellung richtig wiedergeben kann und die maßgebenden Parameter und Prozesse berücksichtigt werden bzw. die wesentlichen Systemeigenschaften erhalten bleiben, es muss somit eine Kalibrierung an kontrollierten Experimenten vorgenommen werden. Als Kontrollwerte können für die Strömung die im Experiment gemessenen oder vorgegebene Drücke oder Durchflüsse dienen, für den Transport z.B. Durchbruchkurven. Mit dem bestehenden Modell können nun Sensitivitätsanalysen durchgeführt werden, um den Einfluss einzelner Modellparameter auf das Prozessverhalten zu untersuchen. Auf diese Weise können die Auswirkungen der Unsicherheiten, die den Eingangsdaten zugrunde liegen, verdeutlicht werden. Durch die Gegenüberstellung von Experiment und numerischem Modell ist es möglich, den Einsatzbereich der verwendeten Modelltechnik in Abhängigkeit der vorhandenen Daten näher zu bestimmen und eine Aussage hinsichtlich der Qualität der Wiedergabe des physikalischen Verhaltens mit Hilfe des numerischen Modells zu erhalten. Gerade der Einsatz diskreter numerischer Ansätze erlaubt es auch, effektive Parameter und gegebenenfalls Prozesse zu bestimmen, die im Rahmen einer Kontinuumsmodellierung eingesetzt werden können (z.B. HEMMINGER, NEUNHÄUSERER, BARDOSSY & HELMIG (1998)[88], NEUNHÄUSERER, HEMMINGER & HELMIG (1999)[161], NEUNHÄUSERER, HEMMINGER & HELMIG (2000)[162], KÖNGETER, LAGENDIJK, JANSEN & VOGEL (2000)[121]).

Im Folgenden sollen die für die vorliegende Arbeit verwendeten Bausteine zur Klufftgenerierung, zur Netzgenerierung und zur Prozessmodellierung näher beleuchtet werden. Der Schwerpunkt der Prozessmodellierung liegt dabei auf der Untersuchung der eingesetzten numerischen Modelle hinsichtlich ihrer Vor- und Nachteile bei der Simulation von Strömungs- und Transportprozessen in geklüftet-porösen Medien.

5.1 Klufftgenerierung

Die Klufftgenerierung dient der Überführung der im Feld und/oder im Labor ermittelten geometrischen Strukturinformationen in ein Klufftgeometriemodell, im Folgenden auch Klufftnetzwerk genannt. Die Klüfte werden dabei als diskrete Elemente abgebildet. Zur Beschreibung von Klufftnetzwerken in der Ebene (2D) und im Raum (3D) kommen deterministische, stochastische, fraktale und geostatistische Verfahren zur Anwendung. LONG (1983)[136] und LONG & BILLAUX (1987)[137] gründeten ihre Arbeiten auf stochastische und geostatistische Generierungsmethoden. Dabei werden charakteristische Verteilungsfunktionen, die die Klufftkenndaten beschreiben, zur Generierung herangezogen. ANDERSSON, SHAPIRO & BEAR (1984)[5] und WOLLRATH (1990)[215] erweiterten diese Methodik durch das Einbeziehen weiterer Klufftinformation wie z.B. Bohrkerndaten und bekannte Klufftverläufe. ACUNA & YORTSOS (1995)[3] und KOSAKOWSKI (1996)[122] setzten voraus, dass bestimmte Eigenschaften der Natur, insbesondere geologische Strukturen, über mehrere Skalen hinweg dem gleichen Muster unterworfen sind, und entwickelten Verfahren zur Klufftnetzgenerierung, die auf einem fraktalen Ansatz basieren. Andere Modellvorstellungen beinhalten die Entwicklung und das Wachstum von Klüften. Beispielsweise wurde in den Arbeiten von RENSHAW & POLLARD (1994)[180] und RENSHAW (1996)[179] die Klufftausbildung bei der Generierung von Klufftnetzwerken berücksichtigt. Daneben kommen geostatistische Simulationstechniken zunehmend in Bereichen zur Anwendung, in denen geologische Strukturen beschrieben werden (KOLTERMANN & GORELICK (1996)[120]). SRIVASTAVA (1994)[199] verwendete in diesem Zusammenhang die Methode des *Simulated Annealing* zur Klufftnetzwerkgenerierung. Dieses Verfahren erlaubt es, neben den geometrischen Klufftinformationen wie z.B. Spurlänge und Orientierung über eine Energie-/Straffunktion weitere charakteristische Merkmale in die Generierung einzubeziehen.

5.1.1 Klufftgenerator FRAC3D

Für die Klufftnetzwerkgenerierung wird im Rahmen dieser Arbeit der Klufftgenerator *FRAC3D* verwendet. Eine ausführliche Darstellung des Klufftgenerators ist SILBERHORN-HEMMINER (2002)[194] zu entnehmen. An dieser Stelle soll eine kurze Übersicht über die Struktur und die Optionen von *FRAC3D* gegeben werden. Der Klufftgenerator *FRAC3D* baut unter anderem auf den Arbeiten von LONG (1983)[136], LONG & BILLAUX (1987)[137] und WOLLRATH (1990)[215] auf und ermöglicht die Erstellung von Klufftnetzwerken auf der Basis eines deterministischen oder eines stochastischen Ansatzes. Die Wahl des zur Anwendung kommenden Verfahrens hängt von der Quantität und der Qualität der vorhandenen Strukturinformationen ab. *FRAC3D* erzeugt Klufftsysteme in der 2D-Ebene, die Klüfte als 1D-Stabelemente beschreiben, und im 3D-Raum, der Klüfte aus 2D-Viereckselementen enthält. 1D-Stabelemente im 3D-Raum geben ausgeprägte Fließwege (*Channels*) wieder.

Abb. 5.2 zeigt deterministisch erstellte Strukturmodelle im 2D- und im 3D-Raum für einen Bohrkern, der im Rahmen des DFG-Projekts *Festgesteins-Aquiferanalog: Experimente und Modellierung* von den Projektpartnern am Geologischen Institut, Lehrstuhl für Angewandte Geologie, Universität Tübingen, im Labor untersucht wurde. Als Strukturinformation lag dazu die grafische Darstellung der Bohrkernoberfläche als Mantelabwicklung vor (MCDERMOTT (1999)[144]). In Abb. 5.3 werden zwei stochastisch generierte Kluftstrukturmodelle dargestellt.

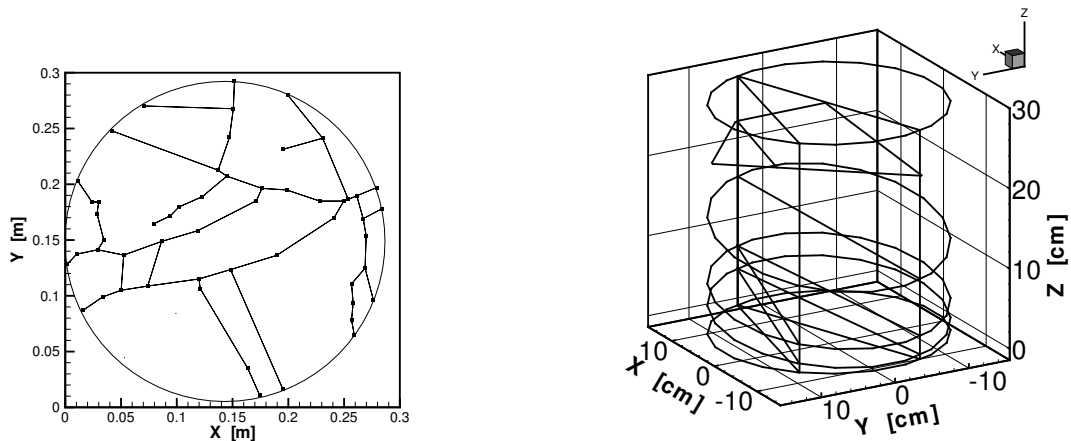


Abbildung 5.2: Deterministische 2D- und 3D-Kluftstrukturmodelle (NEUNHÄUSERER, HEMMINGER & HELMIG (2000)[162])

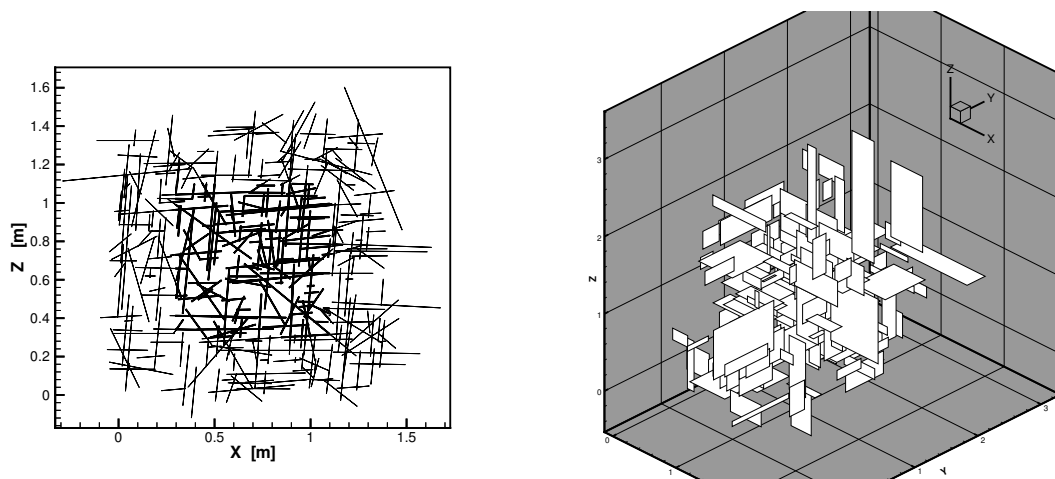


Abbildung 5.3: Stochastische 2D- und 3D-Kluftstrukturmodelle (SILBERHORN-HEMMINGER (2002)[194])

Der Kluftgenerator *FRAC3D* erzeugt zunächst die Gesamtheit der Kluftelemente. Soll ein deterministisches Strukturmodell erstellt werden, so werden die Koordinaten der Eckpunkte der Klüfte (planare Viereckselemente) bzw. der Kluftspuren (lineare Stabelemente) eingelesen. Für eine stochastische Generierung wird nach Eingabe einer beliebigen positiven Integerzahl ein Zufallsgenerator gestartet, der eine Folge von Zufallszahlen $0 \leq Z \leq 1$ produziert. Anschlie-

ßend werden so lange Kluftelemente generiert, bis eine vorgegebene Kluftdichte erreicht wird. Die Kluftdichte kann dabei als Kluftanzahl pro Kubikmeter Gesteinsvolumen oder als Kluftfläche pro Kubikmeter Gesteinsvolumen definiert werden. Geometrie und Lage jedes einzelnen Kluftelements werden durch die folgenden Schritte bestimmt:

- Als erster Kluftpunkt wird der Mittelpunkt der Kluftebene im Raum (*Kluftaufhängepunkt*) über eine Gleichverteilung generiert. Die Koordinaten des Kluftaufhängepunkts sind Zufallszahlen $0 \leq Z \leq 1$. Sie werden mit den Absolutwerten des Generierungsgebiets skaliert.
- Die Orientierung der Kluftebene wird durch den Normalenvektor der Kluftebene beschrieben. Der Normalenvektor kann durch die Vorgabe konstanter geologischer Daten (Azimut und Fallwinkel) oder über eine Fisher-Verteilung ermittelt werden.
- Um die Klufteckpunkte zu berechnen, müssen zuerst die Kluftseitenlängen bekannt sein. Diese können in *FRAC3D* durch Vorgabe eines konstanten Wertes oder durch eine von verschiedenen Verteilungen (negative Exponentialverteilung, Erlang2-Verteilung, Gleichverteilung, Log-Normal-Verteilung) bestimmt werden.
- Die Kluftöffnungsweite wird wahlweise als konstanter Wert, über eine Log-Normal-Verteilung oder über eine Gleichverteilung zugewiesen. Die Kluftöffnungsweite spielt für die Lage der Kluft im Raum keine Rolle, wird aber für die nachfolgenden Prozesssimulationen benötigt.

Das vollständig definierte Kluftelement wird in eine globale Liste eingetragen. Dabei wird überprüft, ob das neue Kluftelement in einer Ebene mit einem bereits vorhandenen liegt und dieses überlappt, oder ob es parallel mit einem sehr geringen Abstand zu einem vorhandenen Element erzeugt worden ist. Während sich überlappende Kluftelemente zu nicht-konvexen Geometrien führen, sind bezogen auf die Gebietsabmessungen sehr kleine Abstände zwischen parallelen Klüften problematisch für den Netzgenerator. Trifft einer der beiden Fälle zu, wird das Kluftelement verworfen und ein neues an seiner Stelle generiert. Nach jedem neu hinzugefügten Element wird die aktuelle Kluftdichte berechnet und mit der zu erreichenden Kluftdichte verglichen.

Ist die Generierung des Kluftsystems abgeschlossen, so werden seine Verteilungsmuster bestimmt und den Eingangsverteilungen gegenübergestellt. Bei zu großen Abweichungen kann das System entweder verworfen oder einer Optimierung unterzogen werden. Es hat sich gezeigt, dass für Kluftorientierung, Kluftseitenlänge und Kluftöffnungsweite im Allgemeinen gute Übereinstimmung zwischen generierten und vorgegebenen Verteilungen erzielt werden konnte, was auf die relativ glatten Eingangsverteilungen zurückgeführt wird. Im Gegensatz dazu sind Informationen bezüglich der Kluftabstände bis zu diesem Punkt nicht berücksichtigt worden. Daher wurde eine Optimierung des Kluftabstands implementiert, die auf einem *Markov-Chain-Monte-Carlo*-Algorithmus gekoppelt mit einem *Simulated-Annealing*-Verfahren basiert.

Für das fertiggestellte Kluftnetzwerk wird ein *Postprocessing* durchgeführt. Zuerst werden die Klüfte des Systems hinsichtlich gemeinsamer Schnittlinien und Schnittpunkte untersucht. Diese werden als zusätzliche Information in die Gebietsbeschreibung übernommen. Eine solche

Erweiterung ist insbesondere für die anschließende Netzgenerierung notwendig. Als nächstes wird das eigentliche Untersuchungsgebiet aus dem generierten Gebiet ausgeschnitten. Das Untersuchungsgebiet kann dabei eine 2D-Ebene, ein 3D-Quader oder ein 3D-Prisma sein. Im Fall einer 2D-Ebene werden die Schnittlinien der Ebene mit den Klüften zu 1D-Klüften. Das Vorgehen dient dazu, die Generierungsfehler an den Gebietsrändern zu minimieren. Es ist beispielhaft in Abb. 5.3, links, zu erkennen. Dort ist das Generierungsgebiet durch feinere und das Untersuchungsgebiet durch stärkere Linien (Klüfte) dargestellt. Optional können einzelne Klüfte, die nicht vernetzt und damit bei einer reinen Kluffnetzwerksimulation inaktiv sind, entfernt werden. Abschließend werden die Daten, die das Kluffnetzwerk beschreiben, in ein für die nachfolgende Netzgenerierung lesbares Format konvertiert.

5.2 Netzgenerierung

Wie bereits ausgeführt, hat ein Netzgenerator im vorliegenden Kontext die Aufgabe, eine zuvor erstellte geometrische Gebietsbeschreibung zu vernetzen und so einer anschließenden numerischen Bearbeitung zugänglich zu machen. Insbesondere Kluff-Matrix-Systeme stellen dabei aufgrund ihrer geometrischen und physikalischen Komplexität hohe Ansprüche an den Netzgenerator. Es existieren eine Reihe unterschiedlicher Ansätze zur Netzgenerierung, die sich nach HO-LE (1988)[112] und SCHNEIDERS (1993)[186] sowie FUCHS (1999)[65] im Wesentlichen in fünf Klassen unterteilen lassen:

- Knotenverbindungs-methoden; hierbei werden bereits vorgegebene Punkte zur Konstruktion des Netzes herangezogen. Die Delaunay-Triangulation gehört zu dieser Klasse.
- gitterbasierte Ansätze, z.B. Rasternetze oder Quadtree; das zu vernetzende Objekt wird von einem Gitter überdeckt. Gitterelemente außerhalb des Objektes werden entfernt, anschließend werden die Gitterpunkte am Rand auf den Rand des Objektes verschoben. Der Nachteil dieser Verfahren liegt in den mitunter ungünstig geformten Randelementen.
- Gebietszerlegungsmethoden; das zu vernetzende Objekt wird durch Einfügen von Schnittkanten in einfachere Teilobjekte zerlegt, die anschließend vernetzt werden. Problematisch dabei ist das Finden geeigneter Teilobjekte, speziell bei der Vernetzung dreidimensionaler Körper.
- Geometrie-Dekompositionsmethoden; die Netze werden erzeugt, indem ausgehend vom Rand oder einer vorher bestimmten medialen Achse Elemente definiert werden. Hierzu gehören mediale Achsentransformationen oder Advancing-Front-Verfahren. Letztere erzeugen im Gegensatz zu den gitterbasierten Ansätzen am Rand Elemente von guter Qualität, nach einigen Schichten kommt es jedoch zu Überlappungen, sodass aufwändige geometrische Operationen und Abschlussformeln benötigt werden. Insbesondere im dreidimensionalen Raum kann der Algorithmus gegebenenfalls nicht beendet werden.
- Sweeping-Algorithmen; auf dem Boden des Körpers wird ein Startnetz erzeugt, das anschließend entlang eines Weges durch die Geometrie gezogen und dabei gegebenenfalls leicht deformiert wird. Dieses Verfahren ist nur für Körper sinnvoll, die durch Ziehen einer Grundfläche in den Raum entstanden sind.

Einzelne Verfahren lassen sich auch miteinander kombinieren. Für Kluft–Matrix–Systeme werden aufgrund ihrer komplexen Geometrie häufig Methoden verwendet, die eine Delaunay–Triangulierung beinhalten. Im Folgenden sollen kurz einige Netzgeneratoren vorgestellt werden, die speziell für Kluft–Matrix–Systeme entwickelt worden sind. Für andere Fragestellungen eingesetzte Netzgeneratoren erfüllen die gestellten Anforderungen (z.B. Kopplung unterschiedlicher Elementtypen) nur bedingt oder gar nicht. LEGE & TANIGUCHI (1994)[130] implementierten einen Netzgenerator, der willkürlich berandete zweidimensionale Gebiete durch eine Delaunay–Triangulierung diskretisiert. Über einen speziellen Algorithmus werden die entstandenen Dreiecke zu Vierecken verbunden und in ihrer Form optimiert. Durch die Einbindung eindimensionaler Elemente können Klüfte dargestellt werden. Darauf aufbauend erstellten LEGE & TANIGUCHI (1994)[131] einen Netzgenerator zur Diskretisierung dreidimensionaler Gebiete durch Schichten aus quaderförmigen Elementen. Kombinationsmöglichkeiten mit eindimensionalen Elementen zur Darstellung ausgeprägter Fließwege und mit zweidimensionalen Elementen zur Darstellung von Kluftebenen bestehen. TANIGUCHI, GODA, KASPER & ZIELKE (1996)[201] beschrieben die Vernetzung dreidimensionaler Kluft–Matrix–Systeme mit Vierecken und Hexaedern, wiesen jedoch darauf hin, dass im Hinblick auf eine anschließende numerische Berechnung die Qualität der Elementgeometrie noch verbessert werden muss. Eine Weiterentwicklung dieser Methodik wird in KASPER, KOLDITZ & ZIELKE (1997)[113] beschrieben. WENDLAND (1996)[210] erweiterte einen von BETTZIECHE (1991)[24] implementierten zweidimensionalen Netzgenerator dahingehend, dass parallel zu den vorgegebenen Klüften schmale Elemente generiert werden, die die Erfassung der dort unter Umständen hohen Gradienten ermöglicht. RENTZ (1997)[181] stellte einen Netzgenerator zur Beschreibung von Klüften im dreidimensionalen Raum vor, der das Modellgebiet zunächst in Schichten unterteilt und diese im Bereich der Klüfte entsprechend anpasst.

5.2.1 Netzgenerator ART

In der vorliegenden Arbeit wird für die geometrische Diskretisierung der Kluftnetzwerke und der umgebenden Matrix der sehr flexible Netzgenerator *ART* (*Almost Regular Triangulation*) eingesetzt. Dieser Netzgenerator wurde am Mathematischen Institut A der Universität Stuttgart im Rahmen des SFB 404 *Mehrfeldprobleme in der Kontinuumsmechanik* entwickelt und in Zusammenarbeit an die speziellen Anforderungen geklüfteter Systeme angepasst (FUCHS (1997)[64], NEUNHÄUSERER, FUCHS, HEMMINGER & HELMIG (1998)[156]). Eine ausführliche Beschreibung ist in FUCHS (1999)[65] gegeben. Die Generierung der Netze beruht auf einer optimierten Delaunay–Triangulierung, wobei das Ziel verfolgt wird, ein möglichst reguläres Netz zu konstruieren. Idealerweise besteht eine zweidimensionale Triangulierung aus ausschließlich gleichseitigen Dreiecken, und jeder innere Knoten gehört zu genau sechs Dreiecken. Da eine solche Regularität nur in Ausnahmefällen erreicht werden kann, erstellt *ART* fast reguläre Triangulierungen, die eine möglichst geringe Anzahl irregulärer Knoten (innere Knoten einer zweidimensionalen Triangulierung, die zu mehr oder weniger als sechs Dreiecken gehören) besitzen, und deren Dreieckselemente bezüglich eines regulären Gitters optimiert werden. Auf diese Weise werden qualitativ hochwertige Elementgeometrien und relativ regelmäßige Netzstrukturen erzeugt. Dies wirkt sich positiv auf die Genauigkeit der nachfolgend auf den Netzen erstellten numerischen Lösungen aus (Erhaltung des lokal–konservativen Verhaltens des zur Anwendung kommenden Diskretisierungsverfahrens).

Der Netzgenerator *ART* ermöglicht die Vernetzung sowohl zweidimensionaler als auch dreidimensionaler Gebiete. Um die kombinatorischen Anforderungen einer fastregulären Triangulierung zu erfüllen, wird ein indirekter Ansatz gewählt. Die Position der Knoten zueinander wird optimiert, bevor irgendwelche Verbindungskanten gezogen und Elemente definiert werden. Die Vernetzung der Klüfte erfolgt niederdimensional, indem die Klüfte als innere Ränder betrachtet werden. Die Diskretisierung der Matrix ist abhängig von einer vorzugebenden Dichtefunktion, die die Größe der zu generierenden Elemente steuert. Sie ist entweder konstant oder feiner im Bereich der Klüfte (Abb. 5.4). Der zugrunde liegende Algorithmus ist für zwei- und dreidimensionale Gebiete nahezu identisch:

- Mit Hilfe einer Dichtefunktion wird eine Basis-Konfiguration von Knoten erstellt.
- Die Position der Knoten zueinander wird durch Minimierung eines Penalty-Funktional optimiert.
- Durch die anschließende Triangulierung wird ein Netz aus Delaunay-Elementen (Dreiecke bzw. Tetraeder) erzeugt.

Das Startgitter für die Basis-Konfiguration der Knoten wird bestimmt, indem ein reguläres Gitter um den ungefähren Mittelpunkt des Gebietes konstruiert wird. Im 2D-Fall ist dies ein aus sechs gleichseitigen Dreiecken bestehendes Sechseck. Im 3D-Fall wird als reguläres Gitter ein Polyeder angesetzt, der aus 24 Tetraedern besteht. Da sich mit gleichseitigen Tetraedern keine gleichmäßige Parkettierung des Raums erreichen läßt, wird der Tetraeder gewählt, dessen Standardabweichung der Diederwinkel zum gleichseitigen Tetraeder so gering wie möglich ist, und der gleichzeitig subdivisions-invariant ist. Letzteres gewährleistet, dass beim Unterteilen des Tetraeders durch Halbieren der Kanten die kleinen Tetraeder kongruent zum unterteilten Tetraeder sind. Anschließend werden alle Kanten des Startgitters so lange halbiert, bis sie bezüglich der zugrunde liegenden Dichtefunktion klein genug sind. Die Gesamtanzahl der zu optimierenden Knoten setzt sich zusammen aus den Eckpunkten des Gebiets, allen Knoten des Netzes, die innerhalb des Gebiets liegen, und den Randpunkten. Diese werden erzeugt, indem diejenigen Punkte, die außerhalb liegen und eine Verbindung zu einem inneren Punkt haben, auf den Rand projiziert werden. Innere Ränder (z.B. Klüfte) und Flächen werden mit den Flächen und Kanten des Startgitters geschnitten, und die Schnittpunkte werden ebenfalls zu der Gesamtmenge der Knoten hinzugefügt. Punkte, die zu dicht nebeneinander liegen, werden wieder entfernt.

Die Optimierung der Knotenpositionen zueinander hat das Ziel, die oben beschriebene Regularität der Elemente so weit als möglich einzuhalten. Dies wird durch die Konstruktion eines Penalty-Funktional realisiert, das Konfigurationen, die irreguläre Knoten erzeugen, bestraft. Dazu werden für jeden Knoten X_i die Abstände zu den umliegenden Knoten X_j berechnet, mit den Abständen verglichen, die in einem regulären Gitter auftreten, und gegebenenfalls durch das Funktional bestraft. Da sich Störungen nur lokal auswirken, werden nicht alle Knotenabstände betrachtet. In der Praxis hat sich gezeigt, dass es ausreicht, ein bis zwei Lagen von Punkten um den Knoten X_i zu berücksichtigen. Die Minimierung des Penalty-Funktional wird mit der Methode der konjugierten Gradienten durchgeführt. Punkte, die während der

Optimierung zu nahe an den Rand wandern, werden ab einer gewissen Schranke ganz auf den Rand gezogen.

Die abschließende Delaunay–Triangulierung beruht auf einem *constrained Delaunay Algorithmus*, um die Konformität der Elemente mit den inneren und äußeren Randkurven und –flächen sicherzustellen. Aufgrund der Optimierung liegen die Knoten bereits in einer sehr guten Position, sodass sich fast die gesamten Vorgaben (Ränder) direkt aus der Delaunay–Triangulierung ergeben. Die so erzeugten Netze zeigen bei Vorgabe beliebiger innerer Ränder (Klüfte) hohe kombinatorische und geometrische Qualität (NEUNHÄUSERER, HEMMINGER & HELMIG (2000)[162]). Um eine quantitative Beurteilung der Netzgüte zu ermöglichen, informiert ART zusätzlich über die Gesamtanzahl, die Anzahl der inneren, der äußeren sowie der irregulären Knoten, den minimalen, den maximalen und den mittleren Winkel, die Standardabweichung der Winkel von 60° , die Standardabweichung der Kantenlängen von der mittleren Kantenlänge und die Standardabweichung des Verhältnisses Umkreis zu Inkreis vom Wert für ein gleichseitiges Dreieck. Die Abb. 5.4 – 5.6 zeigen Beispiele für Gitternetze, die im Rahmen des DFG–Projektes *Festgesteins–Aquiferanalog: Experimente und Modellierung* mit ART generiert wurden. Abb. 5.4 zeigt die Topfläche des Bohrkerns, der von dem Projektpartnern der Universität Tübingen untersucht wurde, als zweidimensionales Gebiet. Das Netz auf der linken Seite in Abb. 5.4 weist eine konstante Elementdichte auf, das Netz auf der rechten Seite wurde im Bereich der Klüfte stark verfeinert. In Abb. 5.5 ist das deterministisch approximierete Kluffinventar des Stubensandstein–Feldversuchsblocks Pliezhausen, der von den Projektpartnern am Lehrstuhl für Angewandte Geologie, Universität Karlsruhe, aufgenommen und beprobt wurde, dargestellt. Abb. 5.5, links, zeigt das reine Kluffsystem, bei dem die zweidimensionalen Kluftebenen vernetzt wurden, Abb. 5.5, rechts, das Kluffnetzwerk umgeben von 3D–Matrixelementen (Tetraedern). Abb. 5.6 ist ein Zoom von Punkt $(0.0[m]; 4.0[m]; 0.0[m])$ mit Blick in Richtung Punkt $(4.0[m]; 0.0[m]; 0.0[m])$, links für das reine Kluffnetzwerk, rechts für das Kluff–Matrix–System.

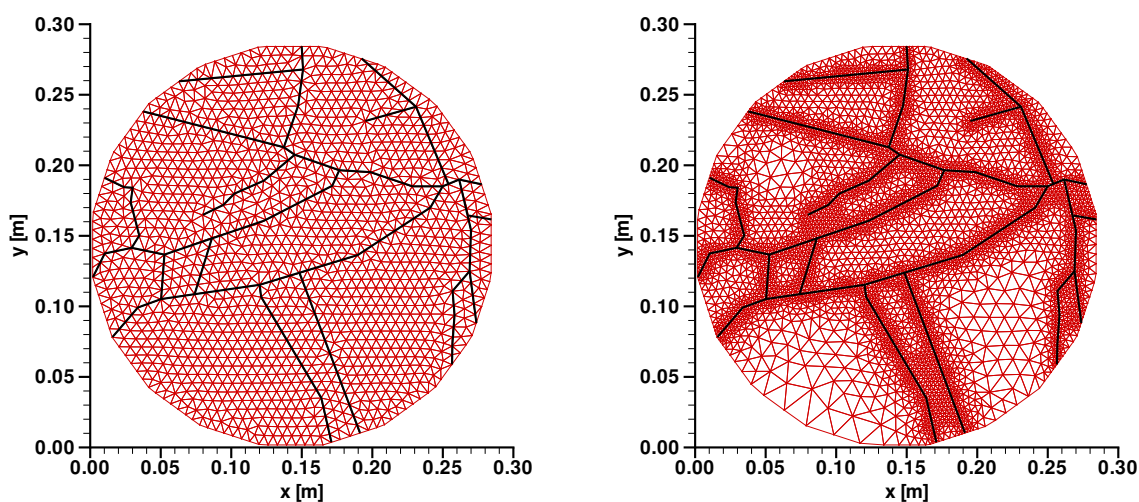


Abbildung 5.4: Vernetzung der Topfläche eines Bohrkerns mit ART. Links: Konstante Elementgröße. Rechts: Mit Verfeinerung entlang der Klüfte.

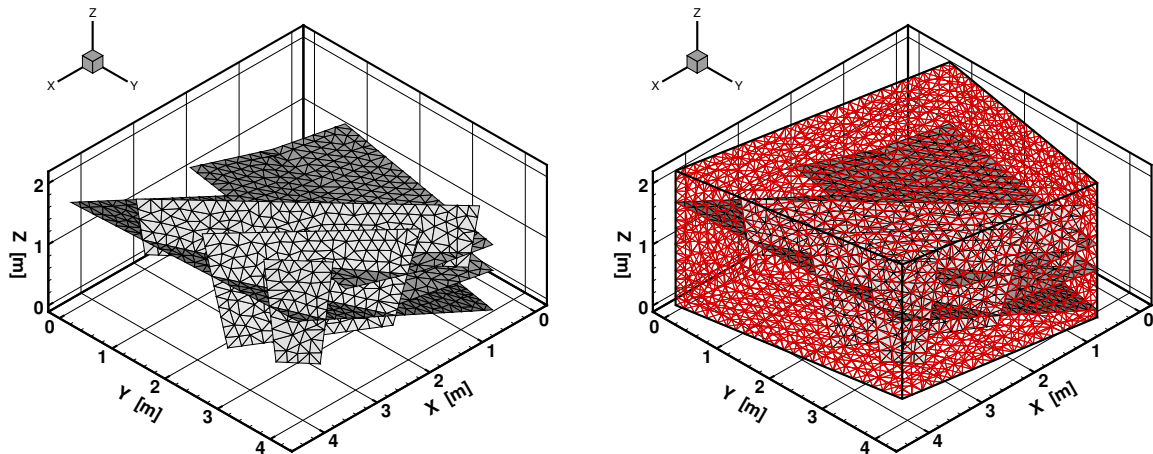


Abbildung 5.5: Vernetzung des Feldversuchsblocks Pliezhause mit ART. Links: 3D-Kluftnetzwerk. Rechts: 3D-Kluft-Matrix-System.

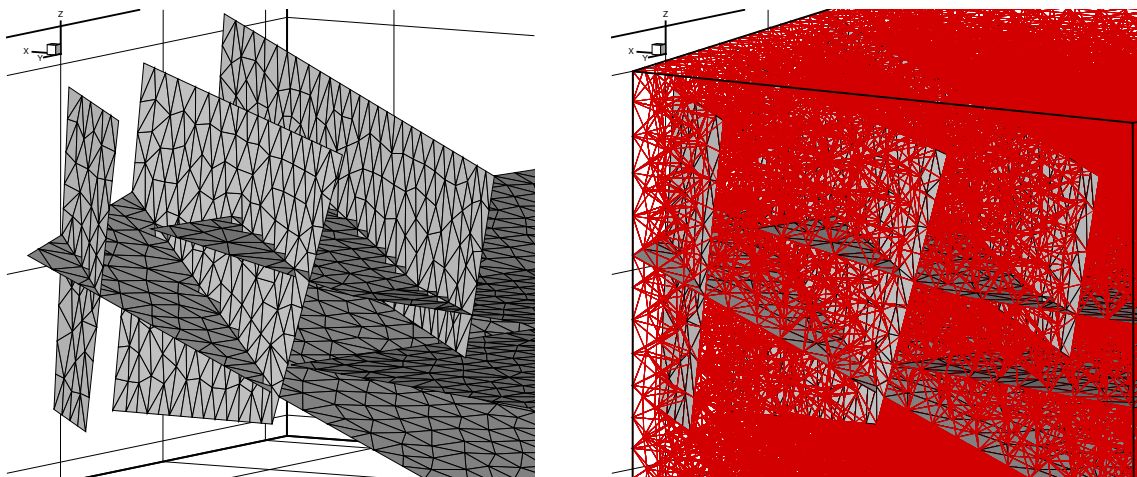


Abbildung 5.6: Ausschnitt der Vernetzung des Feldversuchsblocks Pliezhause mit ART. Links: 3D-Kluftnetzwerk. Rechts: 3D-Kluft-Matrix-System.

Im Folgenden wird das Datenformat zur Ein- und Ausgabe sowie die von ART benötigte Steuerdatei erläutert. Die Ein- und Ausgabe erfolgt in ASCII-Dateien. Die Beschreibung von zwei- und dreidimensionalen Gebieten erfolgt mit Hilfe eines hierarchischen Aufbaus:

Knoten \leftrightarrow Kanten (Kurven) \leftrightarrow Flächen (Patche) \leftrightarrow Volumen

Abb. 5.7 gibt ein einfaches Gebiet mit der zugehörigen Eingabe- und Steuerdatei wieder. Dieses Beispiel soll als Grundlage für die weiteren Ausführungen dienen. Jede Eingabedatei, im Beispiel `input.bnd`, beginnt mit einem Header, der als Information die Anzahl der Knoten (VertexNumber), Kanten (EdgeNumber), Flächen (FaceNumber) und Volumen (ElementNumber) enthält. Die Werte müssen mit den nachfolgenden Daten konsistent sein. Da ART allgemein für die Vernetzung getrimmter NURBS (Non-Uniform Rational B-Splines)-Körper

entwickelt wurde, können an dieser Stelle statt Kanten auch Kurven und statt Flächen Patche vorgegeben werden (siehe dazu FUCHS (1999)[65]). Es folgt die Liste der Knotenkoordinaten $x y z$, die mit \$ abgeschlossen wird. Zur späteren Referenzierung werden die Knoten ebenso wie alle weiteren Listen intern mit 0 beginnend durchnummeriert. Daran schließt sich die Liste der Kanten an, die aus jeweils zwei Knoten bestehen. Die Kante erhält außerdem eine beliebige positive Kennziffer größer Null (im Beispiel die kursiv gedruckten Ziffern 1–6), die sie eindeutig identifiziert. Bei der Netzgenerierung wird diese Kennziffer jeder Elementkante zugewiesen, die auf der entsprechenden Kante zu liegen kommt. Auf diese Weise können den Kanten später beispielsweise Randbedingungen zugewiesen werden („alle Kanten mit der Kennziffer 5 erhalten einen Dirichlet-Rand mit dem Wert Y “). Negative Kennziffern werden als innere Ränder (Klüfte) interpretiert (im Beispiel die kursiv gedruckte -1). Sie werden deswegen von äußeren Rändern unterschieden, weil für sie keine Randbedingungen, sondern Materialeigenschaften (Kluftöffnungsweite, Permeabilität, Porosität etc.) benötigt werden. Die Kennziffer 0 kommt in der Eingabedatei nicht vor, sie wird in der Netzausgabe denjenigen Kanten zugeteilt, die im Innern des Gebiets liegen und keine definierte Bedeutung haben. Die Netzgenerierung von *ART* wird von den Kennziffern in keiner Weise beeinflusst, die Interpretation wird allein vom darauf aufsetzenden Simulationsprogramm vorgenommen. Eine zu den Kanten analoge Vorgehensweise gilt für die Flächen. Flächen erhalten in 2D positive (Zuweisung von Materialeigenschaften), in 3D positive (Zuweisung von Randbedingungen) oder negative (Definition als Kluft und Zuweisung von Materialeigenschaften) Kennziffern. Sie werden durch die Kanten beschrieben, von denen sie berandet werden. Im Beispiel in Abb. 5.7 besteht die Fläche des Gebiets mit der Kennziffer 1 (Zahl im Kreis) aus den Kanten mit den internen Referenzen 0–5 (Zahlen im Kästchen). Volumen, die im vorliegenden Beispiel nicht gegeben sind, können positive Kennziffern haben (Zuweisung von Materialeigenschaften), und sie werden durch die Flächen definiert, die ihren Rand bilden.

Alle grundlegenden Daten werden *ART* in einer Steuerdatei übergeben. Der Name der Steuerdatei wird beim Programmaufruf angegeben (im Beispiel „art default“). Mit % beginnende Zeilen sind wie bei der Eingabedatei stets eine Kommentarzeile. *type* gibt die Art des zu erzeugenden Netzes an. Bei der Vernetzung zweidimensionaler Gebiete ebenso wie bei der Generierung von Oberflächennetzen muss als *type* 2D verwendet werden, bei der Erzeugung von Volumennetzen 3D. Der Name nach *boundary* gibt die Eingabedatei an (hier **input.bnd**), der Name nach *filename* die Ausgabedatei (hier **input**). An den Namen der Ausgabedatei wird die Endung .net angehängt sowie die fortlaufende Nummer des erzeugten Netzes im aktuellen Rechenlauf. Für das Beispiel in Abb. 5.7, in dem nur ein Netz erzeugt wird, ergibt sich daraus **input0.net**. Der Wert für *density* bestimmt die Dichte des zu erzeugenden Netzes und entspricht dabei ungefähr der Kantenlänge der Triangulierung. Mit *density function* kann eine Dichtefunktion ausgewählt werden. Für Oberflächen- und Volumennetze ist die Dichtefunktion 0 implementiert, d.h., es können Netze mit konstanter Dichte erzeugt werden. Für ebene Gebiete existiert außerdem die Dichtefunktion 3, die die Dichte im Bereich komplexer Geometrien (kleine Winkel, sich verschneidende Klüfte) skaliert. Der für *density* angegebene Wert ist dann Maximalwert. Weiterhin kann für zweidimensionale Gebiete statt einem direkten Wert auch eine Funktion **dens.func** in einer eigenen Datei vorgegeben werden. Im Beispiel wird die Kluft mit der Kennziffer -1 mit einer Dichte von 0.005 belegt. Auf diese Weise können für unterschiedliche Klüfte unterschiedliche Dichtewerte definiert werden, ansonsten ist das Vorgehen

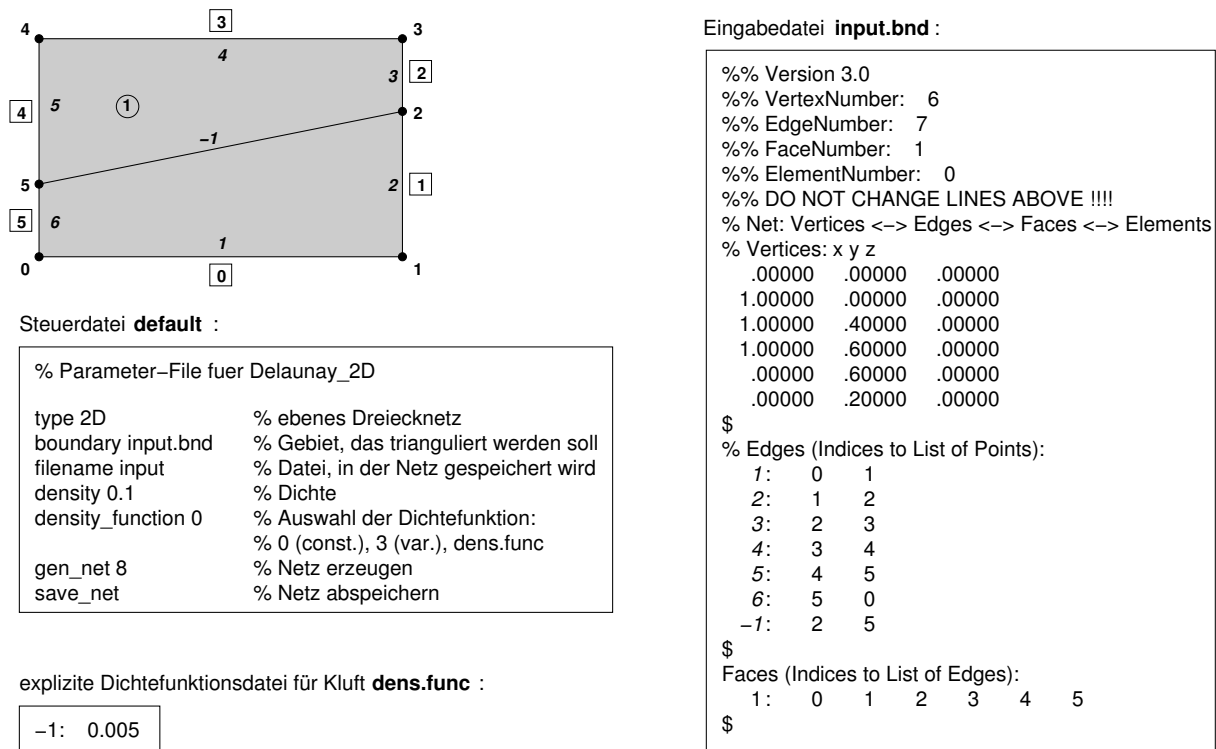


Abbildung 5.7: Dateien und Eingabeformat für ART

ähnlich wie bei Dichtefunktion 3. Der Befehl *gen_net* erzeugt ein neues Netz. Beginnend mit der Startkonfiguration werden im vorliegenden Beispiel acht Iterationen des CG-Verfahrens zur Optimierung durchgeführt und anschließend die Triangulierung berechnet. Mit *save_net* wird das erzeugte Netz abgespeichert. Zu beachten ist, das Netze aus einem früheren Programmablauf überschrieben werden.

5.2.2 Erweiterungsmodul FRACMESH

Um die Vorzüge des Netzgenerators ART auch für die äquidimensionale Kluftmodellierung nutzen zu können, wurde das Erweiterungsmodul *FRACMESH* implementiert. *FRACMESH* verarbeitet zweidimensionale Gebiete. Die Klüfte werden mit Vierecken über die gesamte Kluftbreite vernetzt (Abb. 5.8). Dazu werden die von ART niederdimensional diskretisierten Klüfte aufgeschnitten. Die Kluftknoten werden verdoppelt und senkrecht zur Kluft auf eine vorzuziehende Kluftbreite auseinander geschoben. Knoten, die ein Kluftende oder eine Kluftkreuzung darstellen, werden gesondert behandelt. Anschließend wird die Inzidenzmatrix der Matrixelemente aktualisiert und das Netz um die Kluftkreuzungen herum geglättet.

FRACMESH benötigt als Eingabedateien die Gebietsbeschreibung und das von ART erzeugte Gitter (in Fortführung des Beispiels aus Abb. 5.7 die Dateien **input.bnd** und **input0.net**), eine Datei **input.frac**, die das gleiche Format hat wie im Beispiel die Datei **dens.func**, in der aber statt des Dichtefunktionswertes die jeweilige Kluftöffnungsweite für jeden Kluftkennwert eingetragen wird, sowie eine Konfigurationsdatei, die die Art der Vernetzung von Kluft-

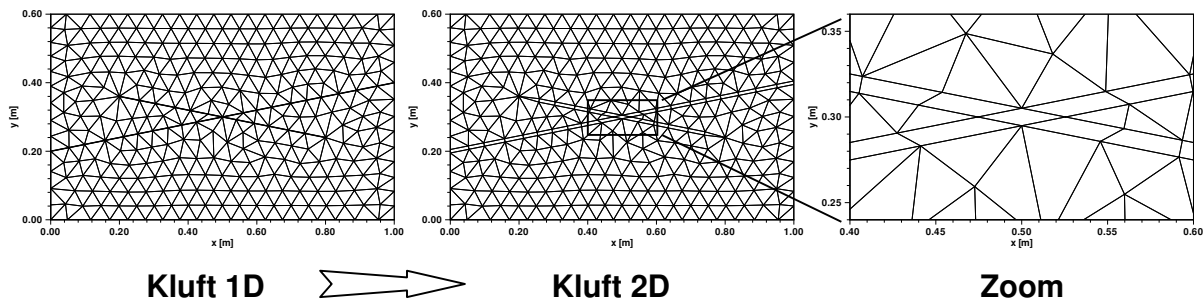


Abbildung 5.8: Vernetzung der Klüfte. Links: Niederdimensional mit 1D-Elementen. Mitte, Rechts: Äquidimensional mit Viereckselementen, Grobgitter.

kreuzungen und Kluffenden steuert. Der zugrunde liegende Algorithmus lässt sich in die folgenden Punkte gliedern:

- Einlesen der Eingabedateien.
- Extrahieren der Kluffobjekte (Knoten, Kanten, Flächen/Elemente).
- Allen Kluffknoten werden die für sie jeweils relevanten Kluffinformationen zugewiesen.
- Verdoppelung der Kluffknoten und Ermittlung der neuen Knotenpositionen.
- Generierung der neuen Kanten und Flächen für die Kluffdiskretisierung.
- Gegebenenfalls Glättung der Knotenstruktur in den Kreuzungsbereichen der Klüfte.
- Bestimmung der neuen Gebietsgeometrie.
- Ausgabe der neuen Gebietsgeometrie und des neu vernetzten Gebietes.

Anhand der Gebietsbeschreibung (im Beispiel **input.bnd**) wird den einzelnen Kluffobjekten aus dem mit *ART* erzeugten Netz eine Zugehörigkeit zu einer bestimmten Geometrie (einer Kluft oder einem äußeren Rand) zugewiesen. Diese wird an die neu generierten Kluffobjekte weitervererbt, sodass bei der Neuerstellung der Gebietsgeometrie eine eindeutige Zuordnung der einzelnen Elemente zu der entsprechenden Kluft oder dem entsprechenden Rand möglich ist. Als Kluffobjekte werden dabei alle Knoten, Kanten und Flächen (Elemente) bezeichnet, die eine Kluft beschreiben (wobei in Umkehrung der *ART*-Nomenklatur Klüfte als innere Klüfte und Ränder als äußere Klüfte definiert werden), sowie alle diejenigen Kanten und Flächen, die an eine Kluft angrenzen. Letzteres ist notwendig, weil für die Diskretisierung der Klüfte neue Knoten und Kanten erzeugt werden, die gegebenenfalls in die angrenzenden Matrixkanten und -flächen integriert werden müssen, um wieder ein konsistentes Netz zu erhalten. Zentrales Element der gesamten Generierung und Neuordnung sind die Kluffknoten, die alle notwendigen Informationen über den angrenzenden Netzbereich enthalten. Jeder Kluffknoten „weiß“, zu wie vielen und welchen Kanten er gehört, welches davon Kluffkanten, Matrixkanten oder Randkanten sind, in welcher Reihenfolge sie unter welchem Winkel gegen den Uhrzeigersinn sortiert anliegen, und welches sein neu erzeugter Knotennachbar auf der anderen Seite der zweidimensional diskretisierten Kluft ist. Auf diese Weise ist eindeutig

festgelegt, welche der Kanten den Originalknoten behält und welche einen neuen Knoten zugewiesen bekommt. Für Kluftkanten und die daran anliegenden Flächen ist das Vorgehen analog. Die abschließende Bestimmung der neuen Gebietsgeometrie erfolgt durch Ablaufen der (gerichteten) Kluft- und Randkanten. Die neuen Eckpunkte werden über ein Winkelkriterium ermittelt. Zwischen den Eckpunkten werden die neuen Gebietskanten generiert, aus denen sich die Teilgebiete zusammensetzen. Im Gegensatz zur Eingabegeometrie, die meist durch eine einzige *Domain* definiert wird, besteht das Gesamtgebiet nun aus mehreren *Subdomains*, die in sich zusammenhängende Gebiete darstellen. Für das Beispiel aus Abb. 5.7 ergeben sich drei Teilgebiete, eins für die jetzt zweidimensionale Kluft, eins für die Matrix oberhalb und eins für die Matrix unterhalb der Kluft.

FRACMESH erlaubt es, die Gestaltung der Kluftkreuzungs- und Kluftendbereiche zu steuern. Auf diese Weise kann die Elementstruktur im Kreuzungsbereich optimiert und an die gegebene Problematik und die zugrunde liegende Netzstruktur angepasst werden. Bei der Erzeugung der einzelnen Subdomains lässt sich auswählen, ob das neu entstandene Gebiet, das nun die Kluftkreuzung darstellt und das in Abhängigkeit von der Anzahl der an die Kreuzung anliegenden Klüfte im Allgemeinen aus nicht mehr als ein oder zwei Elementen besteht, eine eigene Subdomain bilden soll (sodass ihr beispielsweise eigene Materialkennwerte zugewiesen werden können), oder ob es dem Teilgebiet der ersten der an den ursprünglichen Kreuzungsknoten anliegenden Klüfte zugeordnet werden soll (Abb. 5.9, die Grautöne charakterisieren die einzelnen Subdomains).

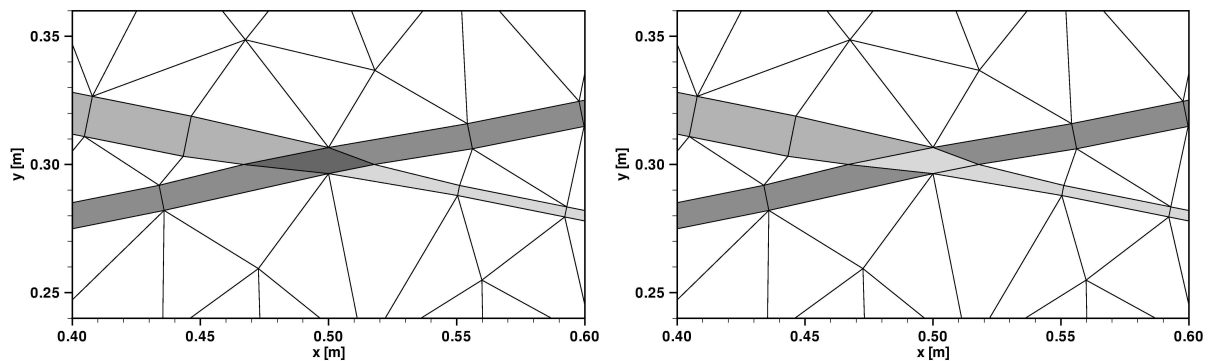


Abbildung 5.9: Definition der Teilgebiete in den Klüften. Links: Die Kluftkreuzung erhält eine eigene Subdomain. Rechts: Die Kluftkreuzung wird der Subdomain der ersten anliegenden Kluft zugeordnet.

Die Knoten, die eine Kluftkreuzung im äquidimensionalen Fall definieren, werden aus dem ursprünglichen Kluftkreuzungsknoten erzeugt. Sowohl die neu generierten als auch der Originalknoten müssen daraufhin neu positioniert werden. Eine Möglichkeit, die neuen Koordinaten zu bestimmen, besteht darin, den Knoten entlang der Winkelhalbierenden zweier jeweils benachbarter Kluftachsen zu verschieben. Haben die entsprechenden Klüfte die gleiche Kluftöffnungsweite, so ergibt sich die neue Knotenposition aus dem Schnittpunkt der Winkelhalbierenden mit dem Klufttrand. Entstehen aufgrund unterschiedlicher Kluftöffnungsweiten der anliegenden Klüfte zwei Schnittpunkte mit der Winkelhalbierenden, so wird die neue

Knotenposition ermittelt, indem die Koordinaten der beiden Schnittpunkte gemittelt werden. Alternativ dazu können auch die Schnittpunkte der Kluftränder jeweils zweier benachbarter Klüfte gewählt werden, um die neuen Koordinaten für die Kluftkreuzungsknoten zu erhalten. Beide Varianten sind in Abb. 5.10 dargestellt.

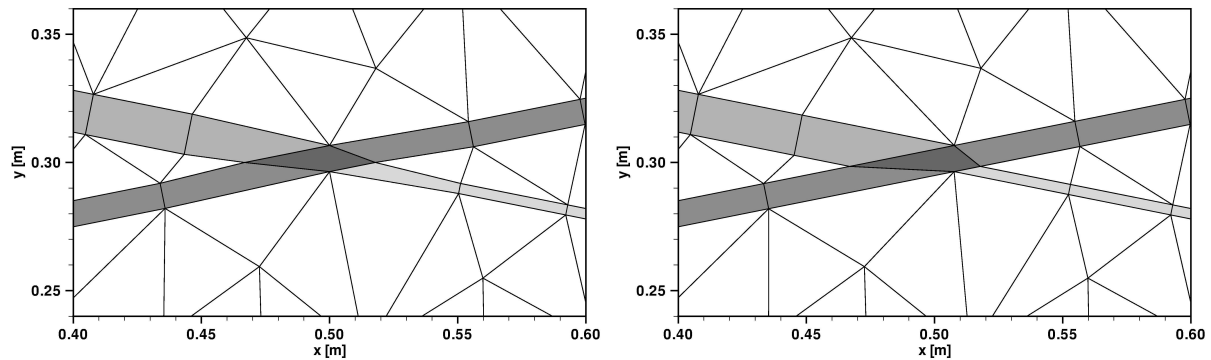


Abbildung 5.10: Positionierung der Kluftkreuzungsknoten. Links: Verschiebung entlang der Winkelhalbierenden. Rechts: Verschiebung auf die Schnittpunkte der Kluftkanten.

Gerade bei Klüften, die sich unter einem verhältnismäßig flachen Winkel schneiden, treten im Kreuzungsbereich häufig Elemente von relativ schlechter Qualität auf, die durch die Aufweitung der eindimensionalen Kluft auf zweidimensionale Elemente und der damit einhergehenden Verschiebung der Knoten weiter verzerrt werden. Auch Elemente von ursprünglich guter Qualität werden durch die Umstellungen im Kluftkreuzungsbereich verschlechtert. Um diesen Effekt zu minimieren, kann die Elementstruktur im Kreuzungsbereich geglättet werden. Dafür wird der in der jeweiligen Kluftrichtung erste Knoten nach dem Kreuzungspunkt in Richtung des zweiten Knotens in Kluftrichtung um einen normierten Faktor $[0;1]$ verschoben. Der Glättungsschritt kann vor oder nach dem Verschieben der Knoten durchgeführt werden. Im ersten Fall entsteht für den ersten Knoten in Kluftrichtung eine senkrecht zur Kluftachse positionierte Kante. Im zweiten Fall steht diese Kante schräg zur Kluftachse, weil die Verschiebung auf der Grundlage der neuen Knotenpositionen der einzelnen Kluftkanten durchgeführt wird (Abb. 5.11 und Abb. 5.12).

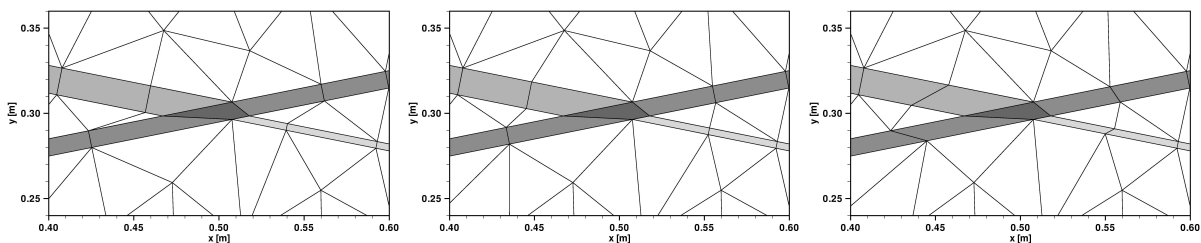


Abbildung 5.11: Glätten des Kreuzungsbereiches. Links: Ohne Glättung. Mitte: Glättung vor dem Verschieben der Knoten. Rechts: Glättung nach dem Verschieben der Knoten.

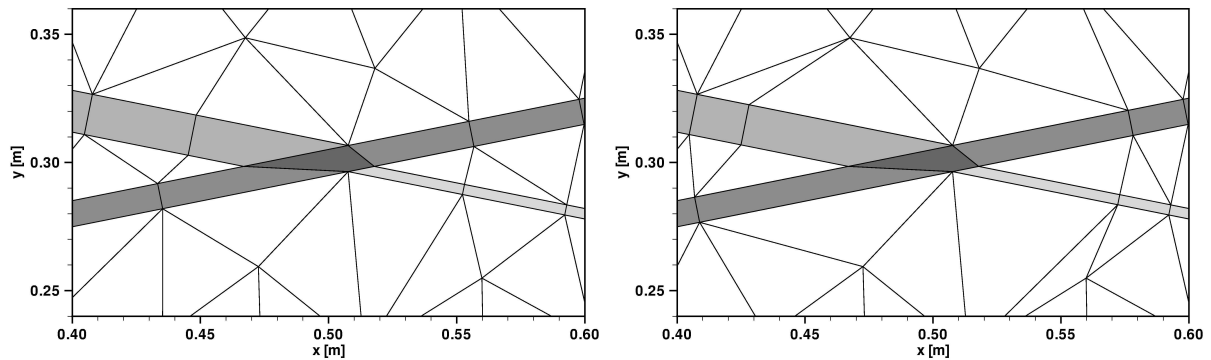


Abbildung 5.12: Glätten des Kreuzungsbereiches. Links: Mit Faktor 0.5. Rechts: Mit Faktor 0.75.

Auch Klüfte, die im Gebiet enden, müssen gesondert betrachtet werden. Als problematisch erweist sich hier die meist sehr unterschiedliche Schrittweite in Kluft und Matrix, da die Kluft im Verhältnis zu den umliegenden Matrixelementen oft sehr schmal ist. Als Abschluss bieten sich zwei Möglichkeiten an. Entweder wird die Kluft selber mit einem Dreieck abgeschlossen, oder aber sie wird bis zum Ende mit Rechtecken vernetzt, und der dreieckige Abschluss findet sich in der Matrix wieder (Abb. 5.13). Im zweiten Fall müssen die Elemente im Matrixbereich um das Klüftende herum neu geordnet werden. Da die Geometrie des abschließenden Dreiecks in beiden Fällen ausgesprochen ungünstig ist, sind hier Probleme bei der numerischen Lösung der Prozessgleichungen zu erwarten. Der Einfluss der Form des Klüftendes auf das Lösungsverhalten wird in Kap. 6.1 diskutiert.

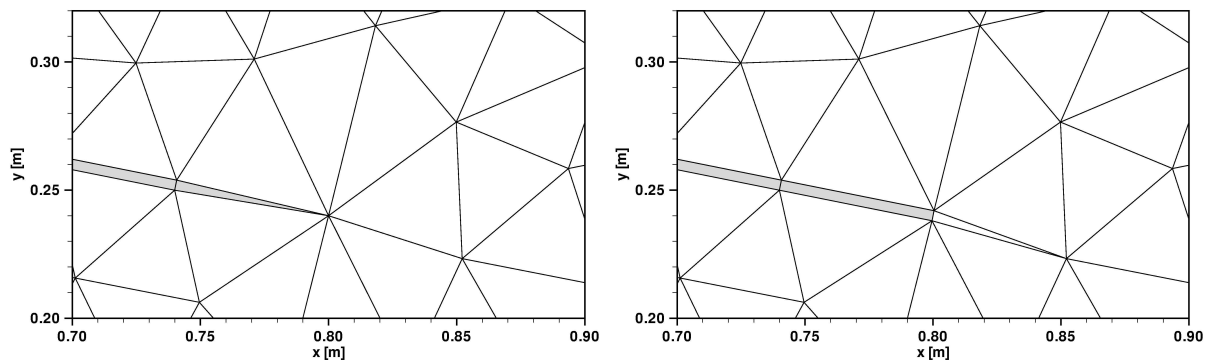


Abbildung 5.13: Klüftenden. Links: Dreieck. Rechts: Rechteck.

Das erzeugte Netz hat für Verfahren, die ihre Unbekannten an den Elementknoten definieren, keine Freiheitsgrade in der Kluft, da die Klüfte mit Vierecken über die gesamte Klüftbreite vernetzt werden. Wird zur Lösung des diskretisierten Problems ein Mehrgitterverfahren verwendet, so bildet das Netz das Basis- oder Grobgitter hierfür, und die Freiheitsgrade in der Kluft entstehen durch die Verfeinerungsschritte im Mehrgitterzyklus. Bei Verwendung eines iterativen Löser ohne Mehrgitter empfiehlt es sich, vor der Berechnung zwei oder drei Verfeinerungsschritte durchzuführen, um eine für eine sinnvolle äquidimensionale Betrachtung des Systems ausreichende Anzahl von Freiheitsgraden in der Kluft zu erhalten. Gegebenfalls ist im

Bereich der Klüfte eine gerichtete Verfeinerung quer zur Kluft durchzuführen, um günstigere Elementgeometrien zu erhalten.

5.3 Programmsystem MUFTE–UG

Die programmtechnische Umsetzung der verwendeten Diskretisierungen wurde auf der Basis des Programmsystems *MUFTE–UG* durchgeführt. *MUFTE–UG* ist die Verbindung der Softwarepakete *MUFTE* und *UG* (Abb. 5.14). *UG* wird vom Simulation in Technology Center am IWR (Interdisziplinäres Zentrum für Wissenschaftliches Rechnen) der Universität Heidelberg entwickelt und gepflegt (BASTIAN, BIRKEN, JOHANNSEN, LANG, ECKSTEIN, NEUSS, RENTZ – REICHERT & WIENERS (1997)[11]), *MUFTE* (*Multiphase Flow, Transport and Energy Model*) am Institut für Wasserbau, Lehrstuhl für Hydromechanik und Hydrosystemmodellierung, der Universität Stuttgart (HELMIG, BASTIAN, CLASS, EWING, HINKELMANN, HUBER, JAKOBS & SHETA (1998)[86], BREITING, HINKELMANN & HELMIG (2000)[32]).

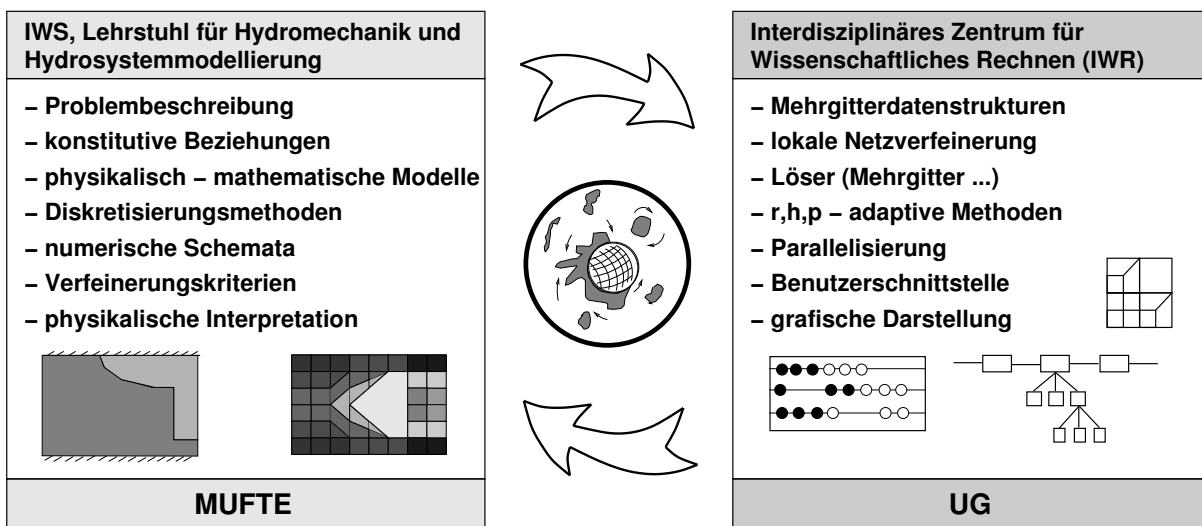


Abbildung 5.14: Struktur des Programmsystems *MUFTE–UG*.

5.3.1 Software–Toolbox UG

UG ist ein umfangreiches Softwaresystem, das eine Reihe effizienter Techniken für die numerische Lösung partieller Differentialgleichungen bereitstellt. Spezielles Gewicht wird dabei auf adaptive Netzverfeinerung, robuste Mehrgittermethoden und Parallelisierungstechniken für unstrukturierte Gitter gelegt. Im Einzelnen lässt sich das in weiten Teilen modular aufgebaute Programmsystem in drei große Teile gliedern (Abb. 5.15):

- UG Library
- Problem Class Libraries
- Applications

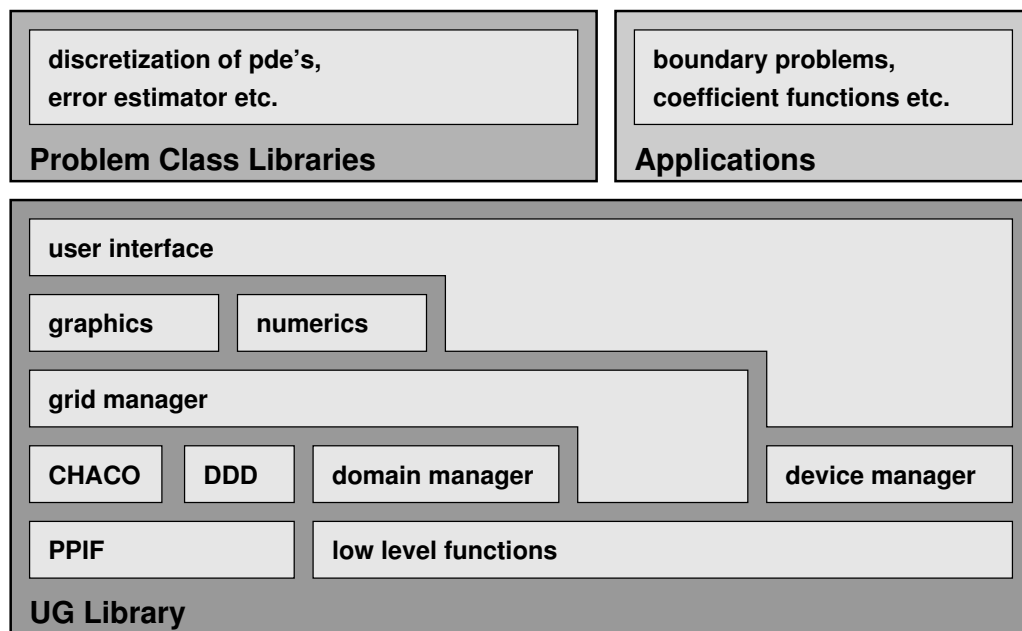


Abbildung 5.15: Struktur der Software-Toolbox UG.

Die *UG Library* enthält die geometrischen und algebraischen Datenstrukturen, eine große Anzahl an Netzverfeinerungs- /vergrößerungstechniken, numerische Algorithmen und Visualisierungstechniken sowie eine Benutzerschnittstelle. Die einzelnen Bereiche sollen nachfolgend kurz vorgestellt werden:

Das Subsystem *user interface* bietet dem Nutzer eine Skriptsprache an, mit der er komplexe Rechenläufe steuern und kontrollieren kann. Gleichzeitig kann eine beliebige Anzahl von Fenstern auf dem Bildschirm geöffnet werden, in denen die aktuellen Simulationsergebnisse mit Hilfe verschiedener Visualisierungstechniken angezeigt werden. Weiterhin stehen Schnittstellen für die Ausgabe der Ergebnisse im Format verschiedener Graphikprogramme (z.B. AVS, Tecplot) bereit. Die für Netzdarstellung, Konturdarstellung, Farbverläufe oder Vektorfelddarstellung notwendigen Methoden werden im Subsystem *graphics* bereitgestellt.

Das Subsystem *numerics* umfasst eine Reihe unterschiedlicher Komponenten für numerische Operationen. Dazu gehören einfache Matrix- /Vektoroperationen wie skalieren, kopieren, zu Null setzen etc., weiterhin Gittertransferoperationen, verschiedene Glätter wie z.B. Jacobi, Gauß-Seidel oder ILU-Zerlegung, Löser wie Conjugate-Gradient- oder Mehrgitterlöser sowie Werkzeuge für die Diskretisierung, die z.B. Berechnungen für Finite Volumen und Finite Elemente (Gradienten, Jacobi-Matrizen, Determinanten etc.) oder Quadraturregeln beinhalten.

Der Kern von *UG* ist die Datenstruktur für unstrukturierte Gitter, die die Verwendung von Netzen aus beliebigen Elementen im zwei- und dreidimensionalen Raum erlaubt. Der *grid manager*, dem diese Datenstruktur untergeordnet ist, stellt auch Funktionalitäten für die Verfeinerung und Vergrößerung sowie Standardformfunktionen für verschiedene Elementtypen zur Verfügung.

Der *domain manager* ermöglicht die geometrische Darstellung zwei- und dreidimensionaler Modellgebiete basierend auf zwei unterschiedlichen Ansätzen. Die *standard domain* beruht auf einer stückweisen Beschreibung des Gebietsrandes. Dabei wird jedes Randsegment durch eine Abbildung aus dem $(n - 1)$ -dimensionalen Parameterraum definiert, $n = 2,3$. Das *linear geometry model* ist für den 3D-Raum gültig und stellt bei komplexen Gebietsberandungen die einzelnen Randsegmente mit Hilfe unstrukturierter Dreiecksnetze dar.

Der *device manager* unterstützt die Ein- und Ausgabe ohne grafische Benutzerschnittstelle sowie mit X11 und Apple Macintosh. Er ermöglicht außerdem die Grafikausgabe in Postscript- und Binärdateien. Das Subsystem *low* bietet grundlegende Funktionalitäten wie Speichermanagement, Input/Output und Debugging-Werkzeuge.

Mit *UG* können Simulationsläufe auf Parallelrechnern vom MIMD-Typ durchgeführt werden. Das Subsystem *DDD (Dynamic Distributed Data)* (BIRKEN (1998)[25]) erzeugt und verwaltet die verteilten Datenstrukturen. *DDD* verwendet *PPIF (Parallel Processor Interface)* als *portables message passing interface*. *PPIF* ist für PVM, MPI, PARIX und verschiedene andere Message-Passing-Systeme implementiert worden. Als *load balancer* wird *CHACO* (HENDRICKSON & LELAND (1993)[90]) eingesetzt.

Die *Problem Class Libraries* enthalten die numerische Diskretisierung, Fehlerschätzer und gegebenenfalls spezielle Lösungsverfahren für ein bestimmtes System von Differentialgleichungen. Der Aufbau ist modular und um eigene Diskretisierungs- und Lösungsverfahren erweiterbar, wobei für viele Operationen und Funktionalitäten auf die *UG Library* zurückgegriffen werden kann.

In den *Applications* werden schließlich die Anwendungen bereitgestellt, die die Gebietsbeschreibung, die Randbedingungen sowie alle erforderlichen Koeffizientenfunktionen beinhalten. Typischerweise wird ein Rechenlauf über ein Skriptfile mit der zuvor angesprochenen Skriptsprache gesteuert. Es existieren Anwendungen aus unterschiedlichen Bereichen, u.a. für die lineare Elastizität, die Plattentheorie, die Navier-Stokes-Gleichung oder die Dichteströmung.

5.3.2 Softwarepaket MUFTE

MUFTE umfasst eine Reihe von *Problem Class Libraries* und *Applications*, in denen physikalisch-mathematische Modelle, konstitutive Beziehungen, Diskretisierungsmethoden und Anwendungsbeispiele für die Modellierung von Mehrphasen-Mehrkomponenten-Systemen implementiert sind. Einzelne Module sind z.B.:

- isotherme Einphasen-Multikomponenten-Prozesse (HINKELMANN, SHETA, CLASS & HELMIG (2000)[93], HINKELMANN, SHETA, HELMIG, SAUTER & SCHLÜTER(2000)[94])
- isotherme Einphasen-Zweikomponenten-Prozesse in geklüftet-porösen Medien (niederdimensional) (NEUNHÄUSERER, HEMMINGER & HELMIG (2000)[162])

- isotherme Einphasen-Zweikomponenten-Prozesse in geklüftet-porösen Medien (äquidimensional) (NEUNHÄUSERER, GEBAUER, HINKELMANN, KORNHUBER & HELMIG (2000)[157], NEUNHÄUSERER, GEBAUER, OCHS, HINKELMANN, KORNHUBER & HELMIG (2001)[158])
- isotherme Zweiphasen- und Dreiphasen-Prozesse ohne Phasenübergang (CROISÉ, SHETA & HELMIG (1995)[48], CROISÉ, SHETA & HELMIG (1995)[49])
- isotherme Dreiphasen-Dreikomponenten-Prozesse mit Phasenübergang (HUBER & HELMIG (1997)[101], HUBER (2000)[100])
- nichtisotherme Dreiphasen-Dreikomponenten-Prozesse mit Phasenübergang (EMMERT (1996)[59], CLASS (2001)[42])
- isotherme Zweiphasen-Zweikomponenten-Prozesse in geklüftet-porösen Medien (niederdimensional) (BASTIAN, CHEN, EWING, HELMIG, JAKOBS & REICHENBERGER (2000)[12], HELMIG, BASTIAN, JAKOBS & REICHENBERGER (2001)[87])

Für die Implementierung des äquidimensionalen Modellansatzes in MUFTE-UG wurden die *Problem Class Library* und die *Applications* für isotherme Einphasen-Zweikomponenten-Prozesse in geklüftet-porösen Medien (NEUNHÄUSERER, HEMMINGER & HELMIG (2000)[162]) sowie die *Problem Class Library* und die *Applications* für Finite Elemente (WIENERS (1997)[212]) als Grundlage verwendet. Auf der Ebene der *Applications* wurde im Wesentlichen die Schnittstelle zum Netzgenerator *ART* erweitert. Die Schnittstelle war bisher für die niederdimensionalen Netze von *ART* implementiert. Die Weiterentwicklung ermöglicht nun auch das Einlesen der äquidimensionalen Netze aus *FRACMESH* unter Berücksichtigung der neu hinzugekommenen *Subdomain*-Informationen. Die *Problem Class Library* für Finite Elemente wurde für gemischt-hybride Finite Elemente im \mathcal{RT}_i um die diskretisierte Strömungsgleichung einschließlich der notwendigen Koeffizientenfunktionen erweitert und in ihrer Struktur der *Problem Class Library* für Einphasen-Zweikomponenten-Prozesse angeglichen.

6 Beispiele

Die Anwendbarkeit der vorgestellten Ansätze und Diskretisierungsverfahren auf die diskrete Modellierung von Strömungs- und Transportprozessen in geklüftet-porösen Medien wird im Folgenden anhand einer Reihe von Beispielen analysiert. Dabei wird insbesondere das Leistungsvermögen des äquidimensionalen Modellansatzes im Vergleich mit der niederdimensionalen Formulierung und das Lösungsverhalten der ausgewählten numerischen Diskretisierungsverfahren (gemischt-hybride Finite Elemente bzw. Boxverfahren für die Strömung und Boxverfahren mit unterschiedlichen Upwinding-Strategien für den Transport) bei nieder- und äquidimensionaler Modellierung untersucht und mit Blick auf die in Kap. 1.4 aufgestellten Anforderungen bewertet, um eine Einschätzung der Anwendungsbereiche und des Leistungsumfangs der diskutierten Methoden zu ermöglichen.

Die in Kap. 1.4 genannte hierarchische Zerlegung, die als robustes Lösungsverfahren für äquidimensional diskretisierte Modellprobleme aktuell am Institut für Mathematik II, Fachbereich Mathematik und Informatik der Freien Universität Berlin und im Rahmen des DFG-Projekts *Mehrgittermethoden und adaptive Euler-Lagrange-Verfahren zur Simulation von Strömungs- und Transportvorgängen in Kluftaquifersystemen* (z.B. GEBAUER (2003)[67], NEUNHÄUSERER, GEBAUER, HINKELMANN, KORNHUBER & HELMIG (2001)[158]) entwickelt wird, ist für den Transport noch nicht implementiert. Aus diesem Grund wurden für Strömung und Transport Konjugierte-Gradienten-Verfahren als Löser eingesetzt. Bei einer Diskretisierung mit dem Boxverfahren wurde die Vorkonditionierung für den Löser mit einem algebraischen Mehrgitter (nach BRAESS (1995)[30]) durchgeführt, das sich bei Testrechnungen als schneller und stabiler bei der Anwendung auf Kluft-Matrix-Systeme erwiesen hat als ein klassisches geometrisches Mehrgitter. Für die gemischt-hybriden Finiten Elemente wurde ein klassisches Mehrgitter mit symmetrischem Gauß-Seidel-Glätter sowie einer speziell angepassten Abbruch-Restriktion und einer kanonischen Prolongation (z.B. HACKBUSCH (1985)[78], BRAESS (1997)[31], BASTIAN & HELMIG (1999)[13]) als Vorkonditionierer angewendet. Beide Verfahren, insbesondere jedoch das klassische Mehrgitterverfahren, sind nicht robust gegenüber verschwindender Kluftöffnungsweite. Dies macht sich in Abhängigkeit von der Komplexität des dem Modellproblem zugrunde liegenden Kluftnetzwerks und speziell bei Verwendung des klassischen Mehrgitterverfahrens relativ früh bemerkbar. Da im Rahmen dieser Arbeit der Einfluss der Modellansätze und der Diskretisierungsverfahren im Vordergrund steht, wird in den hier aufgeführten Beispielen mit Kluftweiten $b \geq 5 \cdot 10^{-3}[m]$ gearbeitet. Die Parameter werden so gewählt, dass die eingesetzten Löser robust sind. Eine genaue Untersuchung der Löser mit einem Vergleich von klassischem und algebraischem Mehrgitter mit dem auf der hierarchischen Zerlegung basierenden Mehrgitter wird in GEBAUER, NEUNHÄUSERER, KORNHUBER, OCHS, HINKELMANN & HELMIG (2002)[68] und NEUNHÄUSERER, GEBAUER, OCHS, HINKELMANN, KORNHUBER & HELMIG (2002)[159] vorgestellt. Tab. 6.1 gibt einen Überblick über die für die

folgenden Beispiele verwendeten Parameter. Abweichungen davon werden im gegebenen Fall angezeigt. Die Parameter des Trägerfluids entsprechen den Werten von Wasser.

| Strömung | | |
|-------------|---|---|
| Parameter | $\eta = 0.0013[\text{kg}/(\text{ms})]$ | $\rho = 1000[\text{kg}/\text{m}^3]$ |
| Matrix | $k_{0xx} = k_{0yy} = 8.3333 \cdot 10^{-11}[\text{m}^2]$ | |
| Kluft 1d | $k_{0xx} = 8.3333 \cdot 10^{-8}[\text{m}^2]$ | |
| Kluft 2d | $k_{0xx} = k_{0yy} = 8.3333 \cdot 10^{-8}[\text{m}^2]$ | |
| Randbdg. | $p(x = 0.0[\text{m}], y) = 1.0 \cdot 10^5[\text{Pa}]$ | $p(x = 1.0[\text{m}], y) = 0.999 \cdot 10^5[\text{Pa}]$ |
| Transport | | |
| Parameter | $D_m = 1.0 \cdot 10^{-9}[\text{m}^2/\text{s}]$ | |
| Matrix | $n_e = 0.2[-]$ | $\alpha_l = \alpha_t = 0.01[\text{m}]$ |
| Kluft 1d | $n_e = 0.3[-]$ | $\alpha_l = 0.001[\text{m}]$ |
| Kluft 2d | $n_e = 0.3[-]$ | $\alpha_l = 0.001[\text{m}], \alpha_t = 0.0001[\text{m}]$ |
| Anfangsbdg. | $c(x, y, t = 0[\text{s}]) = 0.0[\text{kg}/\text{m}^3]$ | |
| Randbdg. | $c(x = 0.0[\text{m}], y, t) = 1.0[\text{kg}/\text{m}^3]$ $c(x = 1.0[\text{m}], y, t) = \text{frei}$ | |

Tabelle 6.1: Parameter, Rand- und Anfangsbedingungen für die Modellbeispiele.

6.1 Einzelkluft

Am Beispiel der Einzelkluft sollen eine Reihe grundlegender Effekte diskutiert werden, deren Ursachen und Abhängigkeiten sich in komplexeren Gebieten gegebenenfalls nicht mehr eindeutig nachvollziehen lassen. Wird der äquidimensionale Modellansatz auf Gebiete angewendet, die Klüftenden im Gebietsinnern beinhalten, so bestehen verschiedene Möglichkeiten, diese Klüftenden abzubilden (Kap. 5.2.2). Für die Einzelkluft wird der Einfluss der Form des Klüftendes auf das Lösungsverhalten im äquidimensionalen Fall und in Bezug auf die Lösung der entsprechenden niederdimensionalen Modellformulierung analysiert. Gleichzeitig wird das Verhalten der Diskretisierungsverfahren für den nieder- und den äquidimensionalen Fall untersucht.

6.1.1 Modellproblem

Das Modellgebiet stellt eine homogene, isotrope Gesteinsmatrix dar mit einer fast senkrecht stehenden Klucht in der Mitte des Gebiets (Abb. 6.1, links). Die Klucht schließt an keinen der Gebietsränder an. Die Kluchtöffnungsweite wurde zu $b = 5.0 \cdot 10^{-3}[\text{m}]$ gewählt. Für den oberen und den unteren Rand wurde eine Neumann-Randbedingung mit einem Fluss von Null (*No-Flow-Randbedingung*) vorgegeben, für den linken und den rechten Rand eine Dirichlet-Randbedingung. Beim Transport wurde für den rechten Rand ein freier Ausfluss angenommen. Die Strömung verläuft von links nach rechts. Die Werte der Modellparameter und Randbedingungen können Tab. 6.1 entnommen werden.

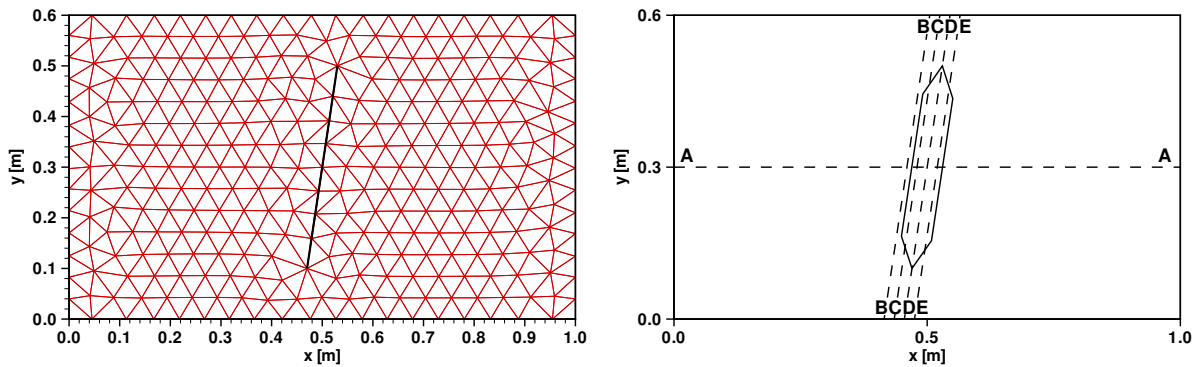


Abbildung 6.1: Modellgebiet mit Einzelkluft. Links: Geometrie und Grobgitter. Rechts: Skizze des Modellgebiets mit den Umrissen der zweidimensional dargestellten Klufft und den Schnittlinien A – E, entlang derer die Zustandsgrößen untersucht und miteinander verglichen werden (Klufftbreite nicht maßstäblich).

Abb. 6.1, links, zeigt die Gebietsgeometrie des Einzelklufftproblems und das Grobgitter mit 305 Knoten im niederdimensionalen Fall. Dies entspricht der Anzahl der Freiheitsgrade im Boxverfahren. Bei äquidimensionaler Betrachtung muss die Form des Klufftendes (Abb. 5.13) berücksichtigt werden: Bei dreieckiger Ausgestaltung beträgt die Anzahl der Knoten im Grobgitter 312, bei rechteckiger Ausgestaltung 314. Die Anzahl der Freiheitsgrade für die gemischt-hybriden Finiten Elemente entspricht der Anzahl der Kanten im Gebiet, beim äquidimensionalen Ansatz 861 (dreieckiges Klufftende) bzw. 865 (rechteckiges Klufftende). Auf die niederdimensionale Formulierung kann das gemischt-hybride Verfahren nicht angewendet werden. Tab. 6.2 verdeutlicht die Entwicklung der Freiheitsgrade bei uniformer Verfeinerung des gesamten Gebiets vom Grobgitter bis zum feinsten Gitter nach vier Verfeinerungsstufen.

| Level | niederdimensional | | äquidimensional | | |
|-------|-------------------|--------|-----------------|------------|--------|
| | Knoten | Kanten | dreieckig | rechteckig | Kanten |
| 0 | 305 | 312 | 861 | 314 | 865 |
| 1 | 1151 | 1179 | 3378 | 1187 | 3394 |
| 2 | 4469 | 4581 | 13380 | 4613 | 13444 |
| 3 | 17609 | 18057 | 53256 | 18185 | 53512 |
| 4 | 69905 | 71697 | 212496 | 72209 | 213520 |

Tabelle 6.2: Freiheitsgrade der verschiedenen Ansätze und Verfahren über vier Level.

In Abb. 6.1, rechts, sind schematisch die Schnittlinien abgebildet, entlang derer neben den zweidimensionalen Darstellungen im Folgenden die Zustandsgrößen Druck, Geschwindigkeit und Konzentration betrachtet werden. Linie A verläuft parallel zur x-Achse durch die Gebietsmitte. Linie D entspricht der bis zum oberen und unteren Rand verlängerten Klufftchse, Linie B verläuft parallel zur Klufftchse direkt außerhalb und die Linien C und E direkt innerhalb der Klufft mit einem Abstand von je $5.0 \cdot 10^{-4} [m]$ zum Klufftrand.

6.1.2 Ergebnisse der Strömungsmodellierung

Es werden zunächst die Ergebnisse der Strömungsmodellierung, d.h. die Größen Druck und Geschwindigkeit, bezüglich der einzelnen Ansätze und Verfahren miteinander verglichen. Abb. 6.2 zeigt die Druckverteilung im Modellgebiet. Da die Einzelklufft keinen großen Einfluss auf das Gesamtverhalten der Strömungsprozesse im Gebiet hat, lassen sich die Druckwerte für nieder- und äquidimensionalen Ansatz in dieser Auflösung kaum unterscheiden. Dargestellt ist die äquidimensionale Lösung, berechnet mit dem Boxverfahren. Wie bereits in Kap. 3.3.5 ausgeführt, ist die Approximation des Drucks bei den gemischt-hybriden Finiten Elementen diskontinuierlich, beim Boxverfahren dagegen kontinuierlich.

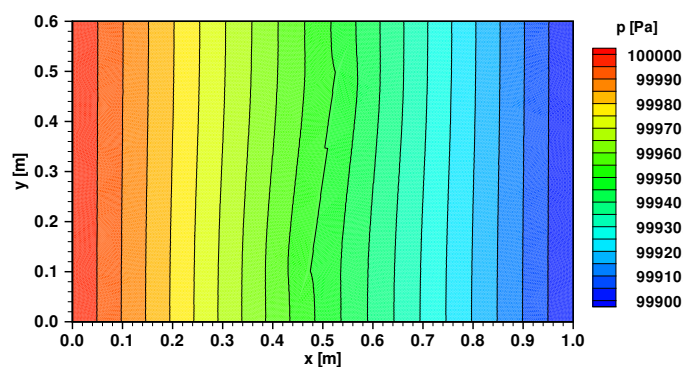


Abbildung 6.2: Druckverteilung im Modellgebiet mit Einzelklufft.

Da für die hier und im Weiteren untersuchten Modelle keine analytischen Lösungen und auch keine experimentellen Messdaten vorliegen, die eine Verifizierung oder Validierung der Ergebnisse ermöglichen könnten, werden ersatzweise die Ergebnisse verschiedener Verfeinerungsstufen miteinander auf Konvergenz verglichen. Dabei wird zuerst die äquidimensionale Formulierung betrachtet und die Resultate später dem niederdimensionalen Ansatz gegenübergestellt. Abb. 6.3 zeigt die auf dem äquidimensional diskretisierten Modellgebiet mit gemischt-hybriden Finiten Elementen ermittelte Verteilung der x - und der y -Komponente der Geschwindigkeit entlang der Schnittlinie B knapp außerhalb der Klufft für die Verfeinerungslevel 2, 3 und 4. In Abb. 6.4 sind die entsprechenden Werte entlang der auf der Klufftachse liegenden Schnittlinie D dargestellt. Die Größe d ist in diesem Zusammenhang der Abstand vom unteren Gebietsrand ($y = 0[m]$) entlang der jeweiligen Schnittlinie.

Es wird deutlich, dass die Werte am Rand in der Matrix sowie im Mittelbereich der Klufft für alle Level gut übereinstimmen. Offensichtlich bereitet jedoch der Bereich der Klufftenden bei etwa $d = 0.1[m]$ und $d = 0.5[m]$ Probleme bei der numerischen Erfassung, das dargestellte Lösungsverhalten lässt auf die Ausbildung von Unendlichkeitsstellen im Bereich der Eckpunkte der Klufftenden bei weiterer Verfeinerung des Gitternetzes schließen. Vergleiche mit der niederdimensionalen Lösung (hier nicht abgebildet) haben gezeigt, dass das Verhalten dort für Linie B ähnlich ist, die Spitzen für Linie D hingegen nicht existieren. Simulationen mit anderen äquidimensional diskretisierten Gebieten legten zudem den Schluss nahe, dass sich insbesondere Koeffizientensprünge in einem spitzen Winkel ungünstig auf die erzielten Ergebnisse auswirken.

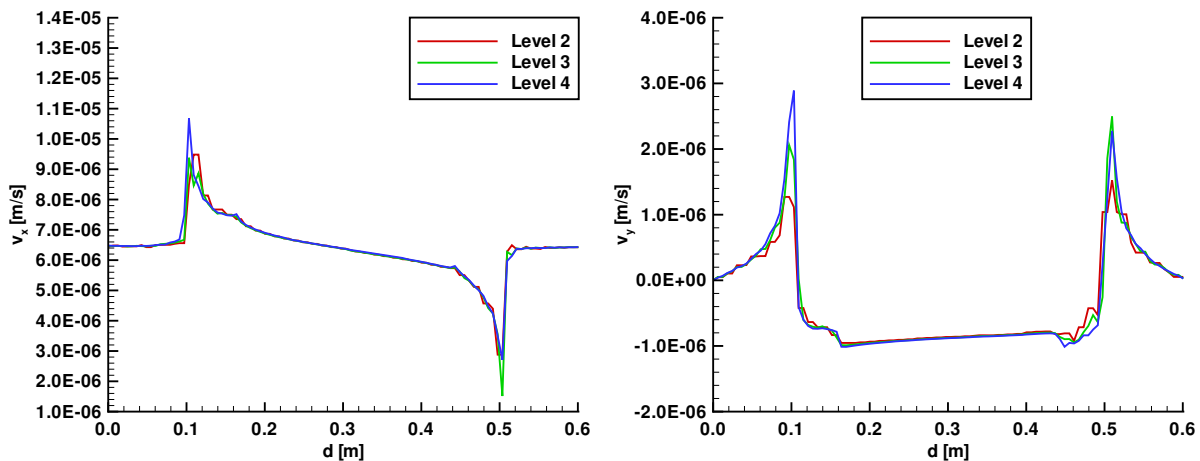


Abbildung 6.3: Geschwindigkeitsverteilung entlang Schnittlinie B für Level 2, 3 und 4 (gemischt-hybride FE). Links: x-Komponente. Rechts: y-Komponente.

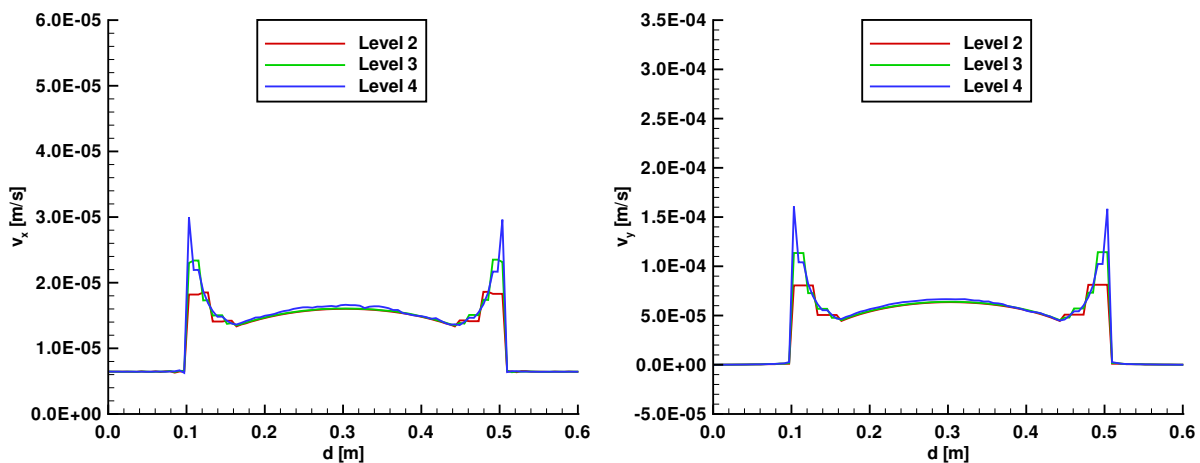


Abbildung 6.4: Geschwindigkeitsverteilung entlang Schnittlinie D für Level 2, 3 und 4 (gemischt-hybride FE). Links: x-Komponente. Rechts: y-Komponente.

Aus diesem Grund wurde der Einfluss unterschiedlicher Formen des Kluftendes auf das Simulationsergebnis untersucht. Zusätzlich zu den in Kap. 5.2.2 vorgestellten und in das Modul *FRACMESH* implementierten Varianten des Dreiecks und des Rechtecks wird hier als dritte Möglichkeit ein kurzes Dreieck eingeführt (Abb. 6.5, die grau markierten Elemente definieren die äquidimensional diskretisierte Kluft). Die Knotenverschiebung erfolgte dabei von Hand, sodass die umliegenden Dreiecke ihre Idealform verloren haben, trotzdem ist ihre geometrische Qualität für den Testfall gut genug. Die in Abb. 6.3 und Abb. 6.4 dargestellten Ergebnisse wurden mit der ursprünglichen Variante, dem langen Dreieck (Abb. 6.5, links), ermittelt. Abb. 6.6 zeigt die Druckverteilung im äquidimensionalen Fall für Level 4 entlang der Linien B (Abb. 6.6, links) und D (Abb. 6.6, rechts). Während die Werte entlang der Kluftachse (Linie D) fast identisch sind, zeigen sich erwartungsgemäß in den Kluftendbereichen geometriebedingte Unterschiede, die über die Länge des die Kluft abschließenden Dreiecks auftreten.

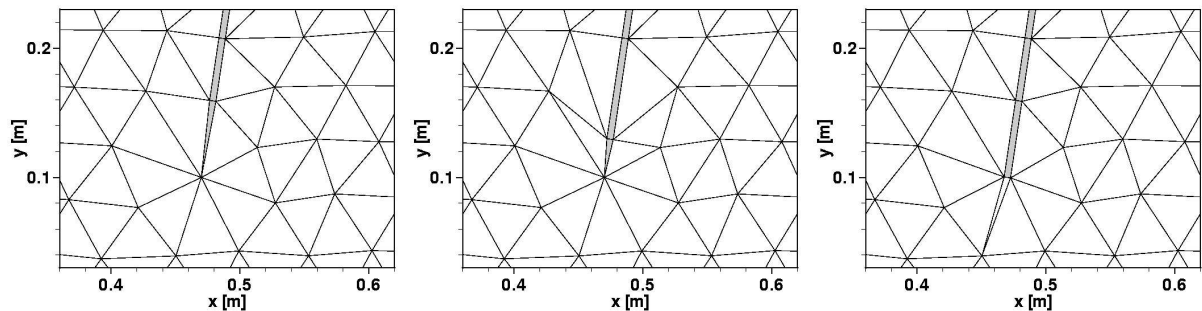


Abbildung 6.5: Kluftenden. Links: Langes Dreieck. Mitte: Kurzes Dreieck. Rechts: Rechteck.

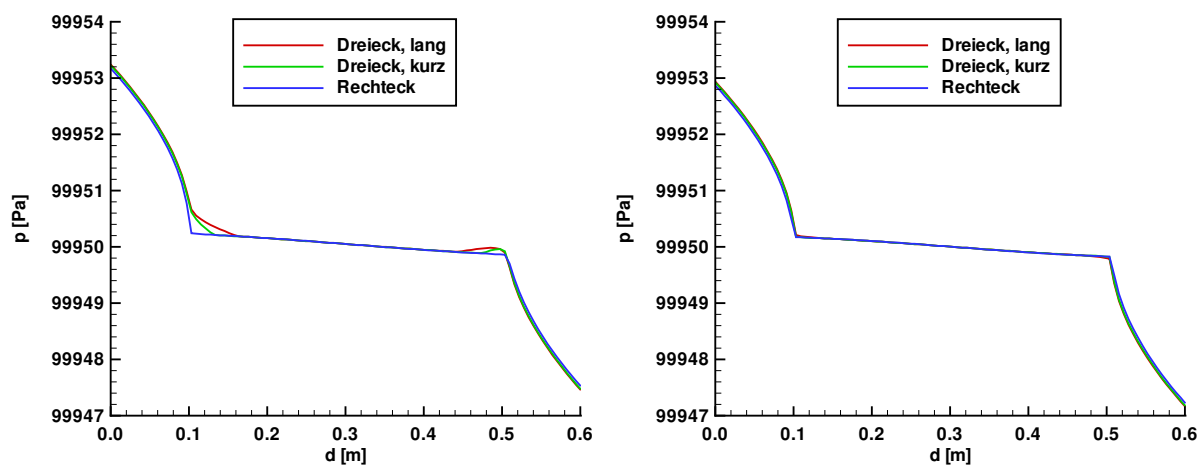


Abbildung 6.6: Druckverteilung für drei Formen des Kluftendes. Links: Linie B. Rechts: Linie D.

In Abb. 6.7 ist die zugehörige Verteilung der Geschwindigkeitskomponenten entlang der Linie B für Level 4 dargestellt. Die glatteste Verteilung weist der Ansatz mit rechteckigen Kluftenden auf, während die dreieckigen Varianten im Bereich der Abschlussdreiecke leichte Oszillationen zeigen. Bei $d = 0.1[m]$ ist die Geschwindigkeit für das Kluftende mit rechteckigem Abschluss am größten, dies geht konform mit der entsprechenden Druckverteilung in Abb. 6.6, links. Ein Vergleich mit den Rechnungen auf Level 2 und 3 für die rechteckige Variante weist analog zum dreieckigen Abschluss in Abb. 6.3 auf die Ausbildung einer Unendlichkeitsstelle im Bereich der Eckpunkte an den Kluftenden hin. Bei den Schnitten entlang der Kluftachse in Abb. 6.8 wird jedoch deutlich, dass hier die Qualität der Ergebnisse von der Ausformung des Kluftendes abhängt. Kürzere Dreiecke am Kluftende bedingen eine geringere Ausprägung der Geschwindigkeitsspitze als lange Dreiecke. Ein ähnlicher Effekt lässt sich bei gleicher Ausgangsdiskretisierung mit einer breiteren Kluft erzielen, in beiden Fällen wird der spitze Winkel am Kluftende größer. Umfangreiche Testrechnungen haben gezeigt, dass bei einem Winkel $\vartheta \geq 90^\circ$ am Kluftende in Abhängigkeit von der Anstromrichtung keine oder nur noch geringe Geschwindigkeitsspitzen erzeugt werden. Allerdings erfordert eine solche Variante eine starke Verfeinerung des Netzes im gesamten Kluftendbereich. Alternativ dazu wurde die Rechteckform als Kluftabschluss gewählt, die in Strömungsrichtung sehr gute Ergebnisse erzeugt (Abb. 6.8, rechts). Die leichten Oszillationen bei der Rechteckvariante im Kluftendbereich werden u.a. durch die

schlechte Elementgeometrie des nun in der Matrix liegenden spitzen Dreiecks verursacht, sie sind jedoch weit geringer als bei einem dreieckigen Kluftabschluss. Auch hier kann ein feiner aufgelöster Kluftendbereich die Lösung verbessern. Die in Abb. 6.7 und Abb. 6.8 präsentierten Geschwindigkeitsverteilungen wurden unter Verwendung der gemischt-hybriden Finiten Elemente ermittelt. Ein Vergleich mit den entsprechenden mit Hilfe des Boxverfahrens bestimmten Werten zeigt entlang Linie B ein ähnliches Verhalten, wobei hier auch bei einem rechteckigen Abschluss leichte Oszillationen im Kluftendbereich auftreten. Entlang der Kluftachse werden bei den dreieckigen Abschlüssen die Maximalwerte noch einmal deutlich größer als die für den gemischt-hybriden Ansatz gezeigten Werte. Bei rechteckigen Kluftenden sind die Ergebnisse für das Boxverfahren ähnlich gut wie für die gemischt-hybriden Finiten Elemente, quer zur Anstromrichtung zeigen sich allerdings stärkere Oszillationen. Die Ergebnisse für das Boxverfahren sind für rechteckige Kluftenden auf Level 4 in Abb. 6.9 und Abb. 6.10 im Vergleich mit der Lösung des gemischt-hybriden Verfahrens dargestellt.

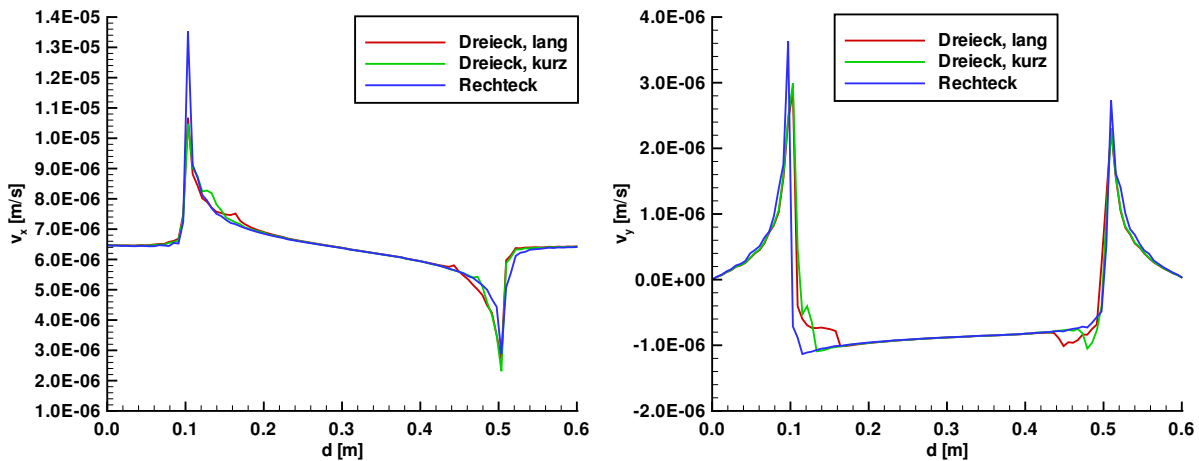


Abbildung 6.7: Geschwindigkeitsverteilung entlang Schnittlinie B für drei Formen des Kluftendes (gemischt-hybride FE). Links: x-Komponente. Rechts: y-Komponente.

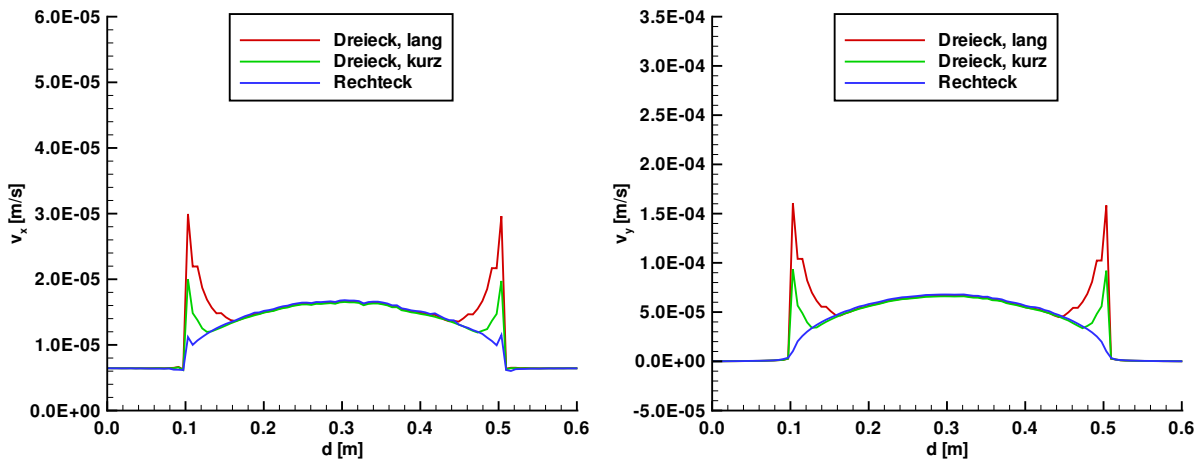


Abbildung 6.8: Geschwindigkeitsverteilung entlang Schnittlinie D für drei Formen des Kluftendes (gemischt-hybride FE). Links: x-Komponente. Rechts: y-Komponente.

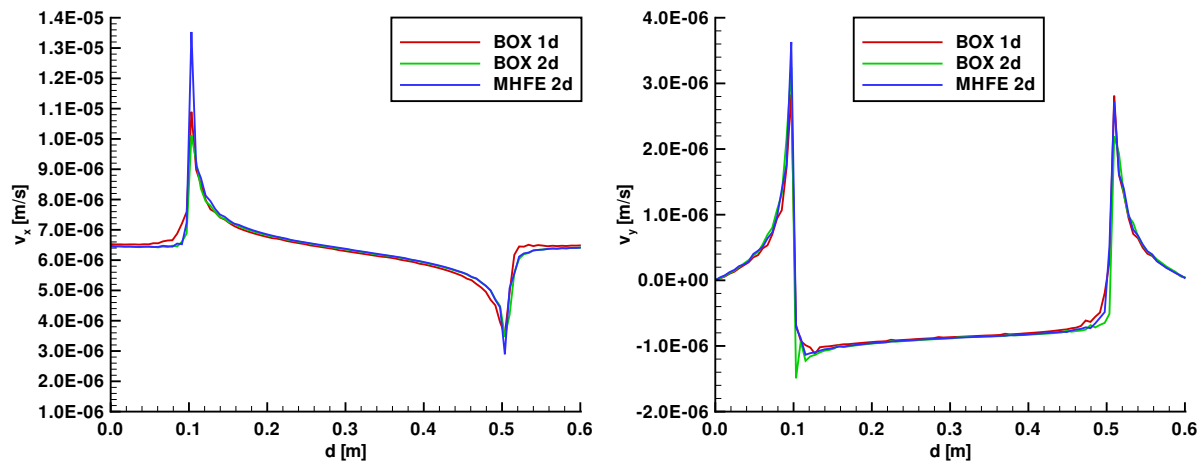


Abbildung 6.9: Geschwindigkeitsverteilung entlang Schnittlinie B für Boxverfahren (niederdimensional: BOX 1d, äquidimensional: BOX 2d) und gemischt-hybride FE (MHFE 2d). Links: x-Komponente. Rechts: y-Komponente.

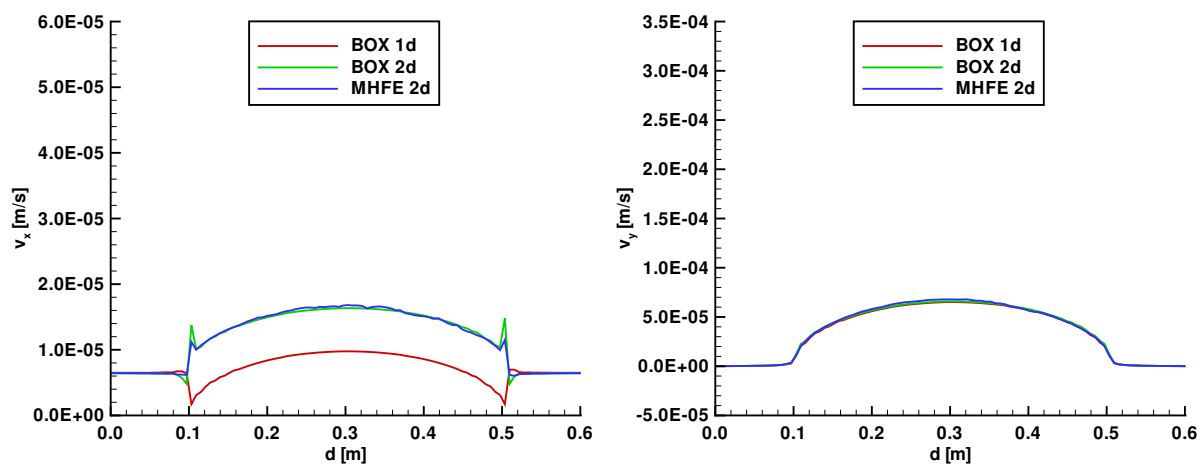


Abbildung 6.10: Geschwindigkeitsverteilung entlang Schnittlinie D für Boxverfahren (niederdimensional: BOX 1d, äquidimensional: BOX 2d) und gemischt-hybride FE (MHFE 2d). Links: x-Komponente. Rechts: y-Komponente.

Ebenfalls in Abb. 6.9 und Abb. 6.10 sind die Simulationsergebnisse der niederdimensionalen Formulierung für die Einzelkluft abgebildet. Entlang Linie B treten auch hier die aus der äquidimensionalen Diskretisierung bekannten Geschwindigkeitsspitzen in den Endbereichen der Kluft auf. Und ebenso wie für den äquidimensionalen Ansatz lässt auch für den niederdimensionalen Ansatz ein Vergleich der Ergebnisse der Level 2 – 4 auf die Ausbildung einer Unendlichkeitsstelle schließen. Werden die Verteilungen der Geschwindigkeitskomponenten entlang der Kluftachse einander gegenübergestellt, so ergibt sich für v_y eine gute Übereinstimmung der Resultate der dargestellten Diskretisierungsansätze (Abb. 6.10, rechts). Im Gegensatz dazu zeigt sich für die x-Komponente der Geschwindigkeit in Abb. 6.10, links, ein deutlicher Unterschied zwischen den Ergebnissen der niedrigen- und der äquidimensionalen Modellierung. Während v_{fx} im äquidimensionalen Fall in der Kluft sofort ansteigt, wird es im niederdimensionalen Fall zunächst deutlich kleiner, um dann zur Kluftmitte hin ebenfalls anzusteigen.

gen. Der Grund dafür wird in Abb. 6.11 deutlich. Wird die Kluft niederdimensional dargestellt (Abb. 6.11, links), so entspricht die Richtung der Geschwindigkeit in der Kluft dem Verlauf der Kluftachse. Im äquidimensionalen Fall (Abb. 6.11, rechts) hingegen kann der Einfluss des die Kluft quer anströmenden Fluids auf das Strömungsverhalten in der Kluft selber besser erfasst werden. Die Geschwindigkeitsdarstellung in Abb. 6.11, rechts, legt nahe, dass ein Gradient quer zur Kluftachse existiert, der sich in der Abweichung der Strömungsrichtung in der Kluft von der Kluftachse widerspiegelt. Dies erscheint bei Betrachtung der globalen Druckverteilung und Fließrichtung im Gesamtsystem sinnvoll.

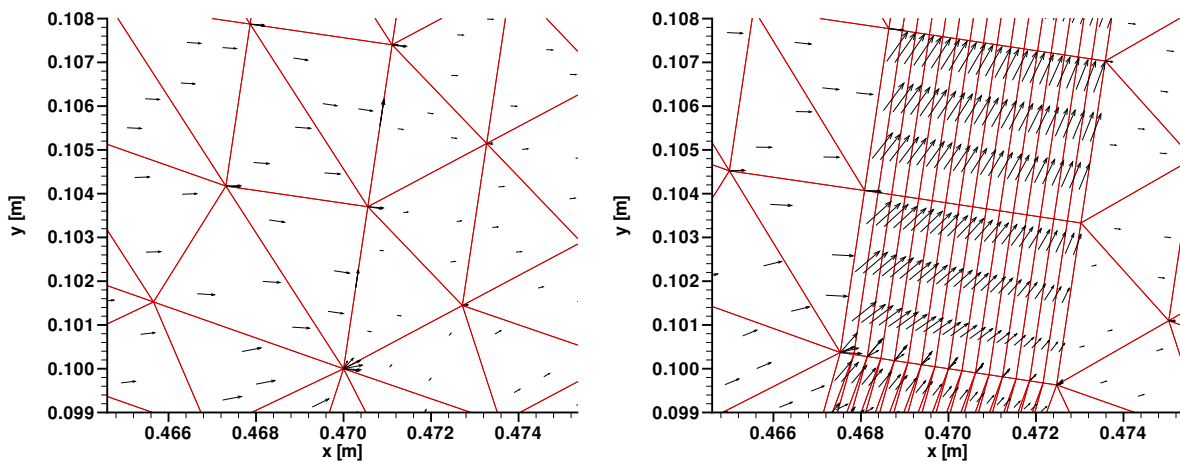


Abbildung 6.11: Geschwindigkeitsverteilung im Bereich des unteren Kluftendes. Links: Niederdimensional. Rechts: Äquidimensional.

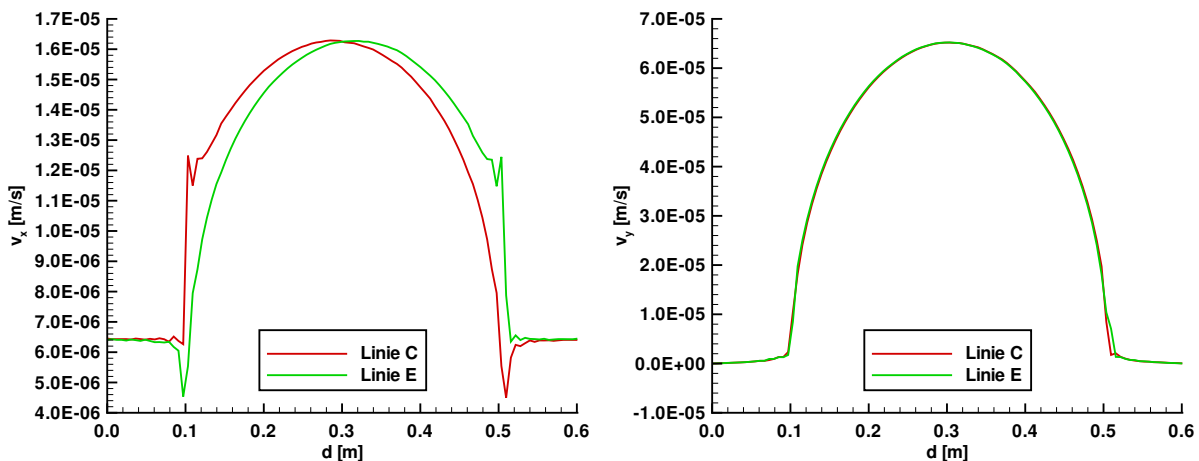


Abbildung 6.12: Geschwindigkeitsverteilung entlang der Schnittlinien C und E (gemischt-hybride FE). Links: x-Komponente. Rechts: y-Komponente.

Abb. 6.12 stellt die Verteilung der Geschwindigkeitskomponenten entlang der Linien C und E knapp innerhalb der Kluft für den äquidimensionalen Ansatz dar. Auch hier zeigt sich das zweidimensionale Strömungsverhalten in der Kluft. Während die y -Komponente für die beiden Linien fast keine Unterschiede aufweist, wird die Geschwindigkeit in x -Richtung am lin-

ken Klufrand sofort beschleunigt, am rechten Klufrand zur Matrix hin dagegen zunächst abgebremst. Am oberen Kluftende zeigt sich das umgekehrt identische Verhalten.

6.1.3 Ergebnisse der Transportmodellierung

Die Transportsimulationen wurden mit dem Boxverfahren mit Fully Upwinding für die Level 2, 3 und 4 und mit Streamline Orientation für die Level 2 und 3 durchgeführt. Ein Vergleich der Ergebnisse über die verschiedenen Verfeinerungsstufen ermöglicht eine Aussage über das Konvergenzverhalten jeder Upwinding-Strategie für sich und im Verhältnis zueinander. Als Zeitschritt wurde für Level 2 $\Delta t_2 = 60[s]$, für Level 3 $\Delta t_3 = 30[s]$ und für Level 4 $\Delta t_4 = 15[s]$ angesetzt. Daraus resultiert im niederdimensionalen Fall eine maximale Courant-Zahl von $Cr = 1.1$, im äquidimensionalen Fall von $Cr = 2.2$ (s. Tab. 6.3). Gezeigt werden die Resultate der äquidimensionalen Diskretisierung mit dreieckigem Kluftende (Abb. 6.13 und Abb. 6.14), die Ergebnisse der niederdimensionalen Diskretisierung und der äquidimensionalen Diskretisierung mit rechteckigem Kluftende verhalten sich bezüglich der Konvergenz analog.

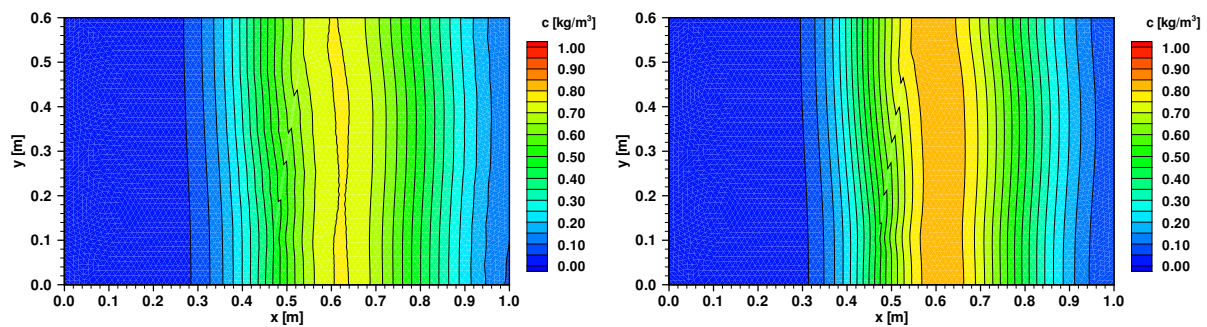


Abbildung 6.13: Konzentrationsverteilung im Modellgebiet nach 24000[s]. Links: Fully Upwinding. Rechts: Streamline Orientation.

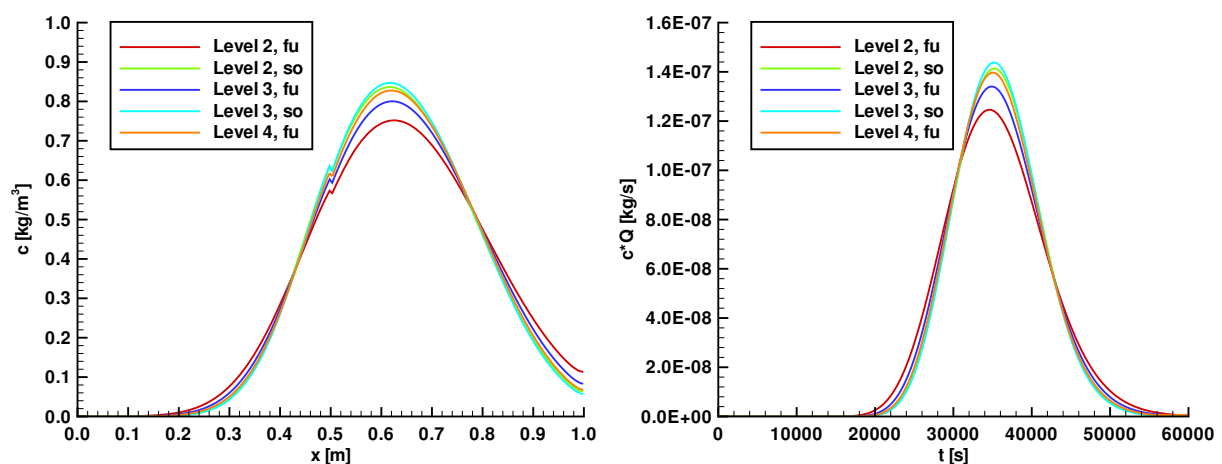


Abbildung 6.14: Links: Konzentrationsverteilung entlang Schnittlinie A. Rechts: Durchbruchkurven am Ausstromrand ($x = 1.0[m]$). Jeweils für Fully Upwinding (fu, Level 2–4) und Streamline Orientation (so, Level 2–3).

Der Tracer wird am linken Rand mit einem Wert von $c(x = 0.0[m], y, t) = 1.0[\text{kg}/\text{m}^3]$ über einen Zeitraum von $t_{zu} = 9960[\text{s}]$ zugegeben, danach ist $c(x = 0.0[m], y, t) = 0.0[\text{kg}/\text{m}^3]$ (s. auch Tab. 6.1). Abb. 6.13 gibt die Konzentrationsverteilung im Modellgebiet für die beiden Upwinding-Strategien auf Level 2 nach einer Simulationszeit von 24000[s] wieder. Es ist offensichtlich, dass das Boxverfahren mit Streamline Orientation (Abb. 6.13, rechts) die Fronten des Tracerpulses steiler approximiert als mit Fully Upwinding (Abb. 6.13, links). Dies ist zu erwarten, da der Großteil des Modellgebiets Gesteinsmatrix darstellt, in der die Geschwindigkeiten niedrig sind, und zudem die Kluft quer zur Hauptströmungsrichtung liegt, sodass auch dort nur mäßig hohe Geschwindigkeiten auftreten. Das Boxverfahren ist daher mit Streamline Orientation fast im gesamten Modellgebiet von höherer Ordnung als mit Fully Upwinding. Ein Vergleich der Konzentrationsprofile entlang der Schnittlinie A (Abb. 6.14, links) und der Durchbruchkurven am Ausstromrand (Abb. 6.14, rechts) zeigt, dass zum einen die Ergebnisse der Verfahren mit zunehmender Verfeinerungstiefe gegen eine Kurve konvergieren und dass zum anderen das Boxverfahren mit Streamline Orientation auf Level 2 zu einer besseren Approximation führt als mit Fully Upwinding auf Level 4.

Um den Einfluss der Äquidimensionalität und der Form des Kluftendes zu untersuchen, werden die Ergebnisse der verschiedenen Ansätze auf Level 3 für das Boxverfahren mit Streamline Orientation, der gemäß dem vorangegangenen Abschnitt genauesten ermittelten Lösung, miteinander verglichen. Abb. 6.15 zeigt die Konzentrationsverteilung im Modellgebiet für den niederdimensionalen Ansatz, Abb. 6.16 die entsprechenden Ergebnisse für den äquidimensionalen Ansatz unter Verwendung dreieckiger Kluftabschlüsse und Abb. 6.17 die Resultate für den äquidimensionalen Ansatz mit rechteckigen Kluftabschlüssen, jeweils nach einer Simulationszeit von 18000[s] und 24000[s]. Im Gegensatz zur niederdimensionalen Modellierung kann im äquidimensionalen Fall eine Verteilung der Konzentration über die Kluftbreite identifiziert werden, die bei niederdimensionaler Betrachtung naturgemäß nicht dargestellt werden kann. Gleichzeitig dringt der Tracer bei der äquidimensionalen Beschreibung im Kluftbereich schneller in x-Richtung vor, was sich in einer Ausrundung der Konzentrationsfront über die Länge der Kluft und einem früheren Erreichen des Ausstromrands widerspiegelt. Werden die Ergebnisse der beiden äquidimensionalen Varianten mit unterschiedlichem Kluftabschluss einander gegenübergestellt, so wird deutlich, dass ein rechteckiges Kluftende (Abb. 6.17) einen besseren seitlichen Tracerzustrom in die Kluft erlaubt als ein dreieckiges Kluftende (Abb. 6.16), das im Zustrombereich eine Konzentrationsverteilung erzeugt, die den Ergebnissen der niederdimensionalen Simulation (Abb. 6.15) ähnlich ist. Weiterhin sind die Maximalwerte nach 24000[s] für den äquidimensionalen Fall mit dreieckigen Kluftabschlüssen (etwas) geringer als für die anderen beiden Ansätze. Ein Vergleich der Konzentrationsverteilungen entlang der Schnittlinie A zu verschiedenen Zeitpunkten für alle drei Ansätze (hier nicht abgebildet) legt den Schluss nahe, dass diese Abflachung während des Tracerpulsdurchgangs durch den Kluftbereich entsteht.

Abb. 6.18 zeigt die zu den Abbn. 6.15 – 6.17 gehörigen Konzentrationsverteilungen entlang der Schnittlinie D zu den Zeitpunkten 18000[s] und 24000[s] für den niederdimensionalen Ansatz und für den äquidimensionalen Ansatz mit den beiden Varianten des Kluftabschlusses. Es werden zunächst die Ergebnisse nach einer Simulationszeit von 18000[s] betrachtet (Abb. 6.18, links). Die aus der niederdimensionalen Approximation resultierende Kurve verläuft im Kluft-

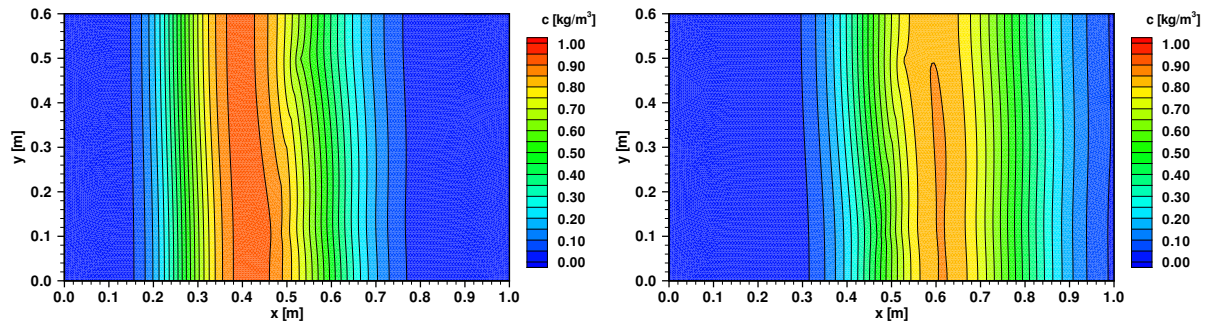


Abbildung 6.15: Konzentrationsverteilung im Modellgebiet, niederdimensionaler Ansatz. Links: Nach 18000[s]. Rechts: Nach 24000[s].

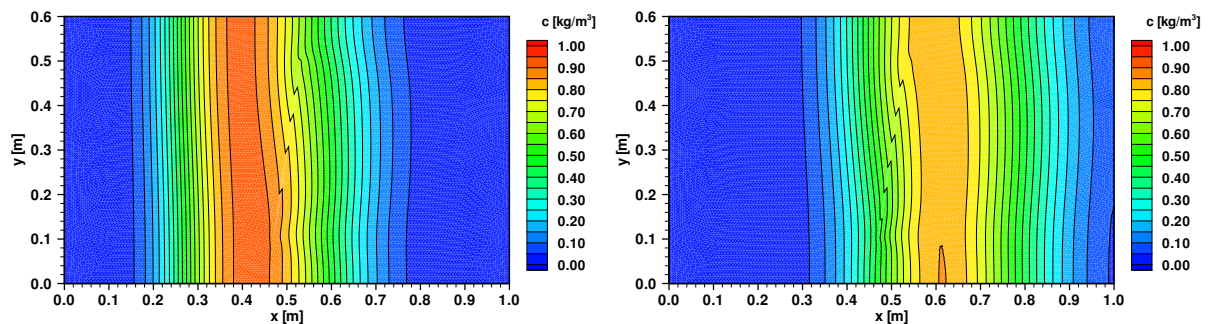


Abbildung 6.16: Konzentrationsverteilung im Modellgebiet, äquidimensionaler Ansatz, Kluftende langes Dreieck. Links: Nach 18000[s]. Rechts: Nach 24000[s].

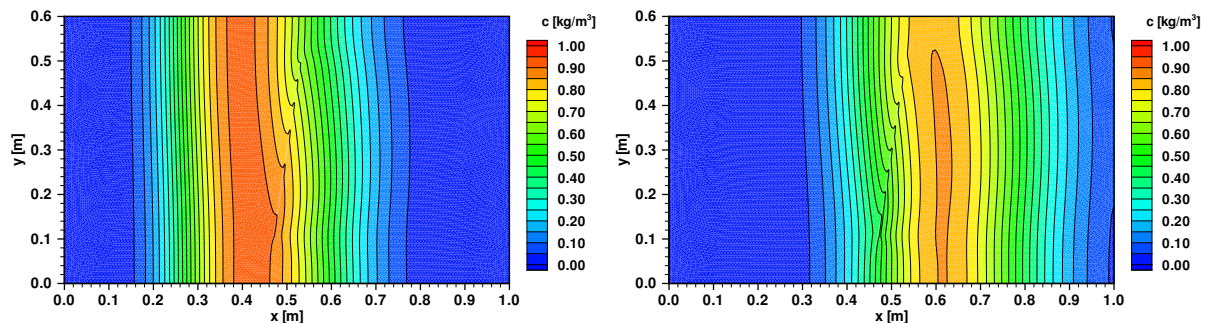


Abbildung 6.17: Konzentrationsverteilung im Modellgebiet, äquidimensionaler Ansatz, Kluftende Rechteck. Links: Nach 18000[s]. Rechts: Nach 24000[s].

bereich fast parallel zu der aus der äquidimensionalen Approximation mit Rechteckabschluss resultierenden Kurve. Die Differenz zwischen beiden Kurven wird durch den Gradienten quer zur Kluft, der mit dem äquidimensionalen Ansatz erfasst wird, bzw. durch den dadurch erhöhten Austausch zwischen Kluft und Matrix bedingt (s. dazu auch Abb. 6.10 und Abb. 6.11). Der äquidimensionale Ansatz mit dreieckigem Kluftabschluss bewegt sich zwischen diesen beiden Lösungen. Es wird angenommen, dass dafür im Wesentlichen der schlechtere Austausch zwischen Kluft und Matrix im Kluftendbereich verantwortlich ist, der aus der Geometrie des spitzen Dreiecks und der umgebenden Geschwindigkeitsverteilung resultiert. Entlang

der Kluft entspricht der Austausch dem im äquidimensionalen Fall mit rechteckigem Kluftabschluss, sodass hier wieder mehr Tracer in die Kluft gelangt als im niederdimensionalen Fall. In Abb. 6.18, rechts, sind die Konzentrationsverteilungen nach einer Simulationszeit von 24000[s] dargestellt, die Kluft befindet sich im absteigenden Ast des Tracerpulses. Die Ergebnisse verhalten sich umgekehrt entsprechend zu denen im aufsteigenden Ast des Tracerpulses nach 18000[s]. Die Geschwindigkeitsverteilung in der Kluft spielt trotz ihrer hohen Werte in den Kluftendbereichen (Abb. 6.8) eher eine geringe Rolle. Andernfalls wäre die Konzentrationsverteilung für den äquidimensionalen Ansatz mit Dreieckabschluss nach 24000[s] (Abb. 6.18, rechts) niedriger als für die Variante mit Rechteckabschluss, da nicht nur weniger Tracer am Kluftende eingetragen würde, sondern dieser auch in der Kluft schneller abtransportiert würde. Es liegt nahe, dass der geringe Einfluss der Geschwindigkeitsspitzen in den dreieckigen Kluftenden auf die Konzentrationsverteilung daraus resultiert, dass die Geschwindigkeitswerte zur Ermittlung des transportrelevanten Flusses zwischen zwei Knoten mit den entsprechenden Randflächen des Boxvolumens multipliziert werden, die in dem spitzen Dreieck sehr klein sind.

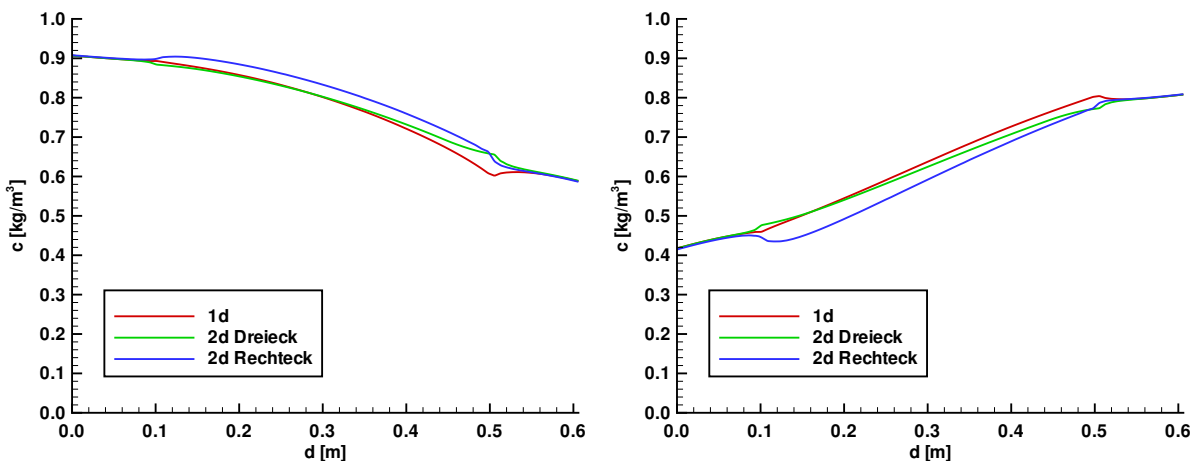


Abbildung 6.18: Konzentrationsverteilung entlang Schnittlinie D für niederdimensionalen (1d) und äquidimensionalen Ansatz (2d Dreieck und 2d Rechteck). Links: Nach 18000[s]. Rechts: Nach 24000[s].

In Abb. 6.19 sind die Durchbruchkurven am Ausstromrand des Gebiets ($x = 1.0[m]$) für nieder- und äquidimensionale Ansätze mit unterschiedlicher geometrischer Ausgestaltung der Kluftenden abgebildet. Eine Vergrößerung im Bereich des Konzentrationspeaks (Abb. 6.19, rechts) zeigt einen geringen Unterschied zwischen nieder- und äquidimensionaler Modellierung, der durch das schnellere Vordringen des Tracers in x -Richtung im Kluftbereich bei der äquidimensionalen Darstellung verursacht wird (s. auch Abbn. 6.15 – 6.17). Insgesamt sind die Differenzen zwischen den einzelnen Ansätzen bei dieser integralen Betrachtungsweise jedoch sehr gering. Dies liegt daran, dass die in den vorangegangenen Abschnitten dieses Unterkapitels beschriebenen Effekte der verschiedenen Ansätze auf den Kluftbereich beschränkt und damit sehr lokaler Natur sind. Insbesondere im vorliegenden Beispiel der Einzelkluft ohne Randkontakt stellt die Kluft naturgemäß nur einen geringen Anteil des Modellgebiets mit dementsprechend geringem Einfluss auf das Gesamtprozessverhalten dar.

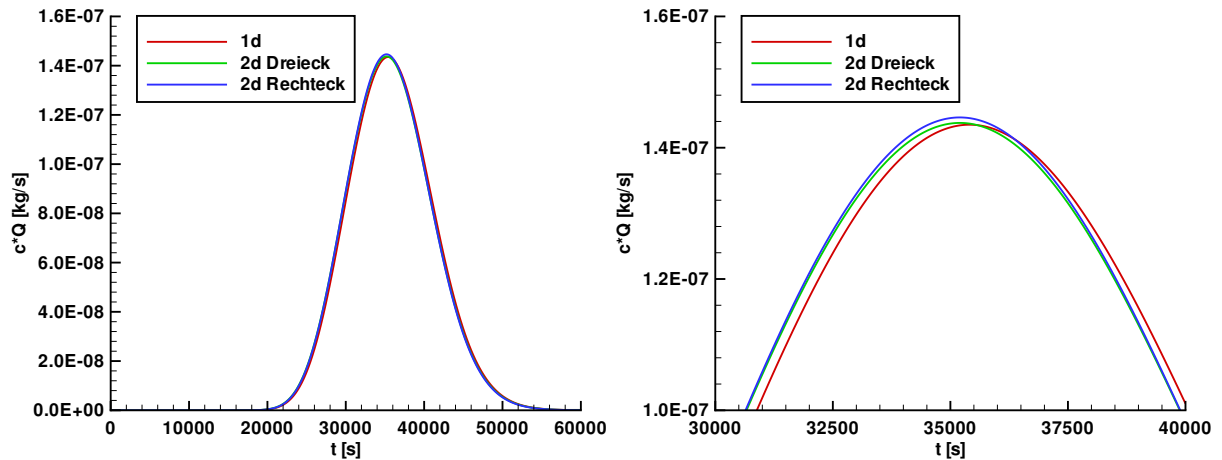


Abbildung 6.19: Links: Durchbruchkurven am Ausstromrand ($x = 1.0[m]$) für niederdimensionalen (1d) und äquidimensionalen Ansatz (2d Dreieck und 2d Rechteck). Rechts: Zoom.

Ebenfalls unter Verwendung des Boxverfahrens mit Streamline Orientation und auf Verfeinerungslevel 3 wird der Einfluss der Strömungsdiskretisierung auf die Ergebnisse der Transportsimulation für das Beispiel der Einzelkluft dargestellt. Ein Vergleich der Konzentrationsverteilungen entlang Schnittlinie A nach 24000[s] auf der Basis einer Strömungsberechnung mit dem Boxverfahren und mit den gemischt-hybriden Elementen (Abb. 6.20, links) bzw. der aus den entsprechenden Simulationsläufen ermittelten Durchbruchkurven am Ausstromrand des Gebiets ($x = 1.0[m]$) (Abb. 6.20, rechts) zeigt, dass auch hier die bessere Geschwindigkeitsapproximation der gemischt-hybriden Finiten Elemente nur lokaler Natur ohne Auswirkungen auf das Gesamtsystem ist.

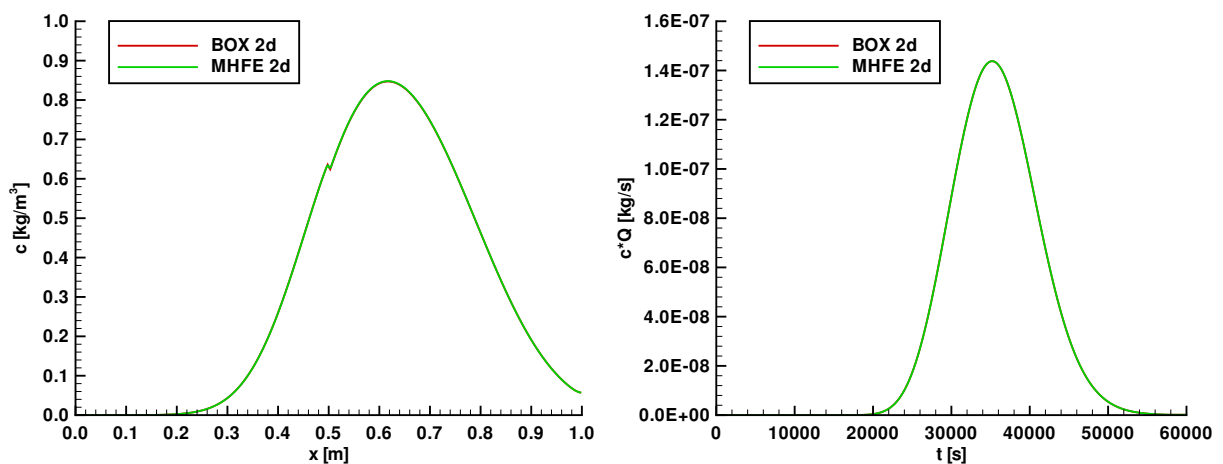


Abbildung 6.20: Links: Konzentrationsverteilung entlang Schnittlinie A nach 24000[s]. Rechts: Durchbruchkurve am Ausstromrand ($x = 1.0[m]$). Jeweils für Boxverfahren (BOX 2d) und gemischt-hybride FE (MHFE 2d) in der Strömungsdiskretisierung, Streamline Orientation (Level 3) für Transport.

Eine weitergehende Analyse der Auswirkungen der einzelnen Verfahren ist anhand der Courant- und Peclet-Zahlen sowie der Werte, die sich bei Stromlinienorientierung für den Upwinding-Parameter α ergeben, möglich. In Tab. 6.3 sind die Minima und Maxima der Werte für die verschiedenen verwendeten Ansätze beispielhaft für Level 4 aufgeführt. Im niederdimensionalen Fall sind die Minimal- und Maximalwerte für alle Kenngrößen getrennt für Kluft und Matrix angegeben, bei den äquidimensionalen Werten beziehen sich Minima und Maxima jeweils auf das gesamte Modellgebiet.

| niederdimensional | | | | |
|-------------------|-----------|-------|------------|-------|
| BOX | Matrix | | Kluft | |
| | min | max | min | max |
| Cr | 0.040 | 0.421 | 0.152 | 1.125 |
| Pe | 0.116 | 0.476 | 2.826 | 3.775 |
| α | 0.000 | 0.000 | 0.000 | 0.433 |
| äquidimensional | | | | |
| BOX | dreieckig | | rechteckig | |
| | min | max | min | max |
| Cr | 0.043 | 5.404 | 0.075 | 4.723 |
| Pe | 0.116 | 3.771 | 0.007 | 0.705 |
| α | 0.000 | 1.000 | 0.000 | 1.000 |
| MHFE | dreieckig | | rechteckig | |
| | min | max | min | max |
| Cr | 0.053 | 3.023 | 0.075 | 2.157 |
| Pe | 0.116 | 3.745 | 0.009 | 0.718 |
| α | 0.000 | 1.000 | 0.000 | 0.000 |

Tabelle 6.3: Courant- und Peclet-Zahlen sowie Upwinding-Parameter α des Streamline Orientation für niederdimensionalen (Boxverfahren BOX) und äquidimensionalen (Boxverfahren BOX und gemischt-hybride FE MHFE sowie drei- und rechteckige Kluftenden) Ansatz auf Level 4.

Ein Vergleich der Minimalwerte in der Matrix aus der niederdimensionalen Modellierung mit den Minimalwerten aus der äquidimensionalen Modellierung mit dreieckigen Kluftenden zeigt gute Übereinstimmung, während die Minimalwerte aus der äquidimensionalen Modellierung mit rechteckigen Kluftenden eine etwas höhere Courant-Zahl und eine deutlich kleinere Peclet-Zahl aufweisen. Die Maximalwerte der Kluft aus der niederdimensionalen Modellierung und die Maximalwerte aus der äquidimensionalen Modellierung verhalten sich uneinheitlich.

Wird zunächst die Courant-Zahl näher betrachtet, so ergibt sich, dass ihre Verteilung in einer niederdimensional dargestellten Kluft dem Verlauf der Geschwindigkeit entspricht, d.h. sie

ist an den Kluffenden niedriger und hat ihr Maximum in der Mitte der Klufflänge. Diese Verteilung der Courant-Zahl ist im äquidimensionalen Fall grundsätzlich ähnlich, die Werte in der Kluffmitte sind nicht wesentlich größer als bei der niederdimensionalen Modellierung. Die Maximalwerte in der Tabelle, die deutlich über diesem Wert liegen, entstehen nicht in der Kluffmitte, sondern in den Kluffendbereichen, bei dreieckigem Kluffabschluss in den spitzen Dreiecken der Kluffenden und bei rechteckigem Kluffabschluss in dem anschließenden spitzen Dreieck in der Matrix. Dabei ist der Maximalwert um so niedriger, um so besser die Approximation die Geschwindigkeitsverteilung in den Kluffendbereichen wiedergibt. Während bei dreieckigem Kluffabschluss die dort auftretenden Geschwindigkeitsspitzen für die hohen Courant-Zahlen verantwortlich sind, treten bei rechteckigem Kluffabschluss im anschließenden Dreieck in der Matrix sehr hohe lokale Geschwindigkeiten auf (Kap. 4.2.2), d.h. die Geschwindigkeiten verlaufen eher über die sehr kurze Breite des schmalen Dreiecks als parallel zu seiner Längsachse und sind damit bezogen auf den Fließweg innerhalb dieses Dreiecks relativ groß.

Die Peclet-Zahl ist im Fall der niederdimensionalen Darstellung an den Kluffenden größer als in der Kluffmitte. Dieses Ergebnis hängt allein von der eindimensionalen Elementschrittweite Δx in der Kluff ab, die nicht konstant ist, sondern leicht variiert. Bei der im Modellbeispiel durchgeführten eindimensionalen Modellierung der Kluff hat die Geschwindigkeit keinen Einfluss auf die Peclet-Zahl, da sie sowohl im Zähler als auch im Nenner auftaucht und sich damit herausstreichen lässt. Für den äquidimensionalen Fall sind die Werte der Peclet-Zahlen, die sich bei einer Strömungsdiskretisierung mit gemischt-hybriden Finiten Elementen für drei- und rechteckige Kluffabschlüsse auf Level 4 ergeben, für den Bereich $Pe = 0.2 - Pe = 0.8$ in Abb. 6.21 in einem Scatter-Plot abgebildet, d.h. pro Element des zugrunde liegenden Gitternetzes ist der Wert der zugehörigen Peclet-Zahl im Elementschwerpunkt in Form eines entsprechend farbigen Quadrats dargestellt. Diese Vorgehensweise löst zwar die exakten Ränder der Geometrie auf, sie ermöglicht jedoch einen Überblick über die Verteilung der Peclet-Zahl im Modellgebiet.

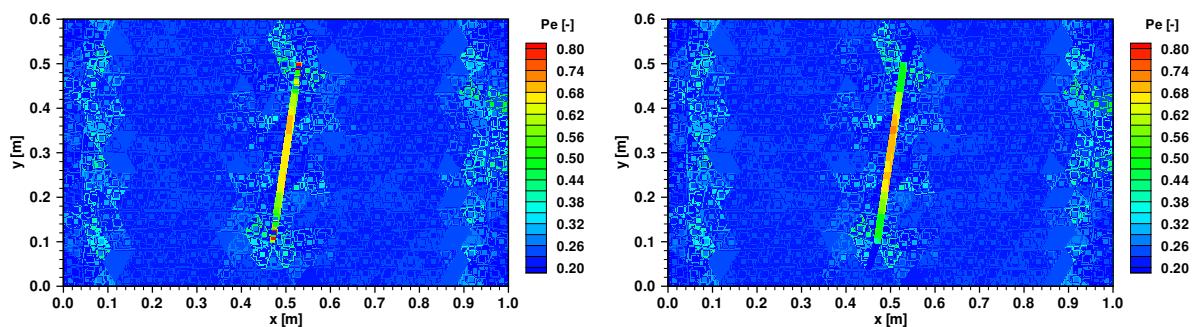


Abbildung 6.21: Verteilung der Peclet-Zahlen zwischen $Pe = 0.2$ und $Pe = 0.8$ im Modellgebiet bei äquidimensionaler Modellierung. Links: Dreieckiger Kluffabschluss. Rechts: Rechteckiger Kluffabschluss.

In der Kluff ist die Verteilung der Peclet-Zahl ähnlich der Verteilung der Courant-Zahl, sie ist in der Kluffmitte größer als zu den Kluffenden hin. Dabei ist der Maximalwert in der Kluffmitte deutlich niedriger als im niederdimensionalen Fall, da auch hier die Geschwindigkeitsvektoren

nicht parallel zur Kluftachse verlaufen und sich der Skalarwert des lokalen Dispersionstensors (Kap. 4.2.2) stärker gegenüber dem niederdimensional ermittelten Wert ändert als die lokale Geschwindigkeit. Werden die Kluftenden dreieckig abgebildet, so ergeben sich dort aufgrund der hohen Geschwindigkeiten sehr hohe Peclet-Zahlen, die die Werte in der Kluftmitte überschreiten. Im rechteckig dargestellten Kluftende treten diese hohen Werte nicht auf, stattdessen sind die Peclet-Zahlen im angrenzenden spitzen Dreieck in der Matrix sehr niedrig, sie entsprechen den Minimalwerten der äquidimensionalen Formulierung mit Rechteckabschluss in Tab. 6.3. Auch hier liegt der Grund für die vergleichsweise niedrigen Werte in der Verteilung der lokalen Geschwindigkeiten und Dispersionswerte.

6.1.4 Diskussion der Ergebnisse

Obwohl der Einfluss einer einzelnen Kluft ohne Randkontakt auf das Gesamtprozessverhalten im Modellgebiet nicht sehr groß ist, zeigt ein Vergleich der Ergebnisse nieder- und äquidimensionaler Simulationen bereits lokale Unterschiede. Insbesondere wird deutlich, dass mehrdimensionale (im vorliegenden Beispiel zweidimensionale) Effekte in Klüften mit einem äquidimensionalen Ansatz erfasst werden können. Die Möglichkeit, Gradienten quer zur Kluft zu berücksichtigen, führt zu einem gegenüber dem niederdimensionalen Ansatz verstärkten Massenaustausch zwischen Kluft und Matrix (z.B. Abb. 6.11 und Abb. 6.18). Dabei spielt die geometrische Ausgestaltung des Kluftendes eine Rolle, da sie den Austausch zwischen Kluft und Matrix in den Endbereichen der Kluft sowie das Prozessverhalten im Kluftbereich gegebenenfalls maßgeblich beeinflussen kann. Die in diesem Kapitel vorgestellten Untersuchungen ebenso wie die Ergebnisse von Simulationen auf weiteren äquidimensional diskretisierten Gebieten legen den Schluss nahe, dass eine Rechteckform des Kluftabschlusses vorteilhaft ist, da die Geschwindigkeitsverteilung in den Kluftenden wesentlich besser approximiert werden kann (Abb. 6.8 mit dem Vergleich der Geschwindigkeitsverteilungen in Abhängigkeit von der Form des Kluftendes und Abb. 6.4 zum Konvergenzverhalten der Geschwindigkeit bei dreieckigen Kluftabschlüssen). Die Folge davon ist eine sicherere Approximation des Austausches zwischen Kluft und Matrix in den Kluftendbereichen und niedrigere Peclet-Zahlen und damit stabilere Verhältnisse in den Kluftenden (Tab. 6.3 und Abb. 6.21).

Die äquidimensionale Formulierung erlaubt im Gegensatz zum niederdimensionalen Ansatz die Verwendung gemischt-hybrider Finiter Elemente, die eine Geschwindigkeitsverteilung höherer Ordnung und einen kontinuierlichen Fluss über die Elementränder ermöglichen. Dies kommt der Forderung nach exakter Flusserhaltung und möglichst exakter Geschwindigkeitsverteilung auch am Kluft-Matrix-Interface (Kap. 1.4) entgegen. Im Beispiel der Einzelkluft machen sich diese Vorteile nur in den Kluftendbereichen bemerkbar, in denen komplexere Strömungsvorgänge auftreten. Der Grad der Verbesserung in der Geschwindigkeitsapproximation lässt sich vor allem an den maximalen Courant-Zahlen im Tab. 6.3 ablesen, die allesamt im Kluftende lokalisiert sind, und die für gemischt-hybride Finite Elemente und insbesondere bei rechteckigen Kluftabschlüssen niedriger sind und somit stabilere und genauere Simulationsergebnisse ermöglichen. Untersuchungen an den folgenden Beispielen, die mehr Klüfte und komplexere Fließprozesse beinhalten, müssen zeigen, ob die beschriebenen Vorteile den Nachteil, dass ein Gleichungssystem mit wesentlich mehr Freiheitsgraden gelöst werden muss, aufwiegen oder gegebenenfalls die Qualität einer gemischt-hybriden Finite-Elemente-Lösung

auf einem niedrigeren Verfeinerungslevel der eines Boxverfahrens auf einem höheren Level entspricht bzw. aufgrund der kontinuierlichen Flussapproximation am Elementrand besser ist als diese.

Der Vergleich der beiden Strategien des Fully Upwinding und der Streamline Orientation für das Boxverfahren bezüglich der Transportdiskretisierung zeigt, dass ein Verfahren höherer Ordnung, das sich flexibel an das lokale Prozessverhalten anpassen kann, wichtig ist für die Genauigkeit der approximierten Lösung (Abb. 6.13 und Abb. 6.14).

Das Auftreten lokaler Unterschiede in der Approximation der Strömungs- und Transportprozesse im Bereich der Kluft und des Kluft-Matrix-Übergangs bei Verwendung der äquidimensionalen im Vergleich zur niederdimensionalen Formulierung lässt darauf schließen, dass eine Ansammlung solcher Effekte beispielsweise in Form eines Kluftsystems auch globale Auswirkungen hat. Mit den folgenden Beispielen der Kluftkreuzung und verschiedener Kluftsysteme soll daher die Anwendbarkeit des äquidimensionalen Ansatzes auf komplexere Systeme und seine Auswirkungen auf das Gesamtsystem untersucht werden.

6.2 Kluftkreuzung

Kluftkreuzungen werden als kritisch für den äquidimensionalen Ansatz eingeschätzt, da hier auf sehr kleinem Raum in Abhängigkeit von den Strömungsverhältnissen und damit auch von der zugrunde liegenden Kluftgeometrie komplexe Geschwindigkeitsverteilungen auftreten können. Beim niederdimensionalen Ansatz tritt diese Fragestellung nicht auf, da die Kluftkreuzungen hier nur in Form eines Punkts (2D- und 3D-Gebiete) oder einer Linie (3D-Gebiete) dargestellt werden und keine Geschwindigkeitsverteilung in einem der äquidimensionalen Beschreibung äquivalenten Sinn zulassen. Um das Verhalten des äquidimensionalen Ansatzes bei Kluftkreuzungen zu untersuchen, werden zwei Modellprobleme vorgestellt, die jeweils eine Kreuzung zweier Klüfte enthalten. Der Schnittwinkel der beiden Klüfte ist für die beiden Beispiele unterschiedlich. Die Simulationsergebnisse werden für die verschiedenen im Rahmen dieser Arbeit verwendeten Diskretisierungsverfahren auf äquidimensionaler Basis und mit den Ergebnissen der niederdimensionalen Modellierung verglichen, um die Eignung der einzelnen Ansätze für Kluftkreuzungen unterschiedlicher Geometrie beurteilen zu können.

6.2.1 Modellprobleme

Das Modellgebiet besteht für die beiden Beispiele aus einer homogenen, isotropen Gesteinsmatrix mit zwei sich kreuzenden Klüften, von denen eine das Gebiet komplett von links nach rechts durchschneidet, während die andere die erste unter einem bestimmten Winkel schneidet und selber keinen Rand berührt. Im Fall der Kluftkreuzung A beträgt der Schnittwinkel in Strömungsrichtung $\vartheta_A = 22.62^\circ$ (Abb. 6.22, links), im Fall der Kluftkreuzung B $\vartheta_B = 79.51^\circ$ (Abb. 6.23, links). Die Strömungsrichtung wurde dabei definiert durch die Randbedingungen, d.h. analog zu Kap. 6.1 wurde ein Fluss von links nach rechts vorgegeben durch Dirichlet-Randbedingungen am linken und rechten Rand sowie durch *No-Flow*-Bedingungen am oberen und unteren Rand. Für den Transport wurde für den linken Rand ebenfalls eine Dirichlet-Randbedingung und für den rechten Rand ein freier Ausfluss angesetzt, für den oberen und

unteren Rand wurde wie für die Strömung eine *No-Flow*-Bedingung gewählt. Die Werte der Modellparameter und Randbedingungen können Tab. 6.1 entnommen werden, als Kluftbreite wurde $b = 5.0 \cdot 10^{-3}[m]$ vorgegeben. Die Kluftenden im Gebiet wurden im äquidimensionalen Fall durchgängig rechteckig diskretisiert, da diese Variante gemäß den Ausführungen in Kap. 6.1 eine bessere Approximation der physikalischen Prozesse erlaubt.

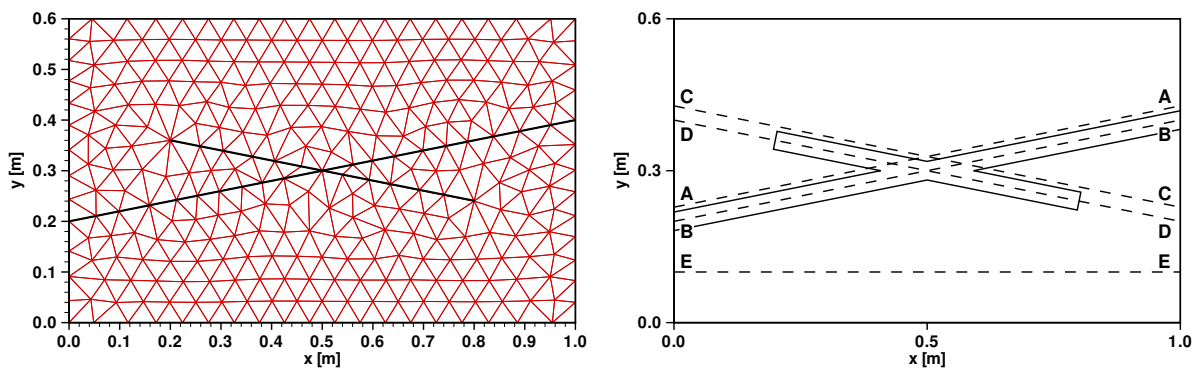


Abbildung 6.22: Modellgebiet mit Kluftkreuzung A. Links: Geometrie und Grobgitter. Rechts: Skizze des Modellgebiets mit den Umrissen der zweidimensional dargestellten Kluft und den Schnittlinien A – E, entlang derer die Zustandsgrößen untersucht und miteinander verglichen werden (Kluftbreite nicht maßstäblich).

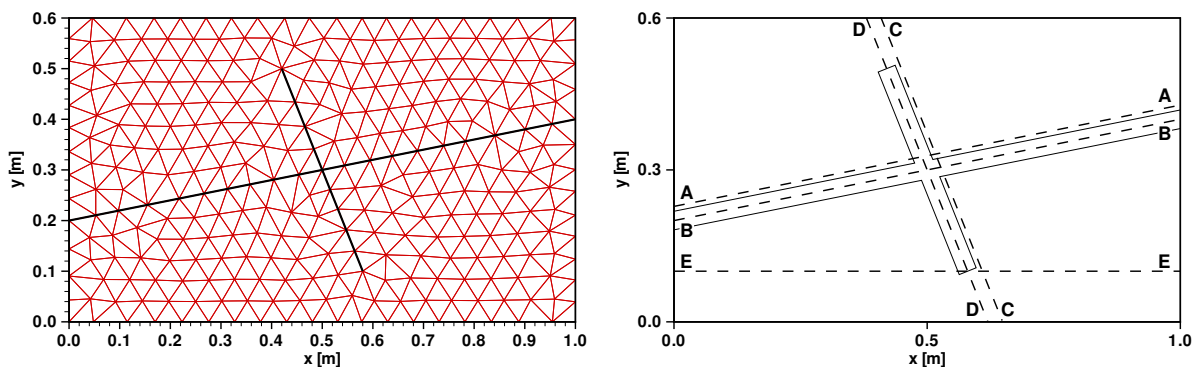


Abbildung 6.23: Modellgebiet mit Kluftkreuzung B. Links: Geometrie und Grobgitter. Rechts: Skizze des Modellgebiets mit den Umrissen der zweidimensional dargestellten Kluft und den Schnittlinien A – E, entlang derer die Zustandsgrößen untersucht und miteinander verglichen werden (Kluftbreite nicht maßstäblich).

In Abb. 6.22, rechts, und Abb. 6.23, rechts, sind für die Beispiele der Kluftkreuzungen A und B die Schnittlinien skizziert, entlang derer zusätzlich zu den zweidimensionalen Darstellungen im Folgenden die Simulationsergebnisse für Geschwindigkeit und Konzentration betrachtet werden. Schnittlinie A verläuft jeweils knapp oberhalb der durchgehenden Kluft mit einem Abstand von $5.0 \cdot 10^{-4}[m]$ zum Klufttrand (der äquidimensionalen Diskretisierung), Schnittlinie C verläuft mit dem gleichen Abstand oberhalb der kreuzenden Kluft. Schnittlinie B liegt auf der Kluftachse der durchgehenden Kluft, und Schnittlinie D entspricht der bis zum oberen und unteren Rand verlängerten Kluftachse der kreuzenden Kluft.

6.2.2 Ergebnisse der Strömungsmodellierung

Zunächst werden die Ergebnisse der Strömungsmodellierung für die Klufthkreuzung A betrachtet. Abb. 6.24 zeigt die mit dem Boxverfahren ermittelte Druckverteilung für den nieder- und den äquidimensionalen Ansatz auf Verfeinerungslevel 4. Im niederdimensionalen Fall (Abb. 6.24, links) ist eine stärkere Ausrundung der Isolinie für $p = 99950\text{[Pa]}$ zu bemerken, im Gesamten ist jedoch der Unterschied zwischen den Ergebnissen der nieder- und der äquidimensionalen Modellierung wie schon in Kap. 6.1.2 für den Druck marginal.

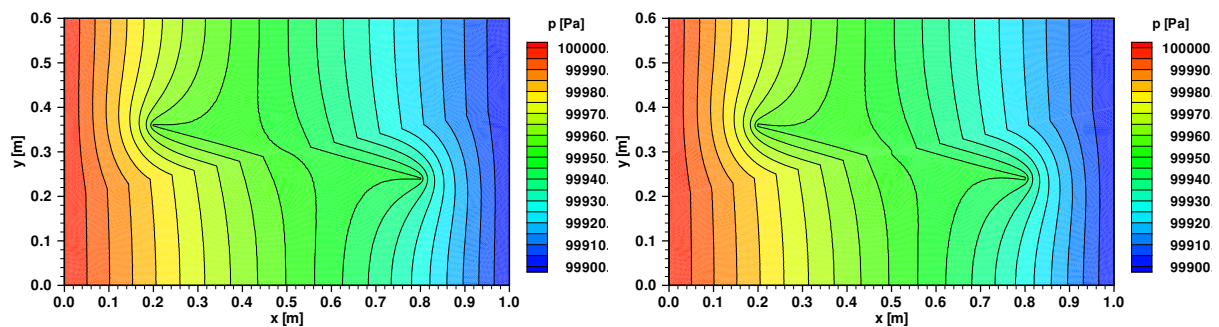


Abbildung 6.24: Druckverteilung im Modellgebiet mit Klufthkreuzung A für Level 4. Links: Niederdimensional. Rechts: Äquidimensional.

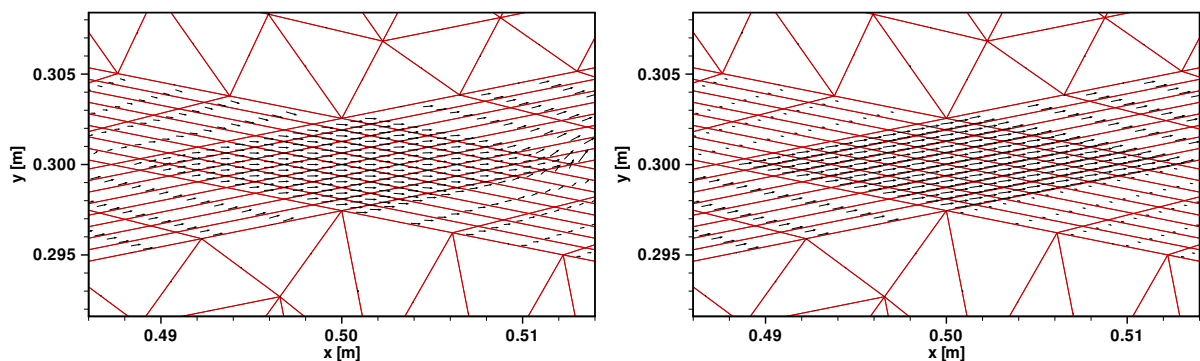


Abbildung 6.25: Geschwindigkeitsverteilung in der Klufthkreuzung A für Level 4 (äquidimensional). Links: Boxverfahren. Rechts: Gemischt-hybride Finite Elemente.

Es wird nun die Verteilung der Geschwindigkeit im Modellgebiet diskutiert. Dabei werden zuerst die Ergebnisse der äquidimensionalen Modellierung insbesondere im Bereich der Klüfte und der Klufthkreuzung analysiert und anschließend ein Vergleich zu den Ergebnissen der niederdimensionalen Modellierung gezogen. In Abb. 6.25 ist die Geschwindigkeitsverteilung in der Klufthkreuzung A für Level 4 dargestellt, links das mit dem Boxverfahren, rechts das mit den gemischt-hybriden Finiten Elementen ermittelte Ergebnis. Das Boxverfahren zeigt Probleme bei der korrekten Erfassung der Geschwindigkeiten in der Klufth. Obwohl der Fluss in der durchgehenden Klufth aufgrund des steileren Druckgradienten deutlich höher ist als in der kreuzenden Klufth, wird das Geschwindigkeitsfeld in der Klufthkreuzung durch den Zustrom aus der kreuzenden Klufth parallel zur x -Achse abgelenkt, um am Ausgang der Kreuzung wieder in die durchgehende Klufth zurückgedrängt zu werden. Die Lösung des gemischt-hybriden

Verfahrens weist ein sinnvollerer Verhalten auf, das Geschwindigkeitsfeld bleibt in der Kluftkreuzung an der Richtung der durchgehenden Kluft orientiert und wird nur wenig durch die Strömung in der kreuzenden Kluft beeinflusst.

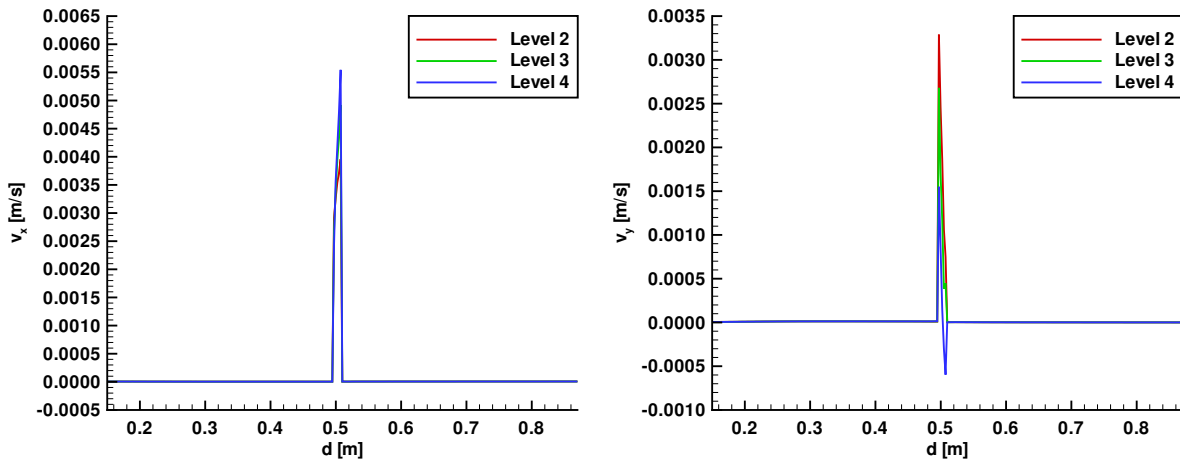


Abbildung 6.26: Geschwindigkeitsverteilung entlang Schnittlinie A für Level 2, 3 und 4 (Boxverfahren, äquidimensional). Links: x-Komponente. Rechts: y-Komponente.

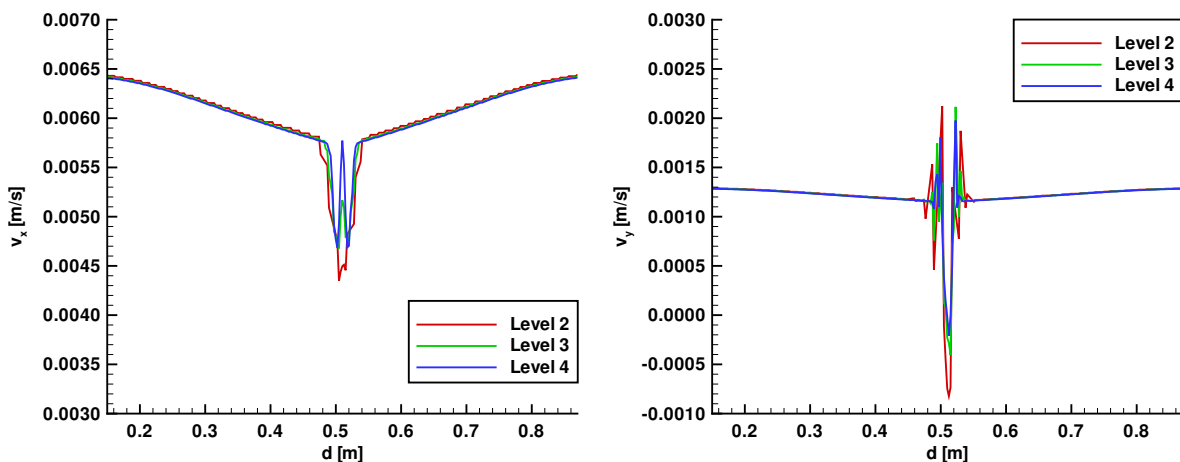


Abbildung 6.27: Geschwindigkeitsverteilung entlang Schnittlinie B für Level 2, 3 und 4 (Boxverfahren, äquidimensional). Links: x-Komponente. Rechts: y-Komponente.

Die Interpretation der Geschwindigkeitsfelder in Abb. 6.25 wird durch den Vergleich der Geschwindigkeitsverteilungen entlang der in Abb. 6.22 dargestellten Schnittlinien über verschiedene Verfeinerungstiefen und für das Boxverfahren und die gemischt-hybriden Finiten Elemente unterstützt. Abb. 6.26 zeigt x- und y-Komponente der mit dem Boxverfahren approximierten Geschwindigkeit entlang der Schnittlinie A knapp außerhalb der durchgehenden Kluft für die Level 2, 3 und 4. Die hohen Werte treten dort auf, wo sich Linie A mit der kreuzenden Kluft schneidet. Die niedrigen Werte entsprechen den Geschwindigkeitsanteilen in der Matrix und sind demnach nicht Null, wie es in Abb. 6.26 erscheinen mag, sondern klein im Verhältnis zu den Werten in der Kluft. Die Kluftwerte der x-Komponente werden für anstei-

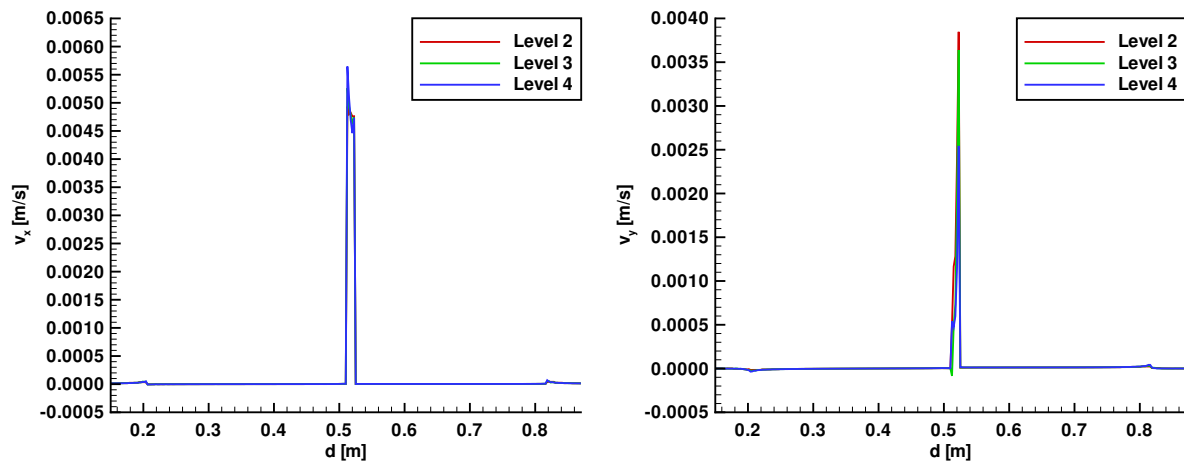


Abbildung 6.28: Geschwindigkeitsverteilung entlang Schnittlinie C für Level 2, 3 und 4 (Boxverfahren, äquidimensional). Links: x-Komponente. Rechts: y-Komponente.

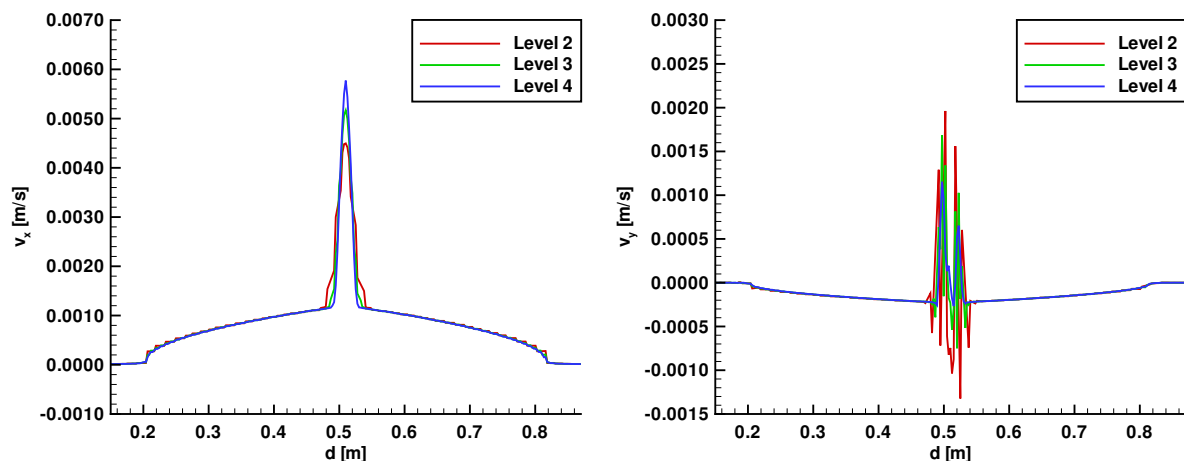


Abbildung 6.29: Geschwindigkeitsverteilung entlang Schnittlinie D für Level 2, 3 und 4 (Boxverfahren, äquidimensional). Links: x-Komponente. Rechts: y-Komponente.

gende Level größer, wobei die Differenz der Werte zwischen den einzelnen Leveln abnimmt, sodass zunächst Konvergenz angenommen wird. Dieser Aspekt soll bei Betrachtung der entsprechenden Ergebnisse des gemischt-hybriden Verfahrens wieder aufgegriffen werden. Die Kluftwerte der y-Komponente sind für Level 2 und 3 ausschließlich positiv, für Level 3 jedoch kleiner als für Level 2. Für Level 4 wird ein Teil der Werte negativ. Die Darstellung der Geschwindigkeitskomponenten entlang der Schnittlinie B (Abb. 6.27) in der Kluftachse der durchgehenden Kluft zeigt, dass die x-Komponente direkt vor und nach der Kluftkreuzung abnimmt, um dann im eigentlich Kluftkreuzungsbereich wieder anzusteigen, um so stärker, je höher die Verfeinerungsstufe ist. Die y-Komponente oszilliert für alle drei gezeigten Level im Kluftkreuzungs- und dem anschließenden Kluftbereich. Die Schnittlinie C (Abb. 6.28) parallel zur kreuzenden Kluft schneidet die durchgehende Kluft. Die x-Komponente der Geschwindigkeit ist im Kluftbereich wieder deutlich größer als in der umgebenden Matrix. Während

der Wert am rechten Klufrand über die Level konstant bleibt, wächst er am linken Klufrand mit steigendem Level an. Die y -Komponente nimmt im Kluftbereich mit ansteigendem Level ab. Wird die Geschwindigkeitsverteilung entlang der Achse der kreuzenden Kluft betrachtet (Schnittlinie D, Abb. 6.29), so zeigt die x -Komponente konvergentes Verhalten im Kluftbereich und in der Kluftkreuzung, die Maximalwerte in der Kluftkreuzung wachsen allerdings noch mit steigender Verfeinerungstiefe stetig an. Die y -Komponente oszilliert für alle drei Level im Kreuzungsbereich und im daran anschließenden Kluftbereich, wobei die Oszillationen mit steigendem Level etwas abnehmen.

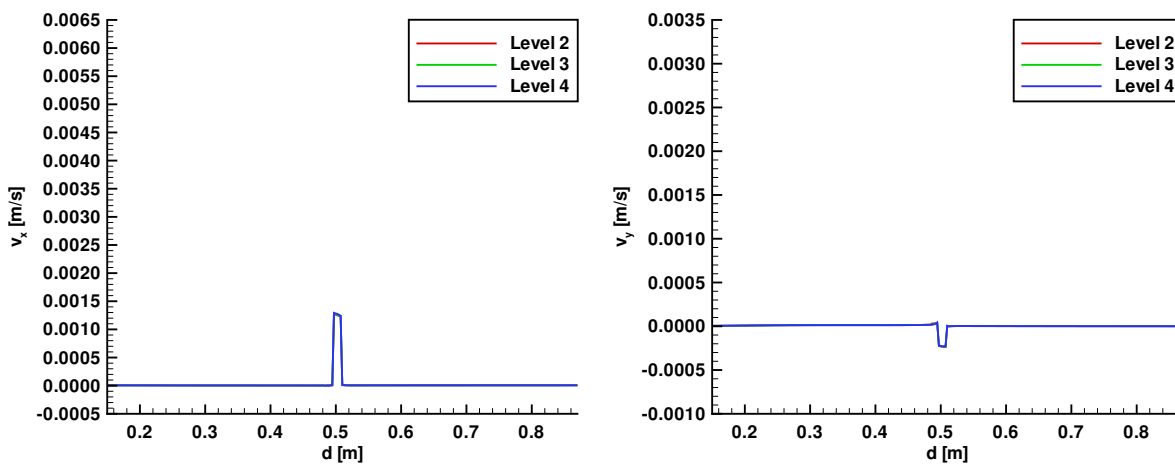


Abbildung 6.30: Geschwindigkeitsverteilung entlang Schnittlinie A für Level 2, 3 und 4 (gemischt-hybride Finite Elemente, äquidimensional). Links: x -Komponente. Rechts: y -Komponente.

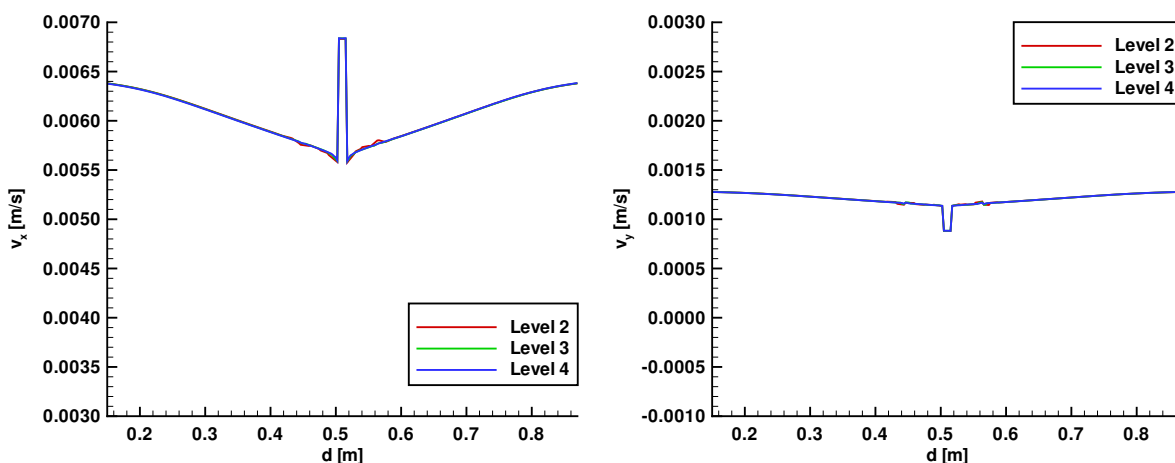


Abbildung 6.31: Geschwindigkeitsverteilung entlang Schnittlinie B für Level 2, 3 und 4 (gemischt-hybride Finite Elemente, äquidimensional). Links: x -Komponente. Rechts: y -Komponente.

Werden nun die entsprechenden Simulationsergebnisse für die gemischt-hybriden Finiten Elemente betrachtet (Abb. 6.30 – Abb. 6.33), so fällt als Erstes auf, dass für jede der vier Schnitt-

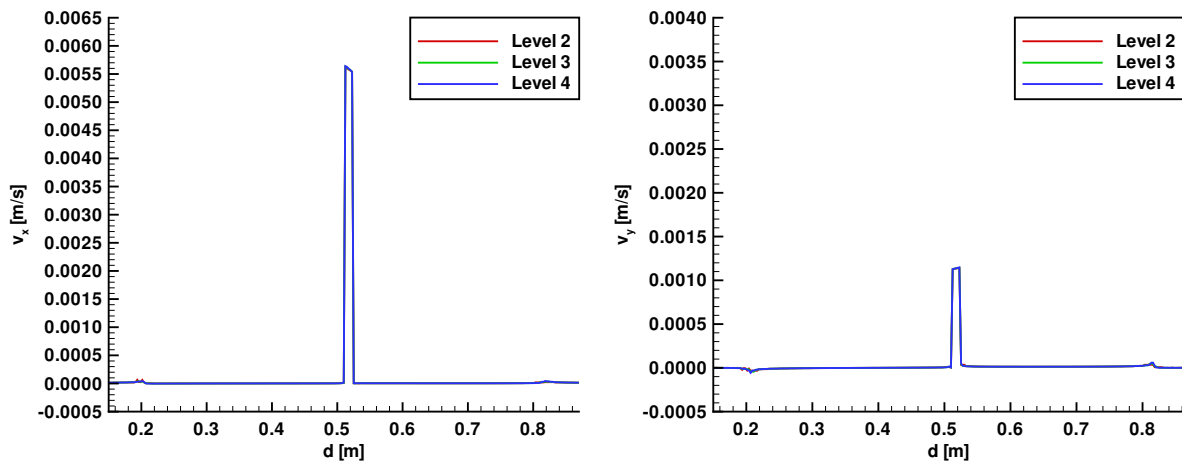


Abbildung 6.32: Geschwindigkeitsverteilung entlang Schnittlinie C für Level 2, 3 und 4 (gemischt-hybride Finite Elemente, äquidimensional). Links: x-Komponente. Rechts: y-Komponente.

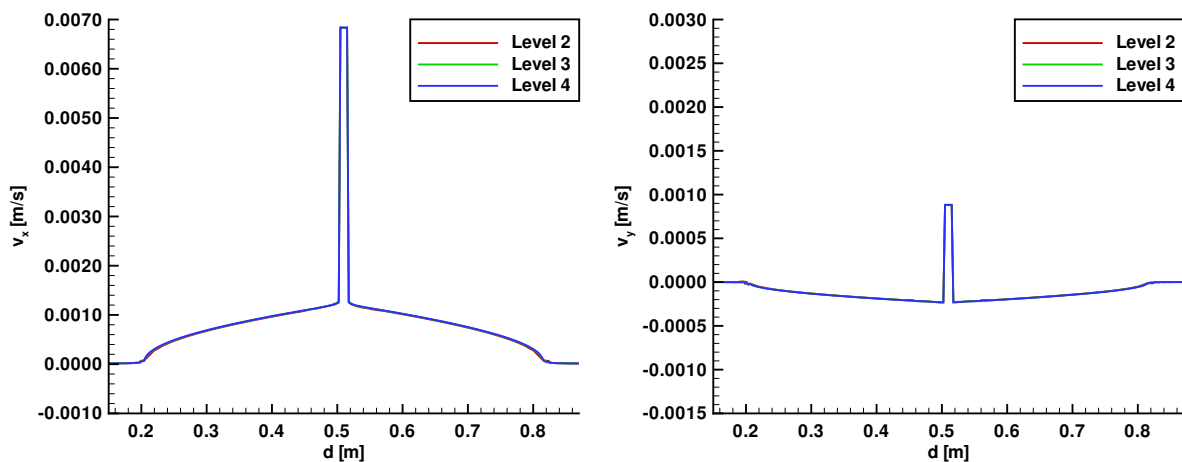


Abbildung 6.33: Geschwindigkeitsverteilung entlang Schnittlinie D für Level 2, 3 und 4 (gemischt-hybride Finite Elemente, äquidimensional). Links: x-Komponente. Rechts: y-Komponente.

linien die Geschwindigkeitsverteilungen für die drei gezeigten Level fast identisch sind. Wird daher und auch im Zusammenhang mit der sinnvolleren zweidimensionalen Abbildung der Geschwindigkeitsverteilung in der Kluftkreuzung (Abb. 6.25, rechts) davon ausgegangen, dass diese Lösung die exakte Lösung korrekt approximiert, so bedeutet dies beispielsweise für die x-Komponente entlang der Schnittlinie A (Abb. 6.26 und Abb. 6.30), dass die mit dem Boxverfahren ermittelten Ergebnisse zumindest für die drei gezeigten Verfeinerungsstufen gegen einen falschen, weil zu hohen Wert konvergieren. Die y-Komponente ist nach den Ergebnissen der gemischt-hybriden Modellierung in der kreuzenden Kluft negativ. Dies macht Sinn, da die Geometrie der kreuzenden Kluft eine negative Steigung aufweist und das Fluid demnach in der Kluft von „links oben“ nach „rechts unten“ fließt. Trotzdem zeigt die Lösung des Boxverfahrens erst für Level 4 überhaupt negative Anteile. Entlang der Schnittlinie B (Abb. 6.31) nimmt die

x-Komponente der Geschwindigkeit bis zur Klufftkreuzung ab, um in der Klufftkreuzung steil anzusteigen und wieder abzufallen und danach in der Klufft wieder langsam auf das Anfangsniveau anzuwachsen. Die y-Komponente zeigt ein ähnliches Verhalten, nur nimmt sie in der Klufftkreuzung etwas ab, da die Geschwindigkeit durch den Zufluss aus der kreuzenden Klufft etwas nach unten abgelenkt wird. Auch dieses Verhalten kann vom Boxverfahren nicht ausreichend wiedergegeben werden (Abb. 6.27). Die mit dem Boxverfahren ermittelten Lösungen für die Schnittlinien C und D parallel zur kreuzenden Klufft (Abb. 6.28 und Abb. 6.29) konvergieren im Wesentlichen gegen die mit den gemischt-hybriden Finiten Elementen berechneten Werte (Abb. 6.32 und Abb. 6.33) mit Ausnahme der y-Komponente entlang der Schnittlinie D, die in der Klufftkreuzung für das Boxverfahren oszilliert, für das gemischt-hybride Verfahren jedoch einen stabilen Wert aufweist.

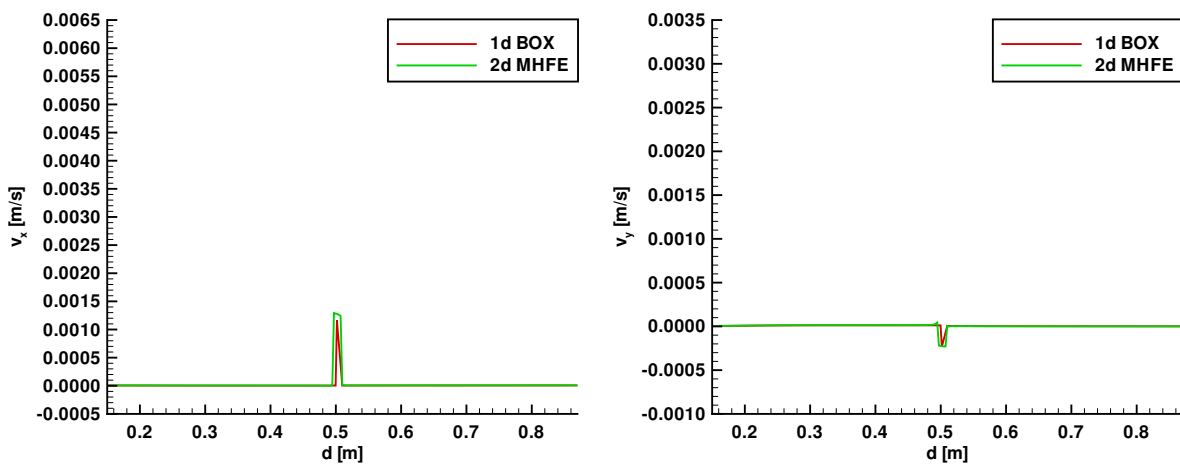


Abbildung 6.34: Geschwindigkeitsverteilung entlang Schnittlinie A für Level 4 für Boxverfahren, niederdimensional (1d BOX) und gemischt-hybride Finite Elemente, äquidimensional (2d MHFE). Links: x-Komponente. Rechts: y-Komponente.

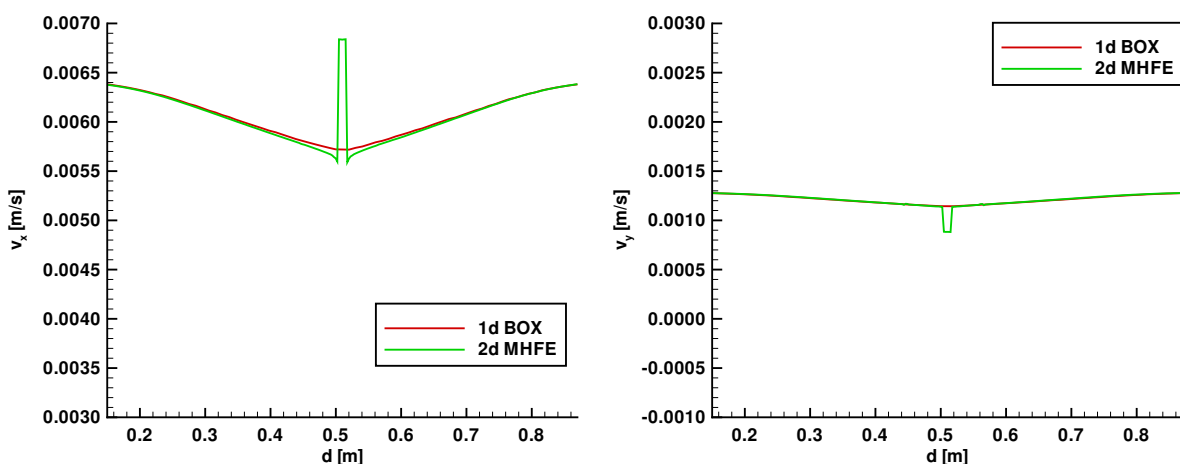


Abbildung 6.35: Geschwindigkeitsverteilung entlang Schnittlinie B für Level 4 für Boxverfahren, niederdimensional (1d BOX) und gemischt-hybride Finite Elemente, äquidimensional (2d MHFE). Links: x-Komponente. Rechts: y-Komponente.

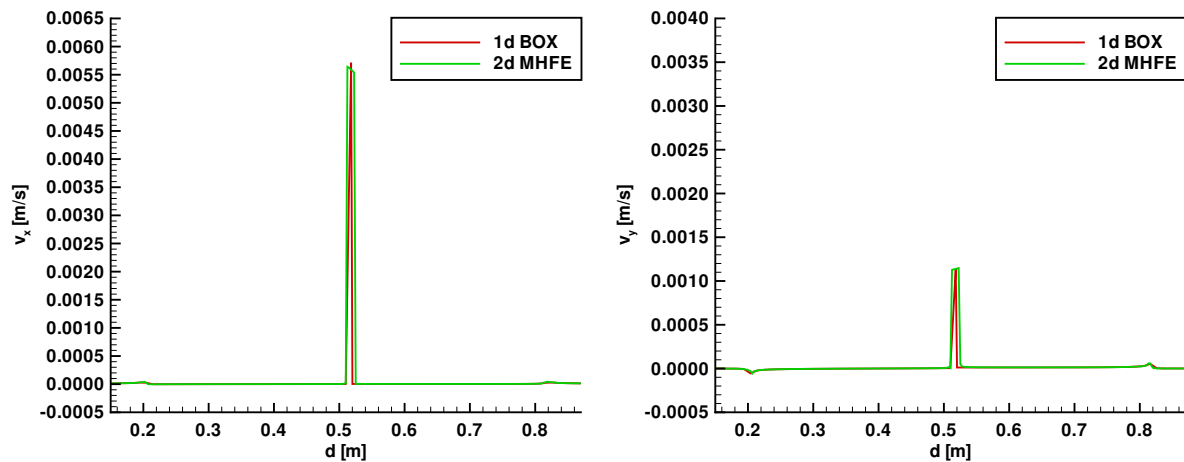


Abbildung 6.36: Geschwindigkeitsverteilung entlang Schnittlinie C für Level 4 für Boxverfahren, niederdimensional (1d BOX) und gemischt-hybride Finite Elemente, äquidimensional (2d MHFE). Links: x-Komponente. Rechts: y-Komponente.

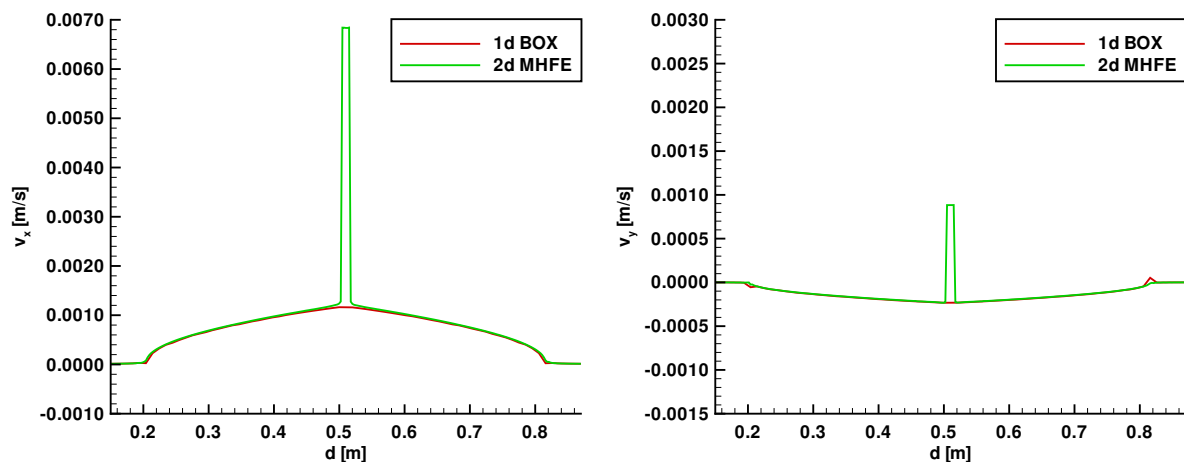


Abbildung 6.37: Geschwindigkeitsverteilung entlang Schnittlinie D für Level 4 für Boxverfahren, niederdimensional (1d BOX) und gemischt-hybride Finite Elemente, äquidimensional (2d MHFE). Links: x-Komponente. Rechts: y-Komponente.

Ein Vergleich der Ergebnisse der gemischt-hybriden Finiten Elemente auf äquidimensionaler Basis mit den Ergebnissen der niederdimensionalen Modellierung (Abb. 6.34 – Abb. 6.37) zeigt, dass die Werte sowohl in der Matrix als auch in den Klüften gut übereinstimmen. Unterschiede zeigen sich zum einen in den Schnittlinien A (Abb. 6.34) und C (Abb. 6.36) dort, wo die jeweils außerhalb der Kluft parallel verlaufende Schnittlinie die jeweils andere Kluft kreuzt. Diskretisierungsbedingt kann in der niederdimensionalen Variante hier nur ein Kluftwert erfasst werden, sodass die Verteilung über die Kluftbreite nicht abgebildet werden kann. Die Spitzenwerte sind jedoch für nieder- und äquidimensionalen Ansatz ähnlich groß. Zum anderen treten Unterschiede für die Schnittlinien B (Abb. 6.35) und D (Abb. 6.37) im Kluftkreuzungsbereich auf. Im niederdimensionalen Fall ist der Verlauf der x-Komponente im Kreuzungsbereich etwas runder. Außerdem wird die Kreuzung durch den niederdimensionalen

nalen Ansatz als Punkt dargestellt, für den selbst keine eigene Geschwindigkeitsbestimmung möglich ist, sodass die Linie für die Verteilung der Geschwindigkeitskomponenten in der Klufftkreuzung durchgezogen dargestellt wird und den Sprung der Ergebnisse der äquidimensionalen Modellierung nicht nachvollziehen kann.

Um den Einfluss der Klufftgeometrie auf die Modellergebnisse und damit auch den Einsatzbereich der verschiedenen Verfahren beurteilen zu können, wurden Simulationen auf einem Modellgebiet mit einem in Strömungsrichtung größeren Schnittwinkel zwischen den beiden Klüften, Klufftkreuzung B (Abb. 6.23), durchgeführt. Die Unterschiede in der Druckverteilung für das nieder- und das äquidimensional diskretisierte Modellgebiet (Abb. 6.38) sind hier bis auf den Schwenk, der im äquidimensionalen Fall die Klufftbreite erfasst (Abb. 6.38, rechts) sehr gering.

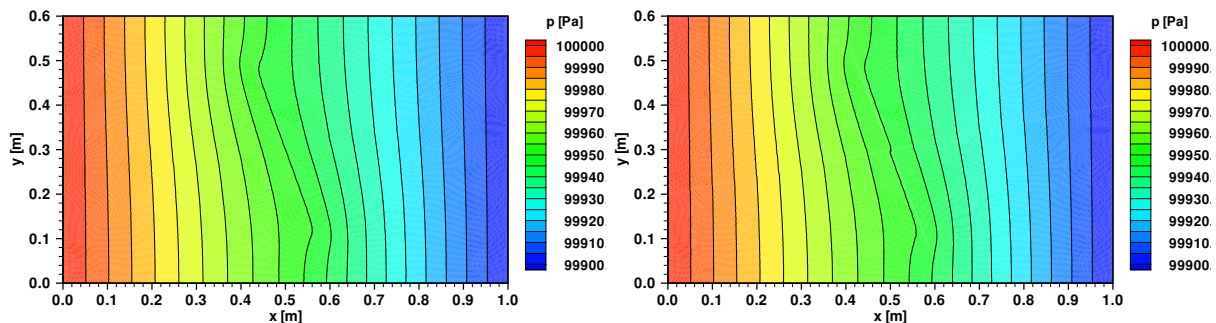


Abbildung 6.38: Druckverteilung im Modellgebiet mit Klufftkreuzung B für Level 4. Links: Niederdimensional. Rechts: Äquidimensional.

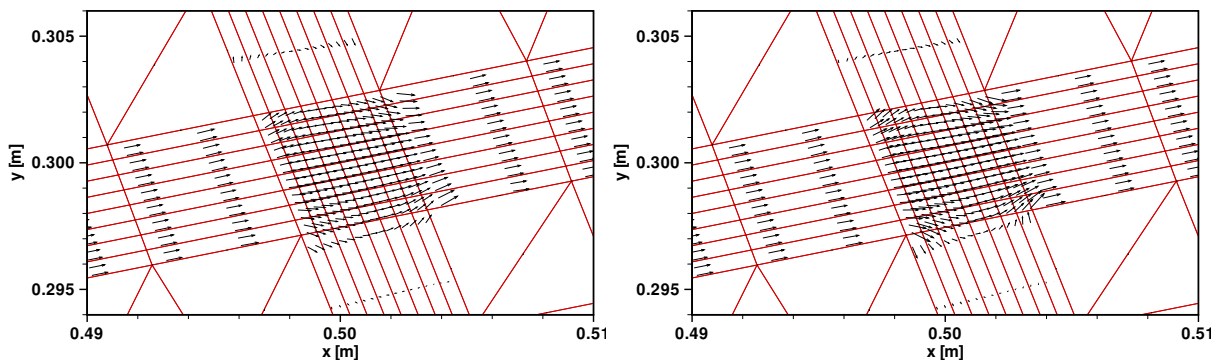


Abbildung 6.39: Geschwindigkeitsverteilung in der Klufftkreuzung B für Level 4 (äquidimensional). Links: Boxverfahren. Rechts: Gemischt-hybride Finite Elemente.

Die Struktur der Geschwindigkeitsverteilung ist in diesem Beispiel für Boxverfahren und gemischt-hybride Finite Elemente ähnlich (Abb. 6.39). In beiden Fällen orientiert sich die Richtung der Geschwindigkeit in der Klufftkreuzung an der Richtung der durchgehenden und damit dominierenden Klufft. Da die kreuzende Klufft sehr steil steht, ist der Druckunterschied zwischen den Klufftenden und damit auch der darin herrschende Fluss deutlich geringer als im Beispiel der Klufftkreuzung A. Die in Abb. 6.39 dargestellten Geschwindigkeitsapproximationen legen nahe, dass in der Klufftkreuzung Fluidmasse aus der durchgehenden Klufft

in die Arme der kreuzenden Kluft eingetragen wird, da die kreuzende Kluft fast senkrecht auf der durchgehenden Kluft steht und der Kreuzungsbereich daher einer Aufweitung der durchgehenden Kluft entspricht. Ein Teil der in die kreuzende Kluft eingetragenen Fluidmasse wird demnach zurück in die Kluftkreuzung geführt. Im oberen Arm der kreuzenden Kluft lässt sich dies durch das in der Kluft entgegenströmende Fluid begründen, der Impuls für das entsprechende Verhalten im unteren Arm der kreuzenden Kluft ist an dieser Stelle unklar. Es ist jedoch zu erkennen, dass mehr Fluidmasse aus dem oberen Arm der kreuzenden Kluft in die Kluftkreuzung fließt als aus dem unteren Arm und umgekehrt mehr Fluidmasse aus der Kluftkreuzung in den unteren Arm der kreuzenden Kluft als in den oberen, sodass der Einfluss der Strömung in der kreuzenden Kluft auf das Strömungsverhalten im Kreuzungsbereich deutlich wird. Ein Vergleich der Ergebnisse von Boxverfahren und gemischt-hybriden Finiten Elementen in Abb. 6.39 zeigt, dass die gemischt-hybriden Finiten Elemente die komplexe Geschwindigkeitsverteilung im Kreuzungsbereich und den daran anschließenden Kluftarmen genauer erfassen können. Die Diskussion soll mit Hilfe der Geschwindigkeitsverteilungen entlang der in Abb. 6.23, rechts, abgebildeten Schnittlinien fortgeführt werden.

Abb. 6.40 zeigt die Verteilung der Geschwindigkeitskomponenten entlang der Schnittlinie A knapp außerhalb der durchgehenden Kluft im Bereich des Schnittpunkts der Linie mit der kreuzenden Kluft für die Level 4 und 5 der äquidimensionalen Diskretisierung mit Boxverfahren und gemischt-hybriden Finiten Elementen sowie für Level 4 der niederdimensionalen Diskretisierung mit dem Boxverfahren. Die Werte in der Gesteinsmatrix stimmen für alle verwendeten Ansätze überein. Im Bereich der Kluft zeigt sich hier für die x -Komponente der Geschwindigkeit im Gegensatz zur Kluftkreuzung A im äquidimensionalen Fall für die beiden Diskretisierungsverfahren erst in den oberen Leveln (Level 4 und 5) Konvergenz gegen einen bestimmten Wert, wobei die Ergebnisse von Boxverfahren und gemischt-hybriden Finiten Elementen sich aufeinander zu bewegen. Das Verhalten der y -Komponente ist ähnlich, allerdings weist das gemischt-hybride Verfahren ein besseres Konvergenzverhalten auf, die Ergebnisse der Level 4 und 5 sind fast identisch. Die niederdimensionale Lösung erreicht im Kluftbereich einen deutlich niedrigeren Wert als die beiden äquidimensionalen Diskretisierungen, da keine zweidimensionalen Effekte innerhalb der Kluft auftreten können, die die jeweilige Geschwindigkeitskomponente in x - oder y -Richtung verstärken.

Werden die Geschwindigkeitsverteilungen entlang Schnittlinie B im Kluftkreuzungsbereich (Abb. 6.41) miteinander verglichen, so ist auch hier eine Konvergenz der Ergebnisse gegen einen bestimmten Wert zu beobachten, wobei sich wiederum die mit dem Boxverfahren und dem gemischt-hybriden Ansatz ermittelten Ergebnisse aufeinander zu bewegen. Auf den niedrigeren Leveln 2 und 3 (aus Gründen der Übersichtlichkeit hier nicht abgebildet) zeigen die Lösungen des gemischt-hybriden Verfahrens weniger Oszillationen als die des Boxverfahrens, was sich auf den Leveln 4 und 5 beispielsweise noch in der Verteilung der y -Komponente der Geschwindigkeit in Abb. 6.41, rechts, widerspiegelt. Es fällt auf, dass die x -Komponente der Geschwindigkeit (Abb. 6.41, links) im Kluftbereich außerhalb der Kreuzung für Level 5 der gemischt-hybriden Lösung in der Approximation von den Werten der anderen Ansätze und des niedrigeren Levels abweicht. Dieser Effekt verschwindet mit abnehmender Differenz der Permeabilitäten von Kluft und Matrix. Es bleibt zu untersuchen, ob mit ansteigender Verfeinerungstiefe die Invertierung der Untermatrix $\underline{\underline{G}}$ des gemischt-hybriden Verfahrens (Kap. 4.1,

Glg. 4.12) problematisch wird, oder ob das verwendete Lösungsverfahren für das Modellproblem nicht hinreichend robust ist. Da die Abweichung weniger als 1% von den Lösungen des Boxverfahrens und des gemischt-hybriden Ansatzes auf den niedrigeren Verfeinerungsstufen beträgt, werden die Ergebnisse im Rahmen der vorliegenden Untersuchung akzeptiert. Die Ergebnisse der niederdimensionalen Modellierung können das Strömungsverhalten im Kluffkrebungsbereich nicht abbilden und bleiben daher konstant.

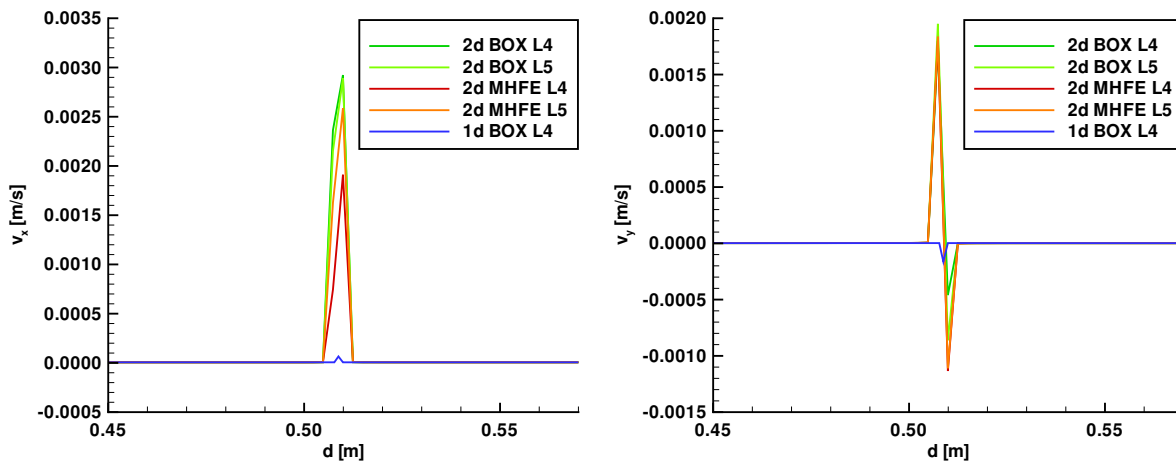


Abbildung 6.40: Geschwindigkeitsverteilung entlang Schnittlinie A für Level 4 (L4) und Level 5 (L5) jeweils für Boxverfahren, äquidimensional (2d BOX) und gemischt-hybride Finite Elemente, äquidimensional (2d MHFE) sowie für Level 4 für Boxverfahren, niederdimensional (1d BOX). Links: x-Komponente. Rechts: y-Komponente.

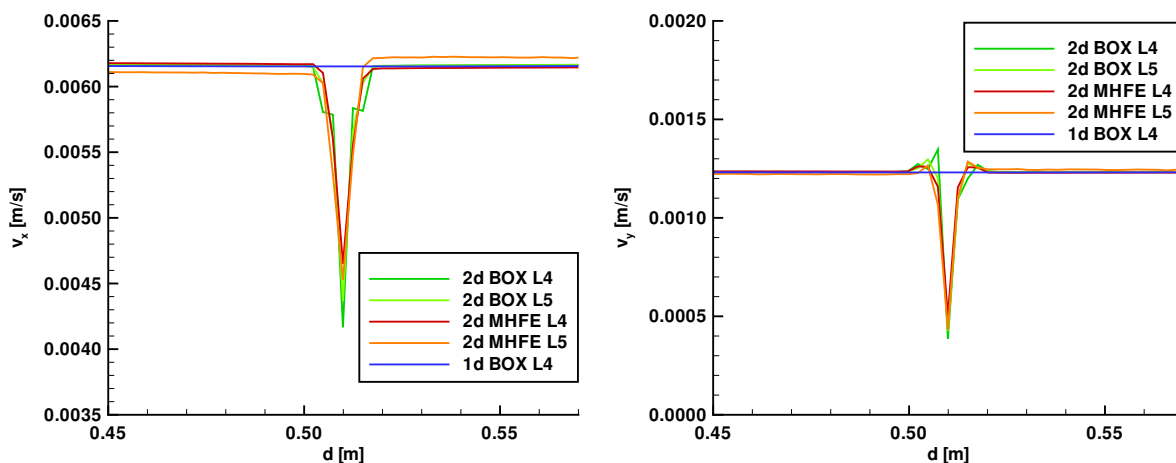


Abbildung 6.41: Geschwindigkeitsverteilung entlang Schnittlinie B für Level 4 (L4) und Level 5 (L5) jeweils für Boxverfahren, äquidimensional (2d BOX) und gemischt-hybride Finite Elemente, äquidimensional (2d MHFE) sowie für Level 4 für Boxverfahren, niederdimensional (1d BOX). Links: x-Komponente. Rechts: y-Komponente.

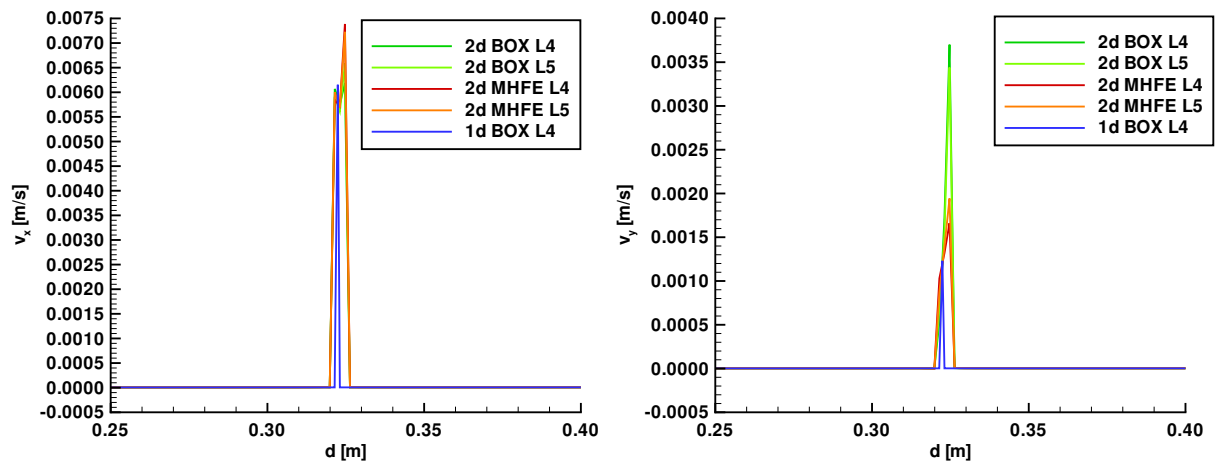


Abbildung 6.42: Geschwindigkeitsverteilung entlang Schnittlinie C für Level 4 (L4) und Level 5 (L5) jeweils für Boxverfahren, äquidimensional (2d BOX) und gemischt-hybride Finite Elemente, äquidimensional (2d MHFE) sowie für Level 4 für Boxverfahren, niederdimensional (1d BOX). Links: x-Komponente. Rechts: y-Komponente.

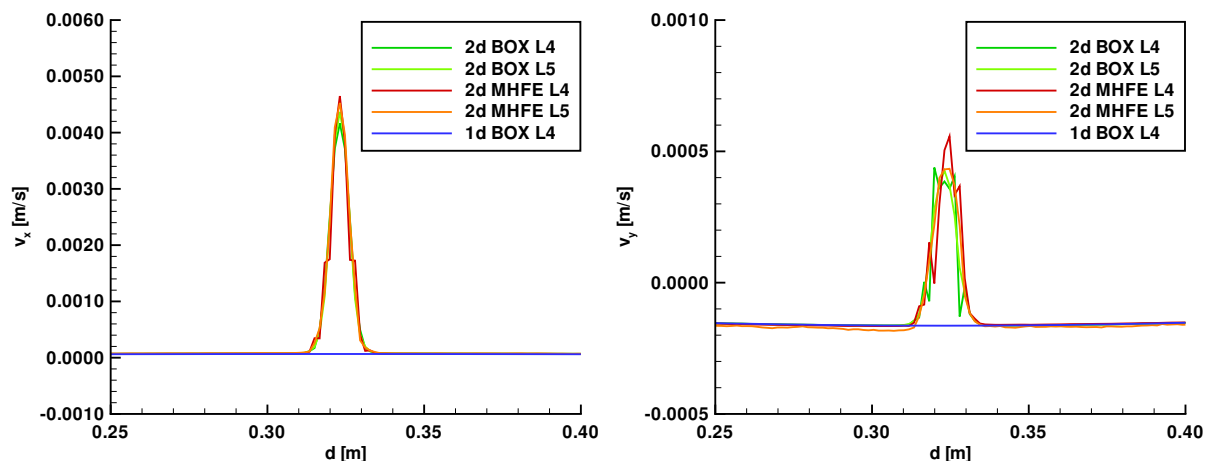


Abbildung 6.43: Geschwindigkeitsverteilung entlang Schnittlinie D für Level 4 (L4) und Level 5 (L5) jeweils für Boxverfahren, äquidimensional (2d BOX) und gemischt-hybride Finite Elemente, äquidimensional (2d MHFE) sowie für Level 4 für Boxverfahren, niederdimensional (1d BOX). Links: x-Komponente. Rechts: y-Komponente.

Wird das Verhalten entlang der kreuzenden Kluft betrachtet, so zeigt sich ein uneinheitliches Verhalten. Die x-Komponente der Geschwindigkeit wird dort, wo die Schnittlinie C die durchgehende Kluft kreuzt, am linken Klufttrand von allen Verfahren relativ ähnlich approximiert, am rechten Klufttrand konvergieren erst die oberen Level 4 und 5 der beiden verwendeten Diskretisierungsverfahren gegeneinander. Dies wird durch den schwierig zu approximierenden Fluss aus dem unteren Arm der kreuzenden Kluft zurück in die Kluftkreuzung und den rech-

ten Arm der durchgehenden Kluft begründet. Die y -Komponente der Geschwindigkeit zeigt in diesem Bereich kein wirkliches Konvergenzverhalten. Die Werte aus der niederdimensionalen Formulierung entsprechen etwa den Werten der äquidimensionalen Modellierung in der Kluftachse. Entlang der Schnittlinie D innerhalb der kreuzenden Kluft (Abb. 6.43) wird das Konvergenzverhalten der approximierten Lösungen für den Kreuzungsbereich wieder besser. Zwar weisen die Ergebnisse auf den niedrigeren Leveln 2 und 3 insbesondere für die y -Komponente der Geschwindigkeitsverteilung Oszillationen auf, doch konvergieren die Lösungen des Boxverfahrens und des gemischt-hybriden Ansatzes gegeneinander.

6.2.3 Ergebnisse der Transportmodellierung

Die Transportmodellierung wurde mit dem Boxverfahren mit beiden vorgestellten Upwinding-Strategien, Fully Upwinding und Streamline Orientation, für die Level 2 und 3 durchgeführt, um auch hier eine Aussage zum Konvergenzverhalten der beiden Ansätze zu erhalten. Als Zeitschritt wurde für Level 2 $\Delta t_2 = 1.0[s]$ und für Level 3 $\Delta t_3 = 0.5[s]$ angesetzt. Die daraus resultierende maximale Courant-Zahl beträgt im niederdimensionalen Fall $Cr = 2.08$ und im äquidimensionalen Fall $Cr = 11.2$ (Strömung: Boxverfahren) bzw. $Cr = 6.0$ (Strömung: gemischt-hybride FE). Bei niederdimensionaler Darstellung ergeben sich die Maximalwerte in der Kluft. Die äquidimensionalen Courant-Werte verteilen sich ähnlich zum niederdimensionalen Ansatz im Gebiet, die hohen Werte treten lokal in den Ecken der Kluftkreuzung auf.

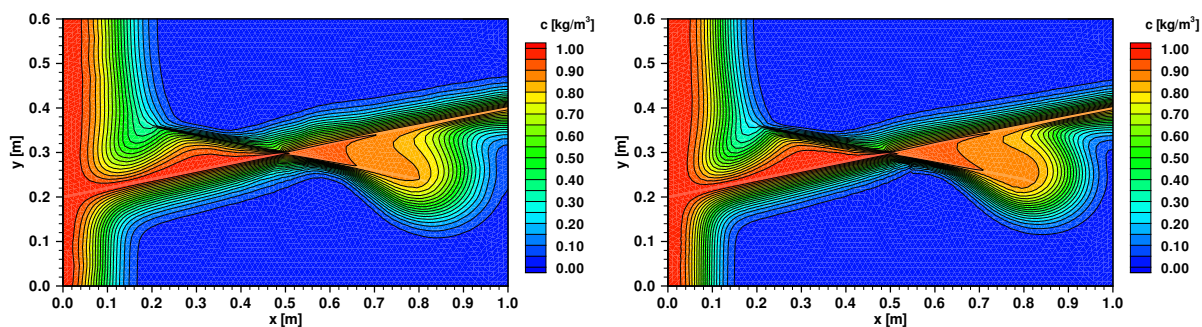


Abbildung 6.44: Konzentrationsverteilung im Modellgebiet mit Kluftkreuzung A nach 2400[s]. Links: Fully Upwinding. Rechts: Streamline Orientation.

Der Tracer wurde am linken Rand mit einem Wert von $c(x = 0.0[m], y, t) = 1.0[kg/m^3]$ über einen Zeitraum von $t_{zu} = 9960[s]$ zugegeben, danach war $c(x = 0.0[m], y, t) = 0.0[kg/m^3]$ (s. auch Tab. 6.1). Abb. 6.44 zeigt die Konzentrationsverteilung im Modellgebiet mit Kluftkreuzung A nach einer Simulationszeit von 2400[s]. Verglichen werden die Ergebnisse für Fully Upwinding (Abb. 6.44, links) und Streamline Orientation (Abb. 6.44, rechts) auf Level 2 bei äquidimensionaler Diskretisierung. Das zugrunde liegende Geschwindigkeitsfeld wurde mit der Methode der gemischt-hybriden Finiten Elemente ermittelt, mit der eine bessere Strömungsapproximation für diese Kluftkreuzung erzielt werden konnte als mit dem Boxverfahren (Kap. 6.2.2). Zu diesem frühen Zeitpunkt hat sich der Tracer vor allem entlang der Klüfte im Modellgebiet verteilt, und die schärferen Konzentrationsfronten am Zuflussrand und an den Klüften geben den Einfluss der erhöhten Approximationsordnung des Streamline Orientation auf die Lösung der Transportdiskretisierung wieder.

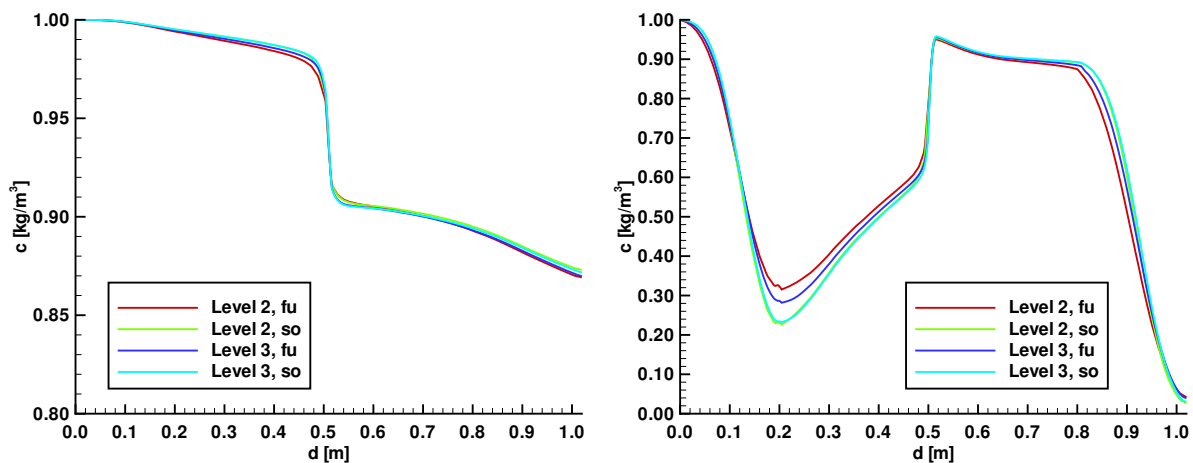


Abbildung 6.45: Links: Konzentrationsverteilung entlang Schnittlinie B. Rechts: Konzentrationsverteilung entlang Schnittlinie D. Jeweils für Fully Upwinding (fu, Level 2–3) und Streamline Orientation (so, Level 2–3).

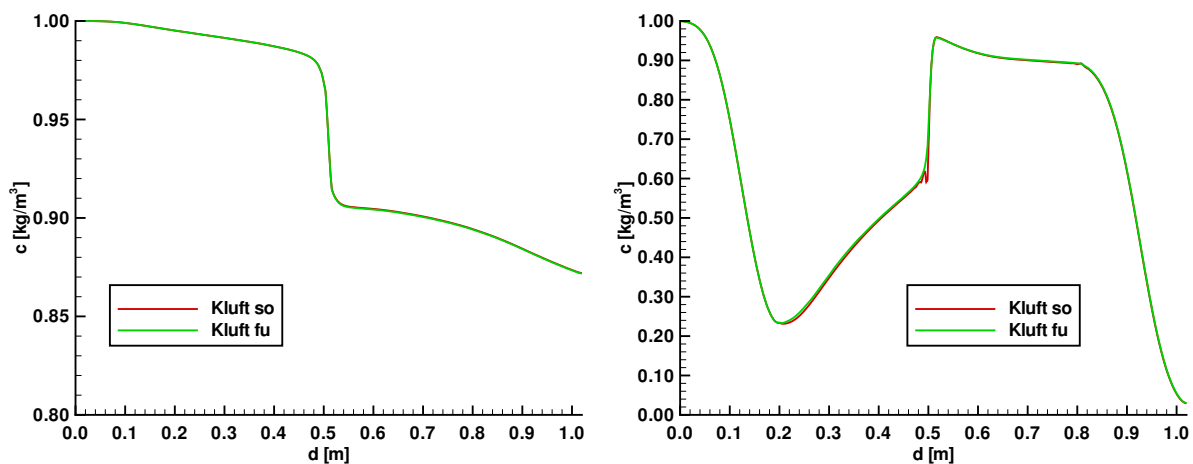


Abbildung 6.46: Links: Konzentrationsverteilung entlang Schnittlinie B. Rechts: Konzentrationsverteilung entlang Schnittlinie D. Jeweils für Streamline Orientation im gesamten Modellgebiet (Kluft so) und Streamline Orientation in der Matrix, Fully Upwinding in der Kluft (Kluft fu).

In Abb. 6.45 sind die Schnitte durch die Konzentrationsverteilung entlang der Klüfte für die beiden eingesetzten Upwinding-Strategien jeweils auf den Leveln 2 und 3 dargestellt, links für die durchgehende und rechts für die kreuzende Kluft. Der Abstandparameter d läuft für Linie B von $x = 0.0[m]$ gegen $x = 1.0[m]$ und für Linie D von $y = 0.6[m]$ gegen $y = 0.0[m]$. Während sich für die durchgehende Kluft nur ein geringer Unterschied zwischen den einzelnen Ergebnissen zeigt, da die kreuzende Kluft eine Tracerverteilung bewirkt, die streckenweise nur auf einer Seite der durchgehenden Kluft eine steile Front bildet, ist der Einfluss des Streamline Orientation auf die Konzentrationsverteilung in der kreuzenden Kluft deutlich. Letztere wird im oberen Bereich im Wesentlichen aus der Matrix gespeist und ist damit von der Tracerverteilung in der Matrix abhängig. Im unteren Bereich, der auch aus der durchgehenden Kluft

gespeist wird, sind die Differenzen zwischen den einzelnen Ansätzen geringer. Dabei sind die Ergebnisse für das Boxverfahren mit Streamline Orientation für beide Level fast identisch. Die Werte des Boxverfahrens mit Fully Upwinding konvergieren mit ansteigendem Level gegen die Lösung des Streamline Orientation, die damit als hinreichend genau interpretiert wird. Wie in Kap. 4.2.2 ausgeführt, wird in den Klüften unabhängig von den lokalen physikalischen Eigenschaften der Transportprozesse immer ein Fully Upwinding eingesetzt, um Unterschwinger im Bereich von Klüftkreuzungen zu vermeiden. Abb. 6.46 zeigt die Konzentrationsverteilungen entlang der Klüfte analog zu Abb. 6.45, jedoch mit Streamline Orientation auch in der Kluft. Entlang der durchgehenden Kluft (Abb. 6.46, links) zeigen sich keine Unterschiede. Entlang der kreuzenden Kluft (Abb. 6.46, rechts) bilden sich vor der Klüftkreuzung Oszillationen, die für das vorliegende Beispiel klein sind, da der Upwinding-Parameter α auch in der kreuzenden Kluft aufgrund der dort auftretenden relativ hohen Geschwindigkeiten selbst bei Anwendung von Streamline Orientation nahe $\alpha = 1$ ist.

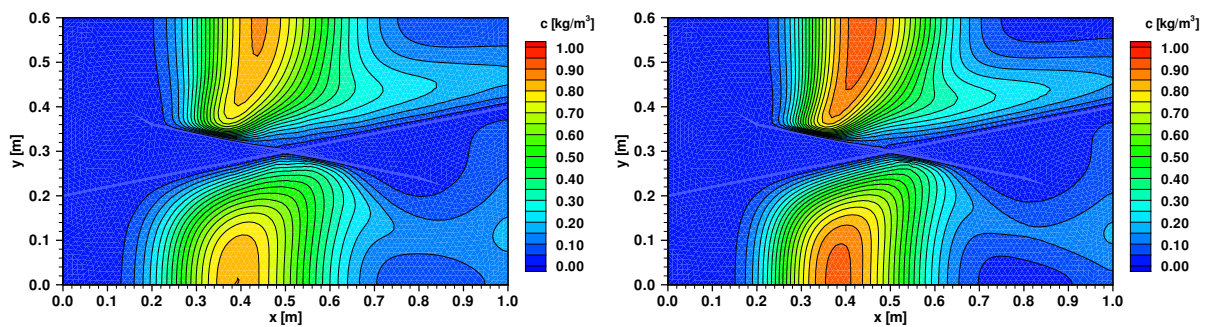


Abbildung 6.47: Konzentrationsverteilung im Modellgebiet mit Klüftkreuzung A nach 18000[s]. Links: Fully Upwinding, Rechts: Streamline Orientation.

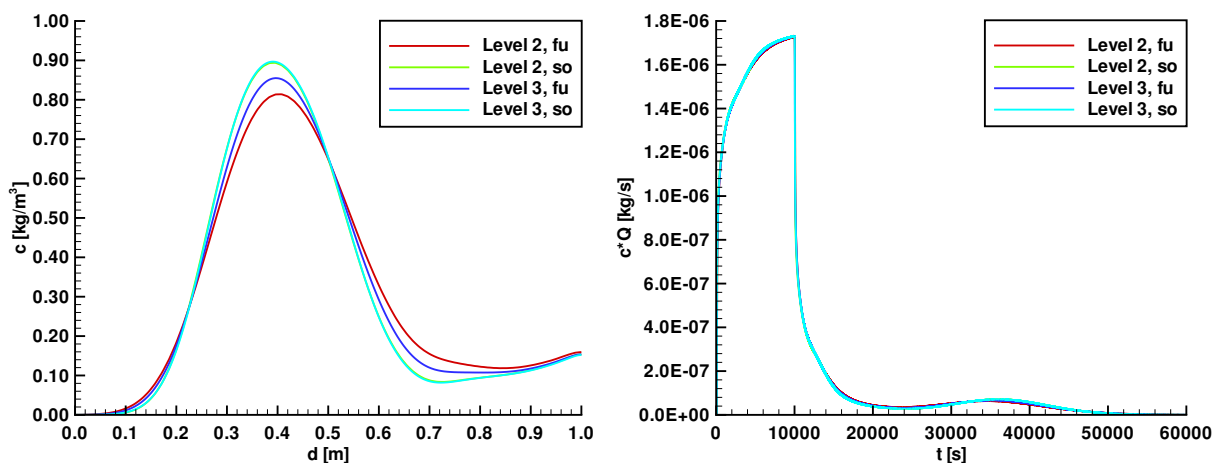


Abbildung 6.48: Links: Konzentrationsverteilung entlang Schnittlinie E. Rechts: Durchbruchkurven am Ausstromrand ($x = 1.0[m]$). Jeweils für Fully Upwinding (fu, Level 2–3) und Streamline Orientation (so, Level 2–3).

Abb. 6.47 stellt die Konzentrationsverteilung im Modellgebiet mit Klüftkreuzung A nach 18000[s] dar, links für Fully Upwinding, rechts für Streamline Orientation, wie zuvor für

Level 2 bei äquidimensionaler Diskretisierung auf der Basis eines mit Hilfe der gemischt-hybriden Finiten Elemente ermittelten Geschwindigkeitsfeldes. Die schärfere Frontapproximation durch das Boxverfahren mit Streamline Orientation wird bei der Tracerverteilung im Matrixbereich besonders deutlich. Der Schnitt durch die Konzentrationsverteilung entlang Linie E parallel zum unteren Rand (Abb. 6.48, links) zeigt, dass auch hier wieder die Lösung des Boxverfahrens mit Fully Upwinding mit steigendem Level gegen die Ergebnisse des Streamline Orientation konvergiert. Nach der Durchbruchkurve am rechten Ausstromrand bei $x = 1.0[m]$ in Abb. 6.48, rechts, sind die globalen Unterschiede zwischen beiden Upwinding-Strategien jedoch minimal. Die Unterschiede zeigen sich vor allem im Bereich des zweiten, deutlich flacheren Peaks, der aus der Matrix kommt und vom Upwinding-Verfahren wesentlich beeinflusst wird. Die Unterschiede sind nicht geringer als im Beispiel der Einzelkluft in Abb. 6.14, sie werden jedoch durch den ersten Peak, der den Tracerdurchbruch am Ende der durchgehenden Kluft charakterisiert, dominiert.

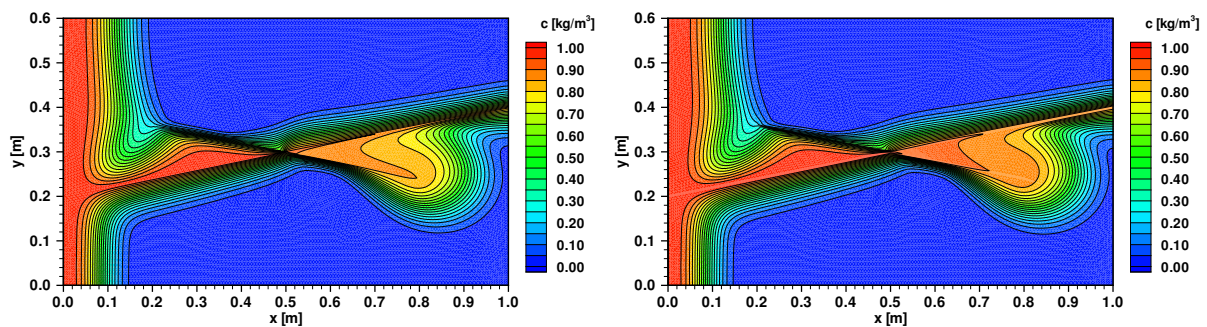


Abbildung 6.49: Konzentrationsverteilung im Modellgebiet mit Kluftkreuzung A nach 2400[s]. Level 3, Streamline Orientation. Links: Niederdimensional. Rechts: Äquidimensional.

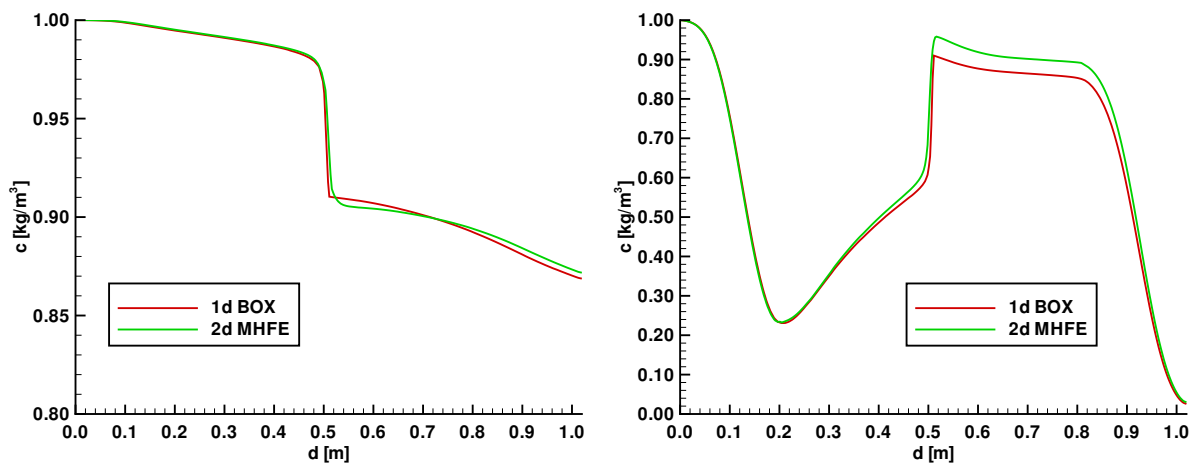


Abbildung 6.50: Links: Konzentrationsverteilung entlang Schnittlinie B. Rechts: Konzentrationsverteilung entlang Schnittlinie D. Jeweils für Boxverfahren, niederdimensional (1d BOX) und gemischt-hybride FE, äquidimensional (2d MHFE) in der Strömungsdiskretisierung, Streamline Orientation (Level 3) für Transport.

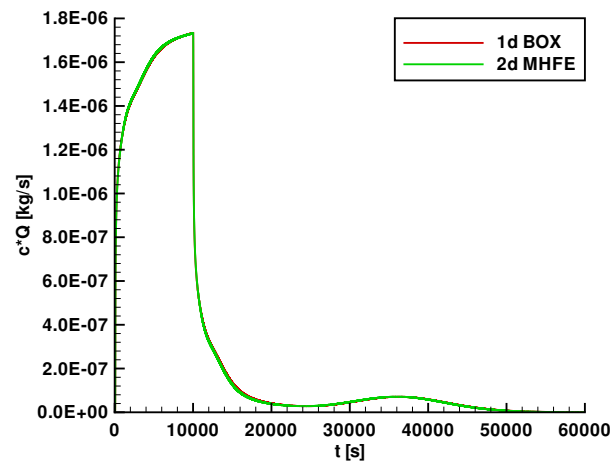


Abbildung 6.51: Durchbruchkurven am Ausstromrand ($x = 1.0[m]$). Für Boxverfahren, niederdimensional (1d BOX) und gemischt-hybride FE, äquidimensional (2d MHFE) in der Strömungsdiskretisierung, Streamline Orientation (Level 3) für Transport.

Um den Einfluss der äquidimensionalen Modellierung als solcher auf das Transportverhalten zu analysieren, werden die Ergebnisse des nieder- und des äquidimensionalen Ansatzes miteinander verglichen. In Abb. 6.49 ist die Konzentrationsverteilung auf Level 3 nach 2400[s] dargestellt, links für den niederdimensionalen Fall auf der Basis eines mit dem Boxverfahren ermittelten Geschwindigkeitsfelds, recht für den äquidimensionalen Fall, für den die Strömung wie zuvor mit der Methode der gemischt-hybriden Finiten Elemente ermittelt wurde. Für das Boxverfahren der Transportmodellierung wurde in beiden Fällen Streamline Orientation für das Upwinding eingesetzt. Abb. 6.49 und die Konzentrationsverteilungen entlang der Schnittlinien B und D in Abb. 6.50 zeigen, dass die deutlich höhere Geschwindigkeit im Kreuzungsbereich bei der äquidimensionalen Modellierung offenbar ausreicht, um mehr Tracer in die nach rechts abgehenden Kluffarme zu speisen. Gleichzeitig scheint sich das Verhältnis der Massenaufteilung auf die beiden von der Kluffkreuzung abgehenden Kluffarme gegenüber dem niederdimensionalen Ansatz zu verändern, da ein größerer Anteil des Tracers in den nach unten abgehenden rechten Arm der kreuzenden Kluff transportiert wird und von dort in die Matrix gelangt. Jedoch macht auch hier die Betrachtung der in Abb. 6.51 dargestellten Durchbruchskurve am Ausstromrand ($x = 1.0[m]$) deutlich, dass die Unterschiede nicht groß genug sind, um global Wirkung zu zeigen.

Abschließend wird für dieses Modellgebiet der Einfluss der Strömungsdiskretisierung auf die Transportapproximation bei äquidimensionaler Formulierung untersucht. In Abb. 6.52 ist die Konzentrationsverteilung nach 2400[s] für Level 3 abgebildet, links auf der Basis eines mit dem Boxverfahren, rechts auf der Basis eines mit gemischt-hybriden Finiten Elementen ermittelten Geschwindigkeitsfelds. Die Transportdiskretisierung wurde in beiden Fällen mit Streamline Orientation durchgeführt. Die Ergebnisse in Abb. 6.52 und die Konzentrationsverteilung entlang der Schnittlinien B und D in Abb. 6.53 verdeutlichen den Einfluss der Geschwindigkeitsverteilung in der Kluffkreuzung (Abb. 6.25) auf den Tracertransport. Wird

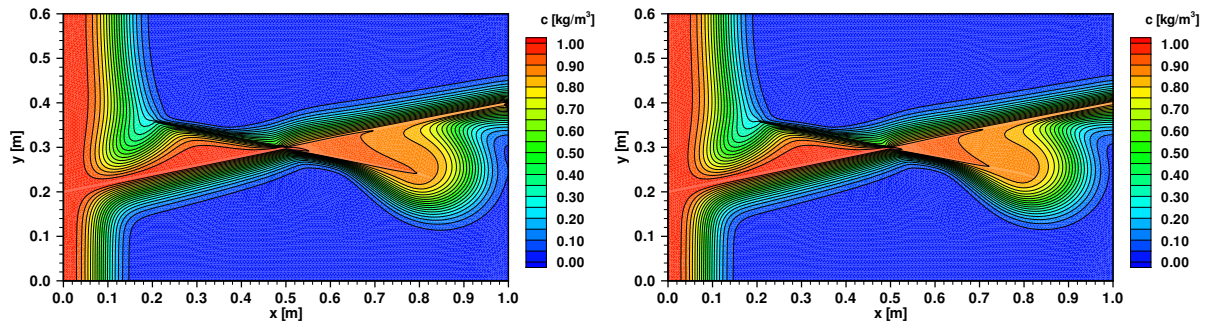


Abbildung 6.52: Konzentrationsverteilung im Modellgebiet mit Klufftkreuzung A nach 2400[s]. Level 3, äquidimensionaler Ansatz, Streamline Orientation. Links: Strömungsdiskretisierung mit Boxverfahren. Rechts: Strömungsdiskretisierung mit gemischt-hybriden FE.

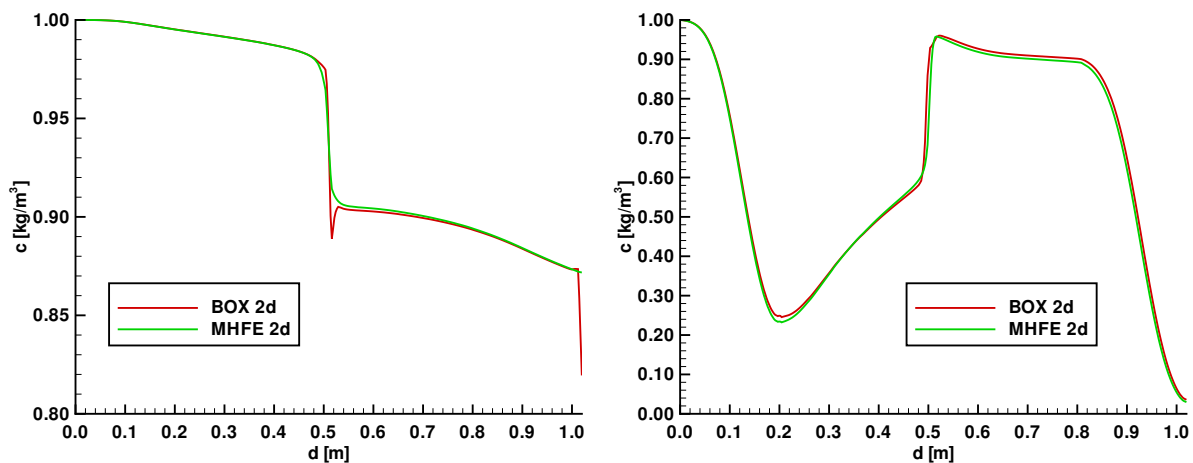


Abbildung 6.53: Links: Konzentrationsverteilung entlang Schnittlinie B. Rechts: Konzentrationsverteilung entlang Schnittlinie D. Level 3, äquidimensionaler Ansatz, Streamline Orientation. Jeweils für Strömungsdiskretisierung mit Boxverfahren (BOX 2d) und mit gemischt-hybriden FE (MHFE 2d).

das Boxverfahren zur Strömungsapproximation verwendet, so wird ein größerer Anteil des in der Klufftkreuzung ankommenden Tracers in den unteren, rechten Kluftarm der kreuzenden Kluft transportiert (Abb. 6.52, links, und Abb. 6.53, rechts). Wird die Strömung hingegen mit den gemischt-hybriden Finiten Elementen approximiert, die die Richtung der Geschwindigkeit eher an der durchgehenden Hauptkluft orientieren, so ist der Anteil der in den unteren, rechten Kluftarm der kreuzenden Kluft gelangenden Masse geringer (Abb. 6.52, rechts, und Abb. 6.53, rechts).

Der Vergleich der Durchbruchkurven in Abb. 6.54 für beide Ansätze zeigt Unterschiede im Bereich des ersten Peaks (Zoom: Abb. 6.54, rechts), der im Wesentlichen von dem Tracer verursacht wird, der durch die durchgehende Kluft den Ausstromrand bei $x = 1.0[m]$ erreicht. Das Boxverfahren weist hier einen höheren Wert auf. Grund dafür ist die Eigenschaft des Box-

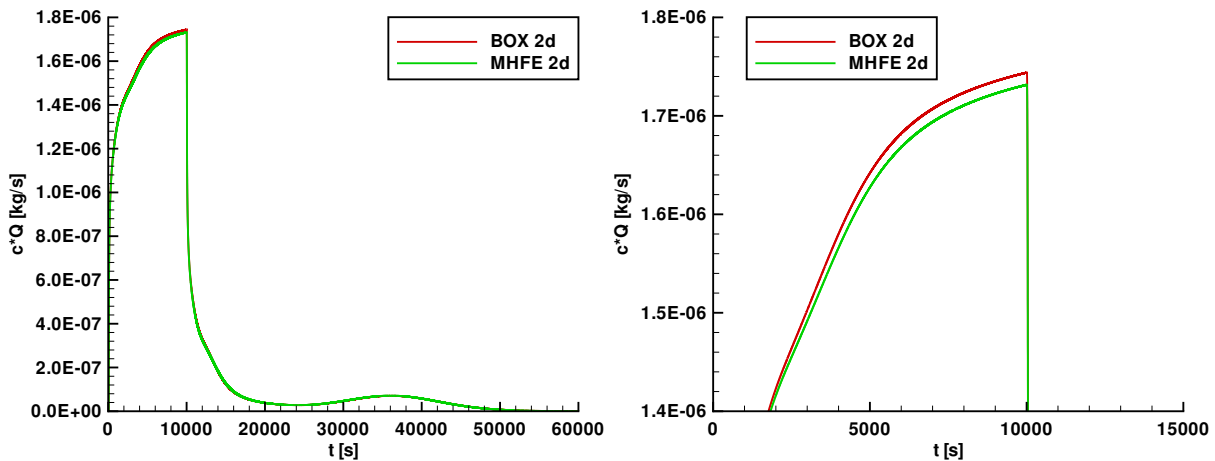


Abbildung 6.54: Links: Durchbruchkurven am Ausstromrand ($x = 1.0[m]$) für Level 3, äquidimensionaler Ansatz, Streamline Orientation, Strömungsdiskretisierung mit Boxverfahren (BOX 2d) und mit gemischt-hybriden FE (MHFE 2d). Rechts: Zoom.

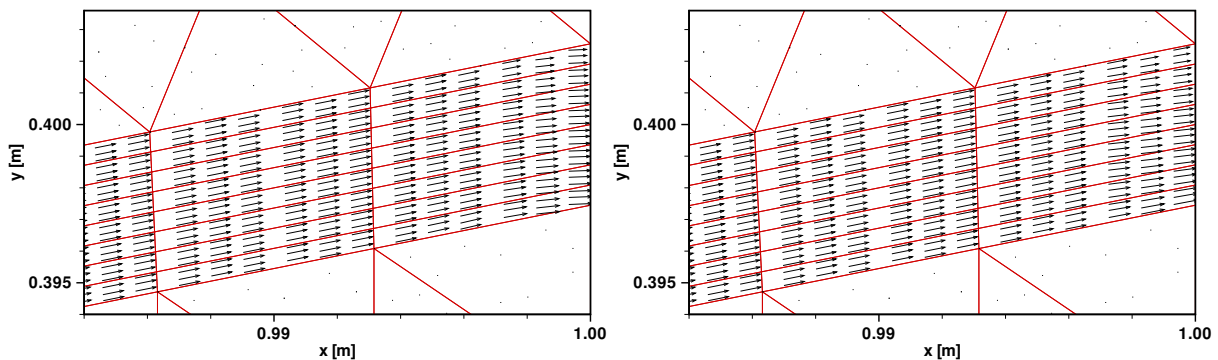


Abbildung 6.55: Geschwindigkeitsverteilung im Modellgebiet mit Kluftkreuzung A, rechtes Kluftende der durchgehenden Kluft. Links: Boxverfahren. Rechts: Gemischt-hybride FE.

verfahrens, die Geschwindigkeit am Rand senkrecht zum Rand zu approximieren (Abb. 6.55, links). Dies hat bei Klüften, die nicht senkrecht auf dem Rand stehen, zur Folge, dass Masse vom äußersten Klufttrandknoten im stumpfen Winkel zum innersten Klufttrandknoten im spitzen Winkel transferiert wird und dort akkumuliert. Im vorliegenden Beispiel in Abb. 6.56, links, beträgt der Maximalwert am Knoten im spitzen Winkel $c = 1.55[kg/m^3]$. Eine solche Konzentrationsverteilung beeinflusst den Verlauf der Durchbruchkurve, deren Werte am Ausstromrand bestimmt werden. Aus dem gleichen Grund fällt die Konzentrationsverteilung des Boxverfahrens am Ende der Schnittlinie B in Abb. 6.53, links, stark ab. Linie B verläuft in der Mitte der Kluft und schneidet damit den Rand des Trichters, den die aus dem stumpfen Winkel zum spitzen Winkel transportierte Masse hinterlassen hat. Eine Geschwindigkeitsapproximation mit gemischt-hybriden Finiten Elementen vermeidet diese Probleme (Abb. 6.55, rechts, und Abb. 6.56, rechts).

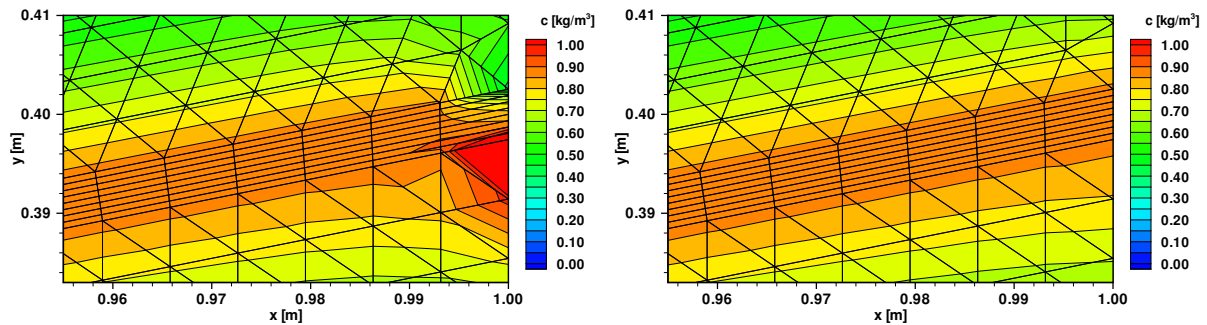


Abbildung 6.56: Konzentrationsverteilung im Modellgebiet mit Klufftkreuzung A nach 2400[s], rechtes Klufftende der durchgehenden Klufft. Links: Boxverfahren. Rechts: Gemischt-hybride FE.

Als nächstes wird das Modellgebiet mit Klufftkreuzung B betrachtet, die einen größeren Öffnungswinkel in Strömungsrichtung aufweist als Klufftkreuzung A. Die Transportmodellierung wird mit einem Zeitschritt von $\Delta t_2 = 1.0[s]$ auf Level 2 und $\Delta t_3 = 0.5[s]$ auf Level 3 durchgeführt. Dies führt auf maximale Courant-Zahlen von $Cr = 1.9$ im niederdimensionalen Fall und $Cr = 11.3$ (Strömung: Boxverfahren) bzw. $Cr = 18.4$ (Strömung: gemischt-hybride FE) jeweils auf Level 3. Wie schon bei Klufftkreuzung A treten diese Werte im niederdimensionalen Fall in der Klufft auf. Auch hier ist die Verteilung der Courant-Zahl bei äquidimensionaler Darstellung den niederdimensionalen Werten sehr ähnlich, und die hohen Werte ergeben sich lokal in den Ecken der Klufftkreuzung, wo die Geschwindigkeitswerte besonders hoch sind (Abb. 6.39).

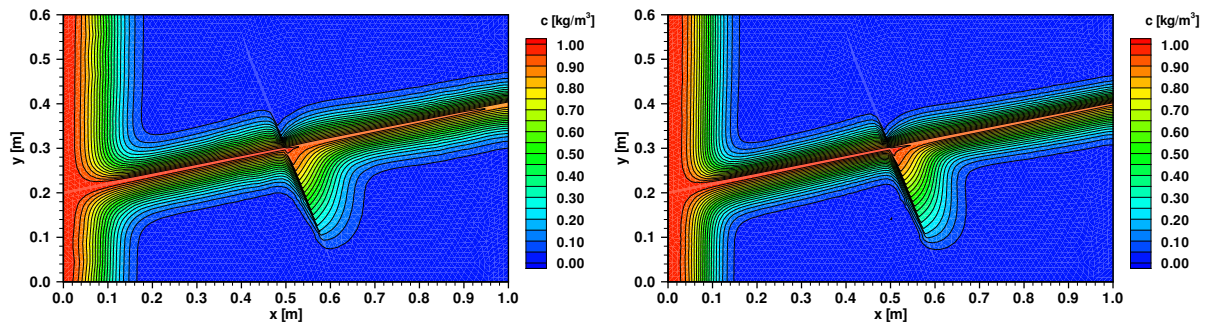


Abbildung 6.57: Konzentrationsverteilung im Modellgebiet mit Klufftkreuzung B nach 2400[s]. Links: Fully Upwinding. Rechts: Streamline Orientation.

Es wird zuerst das Konvergenzverhalten der beiden Upwinding-Strategien untersucht. Wie zuvor wurde am linken Rand über einen Zeitraum von $t_{zu} = 9960[s]$ eine Konzentration $c(x = 0.0[m], y, t) = 1.0[kg/m^3]$, danach von $c(x = 0.0[m], y, t) = 0.0[kg/m^3]$ vorgegeben. Abb. 6.57 zeigt die Konzentrationsverteilung im Modellgebiet mit Klufftkreuzung B nach 2400[s] für Level 2 auf äquidimensionaler Basis. Die Strömung wurde mit Hilfe der Methode der gemischt-hybriden Finiten Elemente ermittelt. Auch hier wird deutlich, dass ein Fully Upwinding (Abb. 6.57, links) mehr künstliche Diffusion in die Matrix einbringt als ein Upwinding mit Streamline Orientation (Abb. 6.57, rechts). Die höhere Approximationsordnung

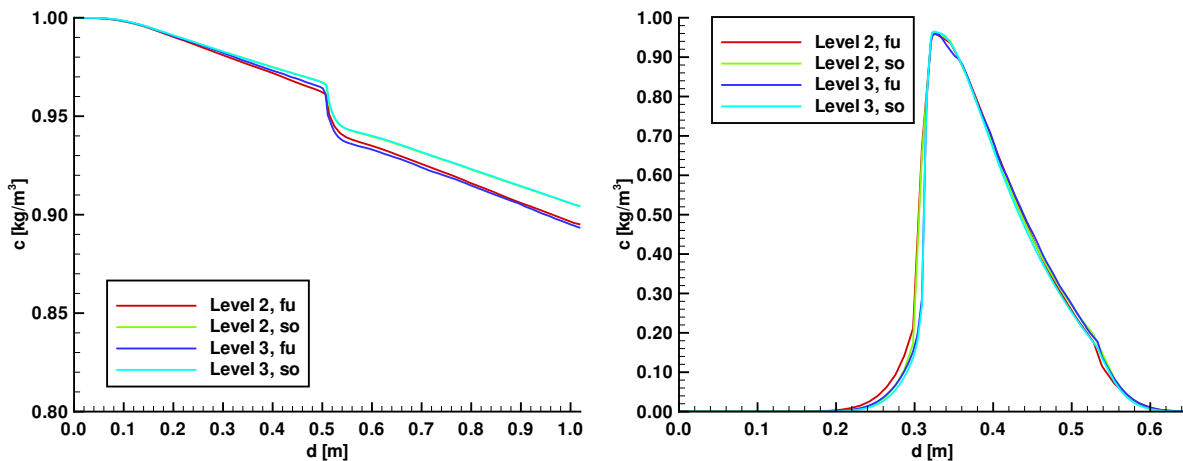


Abbildung 6.58: Links: Konzentrationsverteilung entlang Schnittlinie B. Rechts: Konzentrationsverteilung entlang Schnittlinie D. Jeweils für Fully Upwinding (fu, Level 2–3) und Streamline Orientation (so, Level 2–3).

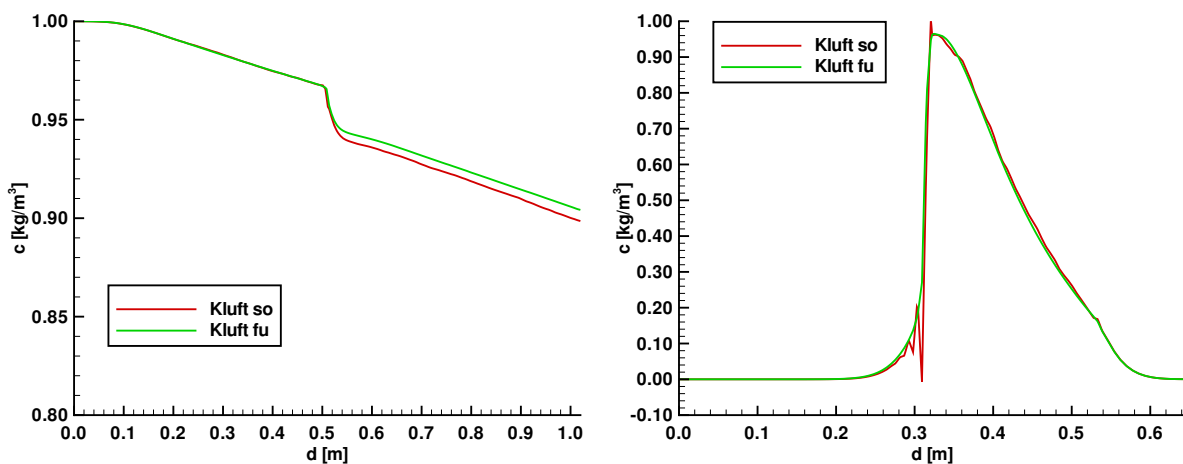


Abbildung 6.59: Links: Konzentrationsverteilung entlang Schnittlinie B. Rechts: Konzentrationsverteilung entlang Schnittlinie D. Jeweils für Streamline Orientation im gesamten Modellgebiet (Kluft so) und Streamline Orientation in der Matrix, Fully Upwinding in der Kluft (Kluft fu).

wirkt sich bei Kluftkreuzung B auf die Konzentrationsverteilung in der durchgehenden Kluft aus (Abb. 6.58, links), die Werte in der Kluft sind höher, da die Fronten steiler sind und weniger in die Matrix diffundiert. Der Einfluss der kreuzenden Kluft ist zu diesem Zeitpunkt deutlich geringer als bei Kluftkreuzung A, da sie selber noch keine zusätzliche Tracermasse vom linken Rand heranzuführt, sondern nur Masse aus der durchgehenden Kluft entnimmt. In Abb. 6.58, rechts, ist die Konzentrationsverteilung entlang Schnittlinie D in der kreuzenden Kluft dargestellt. Für die einzelnen Ansätze zeigen sich keine gravierenden Unterschiede. Wird das Konvergenzverhalten betrachtet, so sind die Werte entlang Schnittlinie B (Abb. 6.58, links) beim Upwinding mit Streamline Orientation zwar für beide Level fast identisch, die Ergebnisse des Fully Upwinding konvergieren jedoch nicht dagegen. Dabei werden die

Konzentrationsfronten in der Matrix zwar für Level 3 steiler als für Level 2, gleichzeitig fließt jedoch ein größerer Anteil Tracer in die kreuzende Kluft als für Level 2, sodass der Wert entlang der durchgehenden Kluft für Level 3 abnimmt. Dies wird auf eine weniger genaue Geschwindigkeitsapproximation in der Kluftkreuzung auf niedrigen Leveln zurückgeführt.

Abb. 6.59 zeigt zum Vergleich die Ergebnisse auf Level 3 für den Fall, dass die Transportdiskretisierung im gesamten Modellgebiet mit Streamline Orientation durchgeführt wird, und für den Fall, dass in der Kluft ein Fully Upwinding unabhängig vom tatsächlich dominierenden Transportprozess verwendet wird. Entlang der Schnittlinie B (Abb. 6.59, links) ist die Konzentration nach der Kluftkreuzung höher, wenn ein Fully Upwinding eingesetzt wird. Grund dafür können die Oszillationen sein, die entlang der Schnittlinie D (Abb. 6.59, rechts) vor der Kluftkreuzung auftreten und die deutlich größer sind als im Beispiel der Kluftkreuzung A. Wird Streamline Orientation als Upwinding-Verfahren in der Kluft verwendet, so ist der Upwinding-Parameter aufgrund der niedrigen Geschwindigkeiten in der kreuzenden Kluft im Gegensatz zum Beispiel der Kluftkreuzung A deutlich kleiner als $\alpha = 1$ und führt damit vor der Diskontinuität, die der Konzentrationsverlauf in der durchgehenden Kluft wiedergibt, zu Unterschwingern. Das Fully Upwinding in der Kluft führt offenbar zu keiner Verschlechterung der Genauigkeit, vermeidet jedoch die Oszillationen.

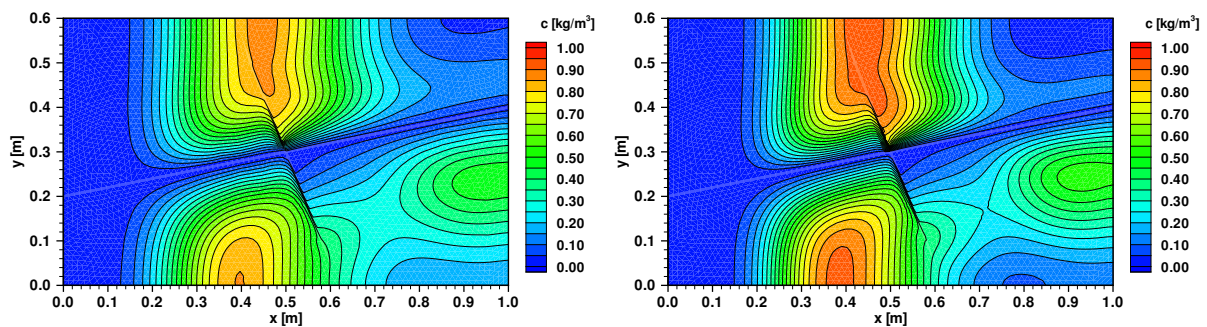


Abbildung 6.60: Konzentrationsverteilung im Modellgebiet mit Kluftkreuzung B nach 18000[s]. Links: Fully Upwinding. Rechts: Streamline Orientation.

In Abb. 6.60 ist die Konzentrationsverteilung im Modellgebiet mit Kluftkreuzung B nach 18000[s] für Level 2 dargestellt, links als Ergebnis der Transportmodellierung mit Fully Upwinding, rechts mit Streamline Orientation. Die höhere Genauigkeit des Streamline Orientation in der Matrix wird deutlich sichtbar. Die Konzentrationsverteilung entlang der Schnittlinie E parallel zur unteren Kante (Abb. 6.61, links) zeigt erwartungsgemäß, dass die Ergebnisse für das Boxverfahren mit Streamline Orientation für Level 2 und 3 größtenteils zusammenfallen und für das Boxverfahren mit Fully Upwinding dagegen konvergieren. Bemerkenswert ist bei diesem Beispiel der Bereich erhöhter Konzentrationswerte in der Matrix am rechten Rand des Modellgebiets (Abb. 6.60). Diese Verteilung der Konzentration resultiert aus der Tracermasse, die durch die kreuzende Kluft in die Matrix transportiert worden ist, und bildet den zweiten von drei Peaks in der Durchbruchkurve am Ausstromrand (Abb. 6.61, rechts), während der dritte Peak von dem Traceranteil verursacht wird, der vom Zuflussrand durch die Matrix transportiert wurde. Diese Peaks sind für das Boxverfahren mit Fully Upwinding etwas flacher als mit Streamline Orientation, wie schon bei Kluftkreuzung A werden jedoch auch

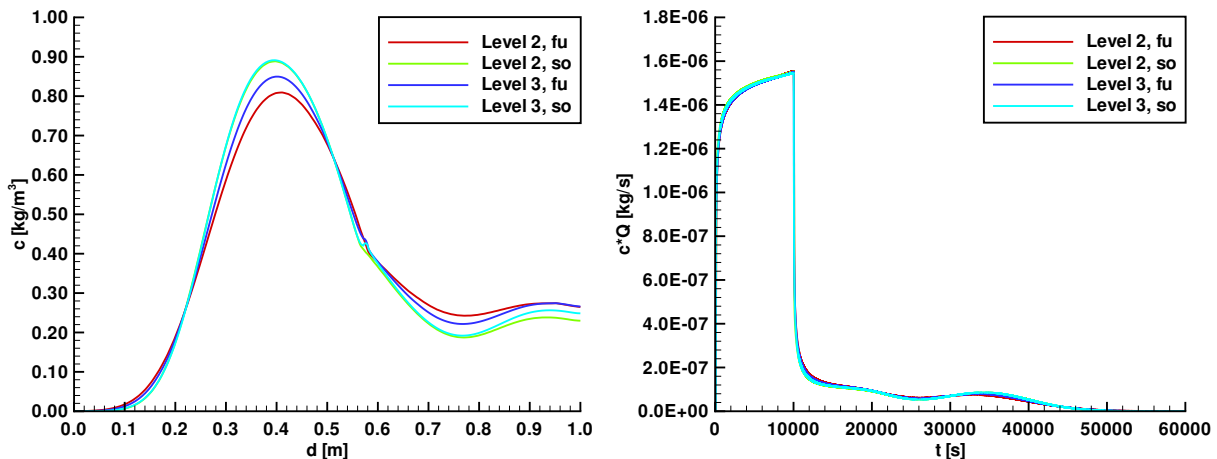


Abbildung 6.61: Links: Konzentrationsverteilung entlang Schnittlinie E. Rechts: Durchbruchkurven am Ausstromrand ($x = 1.0[\text{m}]$). Jeweils für Fully Upwinding (fu, Level 2–3) und Streamline Orientation (so, Level 2–3).

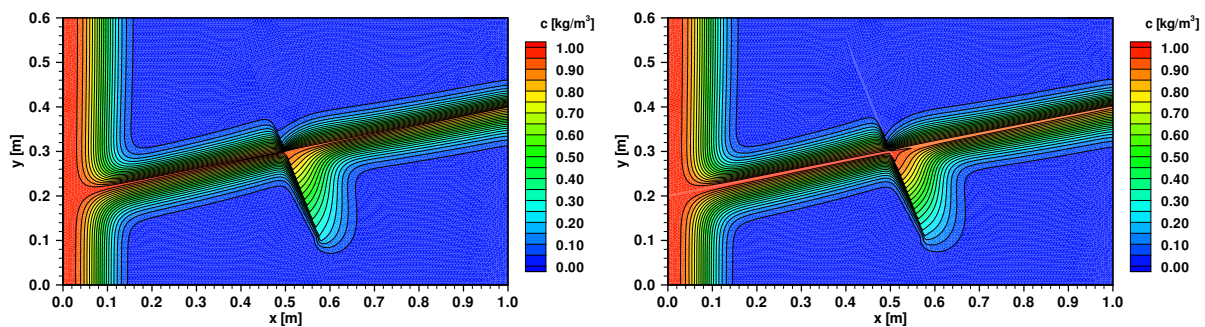


Abbildung 6.62: Konzentrationsverteilung im Modellgebiet mit Kluftkreuzung B nach 2400[s]. Level 3, Streamline Orientation. Links: Niederdimensional. Rechts: Äquidimensional.

diese Differenzen dominiert von der Tracermasse, die durch die durchgehende Hauptkluft advektiert wurde und die den ersten Peak bildet.

Der Vergleich zwischen nieder- und äquidimensionaler Formulierung nach 2400[s] für Level 3 und Boxverfahren mit Streamline Orientation macht deutlich, dass auch hier wieder im Kluftkreuzungsbereich des äquidimensionalen Ansatzes mehr Tracermasse transportiert werden kann. Sowohl die Konzentrationsverteilung im Modellgebiet (Abb. 6.62) als auch entlang der Schnittlinien B und D (Abb. 6.63) zeigen im Kreuzungsbereich im äquidimensionalen Fall höhere Werte. Ein Großteil des Tracers wird jedoch offenbar in den unterem Arm der kreuzenden Kluff gelenkt, da sich die Werte in der durchgehenden Kluff nach der Kluftkreuzung nur wenig unterscheiden (Abb. 6.63, links). Dabei lassen die Konzentrationsverteilungen entlang Schnittlinie D (Abb. 6.63, rechts) den Schluss zu, dass der äquidimensionale Ansatz einen deutlich höheren Austausch mit der Matrix erlaubt, da analog zum Beispiel der Einzelkluff (Kap. 6.1.3) eine zusätzliche Geschwindigkeitskomponente existiert. Die Tracerverteilung der niederdimensionalen Formulierung ist nach dem Kreuzungsbereich im unteren Arm

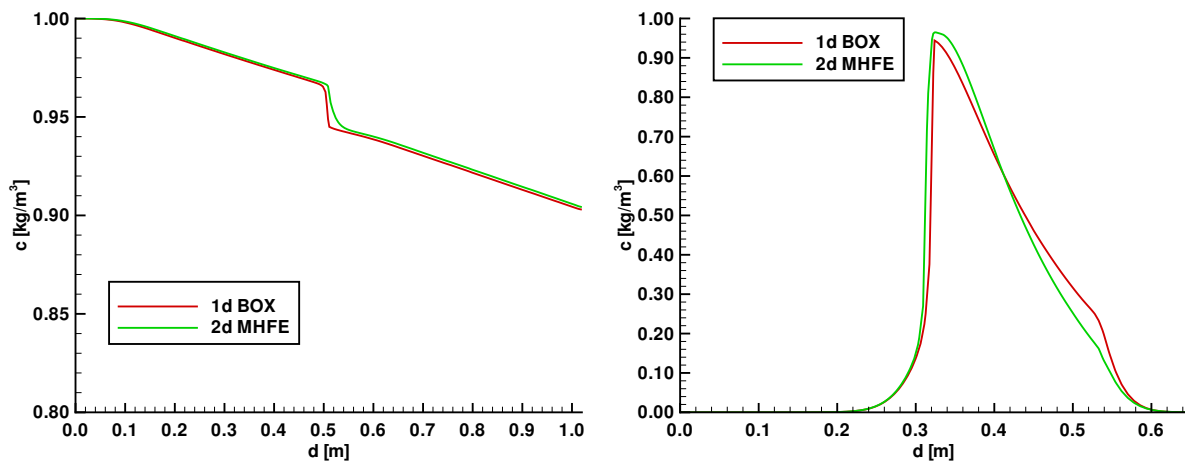


Abbildung 6.63: Links: Konzentrationsverteilung entlang Schnittlinie B. Rechts: Konzentrationsverteilung entlang Schnittlinie D. Jeweils für Boxverfahren, niederdimensional (1d BOX) und gemischt-hybride FE, äquidimensional (2d MHFE) in der Strömungsdiskretisierung, Streamline Orientation (Level 3) für Transport.

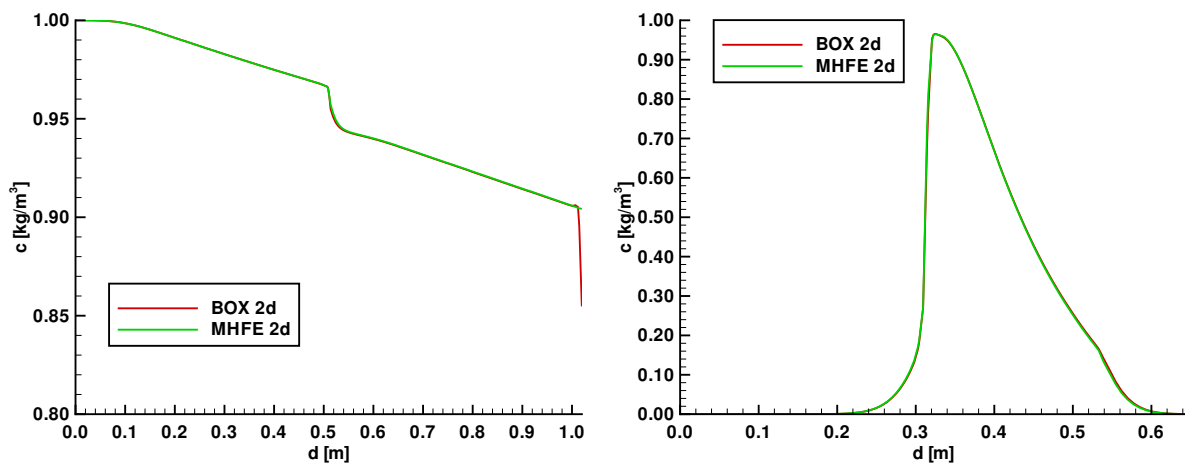


Abbildung 6.64: Links: Konzentrationsverteilung entlang Schnittlinie B. Rechts: Konzentrationsverteilung entlang Schnittlinie D. Level 3, äquidimensionaler Ansatz, Streamline Orientation. Jeweils für Strömungsdiskretisierung mit Boxverfahren (BOX 2d) und mit gemischt-hybriden FE (MHFE 2d).

der kreuzenden Kluft zunächst niedriger als im äquidimensionalen Fall, weil sie den niedrigeren Ausgangswert in der Kluftkreuzung hat. Sie schneidet dann die Verteilungslinie der äquidimensionalen Modellierung, um am Kluftende abrupt abzufallen. Dies und auch die Konzentrationsverteilung unterstrom der kreuzenden Kluft im Matrixbereich (Abb. 6.62) weisen darauf hin, dass im niederdimensionalen Fall mehr Masse bis ans Ende der Kluft transportiert und erst dort in die Matrix abgegeben wird. Auf eine Darstellung der Durchbruchkurven am Ausstromrand für die beiden Ansätze wird verzichtet, sie sind wie in den vorangegangenen Beispielen fast identisch und damit analog zu Abb. 6.61, rechts.

Abb. 6.64 zeigt die Konzentrationsverteilung entlang der Schnittlinien B und D nach 2400[s]. Dargestellt sind die Ergebnisse einer Transportmodellierung mit Streamline Orientation für Level 3, links basierend auf einer Strömungsdiskretisierung mit dem Boxverfahren, rechts mit den gemischt-hybriden Finiten Elementen. Da die Geschwindigkeitsapproximation der beiden Verfahren bei Klufftkreuzung B im Kreuzungsbereich deutlich ähnlicher war (Kap. 6.2.2) als bei Klufftkreuzung A (Kap. 6.1.2), treten keine großen Unterschiede bei den damit durchgeführten Transportberechnungen auf. Auffällig ist auch hier das für Klufftkreuzung A ausführlich diskutierte Problem des Boxverfahrens am Ende der Schnittlinie B (Abb. 6.64, links).

6.2.4 Diskussion der Ergebnisse

Die Unterschiede zwischen den Ergebnissen der einzelnen Verfahren und Ansätze sind auch bei Betrachtung einer einzelnen Klufftkreuzung eher lokaler Natur. Die größten Differenzen im globalen Kontext zeigen sich bei der Auswahl der Upwinding-Strategie für den Transport, die die Approximationsordnung der Lösung in der Gesteinsmatrix bestimmt und damit die Konzentrationsverteilung in großen Teilen des Modellgebiets beeinflusst. Da jedoch der durch die Matrix transportierte Massenanteil deutlich geringer ist als der durch die das Modellgebiet durchschneidende Kluft advektierte Anteil, wird die in der Matrix erreichte Verbesserung der Lösung bei Betrachtung der Durchbruchkurven am Ausflussrand (Abb. 6.48, rechts, und Abb. 6.61, rechts) von dem Massenanteil aus der Kluft dominiert.

Lokale Unterschiede in der Strömungs- und Transportsimulation treten im Vergleich der Ergebnisse der nieder- und der äquidimensionalen Formulierung und im Bereich der äquidimensionalen Modellierung wiederum im Vergleich der auf unterschiedlichen Strömungsdiskretisierungen (Boxverfahren und gemischt-hybride FE) basierenden Ergebnisse auf. Die äquidimensionale Formulierung ermöglicht im Gegensatz zum niederdimensionalen Ansatz die explizite Darstellung des Fließverhaltens in der Klufftkreuzung (Kap. 6.2.2) und induziert damit einen etwas höheren Massendurchsatz durch die Klufftkreuzung und gegebenenfalls eine andere Massenverteilung auf die Klufftarme als im niederdimensionalen Fall (z.B. Abb. 6.49 oder Abb. 6.62). Die bereits in Kap. 6.1 vorgestellte Eigenschaft des äquidimensionalen Ansatzes, aufgrund der Darstellungsmöglichkeit von Gradienten quer zur Kluft einen verstärkten Massenaustausch zwischen Kluft und Matrix zu erlauben, wird auch im Beispiel der Klufftkreuzung B deutlich, deren kreuzende Kluft quer zur Hauptströmungsrichtung des Gebiets verläuft (Abb. 6.62 und Abb. 6.63).

Die Ergebnisse der Strömungsmodellierung verdeutlichen, dass die Geschwindigkeitsverteilung innerhalb einer Klufftkreuzung komplex und in Abhängigkeit von der Kreuzungsgeometrie und den Strömungsverhältnissen für den äquidimensionalen Ansatz nicht einfach zu erfassen ist (Kap. 6.2.2). Klufftkreuzung A weist parallel zur Hauptströmung im Modellgebiet einen verhältnismäßig großen Winkel auf, der eine gute Approximation des Geschwindigkeitsfeldes im Kreuzungsbereich durch die gemischt-hybriden Finiten Elemente schon für niedrige Verfeinerungsstufen (ab Level 2) erlaubt. Die entsprechende Lösung des Boxverfahrens zeigt noch auf höheren Leveln (Level 4) Oszillationen oder eine ungenaue Approximation. Klufftkreuzung B, die aus zwei fast senkrecht aufeinander stehenden Klüften

gebildet wird, erzeugt dagegen ein Geschwindigkeitsfeld, das zumindest bei Betrachtung der Verteilung der Geschwindigkeitskomponenten entlang der Schnittlinien A–D auch durch gemischt–hybride Finite Elemente nicht wesentlich besser approximiert wird als durch das Boxverfahren. Insbesondere bei starker Verfeinerung (Level 5) zeigen sich bei der mit gemischt–hybriden Finiten Elementen ermittelten Lösung Schwierigkeiten (Abb. 6.41, links). Diese gehen allerdings zurück, wenn die Permeabilitäten von Kluft und Matrix geringere Differenzen aufweisen. Mögliche Ursachen bestehen darin, dass bei steigender Verfeinerungstiefe aufgrund der immer kleiner werdenden Elementbreite in der Kluft die Invertierung der Untermatrix \underline{G} des gemischt–hybriden Verfahrens (Kap. 4.1, Glg. 4.12) problematisch wird, oder dass das verwendete Lösungsverfahren für das Modellproblem nicht ausreichend robust ist. Vergleichsrechnungen haben gezeigt, dass die in Abb. 6.41, links, aufgetretenen Unterschiede abnehmen, wenn das Netz im Kluftbereich stärker verfeinert wird. In diesem Zusammenhang bietet sich ab einem bestimmten Verfeinerungslevel, der einige Knoten über die Kluftbreite enthält, eine anisotrope Verfeinerung quer zur Kluft an, die eine Verbesserung der Qualität der Kluftelemente erlaubt. Eine weitere Untersuchung dieses Phänomens mit Hilfe eines geeigneteren Lösungsverfahrens ist notwendig, um auch für schmalere Klüfte eine ausreichende Verfeinerung in der Kluft zu ermöglichen und die Unsicherheiten, die in der Geschwindigkeitsapproximation für Kluftkreuzungen vom Typ B bestehen, zu beseitigen. Nichtsdestotrotz lassen die gezeigten Ergebnisse darauf schließen, dass eine gemischt–hybride Geschwindigkeitsapproximation einer Boxdiskretisierung vorzuziehen ist, da der gemischt–hybride Ansatz in Teilbereichen, zu denen neben Kluftkreuzungen vom Typ A auch Kluftenden am Ausstromrand gehören, deutlich bessere und in anderen Teilbereichen wie den Kluftkreuzungen vom Typ B zumindest keine schlechteren Ergebnisse erzielt.

Ein Vergleich der Ergebnisse der beiden verwendeten Upwinding–Strategien für den Transport zeigt auch am Beispiel der beiden Kluftkreuzungen, dass durch den Einsatz des Streamline Orientation deutlich steilere Fronten in der Gesteinsmatrix approximiert werden. Die verbesserte Darstellung wird bei globaler Betrachtung von der Tracermasse, die durch die durchgehende Hauptkluft schnell zum Ausstromrand transportiert wird, dominiert. Allerdings sind die Unterschiede in der Approximation der Konzentrationsverteilung in der Gesteinsmatrix zwischen beiden Strategien so groß und der notwendige Mehraufwand zur Erlangung der höheren Approximationsordnung so gering, dass der Einsatz des Streamline Orientation im Matrixbereich sinnvoll ist. In den Klüften hingegen können bei Anwendung des Streamline Orientation Oszillationen vor Kluftkreuzungen auftreten. Ein Fully Upwinding vermeidet diese Oszillationen, ohne dass große Unterschiede in der Genauigkeit der Approximation im Vergleich zum Streamline Orientation auftreten (Abb. 6.46 und Abb. 6.59).

6.3 Kluftnetzwerk

Nachdem in Kap. 6.1 und Kap. 6.2 am Beispiel einer Einzelkluft und zweier Kluftkreuzungen grundlegende Effekte der äquidimensionalen Modellierung sowie das Lösungsverhalten der verschiedenen im Rahmen dieser Arbeit verwendeten Diskretisierungsverfahren bezüglich nieder– und äquidimensionaler Formulierung in den kritischen Bereichen der Kluftenden im Gebiet und der Kluftkreuzungen diskutiert wurden, wird im Folgenden die Anwendbar-

keit des äquidimensionalen Ansatzes auf komplexere Kluft–Matrix–Systeme und sein Einfluss auf das Gesamtsystem untersucht. Dafür kommen ein deterministisch erzeugtes Kluftnetzwerk mit sechs Klüften in zwei Varianten und ein mit dem Kluftnetzgenerator *FRAC-MESH* (Kap. 5.1.1) erstelltes stochastisches Kluftnetzwerk als Beispiele zum Einsatz. Wenn nicht anders vermerkt, wurde die niederdimensionale Strömungsdiskretisierung mit dem Boxverfahren und die äquidimensionale Strömungsdiskretisierung mit der Methode der gemischt-hybriden Finiten Elemente durchgeführt. Für die Transportdiskretisierung wurde das Boxverfahren mit Streamline Orientation in der Matrix und Fully Upwinding in der Kluft verwendet.

6.3.1 Modellproblem mit sechs Klüften I

Das Modellgebiet besteht aus einer homogenen, isotropen Gesteinsmatrix, die von sechs willkürlich festgelegten, sich gegenseitig kreuzenden Klüften jeweils komplett durchschnitten wird (Abb. 6.65, links). Ebenso wie in den vorangegangenen Beispielen wurde durch Dirichlet–Randbedingungen am linken und rechten Rand sowie *No–Flow*–Bedingungen am oberen und unteren Rand ein Fluss von links nach rechts innerhalb des Modellgebiets induziert. Für den Transport wurde am linken Rand eine Dirichlet–Randbedingung und am rechten Rand ein freier Ausfluss vorgegeben, oberer und unterer Rand erhielten wie bei der Strömung eine *No–Flow*–Bedingung. Die Modellparameter und Werte der Randbedingungen wurden gemäß Tab. 6.1 angesetzt, als Kluftbreite wurde $b = 1.0 \cdot 10^{-2}[m]$ gewählt.

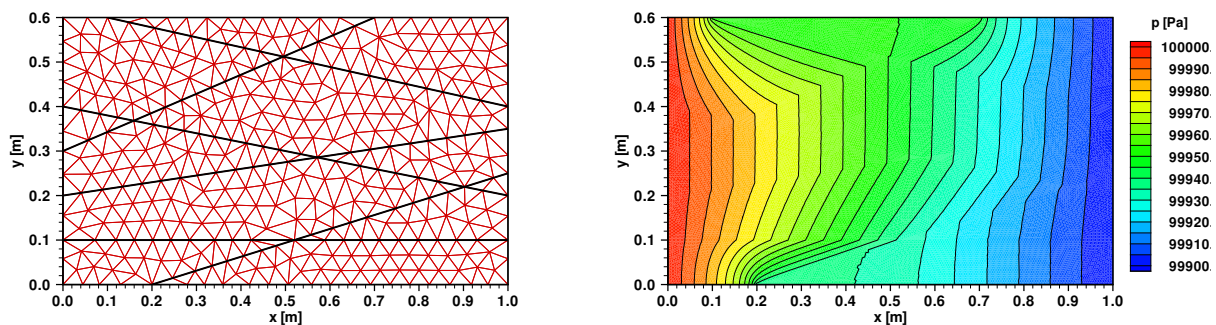


Abbildung 6.65: Modellgebiet mit Kluftnetzwerk I. Links: Geometrie und Grobgitter. Rechts: Druckverteilung, Level 3.

Abb. 6.65, rechts, zeigt die Druckverteilung im Modellgebiet für die niederdimensionale Formulierung. Die Ergebnisse der äquidimensionalen Diskretisierung sind für den Druck fast identisch und daher hier nicht dargestellt. Die Approximation des Geschwindigkeitsfelds zeigt erwartungsgemäß vor allem in den Kluftkreuzungen Unterschiede zwischen nieder- und äquidimensionalem Ansatz. Exemplarisch sei hier die obere Kluftkreuzung des Systems ungefähr bei $y = 0.51[m]$ dargestellt. In Abb. 6.66, links, ist die niederdimensionale, in Abb. 6.66, rechts, die äquidimensionale numerische Lösung im Kreuzungsbereich wiedergegeben. Während im niederdimensionalen Fall nur eine Fließrichtung innerhalb der Kluft möglich ist, wird im äquidimensionalen Fall ein Teil des im Wesentlichen aus dem unteren linken in den unteren rechten Kluftarm der Kreuzung strömenden Fluids in die oberen beiden Kluftarme eingetragen, die jeweils ein „totes Ende“ darstellen und in denen nur geringe Druckunterschiede und niedrige Strömungsgeschwindigkeiten herrschen.

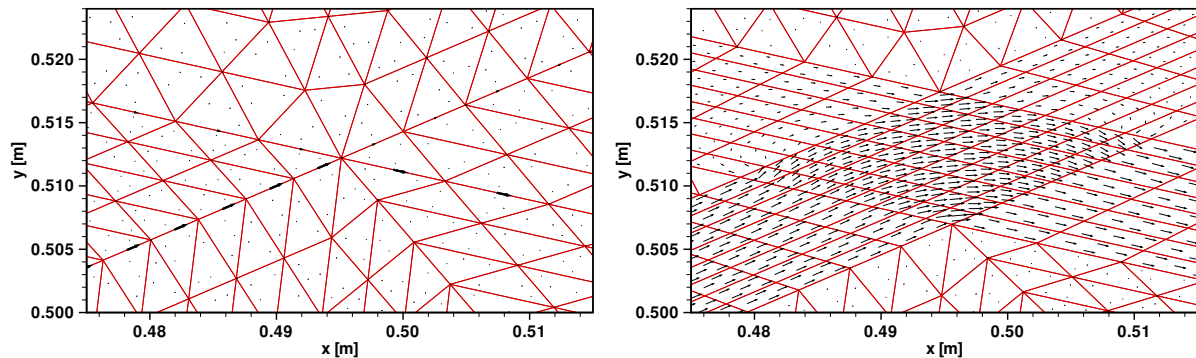


Abbildung 6.66: Geschwindigkeitsverteilung in der oberen Kluftkreuzung, Level 3. Links: Niederdimensional. Rechts: Äquidimensional.

Die Unterschiede in der Geschwindigkeitsdarstellung haben Auswirkungen auf den darauf aufbauenden Tracertransport. Als Zeitschritt für den Transport wurde für Level 3 $\Delta t_3 = 1.0[s]$ angesetzt. Die resultierende maximale Courant-Zahl beträgt im niederdimensionalen Fall $Cr = 8.2$ und im äquidimensionalen Fall $Cr = 16.8$. Diese relativ hohen Werte treten in den Klüften bzw. Kluftkreuzungen auf und stehen im Gegensatz zu den zum Teil sehr niedrigen Werten in der Matrix. Die minimale Courant-Zahl liegt für die niederdimensionale Formulierung bei $Cr = 0.000043$ und für die äquidimensionale Formulierung bei $Cr = 0.000014$. Der gewählte Zeitschritt ist daher ein Kompromiss zwischen minimaler und maximaler Courant-Zahl im Gebiet sowie einem vertretbaren Rechenaufwand, denn jede Halbierung des Zeitschritts bedeutet eine Verdopplung der zu rechnenden Zeitschritte. Der Tracer wurde am linken Rand mit einem Wert von $c(x = 0.0[m], y, t) = 1.0[kg/m^3]$ über einen Zeitraum von $t_{zu} = 9960[s]$ zugegeben (s. auch Tab. 6.1).

Abb. 6.67 zeigt die Konzentrationsverteilung im Gebiet nach einem Simulationszeitraum von 2000[s], links für den niederdimensionalen und rechts für den äquidimensionalen Ansatz. Die Einflüsse der äquidimensionalen Formulierung zeigen sich in Abb. 6.65 im Wesentlichen an den Kluftkreuzungen in unmittelbarer Nähe zum *No-Flow*-Rand, d.h. in der oberen und unteren Kluftkreuzung jeweils bei ungefähr $x = 0.5[m]$. An diese Kreuzungen schließen Klüfte an, die weiter nur mit einem *No-Flow*-Rand verbunden sind und deren niedrige Strömungsgeschwindigkeit deutlich zweidimensionale Effekte im Kreuzungsbereich erlaubt.

Abb. 6.68 gibt zur Verdeutlichung die Konzentrationsverteilung nach 2000[s] im Bereich der oberen Kluft wieder. Aufgrund der veränderten Strömungsbedingungen im Kreuzungsbereich und den quer zur Kluft stehenden Gradienten in den beiden oberen Kluftarmen wird im äquidimensionalen Fall (Abb. 6.68, rechts) mehr Tracermasse in den oberen linken Kluftarm und in den Bereich oberhalb der Kluftkreuzung eingetragen als im niederdimensionalen Fall (Abb. 6.68, links), der nur eine Geschwindigkeitsapproximation parallel zur Kluft und in diesem Fall vom *No-Flow*-Rand in Richtung Kluftkreuzung darstellen kann. Gleichzeitig gelangt bei der äquidimensionalen Formulierung mehr Tracermasse in den nach unten rechts weiterführenden Kluftarm und in die Matrix zwischen den beiden rechten Kluftarmen der Kreuzung als bei der niederdimensionalen Formulierung.

Nach Abschluss der Tracerzugabe bildet sich ein analoges Transportverhalten aus. Abb. 6.69 zeigt die Konzentrationsverteilung im Bereich der oberen Kluft nach einer Simulationszeit von 10000[s]. Am linken Rand des Modellgebiets wird kein Tracer mehr zugegeben, sodass der Tracer in den Klüften vom reinen Trägerfluid verdrängt wird. Während bei niederdimensionaler Diskretisierung zum abgebildeten Zeitpunkt im Wesentlichen die beiden unteren Kluftarme der Kreuzung eine deutlich geringere Tracerkonzentration aufweisen (Abb. 6.69, links), wurden bei der äquidimensionalen Modellierung die Ansätze der beiden oberen Arme der Kluftkreuzung ebenfalls freigespült (Abb. 6.69, rechts).

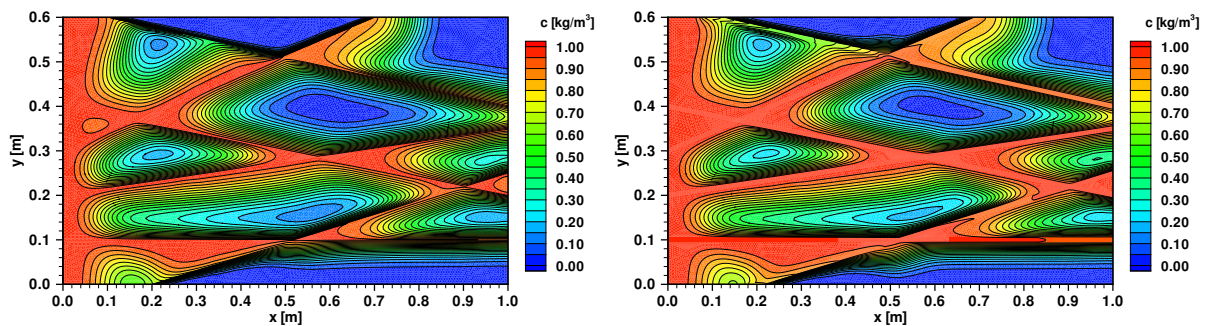


Abbildung 6.67: Konzentrationsverteilung im Modellgebiet nach 2000[s], Level 3. Links: Niederdimensional. Rechts: Äquidimensional.

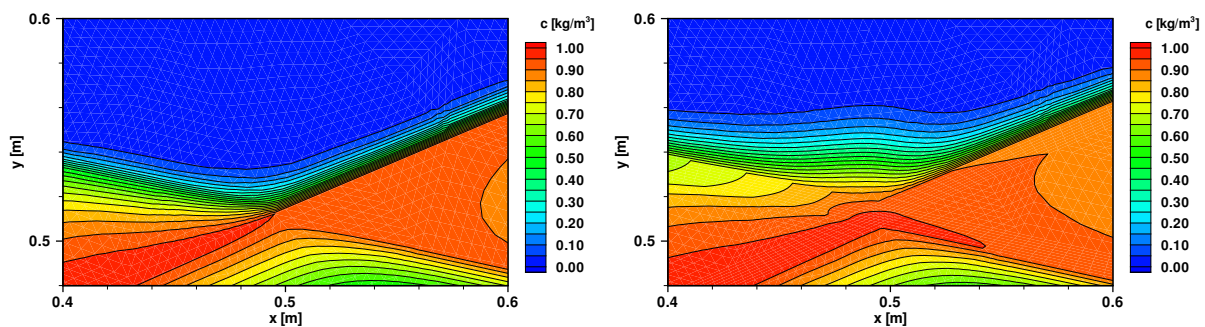


Abbildung 6.68: Konzentrationsverteilung in der oberen Kluftkreuzung nach 2000[s], Level 3. Links: Niederdimensional. Rechts: Äquidimensional.

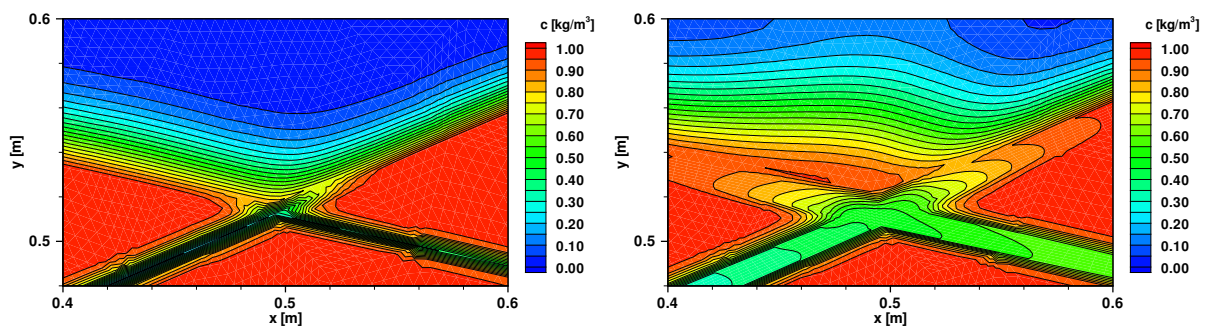


Abbildung 6.69: Konzentrationsverteilung in der oberen Kluftkreuzung nach 10000[s], Level 3. Links: Niederdimensional. Rechts: Äquidimensional.

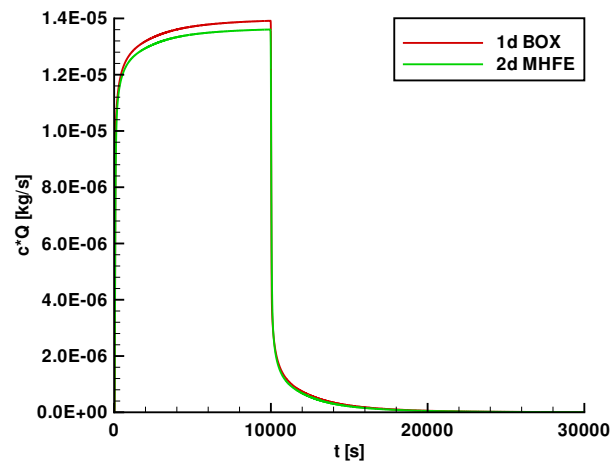


Abbildung 6.70: Durchbruchkurven am Ausstromrand ($x = 1.0[m]$). Für Boxverfahren, niederdimensional (1d BOX) und gemischt-hybride FE, äquidimensional (2d MHFE) in der Strömungsdiskretisierung, Boxverfahren für den Transport.

Wie für die vorangegangenen Beispiele führen auch für dieses Kluftnetzwerk die durch den äquidimensionalen Ansatz hervorgerufenen lokalen Effekte nicht zu deutlichen Differenzen zwischen den Ergebnissen nieder- und äquidimensionaler Modellierung bei globaler Betrachtung. In Abb. 6.70 sind die Durchbruchkurven am Ausstromrand des Modellgebiets bei $x = 1.0[m]$ für die beiden Ansätze dargestellt. Der etwas höhere Maximalwert der von der niederdimensionalen Simulation erzeugten Durchbruchkurve beruht auf dem in diesem Fall geringfügig höheren Durchfluss durch das Modellgebiet. Dieser ist nicht identisch mit dem für das äquidimensional diskretisierte System bestimmten Durchfluss, da im niederdimensionalen Fall von einer über die Kluftbreite gleichmäßigen Geschwindigkeit ausgegangen wird, eine Voraussetzung, die im äquidimensionalen Fall bei nicht senkrecht auf dem Rand stehenden Klüften nicht zwingend gegeben ist. In der Form weichen die beiden Durchbruchkurven kaum voneinander ab. Der Grund dafür liegt im Wesentlichen in dem schnellen Transport des Hauptanteils der Tracermasse durch die Zufluss- und Abflussrand miteinander verbindenden Klüfte. Der schnelle Durchbruch des Tracers an verschiedenen Stellen des Ausstromrands dominiert alle feineren Differenzen, die zwischen den beiden Ansätzen auftreten können. Gleichzeitig liegt einer der Hauptunterschiede zwischen nieder- und äquidimensionaler Modellierung im Austausch zwischen Kluft und Matrix. Dieser kann nur dann auch global zum Tragen kommen, wenn, wie im Beispiel der Einzelkluft, Gradienten quer zur Kluft auftreten, die zu einem verstärkten Massenaustausch zwischen Kluft und Matrix führen, und wenn für diesen Massenaustausch genügend Zeit zur Verfügung steht. Beide Voraussetzungen sind im vorliegenden Beispiel nur in sehr geringem Umfang gegeben. Das folgende Beispiel wurde daher so konzipiert, dass diese beiden Punkte zutreffen.

6.3.2 Modellproblem mit sechs Klüften II

Um ein Modellproblem mit den gewünschten Eigenschaften – Gradienten quer zur Kluft, ausreichend Zeit für einen auch bei globaler Betrachtungsweise relevanten Massenaustausch zwischen Kluft und Gesteinsmatrix – zu erhalten, wurde das vorangegangene Beispiel

mit einem Kluftnetzwerk aus sechs Klüften übernommen und modifiziert. Die Dirichlet-Randbedingungen für die Strömung wurden am unteren und am oberen Rand angesetzt, während der linke und der rechte Rand durch *No-Flow*-Bedingungen beschrieben wurden. Auf diese Weise wurde erreicht, dass die Hauptrichtung der Strömung im Modellgebiet quer zu den Klüften verläuft und höhere Gradienten quer zur Kluftachse erzeugt werden. Um die Dominanz schneller Kluftwege zwischen den beiden Dirichlet-Ränder zu vermeiden, wurden die an diese Ränder grenzenden Klüfte verkürzt, sodass sie bereits in der Matrix enden (Abb. 6.71, links). Die Dirichlet-Randbedingung für den Transport wurde am unteren Rand vorgegeben, der freie Ausfluss am oberen Rand. Der linke und der rechte Rand erhielten wie die Strömung eine *No-Flow*-Bedingung. Parameter und Werte der Randbedingungen wurden analog zum vorangegangenen Beispiel angesetzt (Tab. 6.1, Kluftbreite $b = 1.0 \cdot 10^{-2}[m]$).

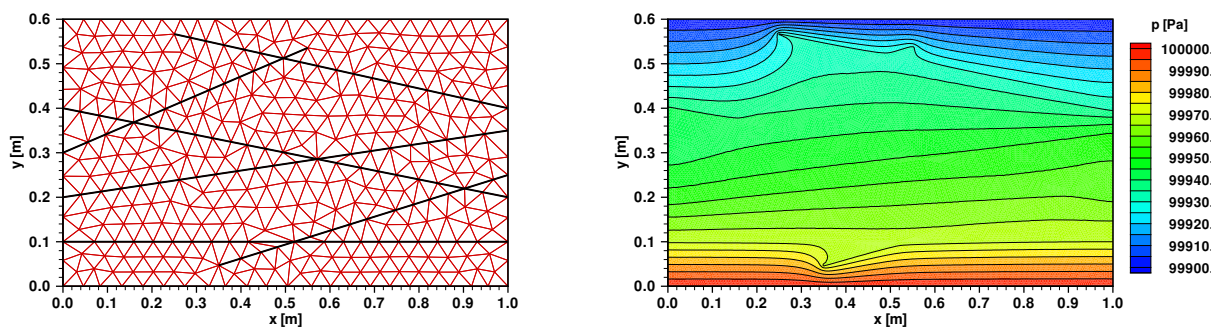


Abbildung 6.71: Modellgebiet mit Kluftnetzwerk II. Links: Geometrie und Grobgitter. Rechts: Druckverteilung, Level 3.

In Abb. 6.71, rechts, ist die Druckverteilung für das Modellgebiet bei niederdimensionaler Diskretisierung dargestellt. Die Ergebnisse der äquidimensionalen Diskretisierung weisen ebenso wie in den vorherigen Beispielen erwartungsgemäß nur geringe Unterschiede dazu auf. Für die Unterschiede in der Geschwindigkeitsapproximation von nieder- und äquidimensionaler Formulierung werden exemplarisch zwei Beispiele näher betrachtet. Abb. 6.72 zeigt die Geschwindigkeitsverteilung im niederdimensionalen Fall im Bereich der oberen rechten Kluft im Modellgebiet, Abb. 6.73 gibt den entsprechenden Bereich der äquidimensionalen Lösung wieder. Es zeigt sich, dass das Fluid hier in der Kluft im Wesentlichen aus zwei Richtungen aufeinander trifft. Die obere rechte Kluft grenzt an ihrem rechten Ende an einen *No-Flow*-Rand und kreuzt mit ihrem linken Ende eine Kluft, die zum Hauptfließweg des Kluftsystems gehört. Durch den Gradienten im Gesamtsystem wird in der Kluft eine schwache Strömung vom *No-Flow*-Rand weg erzeugt, der aus der Kreuzung mit der Kluft des Hauptfließpfades Fluidmasse entgegenströmt. Der Treffpunkt liegt bei niederdimensionaler Diskretisierung deutlich weiter rechts, bei etwa $x = 0.725[m]$ (Abb. 6.72), als bei äquidimensionaler Diskretisierung, wo er bei $x = 0.68[m]$ zu erkennen ist (Abb. 6.73). Dabei werden im niederdimensionalen Fall die Geschwindigkeitswerte in der Kluft bis zum Treffpunkt immer kleiner, um danach in Gegenrichtung wieder größer zu werden. Im äquidimensionalen Fall ist hingegen ein Strom quer aus der Kluft heraus zu bemerken, und auch im Nahbereich des Treffpunkts sind deutliche Gradienten quer zur Kluft festzustellen. Ein ähnliches Verhalten weist die Geschwindigkeitsapproximation im Bereich der oberen Kluft am linken Rand auf. Im entsprechenden Kluftabschnitt strömt Fluid von der Kreuzung dieser Kluft mit dem Hauptfließpfad im System in Richtung Rand. Bei

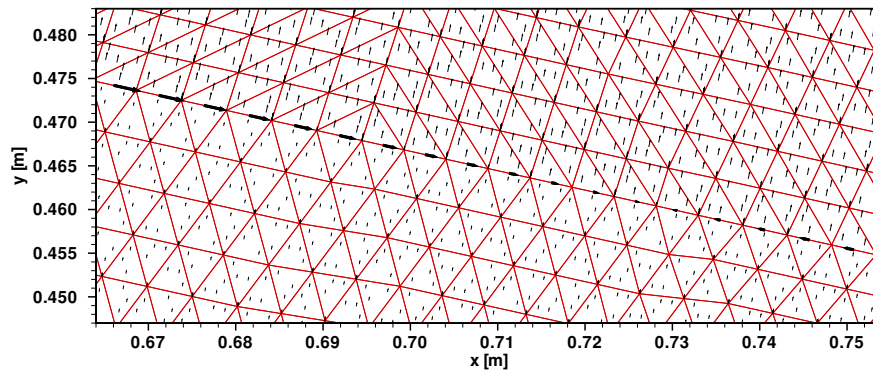


Abbildung 6.72: Geschwindigkeitsverteilung im Bereich der oberen rechten Kluft, Level 3, niederdimensional, Boxverfahren.

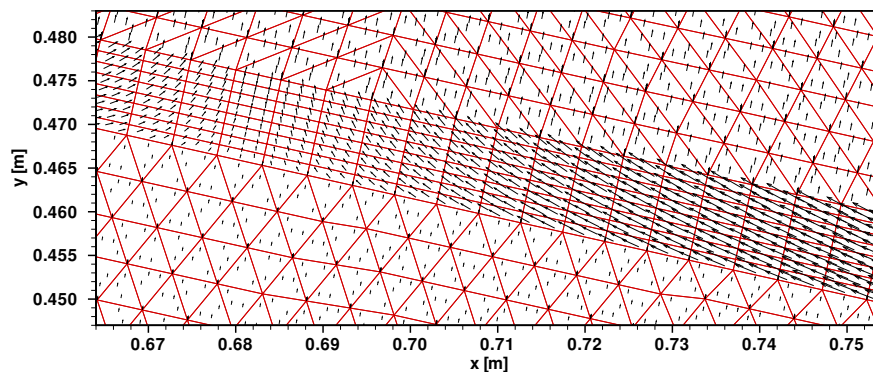


Abbildung 6.73: Geschwindigkeitsverteilung im Bereich der oberen rechten Kluft, Level 3, äquidimensional, gemischt-hybride FE.

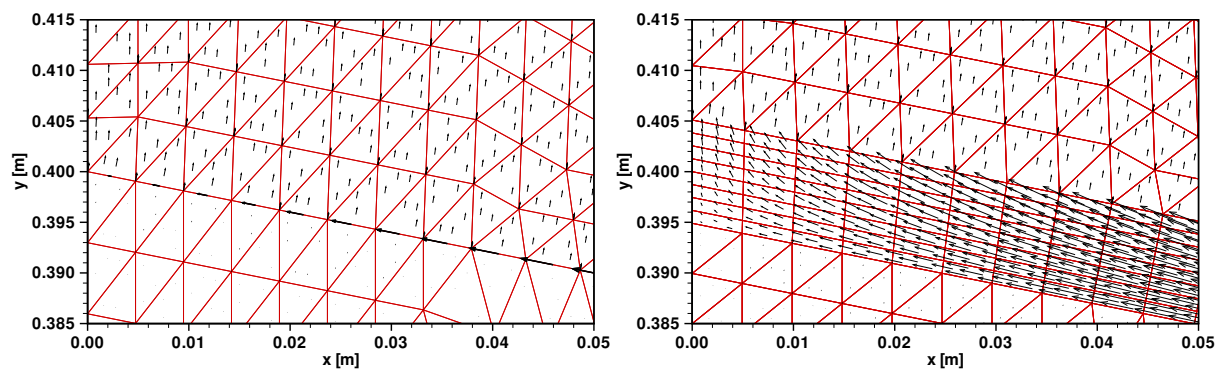


Abbildung 6.74: Geschwindigkeitsverteilung im Bereich der oberen Kluft am linken Rand, Level 3. Links: Niederdimensional. Rechts: Äquidimensional.

niederdimensionaler Betrachtung (Abb. 6.74, links) wird die Geschwindigkeit in der Kluft zum Rand hin immer kleiner. Die äquidimensionale Darstellung in Abb. 6.74, rechts, ermöglicht auch hier die explizite Beschreibung des zum Rand hin immer größer werdenden Flusses aus der Kluft in die Matrix.

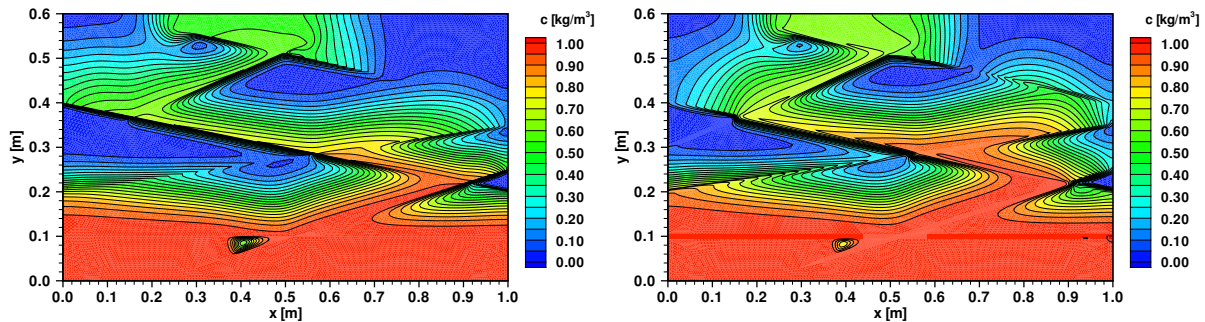


Abbildung 6.75: Konzentrationsverteilung im Modellgebiet nach 3600[s], Level 3. Links: Niederdimensional. Rechts: Äquidimensional.

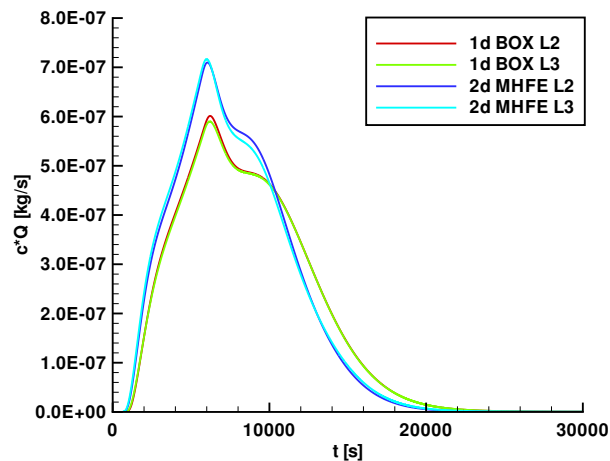


Abbildung 6.76: Durchbruchkurven am Ausstromrand ($x = 1.0[m]$). Für Boxverfahren, niederdimensional (1d BOX) und gemischt-hybride FE, äquidimensional (2d MHFE) in der Strömungsdiskretisierung, Boxverfahren für Transport, jeweils Level 2 (L2) und Level 3 (L3).

Werden die auf den beschriebenen Geschwindigkeitsfeldern basierenden Ergebnisse der Transportsimulation betrachtet, so werden auch hier die unterschiedlichen Eigenschaften der beiden Diskretisierungsansätze deutlich. Für die Transportmodellierung wurde der Tracer am unteren Rand über einen Zeitraum von $t_{zu} = 5000[s]$ mit einem Wert von $c(x, y = 0.0[m], t) = 1.0[kg/m^3]$ zugegeben. Als Zeitschritt für Level 3 wurde $\Delta t_3 = 2.0[s]$ gewählt. Die daraus resultierende maximale Courant-Zahl im Modellgebiet beträgt für die niederdimensionale Formulierung $Cr = 2.2$ und für die äquidimensionale Formulierung $Cr = 12.1$. Dabei treten die hohen Werte des äquidimensionalen Ansatzes im Wesentlichen lokal in den Ecken der Kluftkreuzungen auf, während die übrige Verteilung wie schon in den vorherigen Beispielen den Werten der niederdimensionalen Beschreibung sehr ähnlich ist. Abb. 6.75 zeigt die Konzentrationsverteilung nach einer Simulationszeit von 3600[s]. Es wird deutlich, dass sich im äquidimensionalen Fall (Abb. 6.75, rechts) zu diesem Zeitpunkt mehr Tracermasse im Modellgebiet befindet als im niederdimensionalen Fall (Abb. 6.75, links). Im Bereich der oberen rechten Kluft, für den in Abb. 6.72 und Abb. 6.73 die Geschwindigkeitsverteilung dargestellt wurde, weist die loka-

le Konzentrationsverteilung auf einen deutlich höheren Massenaustausch zwischen Kluft und Matrix bei äquidimensionaler Diskretisierung hin, und zwar sowohl aus der Matrix unterhalb der Kluft in die Kluft hinein als auch aus der Kluft heraus in die Matrix oberhalb der Kluft. Der gleiche Effekt zeigt sich im Bereich der linken oberen Kluft am Kluftrand, wo im äquidimensionalen Fall offensichtlich früher und stärker als im niederdimensionalen Fall ein Tracertransport aus der Kluft in die Matrix stattfindet. Die Differenzen zwischen beiden Ansätzen zeigen sich für dieses Beispiel auch bei Betrachtung der Durchbruchkurven in Abb. 6.76. Zum einen ist der Durchfluss durch das Gebiet im Gegensatz zum vorangegangenen Beispiel bei äquidimensionaler Beschreibung etwa 6.7% höher als im niederdimensionalen Fall, und zum anderen weist die Durchbruchkurve bei niederdimensionaler Diskretisierung ein diffusiveres Verhalten auf, sie steigt langsamer an und fällt auch langsamer wieder ab als im äquidimensionalen Fall. Die Werte der äquidimensionalen Durchbruchkurve liegen daher zu Beginn beträchtlich über und nach etwas mehr als 10000[s] deutlich unter den niederdimensionalen Werten. Der äquidimensionale Maximalwert ist dabei rund 21% größer als der niederdimensionale Maximalwert, und zu dem Zeitpunkt nach etwa 10000[s], an dem sich die niederdimensional und die äquidimensional ermittelte Durchbruchkurve treffen, haben im äquidimensionalen Fall bereits knapp 76% der zugegebenen Tracermasse den Ausstromrand erreicht, während dies im niederdimensionalen Fall erst rund 67% sind. Diese Zahlen machen deutlich, wie groß der Einfluss einer äquidimensionalen Formulierung für das vorliegende Beispiel ist.

6.3.3 Modellproblem mit einem stochastisch generierten Kluftnetzwerk

Um die Anwendbarkeit des äquidimensionalen Ansatzes auch auf natürliche bzw. naturnahe Systeme mit komplexer Geometrie zu überprüfen, wurden Strömungs- und Transportsimulationen auf einem Modellgebiet mit stochastisch generiertem Kluftnetzwerk durchgeführt (Abb. 6.77, links). Die Gesteinsmatrix wurde wie bei den Beispielen zuvor als homogen und isotrop angesetzt. Das Kluftnetzwerk wurde mit Hilfe des Kluftgenerators *FRAC3D* (SILBERHORN–HEMMINGER (2002)[194], Kap. 5.1.1) erzeugt. Dabei wurden die Kluftaufhängepunkte über eine Gleichverteilung generiert. Hinsichtlich der Orientierung wurden für einen Teil der Klüfte Azimut und Dip vorgegeben, die übrigen Klüfte wurden mit Hilfe der Fisher-Verteilung beschrieben. Die Kluftseitenlängen wurden über die Erlang2-Verteilung bestimmt. Die Kluftöffnungsweite im Gebiet beträgt konstant $b = 3.0 \cdot 10^{-3} [m]$, und als Kluftdichte wurde ein relativ hoher Wert von 30 Klüften pro Kubikmeter Gesteinsvolumen angesetzt. Für die Strömungssimulation wurden am linken und rechten Rand Dirichlet-Randbedingungen vorgegeben und am oberen und unteren Rand *No-Flow*-Randbedingungen. Für den Transport wurde am linken Rand eine Dirichlet-Randbedingung und am rechten Rand ein freier Ausfluss vorgegeben, am oberen und unteren Rand wurde wie für die Strömung eine *No-Flow*-Bedingung angesetzt. Modellparameter und Werte der Randbedingungen entsprechen den Daten in Tab. 6.1.

Abb. 6.77, rechts, gibt die niederdimensionale Approximation der Druckverteilung im Modellgebiet wieder. Die Ergebnisse der äquidimensionalen Modellierung weisen dazu wie in den vorangegangenen Beispielen keine großen Unterschiede auf. Bezüglich der Geschwindigkeitsapproximation muss auf eine Besonderheit des Modellproblems mit stochastisch generiertem Kluftnetzwerk eingegangen und im Zusammenhang damit ein kurzer Exkurs

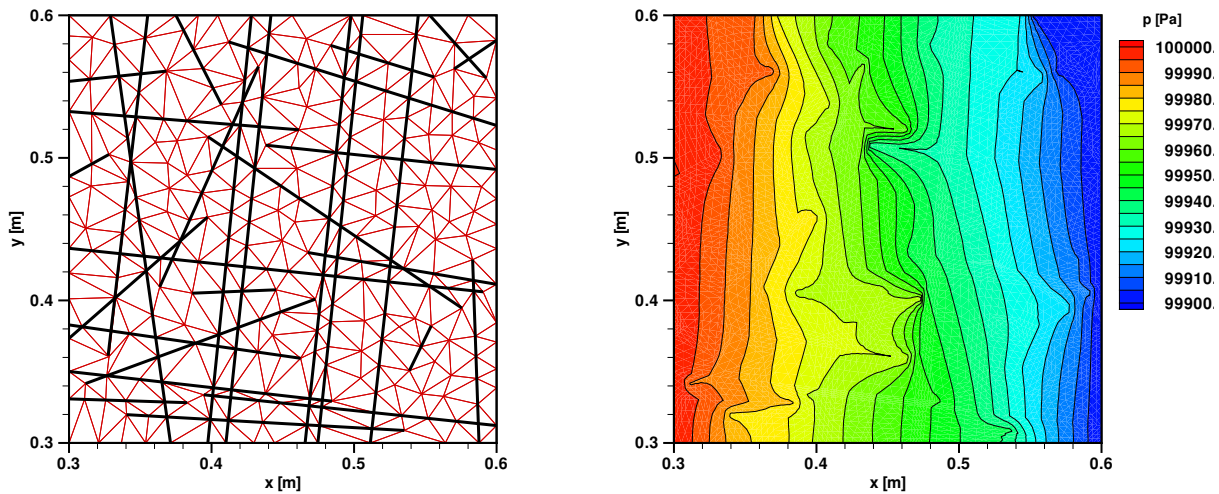


Abbildung 6.77: Modellgebiet mit stochastisch generiertem Kluftnetzwerk. Links: Geometrie und Grobgitter. Rechts: Druckverteilung, Level 2.

über die verwendeten Lösungsverfahren vorgenommen werden. Abb. 6.78 und Abb. 6.79 zeigen die Geschwindigkeitsverteilung im Bereich der linken Kluftkreuzung im Modellgebiet bei etwa $y = 0.5[m]$. Die Ergebnisse der niederdimensionalen Formulierung in Abb. 6.78, links, deuten darauf hin, dass in der von links oben nach rechts unten verlaufenden Kluft eine relativ starke Strömung in negativer y -Richtung existiert, während die von links unten nach rechts oben verlaufende Kluft mit nur geringer Geschwindigkeit in positiver y -Richtung durchströmt wird. Im Fall der äquidimensionalen Formulierung wird dieses Strömungsverhalten nicht sauber vom Boxverfahren erfasst (Abb. 6.78, rechts), es kommt zu Oszillationen in der Geschwindigkeitsverteilung. Dasselbe Problem tritt bei der Lösung der gemischt-hybriden Finiten Elemente auf, wenn das klassische Mehrgitter als Vorkonditionierer für den Löser verwendet wird (Abb. 6.79, links).

Grund dafür ist die für dieses Beispiel sehr schmal gewählte Kluftöffnungsweite. Das klassische Mehrgitterverfahren ist nicht robust gegenüber schmalen Kluftöffnungsweiten bei äquidimensionaler Diskretisierung insbesondere bei komplexen Geometrien. Dies wird deutlich, wenn die Ergebnisse verglichen werden mit den Resultaten, die basierend auf einer äquidimensionalen gemischt-hybriden Diskretisierung mit einem direkten Löser erzielt wurden (Abb. 6.79, rechts). Diese weisen keine Oszillationen mehr auf und zeigen ein sauberes Strömungsverhalten. Nachteilig ist, dass dabei ein Gleichungssystem gelöst werden muss, das alle Freiheitsgrade des feinsten Gitters enthält. Dies führt neben einer langen Rechenzeit auf einen sehr großen Speicherplatzbedarf, sodass das Verfahren nur für eine begrenzte Anzahl von Freiheitsgraden überhaupt anwendbar ist. Hier wird der Bedarf an einem gegenüber verschwindender Kluftweite robusten und effektiven Lösungsverfahren, wie es aktuell in Form der hierarchischen Zerlegung (GEBAUER (2003)[67]) an der Freien Universität Berlin entwickelt wird, deutlich. Es wird darauf hingewiesen, dass eine Anwendung des direkten Löserters bei äquidimensionaler Diskretisierung mit dem Boxverfahren keine besseren Ergebnisse erzielt als die in Abb. 6.78, rechts, dargestellten, die mit einem algebraischen Mehrgitter als Vorkonditionierer erzeugt wurden.

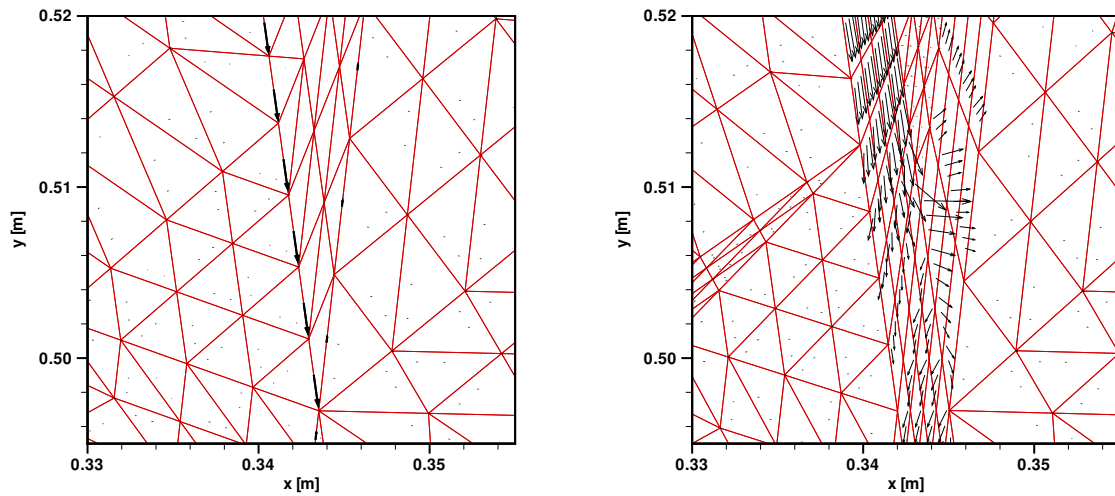


Abbildung 6.78: Geschwindigkeitsverteilung im Bereich der linken Kluftkreuzung bei etwa $y = 0.5[m]$, Level 2, Boxverfahren. Links: Niederdimensional. Rechts: Äquidimensional.

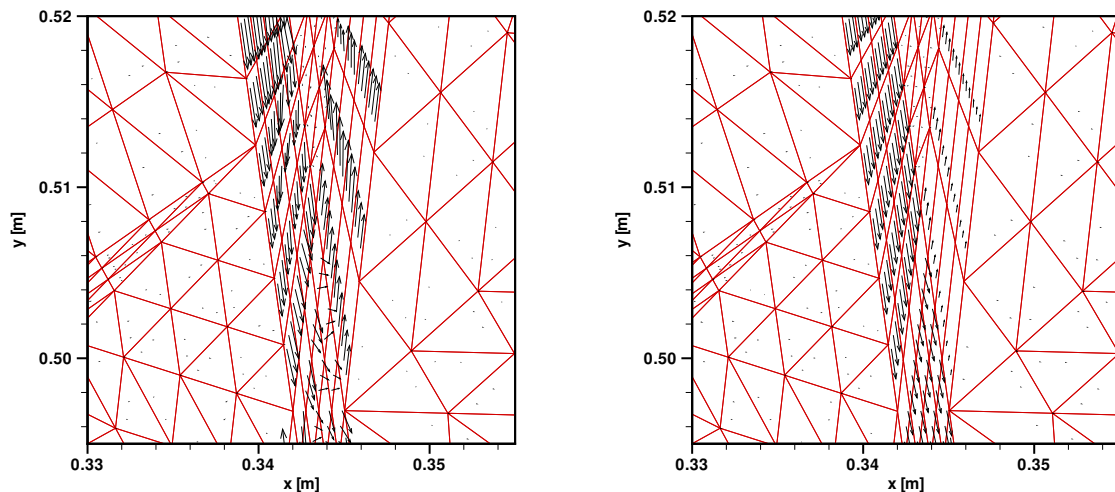


Abbildung 6.79: Geschwindigkeitsverteilung im Bereich der linken Kluftkreuzung bei etwa $y = 0.5[m]$, Level 2, gemischt-hybride FE, äquidimensional. Links: Mehrgitterlöser. Rechts: Direkter Löser.

Für die Transportmodellierung wurde über einen Zeitraum von $t_{zu} = 600[s]$ Tracer mit einem Wert von $c(x = 0.0[m], y, t) = 1.0[kg/m^3]$ am linken Rand zugegeben, danach wurde $c(x = 0.0[m], y, t) = 0.0[kg/m^3]$ angesetzt. Als Zeitschritt wurde $\Delta t_2 = 0.2[s]$ gewählt. Die daraus resultierende maximale Courant-Zahl im Modellgebiet beträgt im niederdimensionalen Fall $Cr = 8.2$ in den Klüften. Die Verteilung der Courant-Zahl im äquidimensionalen Fall ist wie zuvor den Werten der niederdimensionalen Beschreibung sehr ähnlich, Abweichungen ergeben sich lokal in den Kluftkreuzungen mit Maximalwerten von $Cr = 50.5$ (Strömung: Boxverfahren) bzw. $Cr = 48.4$ (Strömung: gemischt-hybride FE). Die minimalen Werte ergeben sich im niederdimensionalen Fall zu $Cr = 0.000011$ und im äquidimensionalen Fall zu

$Cr = 0.000081$ (Strömung: Boxverfahren) bzw. zu $Cr = 0.000196$ (Strömung: gemischt-hybride FE). Der gewählte Zeitschritt ist auch in diesem Beispiel als Kompromiss zwischen minimaler und maximaler Courant-Zahl und Anzahl der Rechenschritte und damit Vertretbarkeit des Rechenaufwands zu verstehen.

Die Abbn. 6.80 – 6.82 geben die Konzentrationsverteilung nach einer Simulationszeit von 60[s] wieder, jeweils links für das gesamte Modellgebiet und rechts für den schon für die Geschwindigkeitsapproximation diskutierten Bereich der linken Kluffkreuzung bei $y = 0.5[m]$. Die Menge der zum betrachteten Zeitpunkt bereits im Gebiet befindlichen Tracermasse macht ebenso wie die sehr kleinen Zeitschritte, mit denen die Diskretisierung in Zeitrichtung vorgenommen wurde, deutlich, dass das vorliegende Modellproblem aufgrund der starken Klüftung und der hohen Konnektivität der Klüfte sowohl untereinander als auch zum Zu- und Ausstromrand ein sehr schnelles System ist. Dabei enthält das niederdimensional diskretisierte Gebiet (Abb. 6.80) zu diesem Zeitpunkt weniger Tracermasse als die äquidimensional diskretisierten Gebiete (Abb. 6.81 und Abb. 6.82). Die Vergrößerung des Kluffbereichs zeigt den Einfluss der Geschwindigkeitsapproximation. Während sich im niederdimensionalen Fall (Abb. 6.80, rechts) nur etwas niedrigere Konzentrationen ergeben als bei der äquidimensionalen Formulierung mit gemischt-hybriden Finiten Elementen und direktem Löser für die Strömung (Abb. 6.82, rechts), zeigt die Lösung des äquidimensionalen Ansatzes mit Boxverfahren für die Strömung (Abb. 6.81) eine von der Form her andere Konzentrationsverteilung. Dies mag bei globaler Betrachtung des Gebiets von untergeordneter Bedeutung sein, kann lokal jedoch problematisch werden, wenn Stoffströme im Kreuzungsbereich anders verteilt werden oder negative Konzentrationen auftreten.

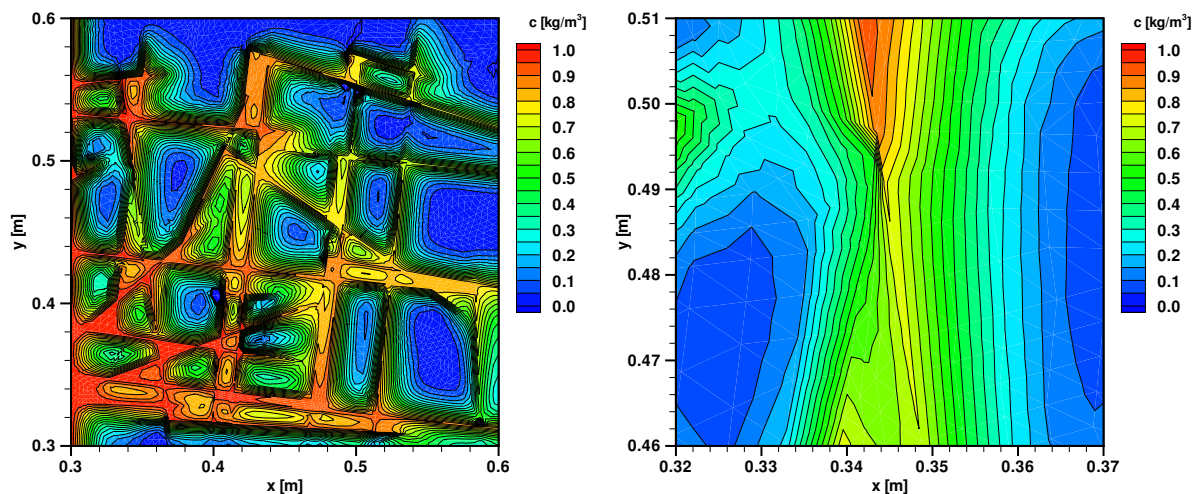


Abbildung 6.80: Konzentrationsverteilung nach 60[s], Level 2, niederdimensional, Boxverfahren für Strömung und Transport. Links: Gesamtes Modellgebiet. Rechts: Bereich der linken Kluffkreuzung bei $y = 0.5[m]$.

Abb. 6.83 zeigt die Durchbruchkurven für die verschiedenen, für das Modellgebiet gezeigten Ansätze. Auch an den Durchbruchkurven wird deutlich, dass es sich um ein schnelles System mit vergleichsweise hohem Durchfluss handelt. Die Verwendung des Streamline Orientation

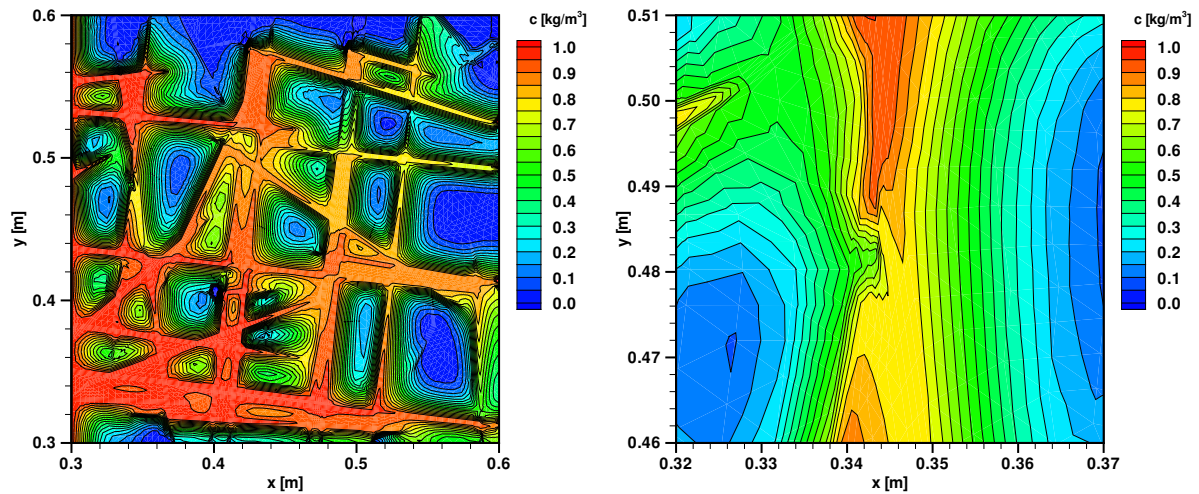


Abbildung 6.81: Konzentrationsverteilung nach 60[s], Level 2, äquidimensional, Boxverfahren für Strömung und Transport. Links: Gesamtes Modellgebiet. Rechts: Bereich der linken Kluftkreuzung bei $y = 0.5$ [m].

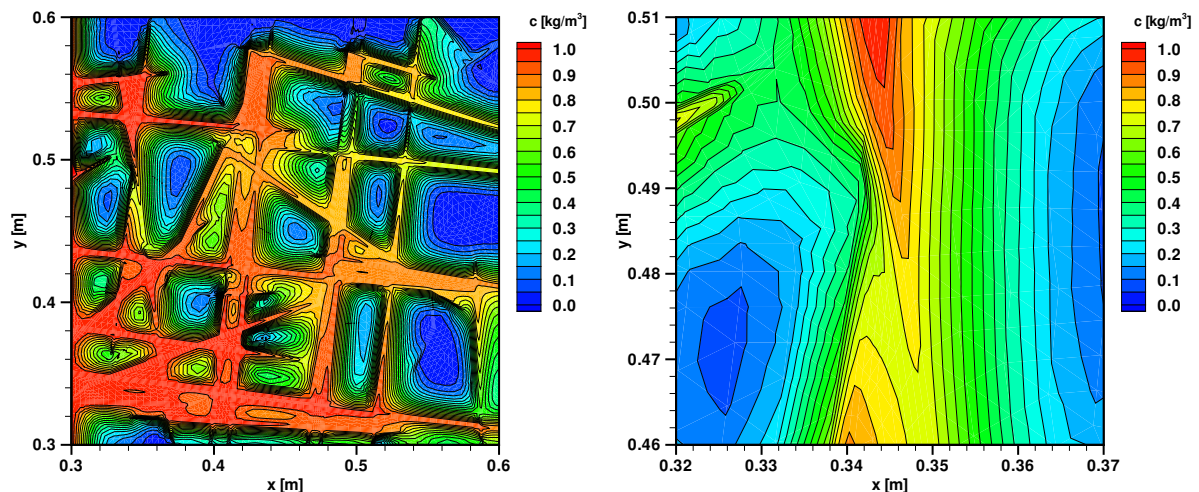


Abbildung 6.82: Konzentrationsverteilung nach 60[s], Level 2, äquidimensional, gemischt-hybride FE für die Strömung, Boxverfahren für den Transport. Links: Gesamtes Modellgebiet. Rechts: Bereich der linken Kluftkreuzung bei $y = 0.5$ [m].

als Upwinding-Strategie für das Boxverfahren der Transportdiskretisierung hat hier nur einen geringen Einfluss auf das Gesamtergebnis. Dies hängt zum einen mit dem verhältnismäßig geringen Matrixanteil des Modellgebiets zusammen und zum anderen mit dem durch die verschiedenen Kluffließpfade schnell in großer Menge den Ausstromrand erreichenden Tracer, der einen Peak erzeugt, der alle feineren Differenzen dominiert. Die Form der Durchbruchkurven ist für die beiden Verfahren der Strömungsdiskretisierung bei äquidimensionaler Formulierung fast identisch. Allerdings ist der Maximalwert für das Boxverfahren rund 3% höher als für die Methode der gemischt-hybriden Finiten Elemente. Dies liegt in der etwas höheren Durchflussrate und der schlechteren Geschwindigkeitsapproximation des Boxverfahrens in

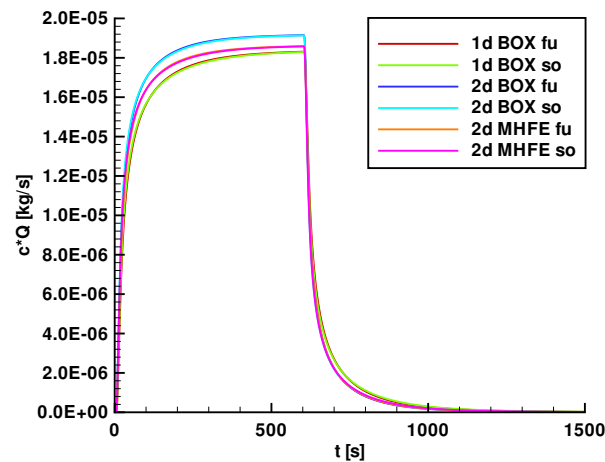


Abbildung 6.83: Durchbruchkurven am Ausstromrand ($x = 0.6[m]$). Für Boxverfahren, niederdimensional (1d BOX), Boxverfahren, äquidimensional (2d BOX) und gemischt-hybride FE, äquidimensional (2d MHFE) in der Strömungsdiskretisierung, Boxverfahren mit Fully Upwinding (fu) und mit Streamline Orientation (so) für den Transport.

Klüften direkt am Gebietsrand begründet (s. auch Kap. 6.2.3). Der mit der niederdimensionalen Formulierung ermittelte Durchfluss ist etwas kleiner als im äquidimensionalen Fall bei gemischt-hybrider Diskretisierung. Die resultierende Durchbruchkurve zeigt entsprechend einen etwa 1.5% niedrigeren Maximalwert. Zusätzlich kann auch hier analog zu den Ergebnissen aus Kap. 6.3.2 ein diffusiveres Verhalten festgestellt werden, das sich in einem flacheren Anstieg und einem langsameren Abfall der niederdimensional bestimmten Durchbruchkurve ausdrückt. Dies weist auf einem im Vergleich zur äquidimensionalen Simulation langsameren Transport in den Klüften hin.

6.3.4 Diskussion der Ergebnisse

Die Beispiele in diesem Kapitel haben gezeigt, dass der äquidimensionale Ansatz grundsätzlich auf komplexere und natürliche bzw. naturnahe Kluft-Matrix-Systeme anwendbar ist. Eine Einschränkung besteht zur Zeit noch von Seiten des Löser, da direkte Lösungsverfahren einen zu großen Bedarf an Rechenzeit und Speicherplatz haben, um für große Systeme auf der erforderlichen Verfeinerungsstufe interessant zu sein, und klassische Mehrgitter bei schmalen Kluftweiten insbesondere bei komplexen Strömungsverhältnissen versagen (Abb. 6.79, links). Algebraische Mehrgitter sind bereits deutlich robuster gegenüber verschwindender Kluftweite als klassische Mehrgitter und damit für die hier gewählten Kluftweiten gegebenenfalls eine Alternative, sie sind jedoch bisher im Rahmen der verwendeten Software-Toolbox *MUFTE-UG* (Kap. 5.3) nicht für gemischt-hybride Finite Elemente verfügbar. Im Hinblick auf schmalere als die hier angesetzten Kluftweiten konnten GEBAUER, NEUNHÄUSERER, KORNUBER, OCHS, HINKELMANN & HELMIG (2002)[68] zeigen, dass auch die algebraischen Mehrgitter nicht robust gegenüber verschwindender Kluftweite sind. Mit der hierarchischen Zerlegung (GEBAUER (2003)[67]) wird zur Zeit ein geeignetes Lösungsverfahren auch für sehr schmale Kluftweiten entwickelt.

Ebenso wie bei den Beispielen der Einzelkluft und der Kluftkreuzungen zeigen sich auch bei Betrachtung der Simulationsergebnisse für die Modellgebiete mit Klufnetzwerk deutliche lokale Unterschiede zwischen der aus der niederdimensionalen Diskretisierung resultierenden Geschwindigkeits- und Konzentrationsverteilung und den entsprechenden Werten der äquidimensionalen Formulierung. Insbesondere treten lokale Effekte im Bereich von Kluftkreuzungen oder in Bereichen mit quer zur Klufachse verlaufenden Gradienten auf. Bei Gebieten, die wie die zweite Variante des Modellproblems mit sechs Klüften eine Geometrie aufweisen, die solche Bereiche akkumuliert, und die gleichzeitig langsam genug sind, um einen relevanten Massenaustausch zwischen Kluf und Matrix zuzulassen, werden die Differenzen in der Lösung des nieder- und des äquidimensionalen Ansatzes auch in der Durchbruchskurve am Ausstromrand deutlich sichtbar (Abb. 6.76). Bei schnellen Systemen, die direkte Fließpfade zwischen Ein- und Ausstromrand haben, treten diese Effekte zurück. Allerdings zeigt die aus der niederdimensionalen Simulation resultierende Durchbruchskurve des Modellproblems mit stochastisch generiertem Klufnetzwerk ebenfalls ein gegenüber dem äquidimensionalen Modellansatz diffusiveres Verhalten (Abb. 6.83), das auf einen langsameren Transport in den Klüften bei niederdimensionaler Diskretisierung hinweist. Dies stimmt überein damit, dass äquidimensional beschriebene Gebiete häufig einen etwas höheren Durchfluss aufzuweisen haben.

7 Zusammenfassung und Ausblick

7.1 Zusammenfassung

Im Rahmen der vorliegenden Arbeit wurden Diskretisierungsansätze hinsichtlich ihrer Eigenschaften und ihres Verhaltens bei der Modellierung von Strömungs- und Transportprozessen in geklüftet-porösen Medien untersucht. Dabei wurden diskrete Modellansätze in der Form kombinierter Modelle zugrunde gelegt, die die Klüfte und die umgebende Gesteinsmatrix diskret als einzelne Strukturelemente beschreiben. Dies führt zu Systemen mit sehr unterschiedlichen Längenskalen und aufgrund der unterschiedlichen hydraulischen Eigenschaften von Kluft und Matrix sehr unterschiedlichen Zeitskalen, die bei der Prozessmodellierung erfasst werden müssen. Gleichzeitig verursacht die starke Heterogenität geklüfteter Systeme ein komplexes Verhalten der Strömungs- und Transportprozesse mit gegebenenfalls wechselnden physikalischen und mathematischen Eigenschaften, die vom gewählten Diskretisierungsansatz korrekt beschrieben werden müssen.

Es wurden daher zuerst eine Reihe von Anforderungen aufgestellt, an der sich die Auswahl eines für die Modellierung von Kluft-Matrix-Systemen geeigneten Diskretisierungsansatzes orientieren sollte. Dazu zählen lokale Flusserhaltung und eine möglichst exakte Geschwindigkeitsapproximation für die Strömung, die als Grundlage für den Transport dient, sowie die Vermeidung von Oszillationen, die gegebenenfalls zu unphysikalischen Ergebnissen (z.B. negative Konzentrationen) führen, bei gleichzeitiger Minimierung der numerischen Dispersion.

Die im Kontext des kombinierten Modellansatzes üblicherweise verwendete *niederdimensionale* Formulierung diskretisiert die Klüfte eine Dimension niedriger als die umgebende Gesteinsmatrix. Dabei ist die lokale Flusserhaltung am Kluft-Matrix-Übergang nicht gewährleistet und der zugrunde liegende physikalische Prozess gegebenenfalls nicht richtig erfasst. Um hier eine bessere Prozessdarstellung im Sinne der in Kap. 1.4 aufgestellten Anforderungen zu erreichen, wurde der *äquidimensionalen* Ansatz vorgestellt, der Kluft und Matrix mit Elementen der gleichen Dimension beschreibt und so Freiheitsgrade in der Kluft und Gradienten quer zur Kluft zulässt. Auf diese Weise ist bei geeigneter numerischer Diskretisierung eine zuverlässigere Abbildung der physikalischen Prozesse in der Kluft und im Übergangsbereich von Kluft und Matrix sowie die lokale Flusserhaltung am Kluft-Matrix-Interface möglich. Eine Analyse der Auswirkungen der äquidimensionalen Darstellung auf die approximierete Lösung im Vergleich mit der niederdimensionalen Beschreibung ebenso wie eine Untersuchung darüber, welche Diskretisierungsverfahren unter Berücksichtigung der Anforderungen in Kap. 1.4 auf den äquidimensionalen Ansatz anwendbar sind, existierte jedoch bisher nicht.

Ziel der vorliegenden Arbeit war es daher, sowohl für die äquidimensionale als auch für die niederdimensionale Formulierung eine Auswahl geeigneter numerischer Diskretisierungsverfahren zu treffen und das Lösungsverhalten des äquidimensionalen Modellansatzes im Vergleich zum niederdimensionalen Modellansatz sowie der jeweils darauf verwendeten numerischen Diskretisierungsverfahren zu untersuchen und mit Blick auf die Anforderungen in Kap. 1.4 zu bewerten.

Für die Auswahl numerischer Verfahren, die sich zur Diskretisierung von Strömungs- und Transportprozessen in geklüftet-porösen Medien unter Berücksichtigung der aufgestellten Anforderungen eignen, wurden ausschließlich Euler-Verfahren aus dem Bereich der Finiten Volumen und der Finiten Elemente betrachtet. Lagrange'sche und Euler-Lagrange'sche Verfahren sind für die rein parabolische Strömungsgleichung nicht geeignet und bei der Anwendung auf die Transportgleichung insbesondere für die stark unstrukturierten Gitter der Kluft-Matrix-Systeme grundsätzlich problematisch, da sie rechentechnisch sehr aufwändig und teilweise für die niederdimensionale Diskretisierung nicht einsetzbar sind.

Für die Strömungsdiskretisierung wurden von den vorgestellten numerischen Diskretisierungsverfahren das Boxverfahren und die Methode der gemischt-hybriden Finiten Elemente gewählt. Die gemischt-hybriden Finiten Elemente erzeugen eine über die Elementkante kontinuierliche Normalenkomponente der Geschwindigkeit und erfüllen so die Forderung nach einer möglichst exakten Geschwindigkeitsverteilung und der lokalen Flusserhaltung am Kluft-Matrix-Interface, wenn sie zusammen mit dem äquidimensionalen Ansatz verwendet werden. Sie sind weiterhin im Gegensatz zu den ebenfalls den Normalenfluss kontinuierlich approximierenden zellenorientierten Finiten Volumen auf beliebig unstrukturierten Gittern einsetzbar und damit für die vorliegende Problemklasse der Kluft-Matrix-Systeme geeignet. Allerdings lassen sie sich nicht auf niederdimensionale Probleme anwenden, sodass hier das Boxverfahren eingesetzt wird, das zwar den Druck, nicht aber die Normalenkomponente der Geschwindigkeit kontinuierlich approximiert. Gleichzeitig wurde das Boxverfahren zu Vergleichszwecken auch für die äquidimensionale Betrachtung verwendet, um zu überprüfen, ob der erhöhte Aufwand für die gemischt-hybriden Finiten Elemente sinnvoll ist.

Für die Transportdiskretisierung wurde das Boxverfahren verwendet, das die Forderung nach Vermeidung von Oszillationen auch auf beliebig unstrukturierten Gittern erfüllt, jedoch nur von erster Ordnung ist und damit numerische Dispersion in das System einführt. Es wurde daher eine Bestimmung des Upwinding-Parameters α in Abhängigkeit von Courant- und Peclet-Zahl und der Strömungsrichtung (Streamline Orientation) eingeführt, um die Ordnung des Verfahrens in dominant dispersiven Bereichen zu erhöhen. Höherwertige, nichtlineare Ansätze wie Slope-Limiter-Verfahren mit TVD-Eigenschaften oder WENO-Schemata sind für unstrukturierte Gitter ausgesprochen ungünstig oder erfordern einen unverhältnismäßig hohen Aufwand. Mögliche Alternativen unter den monotonen bzw. Monotonie erhaltenden Ansätzen sind das rechentechnisch ebenfalls intensive, aber vertretbare Flux-Corrected Transport Verfahren oder eine Kombination aus gemischt-hybriden Finiten Elementen für den dispersiven und Discontinuous-Galerkin-Verfahren (SIEGEL, MOSÉ, ACKERER & JAFFRE (1997)[193]) für den advektiven Transportanteil.

Die Anwendbarkeit der verschiedenen Modellansätze auf Modellprobleme geklüftet-poröser Medien und ihr Einfluss auf die Modellergebnisse wurde an einer Reihe von Beispielen mit ansteigender geometrischer Komplexität untersucht und diskutiert. Im Rahmen der Modellbildung wurden die Geometriemodelle der Kluft-Matrix-Systeme von Hand und mit dem Kluftgenerator *FRAC3D* erstellt. Für die niederdimensionale Vernetzung der Kluft-Matrix-Systeme wurde der sehr flexible Netzgenerator *ART* eingesetzt, der qualitativ hochwertige Elementgeometrien erzeugt. Für die äquidimensionale Darstellung wurde das Modul *FRAC-MESH* implementiert, das die mit *ART* generierten Gitter einliest und die ursprünglich niederdimensional diskretisierten Klüfte mit Vierecken vernetzt. Die programmtechnische Umsetzung der verwendeten numerischen Diskretisierungsansätze wurde auf der Basis des Programmsystems *MUFTE-UG* durchgeführt.

Anhand der in Kap. 6 gezeigten Beispiele konnte die Anwendbarkeit des äquidimensionalen Ansatzes auf beliebig geklüftete Systeme nachgewiesen werden. Eine Einschränkung bestand dabei von Seiten des Lösungsverfahrens, da sich klassische Mehrgitter als nicht robust bei schmalen Kluftweiten erwiesen haben und algebraische Mehrgitter nicht für alle verwendeten numerischen Diskretisierungsverfahren zur Verfügung standen. Beim Vergleich von nieder- und äquidimensionalem Ansatz wurde deutlich, dass durch den Einsatz der äquidimensionalen Formulierung Ergebnisse ermittelt werden, die eine Reihe von Unterschieden zunächst lokaler Natur gegenüber den Ergebnissen der niederdimensionalen Formulierung aufweisen. Zum einen können bei äquidimensionaler Betrachtung Gradienten quer zur Kluftachse erfasst werden, woraus ein deutlich stärkerer Austausch zwischen Kluft und Matrix resultiert. Zum anderen hat die explizite Beschreibung des Fließverhaltens in der Kluftkreuzung einen etwas höheren Massendurchsatz durch die Kluftkreuzung und gegebenenfalls eine andere Massenverteilung auf die Kluftarme zur Folge. Beide Effekte führen auf einen gegenüber der niederdimensionalen Darstellung tendenziell erhöhten Gesamtdurchfluss durch das Modellgebiet. Untersuchungen zur geometrischen Darstellung von Kluftenden im Gebiet zeigten außerdem, dass ein Kluftabschluss in Form eines Rechtecks oder alternativ eines Dreiecks mit einem Winkel $\vartheta \geq 90^\circ$ am Kluftende eine deutlich stabilere Geschwindigkeitsapproximation im Kluftende ermöglicht und damit auch das Transportverhalten in der Kluft beeinflusst.

Globale Unterschiede zwischen den Ergebnissen des nieder- und des äquidimensionalen Ansatzes treten im Vergleich von Durchbruchkurven am Ausstromrand dann auf, wenn sich die lokalen Effekte im betrachteten Modellgebiet akkumulieren und das System gleichzeitig langsam genug ist, um einen relevanten Massenaustausch zwischen Kluft und Matrix zuzulassen. Aber auch schnellere Systeme mit einem oder mehreren direkten Kluftfließpfaden zwischen Zu- und Ausstromrand des Modellgebiets zeigen bei niederdimensionaler Diskretisierung ein etwas diffusiveres Verhalten in der Durchbruchkurve.

Im Vergleich der Diskretisierungsverfahren für die Strömung erwies sich das Boxverfahren im niederdimensionalen Fall als ausreichend. Für diese Problemklasse sind die gemischt-hybriden Finiten Elemente allerdings keine Alternative. Im äquidimensionalen Fall konnten mit den gemischt-hybriden Finiten Elementen zum Teil deutlich bessere Ergebnisse auch auf niedrigeren Verfeinerungsstufen erzielt werden als mit dem Boxverfahren. In problematischen Fällen ermittelte auch das Boxverfahren keine bessere Lösung. Eine Verwendung

der gemischt-hybriden Finiten Elemente ist daher trotz des gegenüber dem Boxverfahrens erhöhten Rechenaufwands sinnvoll, insbesondere dann, wenn eine stationäre Strömung zugrundeliegt und die Strömungsdiskretisierung damit nur einen Bruchteil der für den Transport benötigten Simulationszeit beansprucht.

Für den Transport zeigte sich das Boxverfahren in den untersuchten Beispielen als zuverlässiges und oszillationsfreies numerisches Diskretisierungsverfahren. Die eingetragene künstliche Dispersion konnte durch ein Upwinding mit Streamline Orientation im Matrixbereich deutlich reduziert werden. Ein Upwinding mit Streamline Orientation in der Kluft erwies sich als nicht sinnvoll, da in Kreuzungen zwischen stark durchflossenen Tracer führenden Klüften und schwach durchflossenen Klüften mit niedriger Konzentration im Kluftarm der schwach durchflossenen Kluft vor der Kluftkreuzung Oszillationen auftreten können. Der Tracer in der stark durchflossenen Kluft übernimmt in diesem Fall die Rolle einer Diskontinuität für die schwache Kluft. Mit einem generellen Fully Upwinding in den Klüften konnten diese Oszillationen vermieden werden, ohne dass große Unterschiede in der Genauigkeit der Approximation im Vergleich zum Streamline Orientation auftraten.

Zusammenfassend kann auf der Grundlage der vorliegenden Untersuchungen zur Modellierung von Strömungs- und Transportprozessen in geklüftet-porösen Medien festgestellt werden, dass die Verwendung des äquidimensionalen Ansatzes insbesondere bei langsameren Systemen mit einer Klüftung quer zur Hauptströmungsrichtung deutliche Auswirkungen auf die approximierten Lösungen zeigt. Bei schnelleren Systemen ist eine äquidimensionale Formulierung dann von Interesse, wenn lokale Effekte untersucht werden sollen. Wird eine äquidimensionale Darstellung gewählt, so ist bis auf wenige Ausnahmen mit z.B. sehr einfachen Strömungsverhältnissen ein Einsatz der gemischt-hybriden Finiten Elemente für die Strömungsdiskretisierung sinnvoll. Das für die Transportdiskretisierung verwendete Boxverfahren mit prozessabhängigem Upwinding mit Streamline Orientaten in der Matrix und Fully Upwinding in den Klüften erzeugt mit geringem zusätzlichen rechnerischen Aufwand deutlich steilere Konzentrationsfronten im Matrixbereich. Für eine verbesserte Approximation der Transportgleichung auch in den hochadvektiven Bereichen ist es jedoch notwendig, aufwändigere Diskretisierungsverfahren zum Einsatz zu bringen.

7.2 Ausblick

Nachdem im Rahmen dieser Arbeit die grundlegende Anwendbarkeit der äquidimensionalen Formulierung auf beliebige Kluft-Matrix-Systeme sowie ihr Einfluss auf die Simulationsergebnisse im Vergleich zur niederdimensionalen Diskretisierung festgestellt und analysiert wurde, eröffnen sich in Kombination mit einem gegenüber verschwindender Kluftweite robustem Lösungsverfahren wie dem zur Zeit in der Entwicklung befindlichen, auf einer hierarchischen Zerlegung des Modellproblems in Kluft- und Matrixraum beruhenden Mehrgitterverfahren (GEBAUER (2003)[67]) weitere Möglichkeiten und Ansatzpunkte für den Aufbau eines robusten und effizienten Gesamtkonzepts zur Modellierung von Strömungs- und Transportprozessen in geklüftet-poröser Medien.

Beispielsweise wurden die bisherigen Untersuchungen an Modellgebieten mit relativ großer Kluftbreite ($0.3[cm] \leq b \leq 1.0[cm]$) durchgeführt. Mit Hilfe eines für schmale Klüfte geeigneten Lösungsverfahrens kann untersucht werden, ob die beobachteten äquidimensionalen Effekte auch bei Kluftsystemen mit schmalere Kluftöffnungsweiten in einer Größe auftreten, die eine äquidimensionale Modellierung sinnvoll macht. Gleichzeitig wird ein robustes Lösungsverfahren bereits bei Kluftweiten in der Größenordnung der hier verwendeten benötigt, wie das Beispiel des stochastisch generierten Kluftnetzwerks deutlich macht. Gegebenenfalls sind hier noch algebraische Mehrgitter ausreichend, es wird jedoch sinnvoll sein, den Einsatzbereich von algebraischem Mehrgitter und dem auf der hierarchischen Zerlegung basierenden Mehrgitter durch einen Vergleich der Ergebnisse auf Gebieten von ansteigend geometrischer Komplexität für unterschiedliche Kluftweiten abzuschätzen.

Die Methode der gemischt-hybriden Finiten Elemente hat sich als gut geeignet für die Strömungsapproximation im Rahmen einer äquidimensionalen Formulierung erwiesen. Bei der Approximation auf hohen Verfeinerungsstufen (Level 5) traten jedoch Probleme auf, deren Herkunft im Kontext dieser Arbeit nicht zufriedenstellend geklärt werden konnte (Kap. 6.2.2, Kluftkreuzung B). Als möglicher Lösungsweg erwies sich eine stärkere Verfeinerung im Kluftbereich bzw. eine anisotrope Verfeinerung in der Kluft. Mit Hilfe eines robusten Lösungsverfahrens können hier weitere diesbezügliche Untersuchungen auch für schmalere Klüfte durchgeführt werden.

Für die Transportmodellierung sollten grundsätzlich weitere Diskretisierungsmethoden auf ihre Anwendbarkeit auf nieder- und äquidimensionale Kluft-Matrix-Systeme überprüft werden. Das hier verwendete Boxverfahren erfüllt zwar die Forderung nach einer oszillationsfreien Approximation, nicht jedoch die nach einer Minimierung der numerischen Dispersion, obwohl die Anwendung des Streamline Orientation Upwinding bereits eine Verbesserung im Matrixbereich erzielt. Mögliche Alternativen sind, wie bereits genannt, das Flux-Corrected Transport Verfahren oder eine Kombination aus gemischt-hybriden Finiten Elementen und Discontinuous-Galerkin-Verfahren nach SIEGEL, MOSÉ, ACKERER & JAFFRE (1997)[193]. Prinzipiell ist auch ein Particle-Tracking-Ansatz denkbar, wobei untersucht werden muss, ob die komplexe Geometrie des Systems in diesem Zusammenhang grundsätzliche Probleme aufwirft. Es wird darauf hingewiesen, dass die letzten beiden der genannten Verfahren nur bei einer äquidimensionalen Darstellung der Klüfte angewendet werden können. Eine andere Alternative für die Transportmodellierung bietet die hierarchische Zerlegung. Da das Modellproblem bei dieser Vorgehensweise in Kluft- und Matrixraum unterteilt und diese zunächst getrennt behandelt werden, können in Kluft und Matrix unterschiedliche Diskretisierungsverfahren verwendet werden. Dies bedeutet für die Transportmodellierung, dass in Kluft und Matrix voneinander unabhängig Diskretisierungsverfahren eingesetzt werden können, die für die jeweiligen physikalischen und mathematischen Eigenschaften geeignet sind.

In Kap. 6.1.1 wurde am Beispiel der Einzelkluft über vier Verfeinerungsstufen die Entwicklung der Anzahl der Freiheitsgrade für Knoten (Boxverfahren) und Kanten (gemischt-hybride Finite Elemente) bei uniformer Verfeinerung dargestellt (Tab. 6.2). Im Hinblick auf komplexere Gebiete, die naturgemäß aufgrund der aufwändigeren Geometriebeschreibung schon im Grobgitter

eine große Anzahl von Freiheitsgraden haben und trotzdem eine ausreichende Verfeinerung in der Kluft erfordern, und auch auf größere Gebiete wird die Notwendigkeit des Einsatzes (h)-adaptiver Methoden deutlich (OCHS, HINKELMANN, NEUNHÄUSERER, SÜSS, HELMIG, GEBAUER & KORNHUBER (2002)[166]). Außerdem bietet sich für die äquidimensionale Modellierung generell eine anisotrope Verfeinerung in der Kluft an, die die Geometrie der Kluftelemente verbessert. Darüber hinaus erschließt eine Parallelisierung der verwendeten Ansätze Leistungsbereiche, die die Berechnung großer und/oder komplexer Gebiete erleichtert oder erst ermöglicht.

Summary

Introduction

The simulation of groundwater flow and solute transport behaviour in fractured subsurface systems is of major importance when managing fractured aquifers used as drinking-water reservoirs, investigating the long-term safety of legacies and waste-disposal sites or the remediation of contaminant sites, or when creating hot dry rock reservoirs. Numerical modelling supports the analysis of field experiments or the determination of system parameters, and it enhances the understanding of the complex behaviour of the physical processes within the region of interest depending on the system parameters. The different hydraulic properties of fractures and the surrounding porous matrix usually strongly affect the flow and transport processes in fractured systems. Under saturated conditions, fractures representing distinctive pathways enable fast contaminant transport through the system, resulting in early breakthrough times. From the fractures, the contaminant enters the surrounding matrix by diffusive or dispersive processes. It is stored in the matrix and released slowly back into the fractures, thus causing a long-term contamination of the system. For a numerical simulation, the employed model concept together with the associated discretisation techniques has to take these heterogeneous conditions into account.

With respect to these considerations, this thesis analyses discretisation techniques for simulating flow and transport processes in arbitrarily fractured porous media. A combined model concept is used, describing fractures and matrix with discrete structure elements. This allows a detailed investigation of the influence of single components on the system as a whole and of the impact of fracture-matrix interaction on the behaviour of physical processes. The numerical method employed for simulations runs in this context has to describe accurately the geometry of the fractured system and the processes. Therefore, a number of requirements is made of the modelling of flow and transport processes which should act as a guideline when choosing discretisation techniques for flow and transport in fractured porous media (fig. 1). These requirements are valid for unfractured media as well; nevertheless, the special structure of discrete fracture-matrix systems with rapidly varying material properties and differing scales in length and time lead to additional problems regarding the specified items.

Transport calculations depend to a great extent on the underlying velocity field. Hence, the determination of the velocity distribution has to be very accurate, and flux conservation, especially at the fracture-matrix interface, should be guaranteed. In the transition zone of fracture and matrix, the character of the transport equation changes from advection to diffusion or from elliptic/parabolic to hyperbolic. The numerical method employed for the discretisation should be able to handle this changing character to minimize numerical dispersion and to avoid

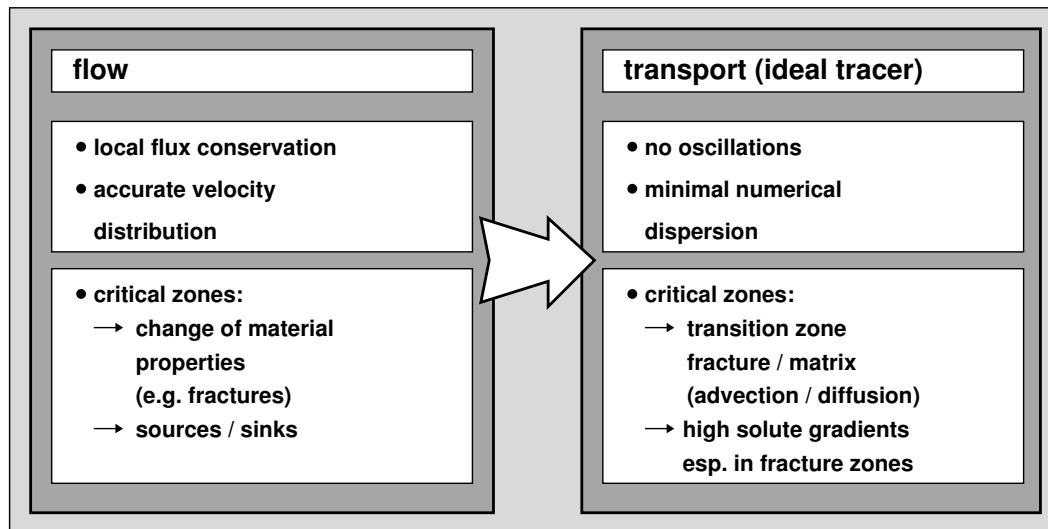


Figure 1: Demands on numerical modelling of flow and transport processes in fractured porous media.

numerical oscillations which could lead to unphysical solutions like negative concentration values. Additionally, the sharp concentration fronts in the fractures and in the transition zone should be approximated as accurately as possible. An influence of the tracer and its distribution within the domain on the flow behaviour is not considered here.

When the combined model concept is used, the fractures are usually discretised with elements of lower dimension than that of the surrounding matrix (fig. 2, left). This approach is called *lower-dimensional*. Though working well in a number of applications, it does not ensure local flux conservation at the fracture–matrix interface and therefore possibly does not describe the underlying physical process correctly. To improve the description of the process behaviour, a new approach in terms of an *equidimensional* formulation (fig. 2, right) has been introduced in the context of the DFG–project *Multigrid Methods and Eulerian–Lagrangian Methods for Modelling Flow and Transport Processes in Fractured Aquifer Systems*, discretising fracture and matrix with elements of the same dimension while allowing for degenerated fracture elements with fracture width $b \rightarrow 0$ (NEUNHÄUSERER, GEBAUER, HINKELMANN, KORNHUBER & HELMIG (2000)[157], NEUNHÄUSERER, GEBAUER, OCHS, HINKELMANN, KORNHUBER & HELMIG (2001)[158]). The equidimensional approach has several advantages. Fractures have their own degrees of freedom; this leads to a more accurate approximation of fluxes in the fracture and between fracture and matrix. Transverse gradients within the fractures can be reproduced, enabling local flux conservation at the fracture–matrix interface. Furthermore, non–ambiguous streamlines can be calculated for the entire domain, allowing, for example, the use of particle methods for transport modelling. A disadvantage compared with the lower–dimensional approach is the long, thin geometry of the equidimensionally discretised fracture elements which may cause numerical problems. To overcome these problems, a robust and effective solution method is currently being developed (z.B. GEBAUER, NEUNHÄUSERER, KORNHUBER, OCHS, HINKELMANN & HELMIG (2002)[68], GEBAUER (2003)[67]), a two–level multigrid method based on a hierarchical decomposition of the model problem into a fracture

problem and a matrix problem. So far, it has been implemented for a flow discretisation. When extended to transport problems, the decoupled treatment of fracture and matrix will allow the use of different discretisation techniques in each part, appropriate to the locally governing physical process.

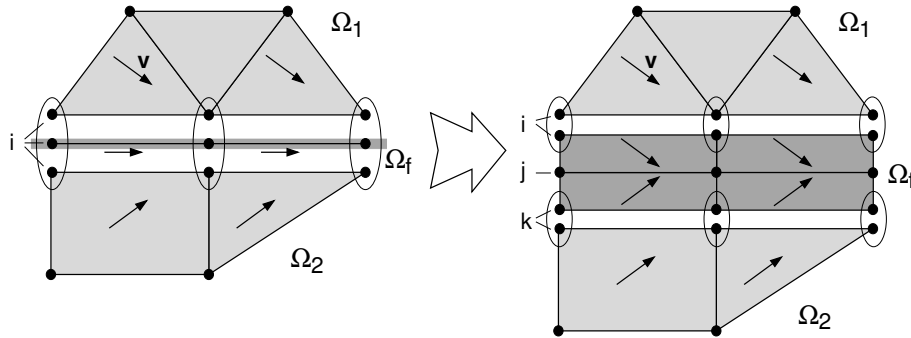


Figure 2: Flux in fracture and matrix depending on the model concept. Left: lower-dimensional formulation. Right: equidimensional formulation.

The equidimensional approach together with the hierarchical decomposition shows some features for the simulation of flow and transport processes in fractured porous media which enable a better and more accurate approximation in terms of the requirements listed in fig. 1. Nevertheless, the influence of this approach on the approximated solution in comparison with the lower-dimensional formulation has not been investigated in detail so far. Additionally, up to now, only little insight has been gained into which numerical discretisation techniques can be applied to an equidimensional discretisation and, compared to the lower-dimensional approach, which other possibilities in choosing a numerical method according to the requirements in fig. 1 result from the application of an equidimensional formulation.

The aim of this thesis in this context is to choose appropriate numerical discretisation techniques for the equidimensional as well as for the lower-dimensional formulation while taking advantage of the specific properties of each approach, and to analyse the behaviour of the equidimensional formulation compared to the lower-dimensional one in combination with the chosen numerical methods in terms of the requirements of fig. 1. This leads to propositions concerning the applicability of the different approaches and methods and the quality of the obtained numerical results. In this case, “appropriate numerical discretisation techniques” are methods which can be used on unstructured grids resulting from arbitrarily fractured systems and which fulfil one or more of the requirements listed above. The computational effort compared to the obtained enhancement of the solution plays a role as well.

A number of established numerical discretisation techniques from the finite volume and the finite element schemes are analysed with respect to their suitability for approximating flow and transport processes in arbitrarily fractured porous systems in an equidimensional as well as in a lower-dimensional formulation. As a result, a box scheme and a mixed-hybrid finite element approach are chosen for the flow discretisation, and a box scheme with different up-winding strategies for the transport discretisation. The software implemented and employed in

the context of the model concept for fracture and mesh generation and for numerical discretisation is presented. The applicability and the properties both of the equidimensional compared to the lower-dimensional formulation and of the chosen numerical discretisation techniques with respect to these two formulations are discussed on the basis of several model problems of increasing geometric complexity.

Governing Equations

Saturated flow in a confined aquifer is considered. Incompressibility of the fluid and nondeformability of the fractured porous medium are assumed. Then the continuity equation in combination with the Darcy formula yields the equation for saturated groundwater flow. As for experimental data, the pressure is most often obtained instead of the piezometric head, the pressure formulation is used with $p = \rho g (h - z)$, p is the pressure, ρ the fluid density, g the acceleration due to gravity, h the piezometric head and z the geodetic altitude:

$$\frac{S_0}{\rho g} \frac{\partial p}{\partial t} - \nabla \cdot \left(\frac{1}{\eta} \underline{\underline{K}}_0 \cdot \nabla (p + \rho g z) \right) - q = 0$$

where S_0 represents the specific storage coefficient, t the time, η the dynamic fluid viscosity, $\underline{\underline{K}}_0$ the permeability tensor and q external sources and sinks.

As the velocity field is known from the above equation, the advective–dispersive transport of an ideal tracer can be described as follows:

$$\frac{\partial c}{\partial t} + \nabla \cdot (\underline{v}_a c) - \nabla \cdot (\underline{\underline{D}} \nabla c) = 0$$

c stands for the tracer concentration, \underline{v}_a for the seepage velocity and $\underline{\underline{D}}$ for the effective diffusion tensor defined by SCHEIDEGGER (1961)[185]. From the mathematical point of view, the transport equation is of mixed parabolic–hyperbolic character. Dominating dispersion induces a stable parabolic behaviour while strong advection leads to the hyperbolic form which easily excites oscillations.

Discretisation Techniques

The numerical discretisation techniques discussed with respect to their applicability to the flow and transport simulation in arbitrarily fractured porous systems belong to the family of Eulerian methods. Lagrangian and Eulerian–Lagrangian approaches are not well-suited for the approximation of the parabolic flow equation. Their application to transport problems in fracture–matrix systems causes problems as well. While the MOC (*Method of Characteristics*) schemes may not provide mass conservation on unstructured grids, the ELLAM (*Eulerian–Lagrangian Localized Adjoint Method*) produces large systems of equations and is computationally expensive to solve. Particle methods cannot be used for lower-dimensional fracture discretisations as the streamlines entering or leaving the fracture are ambiguous. They can be used with equidimensional formulations but, due to the complexity of a fractured system, this will be computationally costly as well. In this thesis, finite volume and finite element techniques are considered.

For flow discretisation in fractured porous systems, a box scheme and a mixed–hybrid finite element approach are chosen. The mixed–hybrid finite elements provide velocities whose components normal to the element edges are continuous. Thus, they fulfil the requirements for an accurate velocity distribution and for local flux conservation at the fracture–matrix interface when applied to an equidimensional formulation. Additionally, and in contrast to cell centered finite volumes, they can be applied to arbitrarily unstructured grids without problems and are therefore well–suited for application to fractured systems. Note that they are not applicable to lower–dimensional formulations. In this case, a box scheme is used, approximating the pressure continuously but not the normal component of the velocity across the element edge. The box scheme is also employed for the equidimensional approach to verify whether the mixed–hybrid approach provides results which are so much better than those of the box scheme that the increased number of degrees of freedom is justified.

Numerical methods applied to transport problems in fractured porous systems have to cope with transport properties changing from advection to diffusion and to describe all conditions correctly. An additional challenge is the – especially for equidimensional discretisations – highly unstructured grids which make the application of a number of promising numerical techniques difficult or even impossible. Hence, the requirements made of the transport calculation listed in fig. 1 have been weighted. Primarily, a numerical method has to be monotone to ensure physically correct results. Secondly, the numerical method should show as little numerical dispersion as possible. The approximation of a concentration front can of course always be improved by using e.g. h–adaptive approaches, ideally eliminating oscillations (e.g. BARLAG (1997)[9], OCHS, HINKELMANN, NEUNHÄUSERER, SÜSS, HELMIG, GEBAUER & KORNHUBER (2002)[166]). However, to guarantee monotone or monotonicity–preserving solutions, the discretisation technique itself should imply this property.

As far as finite volume methods are concerned, a box scheme or a flux–corrected transport approach are possible choices for transport modelling on unstructured grids. Slope–limiter techniques with TVD (*total variation diminishing*) properties are unfavourable for unstructured grids and the application of WENO (*weighted essentially non–oscillatory*) schemes requires a computational effort which is out of proportion to the improvement of the obtained solution (FARTHING & MILLER (2001)[60]). As for approaches from the family of finite element methods, the standard Galerkin as well as the Taylor–Galerkin method cannot be employed for advection–dominated transport problems as they both introduce strong oscillations. Depending on the numerical formulation and the definition of the upwinding parameter α , the inconsistent Petrov–Galerkin scheme is free of oscillations but leads to strong numerical dispersion. The SUPG (*streamline–upwind Petrov–Galerkin*) approach provides results with small numerical oscillations and dispersion but can still produce unphysical results like negative concentration values. BARLAG (1997)[9] combined the SUPG approach with h–adaptive methods for transport calculation, PAPASTAVROU (1998)[170] used an expensive shock–capturing modification to avoid the numerical oscillations introduced by the SUPG–method. Mixed finite element schemes are usually employed to discretise the dispersive part of the transport equation, while the advective part is approximated with a more appropriate scheme. SIEGEL, MOSÉ, ACKERER & JAFFRE (1997)[193] combined mixed finite elements with a DG (discontinuous Galerkin) approach to realise a monotone scheme

for transport calculation. DG methods can also be used to discretise the advection–dispersion transport equation but, as they are TVBM (*total variation bounded in the means*), they may still produce some smaller oscillations near advective zones.

To recapitulate: the box scheme, the flux–corrected transport approach and the combined mixed–hybrid/DG approach of SIEGEL, MOSÉ, ACKERER & JAFFRE (1997)[193] are monotone or monotonicity–preserving when applied to transport problems on unstructured grids. DG methods for the advection–dispersion equation may be an alternative. Note that the combined mixed–hybrid/DG approach can only be employed for equidimensional formulations because of the mixed finite element part. With respect to the computational efficiency of the schemes and to the large number of time steps necessary for transient transport calculations, the box scheme is chosen for transport approximation in the context of this thesis. For time discretisation, an implicit Euler scheme is used. To reduce the numerical dispersion introduced by this choice, an upwinding strategy which will be called *upwinding with streamline orientation* has been adapted.

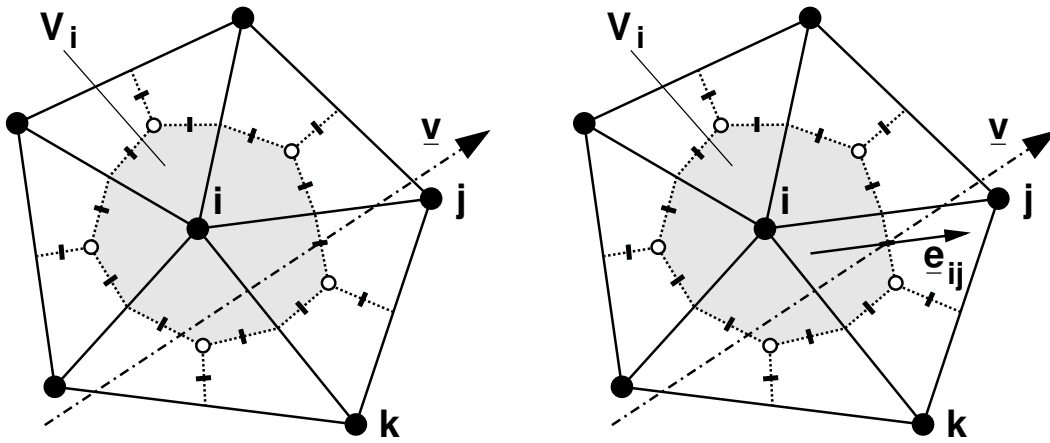


Figure 3: Patch at node i with box V_i . Left: fully upwinding. Right: projection of α_0 , being defined in direction of \underline{v}_{ij} , onto e_{ij} .

The box scheme used here is based on a node–centered finite–volume discretisation. Each element is divided into subcontrol volumes, all subcontrol volumes belonging to the same node form a box. The fluxes perpendicular to the boundaries of the box are determined at the integration points in the middle of the subcontrol volume faces dividing two subcontrol volumes (fig. 3). In the context of a Galerkin–finite–element derivation based on weighted residuals

$$\int_{\Omega} \underline{W} \cdot \epsilon \, dV = 0, \quad \text{with } \epsilon = \mathcal{D}(\tilde{c}) \neq 0 \quad \text{and} \quad \tilde{c} = \underline{N} \cdot \hat{c}.$$

This corresponds to a formulation with the test function

$$\underline{W}(\underline{x}) = \begin{cases} 1 & \text{if } \underline{x} \in V_i \\ 0 & \text{if } \underline{x} \notin V_i \end{cases}.$$

The approximation $\tilde{c} = \underline{N} \cdot \hat{c}$ is determined for the dispersion term by means of linear shape functions. For the advection, term an upstream weighting is carried out:

$$c = (1 - \alpha_{ij})c_{ij} + \alpha_{ij}c_{up}$$

$$c_{up} = \begin{cases} c_i & \text{for } \underline{v}_{ij} > 0 \\ c_j & \text{for } \underline{v}_{ij} < 0 \end{cases}$$

c_{ij} is the concentration at the integration point of the subcontrol volume face between nodes i and j , α_{ij} is the appertaining upwinding coefficient and \underline{v}_{ij} is the corresponding velocity vector.

For $\alpha_{ij} = 1$, this yields a box scheme with fully upwinding (fig. 3, left) which is of first-order accuracy (HELMIG (1997)[85]). Fully upwinding along the element edges introduces numerical dispersion into the system which stabilises the solution. As the stabilising dispersion is only needed along the streamlines, the crosswind dispersion has to be minimized. Therefore, the upwinding coefficient α_0 along the streamline is projected onto the local flux parallel to the corresponding edge across the subcontrol volume face of the corresponding nodes (fig. 3, right):

$$\alpha_{ij} = \alpha_0 \frac{\underline{v}_{ij}}{|\underline{v}_{ij}|} \underline{e}_{ij}$$

To optimise the amount of artificial diffusion along the streamline, the determination of α_0 is subjected to the local governing physical processes. An overestimation of α_0 leads to a smearing of the concentration front while an underestimation results in oscillations. The derivation of α_0 is not straightforward for multidimensional problems. The approach outlined here is based on a relationship defined by NOORISHAD, TSANG, PERROCHET & MUSY (1992)[164] and depends on the Courant and Peclet number:

$$\alpha_0 = \begin{cases} 0 & \text{for } Cr \cdot Pe \leq 2 \\ Cr - 2/Pe & \text{for } Cr \cdot Pe > 2 \end{cases}$$

Both Courant and Peclet number are computed for the n -dimensional space using velocity and dispersion transformed to local coordinates (CIRPKA (1996)[39]). NOORISHAD, TSANG, PERROCHET & MUSY (1992)[164] use a Crank–Nicholson–Galerkin method. On structured grids, they reach an order of accuracy of two in space and time in areas of dominating dispersion and an order of two in time and of one in space elsewhere. The scheme implemented here is implicit in time. It reaches an order of accuracy of two in time and of one in space for dominating dispersion and an order of one in space and time elsewhere. On unstructured grids, the order of accuracy is usually less than on structured grids.

Near fracture crossings, upwinding with streamline orientation may lead to oscillations in the fracture containing a lower concentration than the fracture crossing. Hence, in fractures a fully upwinding scheme has usually been used, independent of the local governing physical process. Numerical experiments have shown that this leads to a monotone solution in the fractures and to no considerable additional amount of numerical dispersion.

Modelling Set-Up

The influence of the equidimensional as well as of the lower-dimensional approach and of the applied numerical discretisation methods and their applicability to fracture–matrix systems are discussed on the basis of a number of model problems of increasing geometric complexity. To realise these example problems, a flexible modelling set-up has been compiled from several software components. The modelling set-up allows the approximation of flow and transport

processes with the chosen numerical methods for lower-dimensional and equidimensional discretisations of arbitrarily fractured systems. For the generation of fracture networks, the fracture generator *FRAC3D* (SILBERHORN–HEMMINGER (2002)[194]) is employed. *FRAC3D* creates lower-dimensional fracture networks in 2D and 3D by using a deterministic or alternatively a stochastic approach. Mesh generation for the lower-dimensional fractured domains has been carried out with the mesh generator *ART* (FUCHS (1999)[65]). *ART* is based on an optimised Delaunay triangulation and produces triangular meshes of high geometric and combinatorial quality for arbitrarily fractured domains. To obtain an equidimensional description of the domain, the module *FRACMESH* has been implemented, this discretises the fractures with quadrilateral elements. Flow and transport simulation has been realised with the software system *MUFTE-UG*. *UG* is a software toolbox providing techniques for the numerical solution of partial differential equations (BASTIAN, BIRKEN, JOHANNSEN, LANG, ECKSTEIN, NEUSS, RENTZ – REICHERT & WIENERS (1997)[11]). *MUFTE* contains numerous discretisation methods and applications concerning single- and multiphase processes (HELMIG, BASTIAN, CLASS, EWING, HINKELMANN, HUBER, JAKOBS & SHETA (1998)[86], BREITING, HINKELMANN & HELMIG (2000)[32]). The modularity of the software components allows the extension of the modelling set-up, for example with additional discretisation or solution techniques.

Examples

The applicability and the properties both of the equidimensional compared to the lower-dimensional formulation and of the chosen numerical discretisation techniques with respect to these two formulations are discussed on the basis of several model problems of increasing geometric complexity. Two of them are shown here as examples. Parameters, boundary and initial conditions are listed in tab. 1.

| | | |
|---------------------|--|---|
| flow | | |
| parameters | $\eta = 0.0013[\text{kg}/(\text{ms})]$ | $\rho = 1000[\text{kg}/\text{m}^3]$ |
| matrix | $k_{0xx} = k_{0yy} = 8.3333 \cdot 10^{-11}[\text{m}^2]$ | |
| fracture 1d | $k_{0xx} = 8.3333 \cdot 10^{-8}[\text{m}^2]$ | |
| fracture 2d | $k_{0xx} = k_{0yy} = 8.3333 \cdot 10^{-8}[\text{m}^2]$ | |
| bnd.cond. example 1 | $p(x, y = 0.0[\text{m}]) = 1.0 \cdot 10^5[\text{Pa}]$ | $p(x, y = 0.6[\text{m}]) = 0.999 \cdot 10^5[\text{Pa}]$ |
| bnd.cond. example 2 | $p(x = 0.3[\text{m}], y) = 1.0 \cdot 10^5[\text{Pa}]$ | $p(x = 0.6[\text{m}], y) = 0.999 \cdot 10^5[\text{Pa}]$ |
| transport | | |
| parameter | $D_m = 1.0 \cdot 10^{-9}[\text{m}^2/\text{s}]$ | |
| matrix | $n_e = 0.2[-]$ | $\alpha_l = \alpha_t = 0.01[\text{m}]$ |
| fracture 1d | $n_e = 0.3[-]$ | $\alpha_l = 0.001[\text{m}]$ |
| fracture 2d | $n_e = 0.3[-]$ | $\alpha_l = 0.001[\text{m}], \alpha_t = 0.0001[\text{m}]$ |
| init.cond. | $c(x, y, t = 0[\text{s}]) = 0.0[\text{kg}/\text{m}^3]$ | |
| bnd.cond. example 1 | $c(x, y = 0.0[\text{m}], t) = 1.0[\text{kg}/\text{m}^3]$ | $c(x, y = 0.6[\text{m}], t) = \text{free}$ |
| bnd.cond. example 2 | $c(x = 0.3[\text{m}], y, t) = 1.0[\text{kg}/\text{m}^3]$ | $c(x = 0.6[\text{m}], y, t) = \text{free}$ |

Table 1: Parameters, boundary (bnd.) and initial conditions (init.cond.) for example problems.

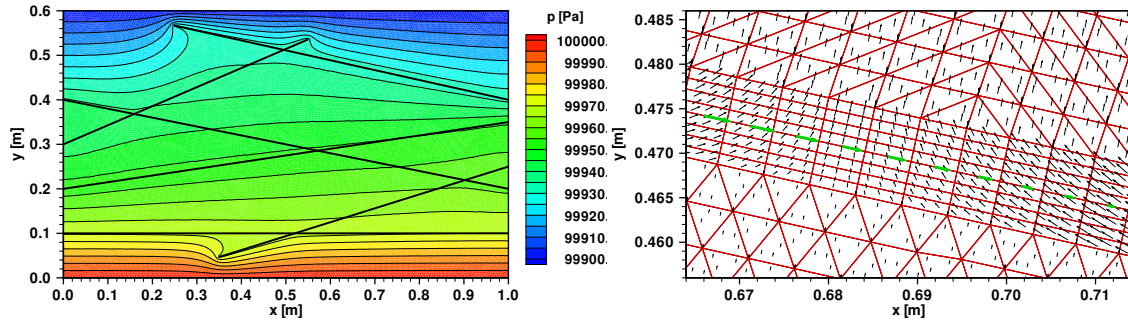


Figure 4: Left: fracture system with pressure distribution. Right: velocity in upper fracture on the right, black: 2d fracture, green: 1d fracture.

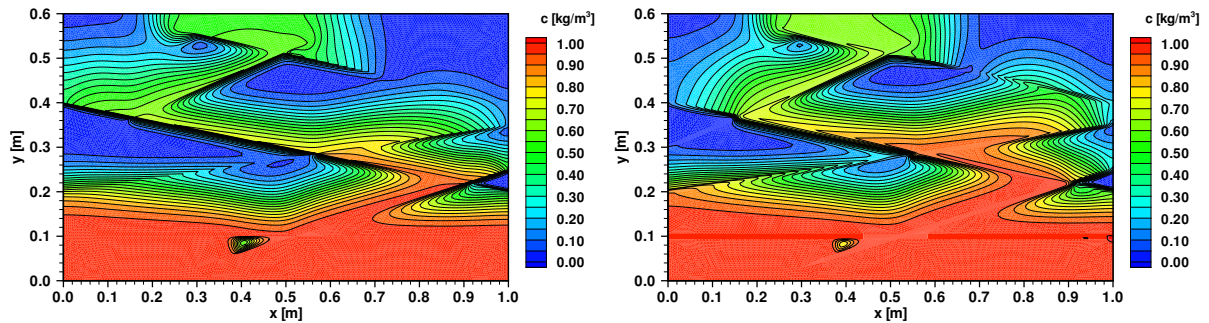


Figure 5: Tracer distribution after 3600[s]. Left: lower-dimensional. Right: equidimensional.

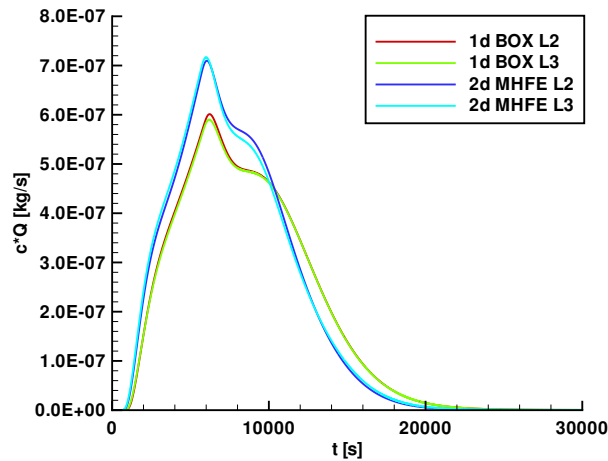


Figure 6: Breakthrough curves. For box scheme, lower-dimensional, (1d BOX) and mixed-hybrid FE, equidimensional, (2d MHFE) for flow on level 2 (L2) and level 3 (L3).

Example 1 is a domain with homogeneous matrix and six fractures (fig. 4, left). Fracture width is $b = 1.0 \cdot 10^{-2}[m]$. The left and right domain boundaries are no-flow boundaries for flow and transport; on the lower and upper domain boundaries, Dirichlet conditions have been imposed for flow and for transport the lower domain boundary has a Dirichlet condition and the upper domain boundary allows free concentration values. For transport calculations, tracer enters the domain across the lower boundary for 5000[s]. Care has been taken to ensure

that no fracture reaches a Dirichlet boundary to realise a “slow” system. Fig. 4, left, shows the pressure distribution in the domain. In fig. 4, right, the velocity distribution in the upper left fracture is presented, black arrows for the equidimensional solution and green arrows for the lower-dimensional solution in the fracture. Fluxes from two sides meet in the depicted area, and the advantage of the equidimensional formulation with its ability to reproduce gradients perpendicular to the fracture can clearly be seen. The differences in the velocity distribution have a visible impact on the concentration fronts as shown in fig. 5. Due to the fact that the system has no fast fracture pathways from inflow to outflow boundary, there is more time for fracture–matrix interaction to take place which, of course, is strongly influenced by the gradients perpendicular to the fracture. The resulting breakthrough curves in fig. 6 mirror the differences between lower- and equidimensional formulation.

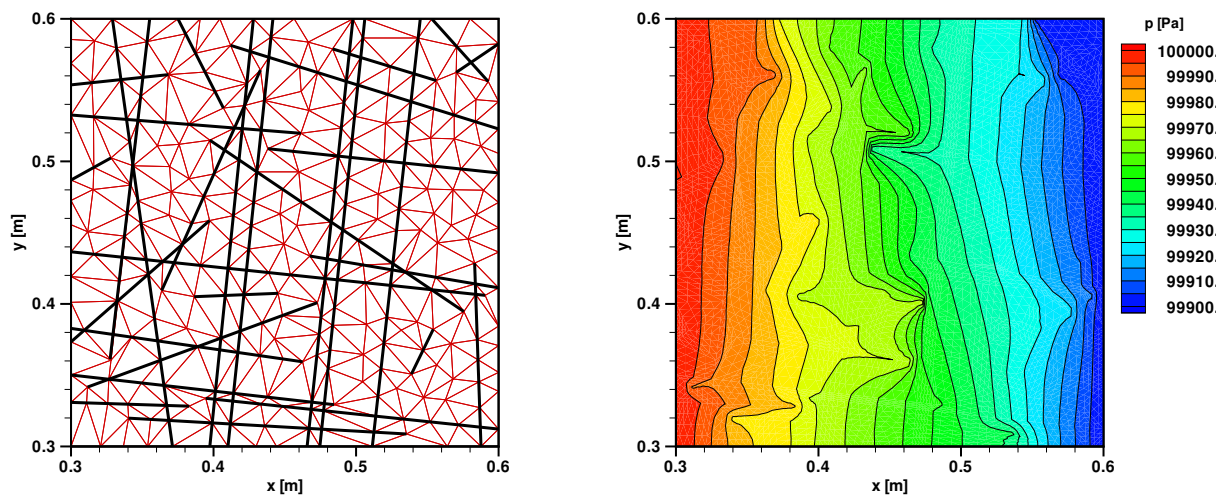


Figure 7: Example problem with stochastically generated fracture network. Left: geometry and coarse grid. Right: pressure distribution, level 2.

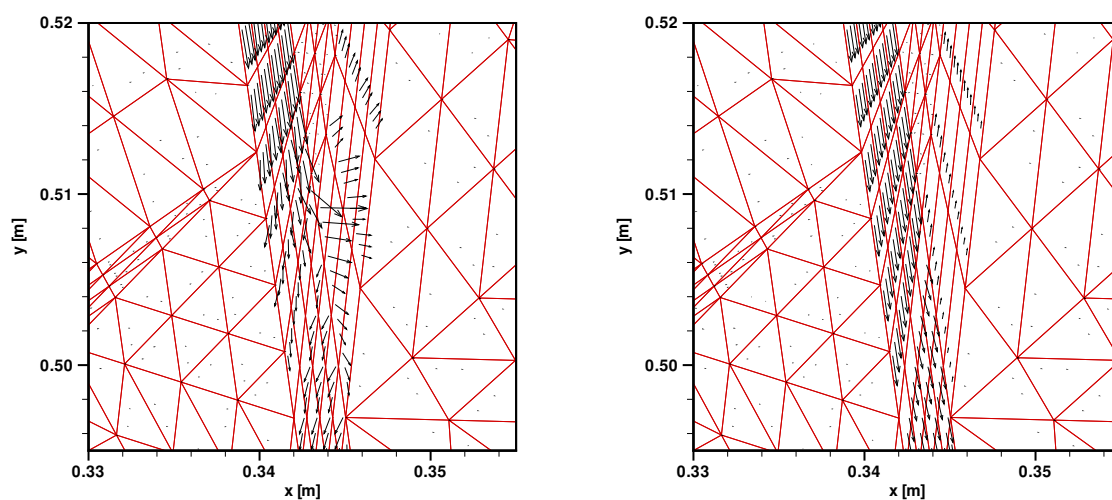


Figure 8: Velocity distribution in left fracture crossing at $y = 0.5$ [m], level 2. Left: box scheme. Right: mixed-hybrid FE.

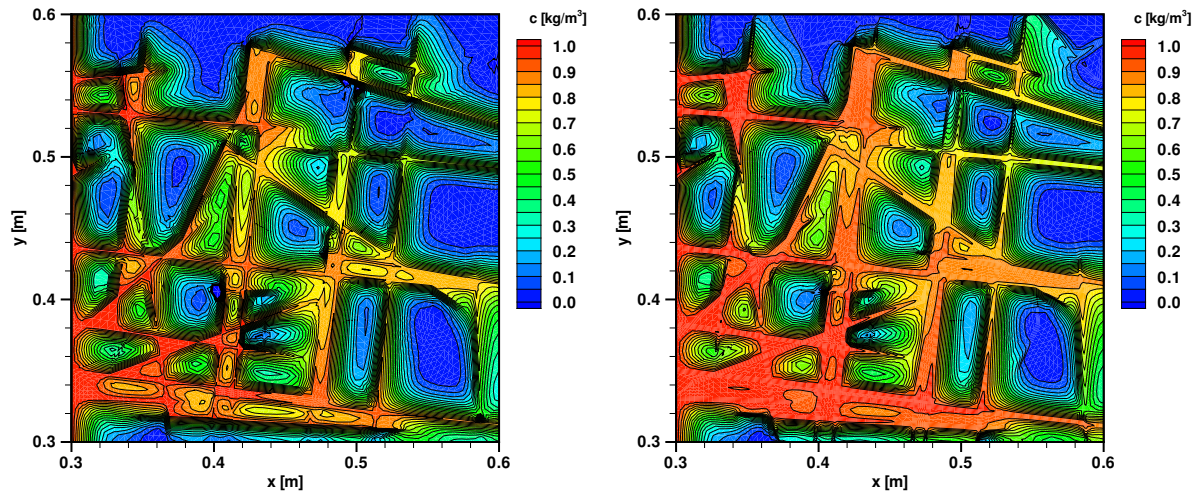


Figure 9: Tracer distribution after 60[s]. Left: lower-dimensional. Right: equidimensional.

Example 2 is a domain with homogeneous matrix and a stochastically generated fracture network (fig. 7, left). Fracture width is $b = 3.0 \cdot 10^{-3}[m]$. Lower and upper boundaries are no-flow boundaries for flow and transport. Flow is induced by Dirichlet boundary conditions from the left to the right. For transport calculations, tracer enters the domain across the left-hand side boundary for 600[s] while the concentration values at the right-hand side boundary are free. Fig. 7, right, shows the pressure distribution in the domain. In fig. 8, the velocity distribution in the left fracture crossing at $y = 0.5[m]$ is depicted, the solution of the box scheme on the left and the solution of the mixed-hybrid finite element method on the right, both for an equidimensional formulation. The superiority of the mixed-hybrid approach is obvious. Fig. 9 shows the results of the transport calculation after a simulation time of 60[s] for the lower-dimensional (left) and the equidimensional approach (right). Example problems with a single fracture crossing indicated that the explicit (equidimensional) description of the velocity distribution within the crossing leads to larger velocities in the crossing than the lower-dimensional approach. Hence, in the equidimensional case, tracer is advected faster through the fractures in the crossing areas and may additionally be distributed in a different way into the fractures leaving the crossings. This mechanism obviously leads to a larger amount of mass moving through the system, as can be seen when comparing the tracer distribution in fig. 9.

Conclusions

By means of model problems with a single fracture, fracture crossings and fracture networks, the applicability of the equidimensional approach to arbitrarily fractured porous systems is demonstrated. The limiting factor at the moment is the lack of an appropriate solution method for the equidimensional approach. The classical multigrid solver proved unable to solve problems with small fracture width depending on the complexity of the system while algebraic multigrids have not yet been implemented for the mixed-hybrid formulation into the software toolbox *UG*. This problem will disappear as soon as the two-level multigrid method based on hierarchical decomposition and developed explicitly to deal with fracture width $b \rightarrow 0$ (GEBAUER (2003)[67]) can be employed for this kind of model problem.

The comparison of the results yielded by lower- and equidimensional discretisation revealed a number of initially local differences. When an equidimensional approach is used, gradients perpendicular to the fracture can be described, which leads to an improved mass exchange between fracture and matrix (fig. 4 – fig. 6). Furthermore, the equidimensional formulation induces higher velocities within fracture crossings and probably a different mass distribution in the fractures leaving the crossing. Both effects lead to a slightly increased total flux through the domain compared with a lower-dimensional discretisation. Global differences in the resulting breakthrough curves of lower- and equidimensional formulation appear if the local effects accumulate in a system and if this system is “slow” enough to allow a relevant mass exchange between fracture and matrix (fig. 4 – fig. 6).

Considering the flow discretisation techniques, the box scheme yielded satisfactory results for the lower-dimensional case. For equidimensional formulations, the mixed-hybrid finite element method led to obviously better results in most cases. Hence, despite its larger number of degrees of freedom compared with the box scheme, the application of the mixed-hybrid method appears to be justified.

For transport calculations, the box scheme showed itself to be reliable and free of oscillations. The process-dependent upwinding with streamline orientation visibly reduced the numerical dispersion in the matrix zone. In the fractures, a fully upwinding is used independent of the local governing process as streamline orientation upwinding sometimes led to oscillations near fracture crossings within the fracture with the lower tracer concentration. Numerical experiments showed that the fully upwinding in the fractures does not add considerable amounts of numerical dispersion to the solution.

Outlook

After this thesis has ascertained the fundamental applicability of the equidimensional approach to arbitrarily fractured systems and its effects on the numerical results compared with the lower-dimensional approach, the equidimensional approach can be used in combination with a robust solver like the multigrid method based on hierarchical decomposition (GEBAUER (2003)[67]) to build a robust and efficient concept for modelling flow and transport processes in fractured porous media. So far, relatively large fracture widths ($0.3[cm] \leq b \leq 1.0[cm]$) have been chosen for the model problems. With an appropriate solver, investigations should be carried out to ascertain whether the equidimensional effects observed in this thesis can be found to be a considerable factor for smaller fracture widths. Nevertheless, an efficient and robust solver is also needed for the larger fracture widths analysed here. In this context, the applicability of algebraic multigrids and hierarchical decomposition has to be analysed with respect to fracture width and complexity of the system.

For transport calculations, a further analysis of numerical discretisation techniques concerning their applicability to lower- and equidimensional formulated fractured systems is necessary. Possible alternatives are a flux-corrected transport approach, the combined mixed-hybrid/DG-scheme of SIEGEL, MOSÉ, ACKERER & JAFFRE (1997)[193] or even a particle tracking algorithm. Note that the last two of the listed techniques require an equidimensionally

described fracture system. Regarding larger and more complex fracture systems, the application of h-adaptive techniques or anisotropic mesh refinement for equidimensional discretised fractures as well as the use of parallel computers for simulations runs have to be considered.

Literaturverzeichnis

- [1] H. Abelin, I. Neretnieks, S. Tunbrant und L. Moreno. Final report of the migration in a single fracture: Experimental results and evaluation. Tech. Rep. 85–03, SKB, Stockholm, Schweden, 1985.
- [2] R. Abgrall. On essentially non-oscillatory schemes on unstructured meshes: analysis and implementation. *Journal of Computational Physics*, 114:45 – 58, 1994.
- [3] J.A. Acuna und Y.C. Yortsos. Application of fractal geometry to the study of networks of fractures and their pressure transient. *Water Resources Research*, 31(3):527 – 540, 1995.
- [4] P.M. Adler, O. Huseby und J.-F. Thovert. A general analysis of transports in fracture networks. In M.H. Aliabadi, Hrsg., *Fracture of Rock*, Band 5 von *Advances in Fracture Mechanics*. WIT Press, 1999.
- [5] J. Andersson, A.M. Shapiro und J. Bear. A stochastic model of fractured rock continued by measured information. *Water Resources Research*, 20(1):79 – 88, 1984.
- [6] D.N. Arnold und F. Brezzi. Mixed and nonconforming finite element methods: Implementation, postprocessing and error estimates. *Mathematical Modelling and Numerical Analysis*, 19:7 – 32, 1985.
- [7] D.N. Arnold, F. Brezzi, B. Cockburn und L.D. Marini. Unified Analysis of Discontinuous Galerkin Methods for Elliptic Problems. *SIAM Journal on Numerical Analysis*, 39(5):1749 – 1779, 2002.
- [8] G.I. Barenblatt, Iu.P. Zheltov und I.N. Kochina. Basic concepts in the theory of seepage of homogeneous liquids in fissured rocks. *Journal of Applied Mathematics and Mechanics, Engl. Transl.*, 20:825 – 864, 1960.
- [9] C. Barlag. Adaptive Methoden zur Modellierung von Stofftransport im Kluffgestein. Bericht Nr. 52, Institut für Strömungsmechanik und Elektronisches Rechnen im Bauwesen, Universität Hannover, 1997.
- [10] F. Bassi und S. Rebay. A High-Order Accurate Discontinuous Finite Element Method for the Numerical Solution of the Compressible Navier-Stokes Equations. *Journal of Computational Physics*, 131(2):267 – 279, 1997.
- [11] P. Bastian, K. Birken, K. Johannsen, S. Lang, K. Eckstein, N. Neuss, H. Rentz Reichert und C. Wieners. UG – A Flexible Software Toolbox for Solving Partial Differential Equations. *Computing and Visualization in Science*, 1(1):27 – 40, 1997.
- [12] P. Bastian, Z. Chen, R. Ewing, R. Helmig, H. Jakobs und V. Reichenberger. Numerical Simulation of Multiphase Flow in Fractured Porous Media. In Chen, Z. and R. Ewing and Shi, Hrsg., *Lecture Notes in Physics*. Springer Verlag, Tokyo, Berlin, New York, 2000.

- [13] P. Bastian und R. Helmig. Efficient fully-coupled solution techniques for two-phase flow in porous media. Parallel multigrid solution and large scale computations. *Advances in Water Resources*, 23(3):199 – 216, 1999.
- [14] K.-J. Bathe. *Finite Elemente Methoden*. Springer Verlag, Berlin, 1986.
- [15] J. Bear. *Dynamics of Fluids in Porous Media*. Elsevier, New York, 1972.
- [16] D.A. Benson. *The fractional advection–dispersion equation: Development and application*. Dissertation, University of Nevada, Reno, 1998.
- [17] D.A. Benson, S.W. Wheatcraft und M. M. Meerschaert. Application of a fractional advection–dispersion equation. *Water Resources Research*, 36(6):1403 – 1412, 2000.
- [18] D.A. Benson, S.W. Wheatcraft und M. M. Meerschaert. The fractional-order governing equation of Lévy motion. *Water Resources Research*, 36(6):1413 – 1423, 2000.
- [19] B. Berkowitz und I. Balberg. Percolation theory and its application to groundwater hydrology. *Water Resources Research*, 29(4):775 – 794, 1993.
- [20] B. Berkowitz, J. Bear und C. Braester. Continuum Models for Contaminant Transport in Fractured Porous Formations. *Water Resources Research*, 24(8):1225 – 1236, 1988.
- [21] B. Berkowitz und H. Scher. On characterization of anomalous dispersion in porous and fractured media. *Water Resources Research*, 31(6):1461 – 1466, 1995.
- [22] B. Berkowitz und H. Scher. Theory of anomalous chemical transport in random fracture network. *Physical Review E*, 57(5):5858 – 5869, 1998.
- [23] B. Berkowitz, H. Scher und S.E. Silliman. Anomalous transport in laboratory-scale, heterogeneous porous media. *Water Resources Research*, 36(1):149 – 158, 2000.
- [24] V. Bettzieche. *Systematische Erstellung von Modellen bei der Simulation von Grundwasserströmungen nach der Methode der Finiten Elemente*. Dissertation, Ruhr – Universität Bochum, 1991.
- [25] K. Birken. *Ein Modell zur effizienten Parallelisierung von Algorithmen auf komplexen, dynamischen Datenstrukturen*. Dissertation, Universität Stuttgart, 1998.
- [26] J. Birkhölzer. Numerische Untersuchungen zur Mehrkontinuumsmodellierung von Stofftransportvorgängen in Klufftgrundwasserleitern. Mitteilungen 93, Lehrstuhl und Institut für Wasserbau und Wasserwirtschaft, RWTH Aachen, 1994.
- [27] J.P. Boris und D.L. Book. Flux corrected transport: I. SHASTA, a fluid transport algorithm that works. *Journal of Computational Physics*, 11:38 – 69, 1973.
- [28] O. Bour und P. Davy. Connectivity of random fault networks following a power law fault length distribution. *Water Resources Research*, 33(7):1567 – 1583, 1997.
- [29] P.J. Bourke. Channeling of flow through fractures in rock. In *Proceedings of GEOVAL-87 International Symposium*, Stockholm, Schweden, 1987. Swedish Nuclear Power Inspectorate.
- [30] D. Braess. Towards Algebraic Multigrid for Elliptic Problems of Second Order. *Computing*, 55:379 – 393, 1995.
- [31] D. Braess. *Finite Elemente*. Springer, 1997.

- [32] T. Breiting, R. Hinkelmann und R. Helmig. Modeling of Hydrosystems with MUFTE-UG: Multiphase Flow and Transport Processes in the Subsurface. In *Forth International Conference on Hydroinformatics*, Iowa, USA, 2000.
- [33] F. Brezzi und M. Fortin. *Mixed and Hybrid Finite Element Methods*. Springer Verlag, New York, 1991.
- [34] M.C. Cacas, E. Ledoux, G. de Marsily, A. Barbreau, P. Calmels, B. Gaillard und R. Margritta. Modeling Fracture Flow With a Stochastic Discrete Fracture Network: Calibration and Validation 2. The Transport Model. *Water Resources Research*, 26(3):491 – 500, 1990.
- [35] M.C. Cacas, E. Ledoux, G. de Marsily, B. Tillie, A. Barbreau, E. Durand, B. Feuga und P. Peaudecerf. Modeling Fracture Flow With a Stochastic Discrete Fracture Network: Calibration and Validation 1. The Flow Model. *Water Resources Research*, 26(3):479 – 489, 1990.
- [36] M.E. Cantekin und J.J. Westerink. Non-diffusive $n+2$ degree petrov-galerkin methods for two-dimensional transient transport computations. *International Journal for Numerical Methods in Engineering*, 30:397 – 418, 1990.
- [37] G. Chavent und J.E. Roberts. A unified physical presentation of mixed, mixed-hybrid finite elements and standard finite difference approximations for the determination of velocities in waterflow problems. *Advances in Water Resources*, 14(6):329 – 348, 1991.
- [38] I. Christie, D.F. Griffiths, A.R. Mitchell und O.C. Zienkiewicz. Finite element methods for second order differential equations with significant first derivatives. *International Journal for Numerical Methods in Engineering*, 10:1389 – 1396, 1976.
- [39] O. Cirpka. CONTRACT: A Numerical Tool for Contaminant Transport and Chemical Transformations. Mitteilungen Heft 87, Universität Stuttgart, Institut für Wasserbau, Eigenverlag, 1996.
- [40] O. Cirpka. *Numerische Methoden zur Simulation des reaktiven Mehrkomponententransports im Grundwasser*. Mitteilungen Heft 95, Universität Stuttgart, Institut für Wasserbau, Eigenverlag, 1997.
- [41] O. Cirpka und R. Helmig. Comparison of Approaches for the Coupling of Chemistry to Transport in Groundwater Systems. In *Notes on Numerical Fluid Mechanics*. Vieweg Verlag, Braunschweig, 1996.
- [42] H. Class. *Numerische Modellierung nicht-isothermer Mehrphasenprozesse in NAPL-kontaminierten porösen Medien*. Mitteilungen Heft 105, Universität Stuttgart, Institut für Wasserbau, Eigenverlag, 2001.
- [43] B. Cockburn, G.E. Karniadakis und C.-W. Shu. The development of discontinuous Galerkin methods. In B. Cockburn, G.E. Karniadakis und C.-W. Shu, Hrsg., *Discontinuous Galerkin Methods. Theory, Computation and Applications*, Band 11 von *Lecture Notes in Computational Science and Engineering*, S. 3 – 50. Springer-Verlag, 2000.
- [44] B. Cockburn und C.-W. Shu. TVB Runge-Kutta local projection discontinuous Galerkin finite element method for scalar conservation laws II: general framework. *Mathematics of Computation*, 52:411 – 435, 1989.

- [45] B. Cockburn und C.-W. Shu. The Runge–Kutta Discontinuous Galerkin Method for Conservation Laws V: Multidimensional Systems. ICASE Report No. 97–43, Institute for Computer Applications in Science and Engineering, NASA Langley Research Center, Hampton, VA, 1997.
- [46] B. Cockburn und C.-W. Shu. The Local Discontinuous Galerkin Method for Time-Dependent Convection–Diffusion Systems. *SIAM Journal on Numerical Analysis*, 35(6):2440 – 2463, 1998.
- [47] C. Cordes und W. Kinzelbach. Continuous Groundwater Velocity Fields and Path Lines in Linear, Bilinear, and Trilinear Finite Elements. *Water Resources Research*, 28(11):2903 – 2911, 1992.
- [48] J. Croisé, H. Sheta und R. Helmig. Flow and transport processes in fractured porous media. In *In-Situ Subsurface Remediation Strategies*, Stuttgart, 1995. VEGAS–Symposium.
- [49] J. Croisé, H. Sheta und R. Helmig. Numerical Simulation of NAPL–infiltration and redistribution processes in unsaturated heterogeneous porous media. In Kovar, K. and J. Krásný, Hrsg., *Groundwater Quality: Remediation and Protection (GQ '95)*, 225. IAHS Publication, 1995.
- [50] J.H. Cushman und T.R. Ginn. Nonlocal dispersion in media with continuously evolving scales of heterogeneity. *Transport in Porous Media*, 13(1):123 – 138, 1993.
- [51] G. Dagan. Solute transport in heterogeneous porous formations. *Journal of Fluid Mechanics*, 145:151 – 177, 1984.
- [52] A. Datta-Gupta und M.J. King. A semianalytic approach to tracer flow modeling in heterogeneous permeable media. *Advances in Water Resources*, 18:9 – 24, 1995.
- [53] W.S. Dershowitz und C. Fidelibus. Derivation of equivalent pipe network analogues for three–dimensional discrete fracture networks by the boundary element method. *Water Resources Research*, 35(9):2685 – 2691, 1999.
- [54] P. Deuflhard und F. Bornemann. *Numerische Mathematik II – Gewöhnliche Differentialgleichungen*. Walter de Gruyter, Berlin – New York, 2. Auflage, 2002.
- [55] H.-J. G. Diersch. About the difference between the convective form and the divergence form of the transport equation. White Papers – Vol. I, Chapter 6, WASY Ltd., 2002.
- [56] J. Donea. A Taylor–galerkin method for convective transport problems. *International Journal for Numerical Methods in Engineering*, 20:101 – 119, 1984.
- [57] J. Donea, L. Quartapelle und V. Selmin. An Analysis of Time Discretization in the Finite Element Solution of Hyperbolic Problems. *Journal of Computational Physics*, 70:463 – 499, 1987.
- [58] L.J. Durlofsky. Accuracy of mixed and control volume finite element approximations to Darcy velocity and related quantities. *Water Resources Research*, 30(4):965 – 973, 1994.
- [59] M. Emmert. *Numerische Modellierung nichtisothermer Gas–Wasser Systeme in porösen Medien*. Mitteilungen Heft 92, Universität Stuttgart, Institut für Wasserbau, Eigenverlag, 1996.
- [60] M.W. Farthing und C.T. Miller. A comparison of high–resolution, finite–volume, adaptive–stencil schemes for simulating advective–dispersive transport. *Advances in Water Resources*, 24:29 – 48, 2001.

- [61] J. Feder. *Fractals*. Plenum Press, New York, 1988.
- [62] B. Fraeijs de Veubeke. Displacement and equilibrium models in the finite element method. In O.C. Zienkiewicz und G.S. Holister, Hrsg., *Stress Analysis*, S. 145 – 197. John Wiley & Sons Ltd, 1965.
- [63] O. Friedrich. *Gewichtete wesentlich nicht-oszillierende Verfahren auf unstrukturierten Gittern*. Dissertation, Universität Hamburg, 1999.
- [64] A. Fuchs. Almost Regular Delaunay–Triangulations. *International Journal for Numerical Methods in Engineering*, 40:4595–4610, 1997.
- [65] A. Fuchs. *Optimierte Delaunay – Triangulierungen zur Vernetzung getrimmter NURBS – Körper*. Dissertation, Universität Stuttgart, Mathematisches Institut A, Shaker – Verlag, 1999.
- [66] S. Gärtner. Zur diskreten Approximation kontinuumsmechanischer Bilanzgleichungen. Bericht Nr. 24, Universität Hannover, Institut für Strömungsmechanik und Elektronisches Rechnen im Bauwesen, 1987.
- [67] S. Gebauer. *Robuste adaptive Multilevelmethoden zur numerischen Simulation gesättigter Grundwasserströmung durch geklüftet poröse Medien*. Dissertation, Freie Universität Berlin, Fachbereich Mathematik und Informatik, Institut für Mathematik II, 2003. in Vorbereitung.
- [68] S. Gebauer, L. Neunhäuserer, R. Kornhuber, S. Ochs, R. Hinkelmann und R. Helmig. Equidimensional modelling of flow and transport processes in fractured porous systems I. In S.M. Hassanizadeh, R.J. Schotting, W.G. Gray und G.F. Pinder, Hrsg., *XIV International Conference on Computational Methods in Water Resources*, Band 1 von *Developments in Water Science*, S. 335 – 342, Delft, The Netherlands, June 2002. Elsevier.
- [69] L.W. Gelhar und C.L. Axness. Three–dimensional stochastic analysis of macrodispersion in aquifers. *Water Resources Research*, 19(1):161 – 180, 1983.
- [70] L.W. Gelhar, C. Welty und K.R. Rehfeldt. A Critical Review of Data on Field–Scale Dispersion in Aquifers. *Water Resources Research*, 28(7):1955 – 1974, 1992.
- [71] A. Genty, C. Grenier, E. Mouche und E. Tevissen. Influence of matrix diffusion on solute transport in a three dimensional fracture network. In V.N. Burganos, G.P. Karatzas, A.C. Payatakes, C.A. Brebbia, W.G. Gray und G. Pinder, Hrsg., *XII International Conference on Computational Methods in Water Resources*, Band 2, Crete, Greece, June 1998.
- [72] H.H. Gerke und M.T. van Genuchten. Evaluation of a First–Order Transfer Term for Variably Saturated Dual–Porosity Flow Models. *Water Resources Research*, 29(4):1225 – 1238, 1993.
- [73] R.W. Gillham, E.A. Sudicky, J.A. Cherry und E.O. Frind. An Advection–Diffusion Concept for Solute Transport in Heterogeneous Unconsolidated Geological Deposits. *Water Resources Research*, 20(3):369 – 378, 1984.
- [74] J. Glimm, W.B. Lindquist, F. Pereira und Q. Zhang. A theory of macrodispersion for the scale–up problem. *Transport in Porous Media*, 13(1):97 – 122, 1993.
- [75] P. Grindrod und M.D. Impey. Channeling and Fickian dispersion in fractal simulated porous media. *Water Resources Research*, 29(12):4077 – 4089, 1993.

- [76] G.E. Grisak und J.F. Pickens. Solute Transport Through Fractured Media, 1. The Effect of Matrix Diffusion. *Water Resources Research*, 16(4):719 – 730, 1980.
- [77] G.E. Grisak und J.F. Pickens. An analytical solution for solute transport through fractured media with matrix diffusion. *Journal of Hydrology*, 52:47 – 57, 1981.
- [78] W. Hackbusch. *Multi-Grid Methods and Applications*. Springer – Verlag, Heidelberg, 1985.
- [79] B. Harrison, E.A. Sudicky und J.A. Cherry. Numerical Analysis of Solute Migration Through Fractured Clayey Deposits Into Underlying Aquifers. *Water Resources Research*, 28(2):515 – 526, 1992.
- [80] A. Harten. High resolution schemes for hyperbolic conservation laws. *Journal of Computational Physics*, 49:357 – 393, 1983.
- [81] A. Harten. On a class of high resolution total variation stable finite difference schemes. *SIAM Journal on Numerical Analysis*, 21:1 – 23, 1984.
- [82] A. Harten, B. Engquist, S. Osher und S. Chakravarthy. Uniformly high order essentially non-oscillatory schemes,III. *Journal of Computational Physics*, 71:231 – 303, 1987.
- [83] S.M. Hassanizadeh. On the Transient Non-Fickian Dispersion Theory. *Transport in Porous Media*, 23:107 – 124, 1996.
- [84] R. Helmig. Theorie und Numerik der Mehrphasenströmungen in geklüftet – porösen Medien. Bericht Nr. 34, Universität Hannover, Institut für Strömungsmechanik und Elektronisches Rechnen im Bauwesen, 1993.
- [85] R. Helmig. *Multiphase Flow and Transport Processes in the Subsurface*. Springer – Verlag, Heidelberg, 1997.
- [86] R. Helmig, P. Bastian, H. Class, J. Ewing, R. Hinkelmann, R. Huber, H. Jakobs und H. She-ta. Architecture of the modular program system MUFTE-UG for simulating multiphase flow and transport processes in heterogeneous porous media. In H. Thiergärtner, Hrsg., *Mathematische Grundwassermodellierung – unkonventionelle Lösungen und Randbedingungen*, Band 2 von *Mathematische Geologie*. CPress Verlag, Dresden, 1998.
- [87] R. Helmig, P. Bastian, H. Jakobs und V. Reichenberger. Multiphase Multicomponent Processes in Fractured Porous Media. Abschlussbericht des BMBF-Projektes "Weiterentwicklung eines numerischen Modells (MUFTE-UG) zur Simulation von Gas-Wasser-Prozessen in Kluftaquifersystemen", Universität Stuttgart, Institut für Wasserbau, Stuttgart, 2001. to appear.
- [88] A. Hemminger, L. Neunhäuserer, A. Bardossy und R. Helmig. Identification of equivalent parameters on different scales in fractured-porous media . In K.P. Holz, W. Bechteler, S.S.Y. Wang und M. Kawahara, Hrsg., *Advances in Hydro-Science and -Engineering*, Band 3, S. 205. 3rd International Conference on Hydroscience and Engineering, Center for Computational Hydroscience and Engineering, The University of Mississippi, 1998.
- [89] A. Hemminger, L. Neunhäuserer und R. Helmig. Festgesteins-Aquiferanalog: Experimente und Modellierung – Einsatz von diskreten Modellansätzen –. In O. Kolditz, W. Zielke, P. Wriggers, H.-J. Dürbaum und M. Wallner, Hrsg., 3. *Workshop Kluftaquifere "Gekoppelte Prozesse in Geosystemen"*. Bericht 60/2000, Universität Hannover, 2000.

- [90] B. Hendrickson und R. Leland. The CHACO user's guide 1.0. Technical Report SAND93-2339, Sandia National Laboratories, 1993.
- [91] K. Hestir und J.C.S. Long. Analytical expressions for the permeability of random two-dimensional Poisson fracture networks based on regular lattice percolation and equivalent media theories. *Journal of Geophysical Research*, 95:21565 – 21581, 1990.
- [92] T. Himmelsbach. Untersuchungen zum Wasser – und Stofftransportverhalten von Störungszonen im Grundgebirge (Albgranit, Südschwarzwald). Schriftenreihe Angewandte Geologie Karlsruhe, 1993.
- [93] R. Hinkelmann, H. Sheta, H. Class und R. Helmig. A comparison of different model concepts for salt water intrusion processes. In F. Stauffer, W. Kinzelbach, K. Kovar und E. Hoehn, Hrsg., *Calibration and Reliability in Groundwater Modelling: Coping with Uncertainty (ModelCARE '99)*, 265, Wallingford, Oxfordshire, UK, 2000. IAHS Publication.
- [94] R. Hinkelmann, H. Sheta, R. Helmig, E.H. Sauter und M. Schlüter. Numerical Simulation of Water–Gas Flow and Transport Processes in Coastal Aquifers. In K. Sato und Y. Iwasa, Hrsg., *Groundwater Updates*, Tokyo, Berlin, New York, 2000. International Symposium 2000 on Groundwater IAHR: New Science and Technology for Sustainable Groundwater Environment, Sonic City, Japan, Springer Verlag.
- [95] C. Hirsch. *Fundamentals of numerical discretization*, Band 1 von *Numerical computation of internal and external flows*. Wiley & Sons, New York, 1988.
- [96] C. Hirsch. *Computational methods for inviscid and viscous flows*, Band 2 von *Numerical computation of internal and external flows*. Wiley & Sons, New York, 1990.
- [97] H. Hoteit, J. Erhel, R. Mosé, B. Philippe und P. Ackerer. Numerical Reliability and CPU Time for the Mixed Methods applied to Flow Problems in Porous Media. Rapport de recherche No. 4228, Institut National de Recherche en Informatique et en Automatique, 2001.
- [98] H. Hötzl, R. Bäuml, Ch. Thüringer und K. Witthüser. Festgestein–Aquiferanalog: Experimente und Modellierung, Teilprojekt 1: Feldexperimente zur Wasser– und Stoffausbreitung in Abhängigkeit von Kluft– und Gesteinsdurchlässigkeit . DFG–Projekt Nr. Ho502/9–2, Lehrstuhl für Angewandte Geologie , Universität Karlsruhe, 2000.
- [99] C. Hu und C.-W. Shu. Weighted Essentially Non–Oscillatory Schemes on Triangular Meshes. ICASE Report No. 98–32, Institute for Computer Applications in Science and Engineering, NASA Langley Research Center, Hampton, VA, 1998.
- [100] R. Huber. *Compositional Multiphase Flow and Transport in Heterogeneous Porous Media*. Mitteilungen Heft 102, Universität Stuttgart, Institut für Wasserbau, Eigenverlag, 2000.
- [101] R. Huber und R. Helmig. Investigation and simulation of three–phase–flow in porous media. Bericht 2/97, Technische Universität Braunschweig, Institut für ComputerAnwendungen, 1997.
- [102] T.J.R. Hughes und A. Brooks. *Finite Elements in Fluids*, Band 4, Kapitel 3 – A Theoretical Framework for Petrov – Galerkin Methods with Discontinuous Weighting Functions: Application to the Streamline – Upwind Procedure, S. 47 – 65. John Wiley & Sons Ltd, 1982.

- [103] J.L. Huitt. Fluid flow in simulated fractures. *J. Am. Inst. Chem. Eng.*, 2:259 – 264, 1956.
- [104] P.S. Huyakorn, B.H. Lester und C.R. Faust. Finite Element Techniques for Modeling Groundwater Flow in Fractured Aquifers. *Water Resources Research*, 19(4):1019 – 1035, 1983.
- [105] P.S. Huyakorn, B.H. Lester und J.W. Mercer. An Efficient Finite Element Technique for Modeling Transport in Fractured Porous Media 1. Single Species Transport. *Water Resources Research*, 19(3):841 – 854, 1983.
- [106] P.S. Huyakorn, B.H. Lester und J.W. Mercer. An Efficient Finite Element Technique for Modeling Transport in Fractured Porous Media 2. Nuclide Decay Chain Transport. *Water Resources Research*, 19(5):1286 – 1296, 1983.
- [107] M. Ibaraki und E.A. Sudicky. Colloid-facilitated contaminant transport in discretely fractured porous media 1. Numerical formulation and sensitivity analysis. *Water Resources Research*, 31(12):2945 – 2960, 1995.
- [108] M. Ibaraki und E.A. Sudicky. Colloid-facilitated contaminant transport in discretely fractured porous media 2. Fracture network examples. *Water Resources Research*, 31(12):2961 – 2969, 1995.
- [109] D. Jansen. Identifikation des Mehrkontinuum-Modells zur Simulation des Stofftransportes in multiporösen Festgesteinsaquiferen. Mitteilungen 118, Lehrstuhl und Institut für Wasserbau und Wasserwirtschaft, RWTH Aachen, 1999.
- [110] C. Johnson. *Numerical Solution of Partial Differential Equations by the Finite Element Method*. Cambridge University Press, Cambridge, 1992.
- [111] P.R. Jørgensen, L.D. McKay und N.H. Spliid. Evaluation of chloride and pesticide transport in a fractured clayey till using undisturbed columns and numerical modeling. *Water Resources Research*, 34(4):539 – 553, 1998.
- [112] K. Ho-Le. Finite element mesh generation methods: a review and classification. *Computer-Aided Design*, 20(1):27 – 38, 1988.
- [113] H. Kasper, O. Kolditz und W. Zielke. Entwicklung geometrischer Modelle zur Finite-Elemente-Analyse geogener Strömungs- und Transportprozesse in geklüfteten, geologischen Strukturen. Arbeitsbericht 7/96 – 3/97, DFG-Projekt Nr. Zi202/14-1, Institut für Strömungsmechanik und Elektronische Rechnen im Bauwesen, Universität Hannover, 1997.
- [114] C.A. Kennedy und W.C. Lennox. A control volume model of solute transport in a single fracture. *Water Resources Research*, 31(2):313 – 322, 1995.
- [115] W. Kinzelbach. *Numerische Methoden zur Modellierung des Transports von Schadstoffen im Grundwasser*, Band 21 von *gwf Wasser – Abwasser*. R. Oldenbourg Verlag, München, 1992.
- [116] H. Kobus, B. Barczewski und H.-P. Koschitzky, Hrsg. *Groundwater and Subsurface Remediation*. Environmental Engineering. Springer – Verlag, Berlin, 1996.
- [117] H. Kobus, G. Schäfer, K.-H. Spitz und M. Herr. *Wärme und Schadstofftransport im Grundwasser*, Band 1 von *Schadstoffe im Grundwasser*, Kapitel 2: Dispersive Transportprozesse und ihre Modellierung, S. 17 – 79. Deutsche Forschungsgemeinschaft, Weinheim, 1992.

- [118] O. Kolditz. *Strömung, Stoff- und Wärmetransport im Kluftgestein*. Gebr. Borntraeger, Berlin – Stuttgart, 1997.
- [119] O. Kolditz, H. Kasper und G. Kosakowski. Hydrogeologische Systemanalyse: Modellierung von Strömungs – und Transportprozessen. *Zentralblatt für Geologie und Paläontologie Teil I*, 9:863 – 880, 1997.
- [120] C.E. Koltermann und S.M. Gorelick. Heterogeneity in sedimentary deposits: A review of structure-imitating, process-imitating and descriptive approaches. *Water Resources Research*, 32(9):2617 – 2658, 1996.
- [121] J. Köngeter, V. Lagendijk, D. Jansen und T. Vogel. Festgestein–Aquiferanalog: Experimente und Modellierung, Teilprojekt 4: Einsatz von äquivalenten Modellansätzen . Arbeitsbericht DFG–Projekt Nr. Ko1573/2–2, Lehrstuhl und Institut für Wasserbau und Wasserwirtschaft, RWTH Aachen, 2000.
- [122] G. Kosakowski. Modellierung von Strömungs – und Transportprozessen in geklüfteten Medien: Vom natürlichen Kluftsystem zum numerischen Gitternetzwerk. Reihe 7: Strömungstechnik 304, Fortschrittberichte VDI, VDI Verlag, Düsseldorf, 1996.
- [123] N. Koudina, R. Gonzales Garcia, J.-F. Thovert und P.M. Adler. Permeability of three-dimensional fracture networks. *Physical Review E*, 57:4466 – 4479, 1998.
- [124] K. P. Kröhn. *Simulation von Transportvorgängen im klüftigen Gestein mit der Methode der Finiten Elemente*. Dissertation, Universität Hannover, Institut für Strömungsmechanik und Elektronisches Rechnen im Bauwesen, 1991.
- [125] V.R. Lagendijk und J. Köngeter. Festgesteins–Aquiferanalog: Experimente und Modellierung – Kontinua–Modelle –. In O. Kolditz, W. Zielke, P. Wriggers, H.-J. Dürbaum und M. Wallner, Hrsg., 3. *Workshop Kluftaquifere "Gekoppelte Prozesse in Geosystemen"*. Bericht 60/2000, Universität Hannover, 2000.
- [126] U. Lang. *Simulation regionaler Strömungs– und Transportvorgänge in Karstaquiferen mit Hilfe des Doppelkontinuum – Ansatzes: Methodenentwicklung und Parameteridentifikation*. Dissertation, Universität Stuttgart, Germany, 1995. Mitteilungen Heft 85.
- [127] U. Lang und R. Helmig. Numerical modeling in fractured media – identification of measured field data. In J. Krasny und J. Mls, Hrsg., *Groundwater Quality: Remediation and Protection*, S. 203 – 212. IAHS and University Karlova, Prague, May 1995.
- [128] R.B. Lantz. Quantitative evaluation of numerical diffusion (truncation error). *Society of Petroleum Engineers Journal*, 251:315–320, 1971.
- [129] T. Lege. Modellierung des Kluftgesteins als geologische Barriere für Deponien. Bericht Nr. 45, Universität Hannover, Institut für Strömungsmechanik und Elektronisches Rechnen im Bauwesen, 1995.
- [130] T. Lege und T. Taniguchi. ROCKFLOW Teil 10a: NG2D – Version 2.04, Netzgenerator für 1D– und 2D–Elemente in willkürlich umrandeten Gebieten als Preprocessor für SM2. Bericht, Institut für Strömungsmechanik und Elektronisches Rechnen im Bauwesen, Universität Hannover, 1994.
- [131] T. Lege und T. Taniguchi. ROCKFLOW Teil 10b: NG3D – Version 2.02, Netzgenerator für 3D– Schichtenmodelle in willkürlich umrandeten Gebieten als Preprocessor für SM2.

Bericht, Institut für Strömungsmechanik und Elektronisches Rechnen im Bauwesen, Universität Hannover, 1994.

- [132] B.P. Leonard. "A survey of finite differences of opinion on numerical modelling of in-comprehensible defective confusion equation". In T.J.R. Hughes, Hrsg., *Finite Element Methods for Convection Dominated Flow*. AMD-ASME, New York, 1979.
- [133] C. Leven, C.I. McDermott, S. Baraka-Lokmane, M. Sauter, R. Liedl und G. Teutsch. Festgesteins-Aquiferanalog: Experimente und Modellierung – Laborexperimente und Entwicklung neuer Untersuchungsmethoden –. In O. Kolditz, W. Zielke, P. Wriggers, H.-J. Dürbaum und M. Wallner, Hrsg., 3. *Workshop Kluftaquifere "Gekoppelte Prozesse in Geosystemen"*. Bericht 60/2000, Universität Hannover, 2000.
- [134] R.J. LeVeque. *Numerical methods for conservation laws*. Birkhäuser Verlag, Basel, 1992.
- [135] R. Löhner, K.M.J. Peraire und M. Vahdati. Finite-element flux-corrected transport (FEM-FCT) for the Euler and Navier-Stokes equation. *International Journal for Numerical Methods in Fluids*, 7:1093 – 1109, 1987.
- [136] J.C.S. Long. *Investigation of equivalent porous medium permeability in networks of discontinuous fractures*. Dissertation, Berkeley, 1983.
- [137] J.C.S. Long und D.M. Billaux. From Field Data to Fracture Network Modeling: An Example Incorporating Spatial Structure. *Water Resources Research*, 23(7):1201 – 1216, 1987.
- [138] J.C.S. Long, J.S. Remer, C.R. Wilson und P.A. Witherspoon. Porous media equivalents for networks of discontinuous fractures. *Water Resources Research*, 18(3):645 – 658, 1982.
- [139] J.C.S. Long und P.A. Witherspoon. The relationship of the degree of interconnection and permeability in a fracture network. *Journal of Geophysical Research*, 90:3087 – 3098, 1985.
- [140] C. Louis. *Strömungsvorgänge in klüftigen Medien und ihre Wirkung auf die Standsicherheit von Bauwerken und Böschungen im Fels*. Dissertation, Universität Karlsruhe, 1967.
- [141] D.M. Mackay und J.A. Cherry. Groundwater contamination: Pump-and-treat remediation. *Environmental Science & Technology*, 23(6):630 – 636, 1989.
- [142] P. Małozzewski und A. Zuber. Tracer Experiments in Fractured Rocks: Matrix Diffusion and the Validity of Models. *Water Resources Research*, 29(8):2723 – 2735, 1993.
- [143] G. Margolin, B. Berkowitz und H. Scher. Structure, flow and generalized conductivity scaling in fracture networks. *Water Resources Research*, 34(9):2103 – 2121, 1998.
- [144] C.I. McDermott. *New Experimental Modelling Techniques to Investigate the Fractured Porous System*. Dissertation, Eberhard-Karls Universität Tübingen, 1999.
- [145] L.D. McKay, J.A. Cherry und R.W. Gillham. Field Experiments in a Fractured Clay Till 1: Hydraulic Conductivity and Fracture Aperture. *Water Resources Research*, 29(4):1149 – 1162, 1993.
- [146] L.D. McKay, R.W. Gillham und J.A. Cherry. Field Experiments in a Fractured Clay Till 2. Solute and Colloid Transport. *Water Resources Research*, 29(12):3879 – 3890, 1993.
- [147] L. Moreno, I. Neretnieks und T. Eriksen. Analysis of some laboratory tracer runs in natural fissures. *Water Resources Research*, 21(7):951 – 958, 1985.

- [148] L. Moreno, Y.W. Tsang, C.F. Tsang, F.V. Hale und I. Neretnieks. Flow and Tracer Transport in a Single Fracture: A Stochastic Model and Its Relation to Some Field Observations. *Water Resources Research*, 24(12):2033 – 2048, 1988.
- [149] R. Mosé, P. Siegel, P. Ackerer und G. Chavent. Application of the mixed finite element approximation in a groundwater flow model: Luxury or necessity? *Water Resources Research*, 30(11):3001 – 3012, 1994.
- [150] T.N. Narasimhan. Multidimensional Numerical Simulation of Fluid Flow in Fractured Porous Media. *Water Resources Research*, 18(4):1235 – 1247, August 1982.
- [151] T.N. Narasimhan und K. Pruess. MINC: An Approach for Analyzing Transport in Strongly Heterogeneous Systems. In E. Custodio, A. Gurgui und J.P. Lobo Ferreira, Hrsg., *Groundwater Flow and Quality Modeling*, S. 375 – 391, Dordrecht, 1988. D. Reidel Publishing Company.
- [152] I. Neretnieks. Transport in fractured rocks. In *Proceedings, Memoires of the 17th International Congress of International Association of Hydrologists*, Band 17, S. 301 – 318, Tucson, Arizona, 1985. International Association of Hydrologists.
- [153] S.P. Neuman. Universal Scaling of Hydraulic Conductivities and Dispersivities in Geologic Media. *Water Resources Research*, 26(8):1749 – 1758, 1990.
- [154] S.P. Neuman. Eulerian–Lagrangian Theory of Transport in Space–Time Nonstationary Velocity Fields: Exact Nonlocal Formalism by Conditional Moments and Weak Approximation. *Water Resources Research*, 29(3):633 – 645, 1993.
- [155] S.P. Neuman. On advective transport in fractal permeability and velocity fields. *Water Resources Research*, 31(6):1455 – 1460, 1995.
- [156] L. Neunhäuserer, A. Fuchs, A. Hemminger und R. Helmig. Flow and transport processes in fractured porous media. In V.N. Burganos, G.P. Karatzas, A.C. Payatakes, C.A. Brebbia, W.G. Gray und G. Pinder, Hrsg., *XII International Conference on Computational Methods in Water Resources*, Band 2, S. 101 – 108, Crete, Greece, June 1998.
- [157] L. Neunhäuserer, S. Gebauer, R. Hinkelmann, R. Kornhuber und R. Helmig. Mehrgittermethoden und adaptive Diskretisierungsverfahren zur Simulation von Strömungs- und Transportprozessen in Kluftaquiferen. In O. Kolditz, W. Zielke, P. Wriggers, H.-J. Dürbaum und M. Wallner, Hrsg., *3. Workshop Kluftaquifere "Gekoppelte Prozesse in Geosystemen"*, Bericht 60/2000, Universität Hannover, 2000.
- [158] L. Neunhäuserer, S. Gebauer, S. Ochs, R. Hinkelmann, R. Kornhuber und R. Helmig. Mehrgittermethoden und adaptive Euler–Lagrange–Verfahren zur Simulation von Strömungs- und Transportvorgängen in Kluftaquifersystemen. Arbeitsbericht 01.11.1999 – 30.10.2001, DFG–Projekte Nr. Ko1806/2–1 und Nr. Hi640/1–1, Universität Stuttgart, Institut für Wasserbau, Lehrstuhl für Hydromechanik und Hydrosystemmodellierung und Freie Universität Berlin, Fachbereich Mathematik und Informatik, Institut für Mathematik II, 2001.
- [159] L. Neunhäuserer, S. Gebauer, S. Ochs, R. Hinkelmann, R. Kornhuber und R. Helmig. Equidimensional modelling of flow and transport processes in fractured porous systems II. In S.M. Hassanizadeh, R.J. Schotting, W.G. Gray und G.F. Pinder, Hrsg., *XIV Interna-*

tional Conference on Computational Methods in Water Resources, Band 1 von *Developments in Water Science*, S. 343 – 350, Delft, The Netherlands, June 2002. Elsevier.

- [160] L. Neunhäuserer, A. Hemminger und R. Helmig. Festgestein–Aquiferanalog: Experimente und Modellierung, Teilprojekt 3: Einsatz von diskreten Modellansätzen. Arbeitsbericht 5/96 – 10/97, DFG – Projekt Nr. He2531/1 – 1, Institut für Wasserbau, Universität Stuttgart und NMI, Technische Universität Braunschweig, 1997.
- [161] L. Neunhäuserer, A. Hemminger und R. Helmig. Influence of Fracture – Matrix – Interaction on Flow and Transport Processes and the Resulting Effective Parameters in Fractured Porous Systems. In *Hydraulic Engineering for Sustainable Water Resources Management at the Turn of the Millennium*, Graz, Austria, August 1999. XXVIII IAHR congress. CD – Rom.
- [162] L. Neunhäuserer, A. Hemminger und R. Helmig. Festgestein–Aquiferanalog: Experimente und Modellierung, Teilprojekt 3: Einsatz von diskreten Modellansätzen. Arbeitsbericht 11/1997 – 03/2000, DFG – Projekt Nr. He2531/1 - - 2, He2531/1 – 3, Institut für Computeranwendungen im Bauingenieurwesen, Technische Universität Braunschweig, 2000.
- [163] L. Neunhäuserer, V. Reichenberger, S. Gebauer und R. Helmig. Comparison of Discretization Schemes for Flow in Porous Media with Discrete Fractures. in preparation, 2002.
- [164] J. Noorishad, C.F. Tsang, P. Perrochet und A. Musy. A Perspective on the Numerical Solution of Convection – Dominated Transport Problems: A Price to Pay for the Easy Way Out. *Water Resources Research*, 28(2):551 – 561, 1992.
- [165] A.W. Nordqvist, Y.W. Tsang, C.F. Tsang, B. Dverstorp und J. Andersson. A Variable Aperture Fracture Network Model for Flow and Transport in Fractured Rocks. *Water Resources Research*, 28(6):1703 – 1713, 1992.
- [166] S. Ochs, R. Hinkelmann, L. Neunhäuserer, M. Süß, R. Helmig, S. Gebauer und R. Kornhuber. Adaptive methods for the equidimensional modelling of flow and transport processes in fractured aquifers. In *5th International Conference on Hydroscience and Engineering*, Warschau, Polen, 2002.
- [167] J.T. Oden, I. Babuška und C.E. Baumann. A Discontinuous hp Finite Element Method for Diffusion Problems. *Journal of Computational Physics*, 146(2):491 – 519, 1998.
- [168] A. Ogata und R.B. Banks. A solution of the differential equation of longitudinal dispersion in porous media. Technical Report Prof. Paper 411–A, US Geological Survey, U.S. Government Printing Office, Washington, D.C., 1962.
- [169] A.P. Oron und B. Berkowitz. Flow in rock fractures: The local cubic law assumption re-examined. *Water Resources Research*, 34(11):2811 – 2825, 1998.
- [170] A. Papastavrou. *Adaptive Finite Elemente Methoden für Konvektions – Diffusionsprobleme*. Dissertation, Ruhr – Universität Bochum, 1998.
- [171] A.K. Parrott und M.A. Christie. FCT applied to the 2–D Finite Element solution of tracer transport by single phase flow in a porous medium. In K.W. Morton und M.J. Braines, Hrsg., *Numerical Methods for fluid dynamics*, S. 609 – 620. Oxford University Press, Oxford, 1986.
- [172] W. Pfingsten. Stofftransport in Klüften mit porösen Gesteinen. Mitteilungen, Institut für

- Wasserwirtschaft, Hydrologie und Landwirtschaftlichen Wasserbau, Universität Hannover, 1990.
- [173] G.F. Pinder und W.G. Gray. *Finite element simulation in surface and subsurface hydrology*. Academic Press, New York, 1977.
- [174] D.W. Pollock. Semianalytical Computation of Path Lines for Finite-Difference Models. *Ground Water*, 26(6):743 – 750, 1988.
- [175] K. Pruess und T.N. Narasimhan. A Practical Method for Modeling Fluid and Head Flow in Fractured Porous Media. *Society of Petroleum Engineers Journal*, 25(1):14 – 26, 1985.
- [176] G.D. Raithby. Skew upstream differencing schemes for problems involving fluid flows. *Computer Methods in Applied Mechanics and Engineering*, 9:153 – 164, 1976.
- [177] P.A. Raviart und J.M. Thomas. *Mathematical Aspects of the Finite Element Method*, Kapitel A Mixed Hybrid Finite Element Method for the Second Order Elliptic Problems. Lecture Notes in Mathematics. Springer-Verlag, New York, 1977.
- [178] W.H. Reed und T.R. Hill. Triangular mesh methods for the neutron transport equation. Technical Report LA-UR-73-479, Los Alamos Scientific Laboratory, 1973.
- [179] C.E. Renshaw. Influence of subcritical fracture growth on the connectivity of fracture networks. *Water Resources Research*, 32(6):1519 – 1530, 1996.
- [180] C.E. Renshaw und D.D. Pollard. Numerical simulation of fracture set formation: A fracture mechanics model consistent with experimental observations. *Journal of Geophysical Research*, 99(B5):9359 – 9372, 1994.
- [181] D. Rentz. Erstellung eines Netzgenerators für räumlich verteilte Klüfte. Diplomarbeit, Ruhr-Universität Bochum, Fakultät für Bauingenieurwesen, August 1997.
- [182] M. Sauter, R. Liedl, G. Teutsch, C. Leven, S. Baraka Lokmane und C. McDermott. Festgestein-Aquiferanalog: Experimente und Modellierung, Teilprojekt 2: Laborexperimente und Entwicklung neuer Untersuchungsmethoden. DFG-Projekt Nr. Sa501/12-2, Geologisches Institut, Lehrstuhl für Angewandte Geologie, Eberhard-Karls-Universität Tübingen, 2000.
- [183] A.L. Schafer-Perini und J.L. Wilson. Efficient and Accurate Front Tracking for Two-Dimensional Groundwater Flow Models. *Water Resources Research*, 27(7):1471 – 1485, 1991.
- [184] A.E. Scheidegger. *The Physics of Flow Through Porous Media*. University of Toronto Press, Toronto, 1960.
- [185] A.E. Scheidegger. General theory of dispersion in porous media. *Journal of Geophysical Research*, 66(10):3273 – 3278, 1961.
- [186] R. Schneiders. *Remeshing-Algorithmen für dreidimensionale Finite-Element-Simulationen von Umformprozessen*. Dissertation, RWTH Aachen, 1993.
- [187] F. Schröder-Pander, T. Sonar und O. Friedrich. Generalized multiresolution analysis on unstructured grids. *Numerische Mathematik*, 86(4):685 – 715, 2000.
- [188] F.W. Schwartz, L. Smith und A.S. Crowe. A Stochastic Analysis of Macroscopic Dispersion in Fractured Media. *Water Resources Research*, 19(5):1253 – 1265, 1983.

- [189] H.R. Schwarz. *Methode der finiten Elemente*. Teubner Studienbücher Mathematik. B.G. Teubner, Stuttgart, 1991.
- [190] C.-W. Shu. Essentially Non-Oscillatory and Weighted Essentially Non-Oscillatory Schemes for Hyperbolic Conservation Laws. ICASE Report No. 97-65, Institute for Computer Applications in Science and Engineering, NASA Langley Research Center, Hampton, VA, 1997.
- [191] C.-W. Shu. Different formulations of the discontinuous Galerkin method for the viscous terms. In Z.-C. Shi, M. Mu, W. Xue und J. Zou, Hrsg., *Advances in Scientific Computing*, S. 144 – 155. Science Press, 2001.
- [192] R.C. Sidle, B. Nilsson, M. Hansen und J. Fredericia. Spatially varying hydraulic and solute transport characteristics of a fractured till determined by field tracer tests, Funen, Denmark. *Water Resources Research*, 34(10):2515 – 2527, 1998.
- [193] P. Siegel, R. Mosé, P. Ackerer und J. Jaffre. Solution of the advection-diffusion equation using a combination of discontinuous and mixed finite elements. *International Journal for Numerical Methods in Fluids*, 24(6):595 – 613, 1997.
- [194] A. Silberhorn-Hemminger. *Modellierung von Kluftaquifersystemen: Geostatistische Analyse und deterministisch – stochastische Kluftgenerierung*. Dissertation, Universität Stuttgart, Institut für Wasserbau, Eigenverlag, 2002.
- [195] L. Smith und F.W. Schwartz. An Analysis of the Influence of Fracture Geometry on Mass Transport in Fractured Media. *Water Resources Research*, 20(9):1241 – 1252, 1984.
- [196] D.T. Snow. *A Parallel Plate Model of Fractured Permeable Media*. Dissertation, University of California, Berkeley, 1965.
- [197] T. Sonar. On the Construction of Essentially Non-Oscillatory Finite Volume Approximations to Hyperbolic Conservation Laws on General Triangulations: Polynomial Recovery, Accuracy, and Stencil Selection. *Computer Methods in Applied Mechanics and Engineering*, 140:157 – 181, 1997.
- [198] T.O. Sonnenborg, M.B. Butts und K.H. Jensen. Aqueous flow and transport in analog systems of fractures embedded in permeable matrix. *Water Resources Research*, 35(3):719 – 729, 1999.
- [199] R.M. Srivastava. An annealing procedure for honouring change of support statistics in conditional simulation. In R. Dimitrakopoulos, Hrsg., *Geostatistics for the Next Century*, S. 277 – 290. Kluwer Academic Publishers, Netherlands, 1994.
- [200] E.A. Sudicky und R.G. McLaren. The Laplace Transform Galerkin Technique for Large-Scale Simulation of Mass Transport in Discretely Fractured Porous Formations. *Water Resources Research*, 28(2):499 – 514, 1992.
- [201] T. Taniguchi, T. Goda, H. Kasper und W. Zielke. Hexahedral Mesh Generation of Complex Composite Domain. In *Grid Generation Conference*, April 1996.
- [202] G. Teutsch. *Grundwassermodelle im Karst: Praktische Ansätze am Beispiel zweier Einzugsgebiete im Tiefen und Seichten Malmkarst der Schwäbischen Alb*. Dissertation, Universität Tübingen, 1988.

- [203] R. Therrien und E.A. Sudicky. Three-dimensional analysis of variably-saturated flow and solute transport in discretely-fractured porous media. *Journal of Contaminant Hydrology*, 23:1 – 44, 1996.
- [204] C. Thüringer und H. Hötzl. Festgesteins-Aquiferanalog: Experimente und Modellierung – Feldexperimente zur Wasser- und Stoffausbreitung in Abhängigkeit von Kluft- und Gesteinsdurchlässigkeiten –. In O. Kolditz, W. Zielke, P. Wriggers, H.-J. Dürbaum und M. Wallner, Hrsg., 3. *Workshop Kluftaquifere "Gekoppelte Prozesse in Geosystemen"*. Bericht 60/2000, Universität Hannover, 2000.
- [205] Y.W. Tsang und C.F. Tsang. Channel Model of Flow Through Fractured Media. *Water Resources Research*, 23(3):467 – 479, 1987.
- [206] Y.W. Tsang, C.F. Tsang, F.V. Hale und B. Dverstorp. Tracer transport in a stochastic continuum model of fractured media. *Water Resources Research*, 32(10):3077 – 3092, 1996.
- [207] Y.W. Tsang, C.F. Tsang, I. Neretnieks und L. Moreno. Flow and Transport in Fractured Media: a Variable Aperture Channel Model and its Properties. *Water Resources Research*, 24(12):2049 – 2060, 1988.
- [208] Y. Tsuboyama, R.C. Sidle, S. Noguchi und I. Hosoda. Flow and solute transport through the soil matrix and macropores of a hillslope segment. *Water Resources Research*, 30(4):879 – 890, 1994.
- [209] J.E. Warren und P.J. Root. The behavior of naturally fractured reservoirs. *Society of Petroleum Engineers Journal*, 3:245 – 255, 1963.
- [210] E.C. Wendland. Numerische Simulation von Strömung und hochadvektivem Stofftransport in geklüftetem, porösem Medium. Mitteilung Nr. 96 – 6, Ruhr-Universität Bochum, Institut für konstruktiven Ingenieurbau, 1996.
- [211] J.J. Westerink und D. Shea. Consistent Higher Degree Petrov-Galerkin Methods for the Solution of the Transient Convection-Diffusion Equation. *International Journal for Numerical Methods in Engineering*, 28:1077 – 1101, 1989.
- [212] C. Wieners. The implementation of adaptive multigrid methods for finite elements. Preprint Nr. 97/12, Universität Stuttgart, Institut für Computeranwendungen, 1997.
- [213] C.R. Wilson. An investigation for laminar flow in fractured reservoirs. *Soc. of Petroleum Engineers Journal*, 9:145 – 255, 1970.
- [214] W. Wittke. *Felsmechanik*. Springer-Verlag, Berlin, 1984.
- [215] J. Wollrath. Ein Strömungs- und Transportmodell für klüftiges Gestein und Untersuchungen zu homogenen Ersatzsystemen. Forschungsbericht 28, Institut für Strömungsmechanik und Elektronisches Rechnen im Bauwesen, Universität Hannover, 1990.
- [216] S.T. Zalesak. Fully multidimensional flux-corrected transport algorithm for fluids. *Journal of Computational Physics*, 35:335 – 362, 1979.
- [217] C. Zheng und P.P. Wang. MT3DMS: A Modular Three-Dimensional Multispecies Transport Model for Simulation of Advection, Dispersion, and Chemical Reactions of Contaminants in Groundwater Systems; Documentation and User's Guide. Contract Report SERDP-99-1, U.S. Army Corps of Engineers, Engineer Research and Development Center, 1999.

- [218] O.C. Zienkiewicz. *The finite element method in engineering science*. McGraw-Hill, London, 1971.

Lebenslauf

Persönliche Daten

Geburtsdatum: 24.06.1971
Geburtsort: Hannover
Staatsangehörigkeit: deutsch

Bildungsgang

08/1983 - 05/1990 Kaiser-Wilhelm-Gymnasium Hannover
Abschluss: Abitur

10/1990 - 11/1995 Technische Hochschule Darmstadt
Studium Bauingenieurwesen, Schwerpunkte
Wasserbau, Bauinformatik, Wasserversorgung/ Abwassertechnik
Abschluss: Diplom

04/1994 - 10/1994 Studienarbeit bei Professor Dr.-Ing. I. David
Thema der Arbeit: „Numerische Modellierung von
Strömungsvorgängen in Fließgewässern“

08/1995 - 10/1995 Diplomarbeit bei Brandt-Gerdes-Sitzmann Umweltplanung GmbH
und Professor Dr.-Ing. M. Ostrowski
Thema der Arbeit: „Sensitivitätsbetrachtung zur Berechnung der
Grundwasserneubildung im Hessischen Ried mit Hilfe einer
Bodenfeuchtesimulation“

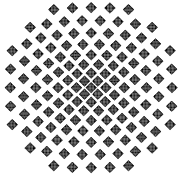
Berufstätigkeit als Diplom - Ingenieurin

01/1996 - 02/1998 Wissenschaftliche Mitarbeiterin an der Universität Stuttgart,
Institut für Wasserbau, Lehrstuhl für Hydraulik und Grundwasser,
Professor Dr. h.c. H. Kobus, Ph.D., Arbeitsgruppe Dr.-Ing. R. Helmig

03/1998 - 09/2002 Wissenschaftliche Mitarbeiterin in der Arbeitsgruppe
Prof. Dr.-Ing. R. Helmig mit Anstellung an den folgenden Instituten:

03/1998 - 09/2000 Technische Universität Braunschweig,
Institut für Computeranwendungen im Bauingenieurwesen

10/2000 - 09/2002 Universität Stuttgart, Institut für Wasserbau,
Lehrstuhl für Hydromechanik und Hydrosystemmodellierung



Institut für Wasserbau Universität Stuttgart

Pfaffenwaldring 61
70550 Stuttgart (Vaihingen)
Telefon (0711) 685 - 4717/41/52
Telefax (0711) 685 - 7020 o. 4746
email: iws@iws.uni-stuttgart.de
<http://www.iws.uni-stuttgart.de>

Direktoren

Prof. Dr.-Ing. Rainer Helmig
Prof. Dr.-Ing. Dr. A. Bárdossy

Vorstand (Stand 30.04.2003)

Prof. Dr.-Ing. R. Helmig
Prof. Dr. Pieter Vermeer
Prof. Dr.-Ing. Dr. A. Bárdossy
Prof. Dr.-Ing. habil. B. Westrich
PD Dr.-Ing. B. Barczewski
PD Dr.-Ing. R. Hinkelmann
Dr.-Ing. H.-P. Koschitzky
PD Dr.-Ing. W. Marx

Emeriti

Prof. Dr.-Ing. Dr.-Ing. E.h. Jürgen Giesecke
Prof. Dr.h.c. Dr.-Ing. E.h. Helmut Kobus, Ph.D.

Lehrstuhl für Wasserbau und Wassermengenwirtschaft

Leiter: Prof. Dr. Pieter Vermeer (kom.)
Stellv.: PD Dr.-Ing. Walter Marx, AOR

Lehrstuhl für Hydrologie und Geohydrologie

Leiter: Prof. Dr.-Ing. Dr. András Bárdossy

Lehrstuhl für Hydromechanik und Hydrosystemmodellierung

Leiter: Prof. Dr.-Ing. Rainer Helmig
Stellv.: PD Dr.-Ing. Reinhard Hinkelmann

VEGAS, Versuchseinrichtung zur Grundwasser- und Altlastensanierung

Wiss. Leiter: PD Dr.-Ing. Baldur Barczewski
Techn. Leiter: Dr.-Ing. Hans-Peter Koschitzky

Versuchsanstalt

Leiter: apl. Prof. Dr.-Ing. Bernhard Westrich

Verzeichnis der Mitteilungshefte

- 1 Röhnisch, Arthur: *Die Bemühungen um eine Wasserbauliche Versuchsanstalt an der Technischen Hochschule Stuttgart*, und Fattah Abouleid, Abdel: *Beitrag zur Berechnung einer in lockeren Sand gerammten, zweifach verankerten Spundwand*, 1963
- 2 Marotz, Günter: *Beitrag zur Frage der Standfestigkeit von dichten Asphaltbelägen im Großwasserbau*, 1964
- 3 Gurr, Siegfried: *Beitrag zur Berechnung zusammengesetzter ebener Flächentragwerke unter besonderer Berücksichtigung ebener Stauwände, mit Hilfe von Randwert- und Lastwertmatrizen*, 1965
- 4 Plica, Peter: *Ein Beitrag zur Anwendung von Schalenkonstruktionen im Stahlwasserbau*, und Petrikat, Kurt: *Möglichkeiten und Grenzen des wasserbaulichen Versuchswesens*, 1966
- 5 Plate, Erich: *Beitrag zur Bestimmung der Windgeschwindigkeitsverteilung in der durch eine Wand gestörten bodennahen Luftschicht*, und Röhnisch, Arthur; Marotz, Günter: *Neue Baustoffe und Bauausführungen für den Schutz der Böschungen und der Sohle von Kanälen, Flüssen und Häfen; Gestehungskosten und*

- jeweilige Vorteile, sowie Unny, T.E.: Schwingungsuntersuchungen am Kegelstrahlschieber, 1967*
- 6 Seiler, Erich: *Die Ermittlung des Anlagenwertes der bundeseigenen Binnenschiffahrtsstraßen und Talsperren und des Anteils der Binnenschiffahrt an diesem Wert, 1967*
 - 7 *Sonderheft anlässlich des 65. Geburtstages von Prof. Arthur Röhnisch mit Beiträgen von Benk, Dieter; Breitling, J.; Gurr, Siegfried; Haberhauer, Robert; Honekamp, Hermann; Kuz, Klaus Dieter; Marotz, Günter; Mayer-Vorfelder, Hans-Jörg; Miller, Rudolf; Plate, Erich J.; Radomski, Helge; Schwarz, Helmut; Vollmer, Ernst; Wildenhahn, Eberhard; 1967*
 - 8 Jumikis, Alfred: *Beitrag zur experimentellen Untersuchung des Wassernachschubs in einem gefrierenden Boden und die Beurteilung der Ergebnisse, 1968*
 - 9 Marotz, Günter: *Technische Grundlagen einer Wasserspeicherung im natürlichen Untergrund, 1968*
 - 10 Radomski, Helge: *Untersuchungen über den Einfluß der Querschnittsform wellenförmiger Spundwände auf die statischen und rammtechnischen Eigenschaften, 1968*
 - 11 Schwarz, Helmut: *Die Grenztragfähigkeit des Baugrundes bei Einwirkung vertikal gezogener Ankerplatten als zweidimensionales Bruchproblem, 1969*
 - 12 Erbel, Klaus: *Ein Beitrag zur Untersuchung der Metamorphose von Mittelgebirgsschneedecken unter besonderer Berücksichtigung eines Verfahrens zur Bestimmung der thermischen Schneequalität, 1969*
 - 13 Westhaus, Karl-Heinz: *Der Strukturwandel in der Binnenschiffahrt und sein Einfluß auf den Ausbau der Binnenschiffskanäle, 1969*
 - 14 Mayer-Vorfelder, Hans-Jörg: *Ein Beitrag zur Berechnung des Erdwiderstandes unter Ansatz der logarithmischen Spirale als Gleitflächenfunktion, 1970*
 - 15 Schulz, Manfred: *Berechnung des räumlichen Erddruckes auf die Wandung kreiszylindrischer Körper, 1970*
 - 16 Mobasseri, Manoutschehr: *Die Rippenstützmauer. Konstruktion und Grenzen ihrer Standsicherheit, 1970*
 - 17 Benk, Dieter: *Ein Beitrag zum Betrieb und zur Bemessung von Hochwasserrückhaltebecken, 1970*
 - 18 Gál, Attila: *Bestimmung der mitschwingenden Wassermasse bei überströmten Fischbauchklappen mit kreiszylindrischem Staublech, 1971, vergriffen*
 - 19 Kuz, Klaus Dieter: *Ein Beitrag zur Frage des Einsetzens von Kavitationserscheinungen in einer Düsenströmung bei Berücksichtigung der im Wasser gelösten Gase, 1971, v-*

ergriffen

- 20 Schaak, Hartmut: *Verteilleitungen von Wasserkraftanlagen*, 1971
- 21 *Sonderheft zur Eröffnung der neuen Versuchsanstalt des Instituts für Wasserbau der Universität Stuttgart mit Beiträgen von*
Brombach, Hansjörg; Dirksen, Wolfram; Gál, Attila; Gerlach, Reinhard; Giesecke, Jürgen; Holthoff, Franz-Josef; Kuz, Klaus Dieter; Marotz, Günter; Minor, Hans-Erwin; Petrikat, Kurt; Röhnisch, Arthur; Rueff, Helge; Schwarz, Helmut; Vollmer, Ernst; Wildenhahn, Eberhard; 1972
- 22 Wang, Chung-su: *Ein Beitrag zur Berechnung der Schwingungen an Kegelstrahlschiebern*, 1972
- 23 Mayer-Vorfelder, Hans-Jörg: *Erdwiderstandsbeiwerte nach dem Ohde-Variationsverfahren*, 1972
- 24 Minor, Hans-Erwin: *Beitrag zur Bestimmung der Schwingungsanfachungsfunktionen überströmter Stauklappen*, 1972
- 25 Brombach, Hansjörg: *Untersuchung strömungsmechanischer Elemente (Fluidik) und die Möglichkeit der Anwendung von Wirbelkammerelementen im Wasserbau*, 1972,
vergriffen
- 26 Wildenhahn, Eberhard: *Beitrag zur Berechnung von Horizontalfilterbrunnen*, 1972
- 27 Steinlein, Helmut: *Die Eliminierung der Schwebstoffe aus Flußwasser zum Zweck der unterirdischen Wasserspeicherung, gezeigt am Beispiel der Iller*, 1972
- 28 Holthoff, Franz Josef: *Die Überwindung großer Hubhöhen in der Binnenschifffahrt durch Schwimmerhebewerke*, 1973
- 29 Röder, Karl: *Einwirkungen aus Baugrundbewegungen auf trog- und kastenförmige Konstruktionen des Wasser- und Tunnelbaues*, 1973
- 30 Kretschmer, Heinz: *Die Bemessung von Bogenstaumauern in Abhängigkeit von der Talform*, 1973
- 31 Honekamp, Hermann: *Beitrag zur Berechnung der Montage von Unterwasserpipelines*, 1973
- 32 Giesecke, Jürgen: *Die Wirbelkammertriode als neuartiges Steuerorgan im Wasserbau, und*
Brombach, Hansjörg: *Entwicklung, Bauformen, Wirkungsweise und Steuereigenschaften von Wirbelkammerverstärkern*, 1974
- 33 Rueff, Helge: *Untersuchung der schwingungserregenden Kräfte an zwei hintereinander angeordneten Tiefschützen unter besonderer Berücksichtigung von Kavitation*, 1974

- 34 Röhnisch, Arthur: *Einpreßversuche mit Zementmörtel für Spannbeton - Vergleich der Ergebnisse von Modellversuchen mit Ausführungen in Hüllwellrohren*, 1975
- 35 *Sonderheft anlässlich des 65. Geburtstages von Prof. Dr.-Ing. Kurt Petrikat mit Beiträgen von:* Brombach, Hansjörg; Erbel, Klaus; Flinspach, Dieter; Fischer jr., Richard; Gál, Attila; Gerlach, Reinhard; Giesecke, Jürgen; Haberhauer, Robert; Hafner Edzard; Hausenblas, Bernhard; Horlacher, Hans-Burkhard; Hutarew, Andreas; Knoll, Manfred; Krummet, Ralph; Marotz, Günter; Merkle, Theodor; Miller, Christoph; Minor, Hans-Erwin; Neumayer, Hans; Rao, Syamala; Rath, Paul; Rueff, Helge; Ruppert, Jürgen; Schwarz, Wolfgang; Topal-Gökceli, Mehmet; Vollmer, Ernst; Wang, Chung-su; Weber, Hans-Georg; 1975
- 36 Berger, Jochum: *Beitrag zur Berechnung des Spannungszustandes in rotationssymmetrisch belasteten Kugelschalen veränderlicher Wandstärke unter Gas- und Flüssigkeitsdruck durch Integration schwach singulärer Differentialgleichungen*, 1975
- 37 Dirksen, Wolfram: *Berechnung instationärer Abflußvorgänge in gestauten Gerinnen mittels Differenzenverfahren und die Anwendung auf Hochwasserrückhaltebecken*, 1976
- 38 Horlacher, Hans-Burkhard: *Berechnung instationärer Temperatur- und Wärmespannungsfelder in langen mehrschichtigen Hohlzylindern*, 1976
- 39 Hafner, Edzard: *Untersuchung der hydrodynamischen Kräfte auf Baukörper im Tiefwasserbereich des Meeres*, 1977, ISBN 3-921694-39-6
- 40 Ruppert, Jürgen: *Über den Axialwirbelkammerverstärker für den Einsatz im Wasserbau*, 1977, ISBN 3-921694-40-X
- 41 Hutarew, Andreas: *Beitrag zur Beeinflußbarkeit des Sauerstoffgehalts in Fließgewässern an Abstürzen und Wehren*, 1977, ISBN 3-921694-41-8, vergriffen
- 42 Miller, Christoph: *Ein Beitrag zur Bestimmung der schwingungserregenden Kräfte an unterströmten Wehren*, 1977, ISBN 3-921694-42-6
- 43 Schwarz, Wolfgang: *Druckstoßberechnung unter Berücksichtigung der Radial- und Längsverschiebungen der Rohrwandung*, 1978, ISBN 3-921694-43-4
- 44 Kinzelbach, Wolfgang: *Numerische Untersuchungen über den optimalen Einsatz variabler Kühlsysteme einer Kraftwerkskette am Beispiel Oberrhein*, 1978, ISBN 3-921694-44-2
- 45 Barczewski, Baldur: *Neue Meßmethoden für Wasser-Luftgemische und deren Anwendung auf zweiphasige Auftriebsstrahlen*, 1979, ISBN 3-921694-45-0
- 46 Neumayer, Hans: *Untersuchung der Strömungsvorgänge in radialen Wirbelkammerverstärkern*, 1979, ISBN 3-921694-46-9

- 47 Elalfy, Youssef-Elhassan: *Untersuchung der Strömungsvorgänge in Wirbelkammerdiolen und -drosseln*, 1979, ISBN 3-921694-47-7
- 48 Brombach, Hansjörg: *Automatisierung der Bewirtschaftung von Wasserspeichern*, 1981, ISBN 3-921694-48-5
- 49 Geldner, Peter: *Deterministische und stochastische Methoden zur Bestimmung der Selbstdichtung von Gewässern*, 1981, ISBN 3-921694-49-3
- 50 Mehlhorn, Hans: *Temperaturveränderungen im Grundwasser durch Brauchwassereinleitungen*, 1982, ISBN 3-921694-50-7, vergriffen
- 51 Hafner, Edzard: *Rohrleitungen und Behälter im Meer*, 1983, ISBN 3-921694-51-5
- 52 Rinnert, Bernd: *Hydrodynamische Dispersion in porösen Medien: Einfluß von Dichteunterschieden auf die Vertikalvermischung in horizontaler Strömung*, 1983, ISBN 3-921694-52-3
- 53 Lindner, Wulf: *Steuerung von Grundwasserentnahmen unter Einhaltung ökologischer Kriterien*, 1983, ISBN 3-921694-53-1, vergriffen
- 54 Herr, Michael; Herzer, Jörg; Kinzelbach, Wolfgang; Kobus, Helmut; Rinnert, Bernd: *Methoden zur rechnerischen Erfassung und hydraulischen Sanierung von Grundwasserkontaminationen*, 1983, ISBN 3-921694-54-X
- 55 Schmitt, Paul: *Wege zur Automatisierung der Niederschlagsermittlung*, 1984, ISBN 3-921694-55-8
- 56 Müller, Peter: *Transport und selektive Sedimentation von Schwebstoffen bei gestautem Abfluß*, 1985, ISBN 3-921694-56-6
- 57 El-Qawasmeh, Fuad: *Möglichkeiten und Grenzen der Tropfbewässerung unter besonderer Berücksichtigung der Verstopfungsanfälligkeit der Tropfelemente*, 1985, ISBN 3-921694-57-4
- 58 Kirchenbaur, Klaus: *Mikroprozessorgesteuerte Erfassung instationärer Druckfelder am Beispiel seegangbelasteter Baukörper*, 1985, ISBN 3-921694-58-2
- 59 Kobus, Helmut (Hrsg.): *Modellierung des großräumigen Wärme- und Schadstofftransports im Grundwasser*, Tätigkeitsbericht 1984/85 (DFG-Forschergruppe an den Universitäten Hohenheim, Karlsruhe und Stuttgart), 1985, ISBN 3-921694-59-0
- 60 Spitz, Karlheinz: *Dispersion in porösen Medien: Einfluß von Inhomogenitäten und Dichteunterschieden*, 1985, ISBN 3-921694-60-4
- 61 Kobus, Helmut: *An Introduction to Air-Water Flows in Hydraulics*, 1985, ISBN 3-921694-61-2

- 62 Kaleris, Vassilios: *Erfassung des Austausches von Oberflächen- und Grundwasser in horizontalebene Grundwassermodellen*, 1986, ISBN 3-921694-62-0
- 63 Herr, Michael: *Grundlagen der hydraulischen Sanierung verunreinigter Porengrundwasserleiter*, 1987, ISBN 3-921694-63-9
- 64 Marx, Walter: *Berechnung von Temperatur und Spannung in Massenbeton infolge Hydratation*, 1987, ISBN 3-921694-64-7
- 65 Koschitzky, Hans-Peter: *Dimensionierungskonzept für Sohlbelüfter in Schußbrinnen zur Vermeidung von Kavitationsschäden*, 1987, ISBN 3-921694-65-5
- 66 Kobus, Helmut (Hrsg.): *Modellierung des großräumigen Wärme- und Schadstofftransports im Grundwasser*, Tätigkeitsbericht 1986/87 (DFG-Forschergruppe an den Universitäten Hohenheim, Karlsruhe und Stuttgart) 1987, ISBN 3-921694-66-3
- 67 Söll, Thomas: *Berechnungsverfahren zur Abschätzung anthropogener Temperaturanomalien im Grundwasser*, 1988, ISBN 3-921694-67-1
- 68 Dittrich, Andreas; Westrich, Bernd: *Bodenseeufererosion, Bestandsaufnahme und Bewertung*, 1988, ISBN 3-921694-68-X, vergriffen
- 69 Huwe, Bernd; van der Ploeg, Rien R.: *Modelle zur Simulation des Stickstoffhaushaltes von Standorten mit unterschiedlicher landwirtschaftlicher Nutzung*, 1988, ISBN 3-921694-69-8, vergriffen
- 70 Stephan, Karl: *Integration elliptischer Funktionen*, 1988, ISBN 3-921694-70-1
- 71 Kobus, Helmut; Zilliox, Lothaire (Hrsg.): *Nitratbelastung des Grundwassers, Auswirkungen der Landwirtschaft auf die Grundwasser- und Rohwasserbeschaffenheit und Maßnahmen zum Schutz des Grundwassers*. Vorträge des deutsch-französischen Kolloquiums am 6. Oktober 1988, Universitäten Stuttgart und Louis Pasteur Strasbourg (Vorträge in deutsch oder französisch, Kurzfassungen zweisprachig), 1988, ISBN 3-921694-71-X
- 72 Soyeaux, Renald: *Unterströmung von Stauanlagen auf klüftigem Untergrund unter Berücksichtigung laminarer und turbulenter Fließzustände*, 1991, ISBN 3-921694-72-8
- 73 Kohane, Roberto: *Berechnungsmethoden für Hochwasserabfluß in Fließgewässern mit überströmten Vorländern*, 1991, ISBN 3-921694-73-6
- 74 Hassinger, Reinhard: *Beitrag zur Hydraulik und Bemessung von Blocksteinrampen in flexibler Bauweise*, 1991, ISBN 3-921694-74-4
- 75 Schäfer, Gerhard: *Einfluß von Schichtenstrukturen und lokalen Einlagerungen auf die Längsdispersion in Porengrundwasserleitern*, 1991, ISBN 3-921694-75-2
- 76 Giesecke, Jürgen: *Vorträge, Wasserwirtschaft in stark besiedelten Regionen; Um-*

- weltforschung mit Schwerpunkt Wasserwirtschaft*, 1991, ISBN 3-921694-76-0
- 77 Huwe, Bernd: *Deterministische und stochastische Ansätze zur Modellierung des Stickstoffhaushalts landwirtschaftlich genutzter Flächen auf unterschiedlichem Skalenniveau*, 1992, ISBN 3-921694-77-9
- 78 Rommel, Michael: *Verwendung von Kluftdaten zur realitätsnahen Generierung von Kluftnetzen mit anschließender laminar-turbulenter Strömungsberechnung*, 1993, ISBN 3-92 1694-78-7
- 79 Marschall, Paul: *Die Ermittlung lokaler Stofffrachten im Grundwasser mit Hilfe von Einbohrloch-Meßverfahren*, 1993, ISBN 3-921694-79-5
- 80 Ptak, Thomas: *Stofftransport in heterogenen Porenaquiferen: Felduntersuchungen und stochastische Modellierung*, 1993, ISBN 3-921694-80-9
- 81 Haakh, Frieder: *Transientes Strömungsverhalten in Wirbelkammern*, 1993, ISBN 3-921694-81-7
- 82 Kobus, Helmut; Cirpka, Olaf; Barczewski, Baldur; Koschitzky, Hans-Peter: *Versucheinrichtung zur Grundwasser und Altlastensanierung VEGAS, Konzeption und Programmrahmen*, 1993, ISBN 3-921694-82-5
- 83 Zang, Weidong: *Optimaler Echtzeit-Betrieb eines Speichers mit aktueller Abflußregenerierung*, 1994, ISBN 3-921694-83-3
- 84 Franke, Hans-Jörg: *Stochastische Modellierung eines flächenhaften Stoffeintrages und Transports in Grundwasser am Beispiel der Pflanzenschutzmittelproblematik*, 1995, ISBN 3-921694-84-1
- 85 Lang, Ulrich: *Simulation regionaler Strömungs- und Transportvorgänge in Karstaquiferen mit Hilfe des Doppelkontinuum-Ansatzes: Methodenentwicklung und Parameteridentifikation*, 1995, ISBN 3-921694-85-X, vergriffen
- 86 Helmig, Rainer: *Einführung in die Numerischen Methoden der Hydromechanik*, 1996, ISBN 3-921694-86-8
- 87 Cirpka, Olaf: *CONTRACT: A Numerical Tool for Contaminant Transport and Chemical Transformations - Theory and Program Documentation -*, 1996, ISBN 3-921694-87-6
- 88 Haberlandt, Uwe: *Stochastische Synthese und Regionalisierung des Niederschlages für Schmutzfrachtberechnungen*, 1996, ISBN 3-921694-88-4
- 89 Croisé, Jean: *Extraktion von flüchtigen Chemikalien aus natürlichen Lockergesteinen mittels erzwungener Luftströmung*, 1996, ISBN 3-921694-89-2
- 90 Jorde, Klaus: *Ökologisch begründete, dynamische Mindestwasserregelungen bei*

- Ausleitungskraftwerken*, 1997, ISBN 3-921694-90-6
- 91 Helmig, Rainer: *Gekoppelte Strömungs- und Transportprozesse im Untergrund - Ein Beitrag zur Hydrosystemmodellierung*-, 1998, ISBN 3-921694-91-4
- 92 Emmert, Martin: *Numerische Modellierung nichtisothermer Gas-Wasser Systeme in porösen Medien*, 1997, ISBN 3-921694-92-2
- 93 Kern, Ulrich: *Transport von Schweb- und Schadstoffen in staugeregelten Fließgewässern am Beispiel des Neckars*, 1997, ISBN 3-921694-93-0
- 94 Förster, Georg: *Druckstoßdämpfung durch große Luftblasen in Hochpunkten von Rohrleitungen* 1997, ISBN 3-921694-94-9
- 95 Cirpka, Olaf: *Numerische Methoden zur Simulation des reaktiven Mehrkomponententransports im Grundwasser*, 1997, ISBN 3-921694-95-7
- 96 Färber, Arne: *Wärmetransport in der ungesättigten Bodenzone: Entwicklung einer thermischen In-situ-Sanierungstechnologie*, 1997, ISBN 3-921694-96-5
- 97 Betz, Christoph: *Wasserdampfdestillation von Schadstoffen im porösen Medium: Entwicklung einer thermischen In-situ-Sanierungstechnologie*, 1998, ISBN 3-921694-97-3
- 98 Xu, Yichun: *Numerical Modeling of Suspended Sediment Transport in Rivers*, 1998, ISBN 3-921694-98-1
- 99 Wüst, Wolfgang: *Geochemische Untersuchungen zur Sanierung CKW-kontaminierter Aquifere mit Fe(0)-Reaktionswänden*, 2000, ISBN 3-933761-02-2
- 100 Sheta, Hussam: *Simulation von Mehrphasenvorgängen in porösen Medien unter Einbeziehung von Hysterese-Effekten*, 2000, ISBN 3-933761-03-4
- 101 Ayros, Edwin: *Regionalisierung extremer Abflüsse auf der Grundlage statistischer Verfahren*, 2000, ISBN 3-933761-04-2
- 102 Huber, Ralf: *Compositional Multiphase Flow and Transport in Heterogeneous Porous Media*, 2000, ISBN 3-933761-05-0
- 103 Braun, Christopherus: *Ein Upscaling-Verfahren für Mehrphasenströmungen in porösen Medien*, 2000, ISBN 3-933761-06-9
- 104 Hofmann, Bernd: *Entwicklung eines rechnergestützten Managementsystems zur Beurteilung von Grundwasserschadensfällen*, 2000, ISBN 3-933761-07-7
- 105 Class, Holger: *Theorie und numerische Modellierung nichtisothermer Mehrphasenprozesse in NAPL-kontaminierten porösen Medien*, 2001, ISBN 3-933761-08-5

- 106 Schmidt, Reinhard: *Wasserdampf- und Heißluftinjektion zur thermischen Sanierung kontaminierter Standorte*, 2001, ISBN 3-933761-09-3
- 107 Reinhold Josef.: *Schadstoffextraktion mit hydraulischen Sanierungsverfahren unter Anwendung von grenzflächenaktiven Stoffen*, 2001, ISBN 3-933761-10-7
- 108 Schneider, Matthias: *Habitat- und Abflussmodellierung für Fließgewässer mit unscharfen Berechnungsansätzen*, 2001, ISBN 3-933761-11-5
- 109 Rathgeb, Andreas: *Hydrodynamische Bemessungsgrundlagen für Lockerdeckwerke an überströmbareren Erddämmen*, 2001, ISBN 3-933761-12-3
- 110 Lang, Stefan: *Parallele numerische Simulation instationärer Probleme mit adaptiven Methoden auf unstrukturierten Gittern*, 2001, ISBN 3-933761-13-1
- 111 Appt, Jochen; Stumpp Simone: *Die Bodensee-Messkampagne 2001, IWS/CWR Lake Constance Measurement Program 2001*, 2002, ISBN 3-933761-14-X
- 112 Heimerl, Stephan: *Systematische Beurteilung von Wasserkraftprojekten*, 2002, ISBN 3-933761-15-8
- 113 Iqbal, Amin: *On the Management and Salinity Control of Drip Irrigation*, 2002, ISBN 3-933761-16-6
- 114 Silberhorn-Hemminger, Annette: *Modellierung von Kluftaquifersystemen: Geostatistische Analyse und deterministisch-stochastische Kluftgenerierung*, 2002, ISBN 3-933761-17-4
- 115 Winkler, Angela: *Prozesse des Wärme- und Stofftransports bei der In-situ-Sanierung mit festen Wärmequellen*, 2003, ISBN 3-933761-18-2
- 116 Marx, Walter: *Wasserkraft, Bewässerung, Umwelt - Planungs- und Bewertungsschwerpunkte der Wasserbewirtschaftung*, 2003, ISBN 3-933761-19-0
- 117 Hinkelmann, Reinhard: *Efficient Numerical Methods and Information-Processing Techniques in Environment Water*, 2003, ISBN 3-933761-20-4
- 118 Samaniego-Eguiguren, Luis Eduardo: *Hydrological Consequences of Land Use / Land Cover and Climatic Changes in Mesoscale Catchments*, 2003, ISBN 3-933761-21-2
- 119 Neunhäuserer, Lina: *Diskretisierungsansätze zur Modellierung von Strömungs- und Transportprozessen in geklüftet-porösen Medien*, 2003, ISBN 3-933761-22-0

ISSN 0343-1150