

Pfaffenwaldring 61  
D-7000 Stuttgart 80  
Telefon (07 11) 685-1  
Durchwahl 685-4714/5

Wissenschaftlicher Bericht  
Nr. 86/9 (HWV 071)

**KONZEPT EINES ZWEISCHICHTENMODELLS  
ZUR BESCHREIBUNG DER MAKRODISPERSION**

**Förderung:** Deutsche Forschungsgemeinschaft (DFG)

**Vorhaben:** Ko 528/11-1  
DFG-Forschergruppe: "Modellierung des großräumigen  
Wärme- und Schadstofftransports im Grundwasser",  
Teilprojekt 1

**Berichtszeitraum:** 1.8.1985 bis 31.8.1986

**Sachbearbeiter:** Dr.-Ing. K. Spitz

Stuttgart, im August 1986



(Prof. Dr. H. Kobus)



(Dr.-Ing. K. Spitz)

## INHALTSVERZEICHNIS

	Seite
VERZEICHNIS DER BILDER	2
1. EINLEITUNG	4
2. BESCHREIBUNG DER DISPERSION IN PORENDRUNDWASSERLEITERN	5
2.1 Dispersion im homogenen porösen Medium	5
2.2 Dispersion im natürlichen Grundwasserleiter	6
3. NUMERISCHE MODELLIERUNG DES VERTIKAL-EBENEN STOFFTRANSPORTS LÄNGS EINER STROMRÖHRE	9
3.1 Allgemeines	9
3.2 Vertikal-ebene Modellierung mit der Random-Walk-Methode	9
3.3 Beschreibung des Stofftransports mit einer mobilen und einer immobilen Transportebene	15
3.4 Eindimensionale, tiefenintegrierte Beschreibung	17
4. ANWENDUNG DER DREI VERFAHREN AUF AUSGEWÄHLTE BEISPIELE	18
4.1 Vergleich mit Experimenten	18
4.2 Numerischer Vergleich	19
5. ZUSAMMENFASSUNG UND WEITERE VORGEHENSWEISE	21
LITERATURVERZEICHNIS	22
ANHANG	46

VERZEICHNIS DER BILDER

- Bild 1: Experimentell bestimmte Dispersionskoeffizienten des dispersiven Stofftransports in homogenen, isotropen Modellböden (aus Spitz, 1985)
- Bild 2: Numerische Approximation des Stofftransports (vereinfacht vertikal-ebene Darstellung)
- Bild 3: Wahl des zweischichtigen Ersatzsystems (aus Söll, 1985)
- Bild 4: Skalenabhängigkeit der Dispersivität (nach Beims, 1982)
- Bild 5: Strömungskonfiguration und Randbedingungen
- Bild 6: Konzentrationsverteilung zur Zeit  $t$  bei momentanem Stoffeintrag
- Bild 7: Wahrscheinlichkeitsverteilung mit Hilfe einer Zufallszahl (nach Uffink, 1983)
- Bild 8: Teilchenbewegung für einen Zeitschritt  $\Delta t$  (aus Koerner, 1986)
- Bild 9: Prozentuale Verteilung der Punkte mit der Random-Walk-Methode (Festkonzentrationsrandbedingung) (aus Koerner, 1986)
- Bild 10: Berechnung der Ausbreitung einer Tracerfront in einem geschichteten Aquifer (aus Koerner, 1986)
- Bild 11: Modellierung des Stofftransports mit einer mobilen und einer immobilen Transportebene
- Bild 12: Kontrollvolumen und Massenbilanz
- Bild 13: Rechenablauf zur Berechnung von Konvektion, Dispersion und Austausch
- Bild 14: Analytische Berechnung des Austausches nach Herzer
- Bild 15: Anwendungsbeispiel
- Bild 16: Eindimensionaler Stofftransport in Strömungsrichtung
- Bild 17: Experimente in einem Modellaquifer mit lokalen Inhomogenitäten
- Bild 18: Geschichteter Aquifer
- Bild 19: Durchbruchskurven nach einem Fließweg von 10 m, 20 m und 30 m (zweidimensionale Berechnung, eindimensionale Annäherung)
- Bild 20: Durchbruchskurven nach einem Fließweg von 40 m, 50 m und 100 m (zweidimensionale Berechnung, eindimensionale Annäherung)
- Bild 21: Fließwegabhängigkeit der äquivalenten Dispersivität (aus Koerner, 1986)

- Bild 22: Durchbruchskurven nach einem Fließweg von 10 m, 20 m und 30 m (2-D-Berechnung, Annäherung mit dem Schichtenansatz, 1-D-Berechnung für konstante Transportparameter)
- Bild 23: Durchbruchskurven nach einem Fließweg von 40 m, 50 m und 100 m (2-D-Berechnung, Annäherung mit dem Schichtenansatz, 1-D-Berechnung für konstante Transportparameter)
- Bild 24: Variation der Transportparameter



## 1. EINLEITUNG

Die mathematische Beschreibung der Grundwasserströmung durch das Darcy-Gesetz ermöglicht es, neben den Grundwasserständen auch die Transportrichtung und die mittlere Transportgeschwindigkeit von Wasserinhaltsstoffen zu ermitteln. Die bei Transportvorgängen in porösen Medien zusätzlich zu diesem konvektiven Transport auftretende Vermischung wurde in ersten Ansätzen von Taylor, 1954 und Aris, 1956 untersucht. Für ein ideales homogenes poröses Medium (z. B. Einkornsande) läßt sich zur Beschreibung der Dispersion als Arbeitshypothese ein zum Fick'schen Diffusionsgesetz äquivalenter Ansatz formulieren. Die Dispersionskoeffizienten in und quer zur Strömungsrichtung berechnen sich näherungsweise als Produkt der Strömungsgeschwindigkeit und einer bodenabhängigen Länge. Diese Länge kann bei idealen porösen Medien in Bezug zu dem typischen Korndurchmesser des Korngerüstes gebracht werden.

Die in der Natur gemessenen Ausbreitungsvorgänge zeigen, daß diese für die homogene Porenmatrix gefundene Beziehung nur schwer auf den Stofftransport in einem geologisch komplex aufgebauten natürlichen Aquifer übertragen werden kann. Die Dispersionskoeffizienten liegen um Größenordnungen über den im Labor gefundenen Werten. Daneben findet man in der Regel einen Dispersionskoeffizienten, der mit Zunahme des Betrachtungsraumes in seiner Größe ansteigt. Die Beschreibung der Dispersion im natürlichen Aquifer ist deshalb bis heute in vielen Fällen unbefriedigend.

In dem vorliegenden Bericht wird versucht, einen kurzen Abriß einer Vorgehensweise zu geben, mit der sich der dispersive Transport im Feld besser beschreiben läßt als allein mit dem Ansatz nach Fick. Die Arbeit ist in der DFG-Forschergruppe "Modellierung des großräumigen Wärme- und Schadstofftransports im Grundwasser" eingebunden. Ein Teil der Arbeiten wurden im Rahmen von Diplomarbeiten durchgeführt (Ebinger, 1986; Koerner, 1986). Deren Ergebnisse werden in diesem Bericht zum Teil mit übernommen.

## 2. BESCHREIBUNG DER DISPERSION IN PORENDRUNDWASSERLEITERN

### 2.1 Dispersion im homogenen porösen Medium

Grundlage zur Beschreibung der Vermischungsvorgänge in einem natürlichen Grundwasserleiter ist die Kenntnis der Dispersion von Wasserinhaltsstoffen durch die Porenmatrix. Eine Vielzahl experimenteller Arbeiten belegen hier die Gültigkeit des Fick'schen Gesetzes.

Unter Annahme eines homogenen, isotropen Mediums, das aus Kugeln des Durchmessers  $d$  aufgebaut ist, läßt sich die Abhängigkeit der Dispersionskoeffizienten längs und quer zur Strömungsrichtung als Funktion zweier dimensionsloser Größen angeben (Bild 1):

Pecletzahl des Kornes: Sie beinhaltet die Abhängigkeit des Dispersionskoeffizienten von der Geschwindigkeit und des Korndurchmessers.

Inverse Schmidt-Zahl: Diese Kennzahl charakterisiert den Einfluß der molekularen Diffusion. Für ( $Re \gg 10^{-2}$ ) überwiegt bei den bisher in der Literatur durchgeführten Experimenten mit mischbaren Fluiden die mechanische Dispersion, so daß der Beitrag der Diffusion vernachlässigt werden kann. Die experimentellen Ergebnisse lassen sich dann in folgender Form darstellen:

$$\frac{D_{U,T}}{D_0} = \alpha_{1,2} Pe^{\beta_{1,2}} \quad (2.1)$$

mit Exponenten nahe bei 1.

Die Dispersionskoeffizienten kann man somit als Produkt einer nur von der Porenmatrix abhängigen Konstante (Dispersivität  $\alpha_{L,T}$  in m) und der Abstandsgeschwindigkeit schreiben.

Für die allgemeine Formulierung der Dispersionskoeffizienten muß der Sensorcharakter berücksichtigt werden. Bei zweidimensionaler Betrachtung des Stofftransports in einem isotropen Medium führt dies z. B. zu

$$D_{xx} = \alpha_L v_x^2 / |v| + \alpha_T v_x^2 / |v| \quad (2.2)$$

$$D_{zz} = \alpha_T v_z^2 / |v| + \alpha_L v_z^2 / |v| \quad (2.3)$$

$$D_{xz} = D_{zx} = (\alpha_L - \alpha_T) v_x v_z / |v| \quad (2.4)$$

$$\text{mit } |v| = \sqrt{v_x^2 + v_z^2} \quad (2.5)$$

## 2.2 Dispersion im natürlichen Grundwasserleiter

### 2.2.1 Dreidimensionale Beschreibung des Stofftransports

Mit den beiden Bausteinen konvektiver Transport, beschrieben durch das Darcy-Gesetz, und korngerüstbedingte Dispersion, beschrieben durch das Fick'sche Gesetz, kann prinzipiell auch der Transport von Wasserinhaltsstoffen in einem komplex aufgebauten Aquifer exakt gelöst werden (kein Abbau, keine Reaktionen etc.) (Bild 2). Bild 2 zeigt vereinfacht an einem vertikal-ebenen Schnitt die damit verbundene notwendige Auflösung und Diskretisierung des Grundwasserleiters (Bild 2a). Die Durchführbarkeit einer genauen dreidimensionalen Berechnung ist im konkreten Fall jedoch i. a. aus unterschiedlichen Gründen nicht möglich:

- Der räumliche Aufbau des Grundwasserleiters ist nicht hinreichend genau bekannt.
- Die Anfangs- und Randbedingungen für Strömung und Transport müssen zum Teil geschätzt werden.
- Die Rechnerkapazität und die Rechenzeit ist begrenzt.
- Der Aufwand für die Berechnung und der hieraus erzielte Nutzen müssen in einem ausgewogenen Verhältnis stehen.

Eine weitgehende dreidimensionale Modellierung und Berechnung des Stofftransports wird daher auf wenige Transportprobleme beschränkt bleiben.

### 2.2.2 Schichtenmodelle

Grundelement aller Schichtenmodelle ist es, eine aufgrund der bekannten geologischen Gegebenheiten sinnvolle Schematisierung des Grundwasserleiters zu finden. Die naturnahe dreidimensionale Modellierung wird zugunsten einer Modellierung aufgegeben, die zwar die individuellen Gegebenheiten des Aquifers nicht mehr detailliert berücksichtigt, die aber charakteristischen Aquiferbereichen Rechnung trägt (Bild 2.b). Der Grad der Vereinfachung erlaubt die Unterscheidung der Schichtenmodelle.

Söll, 1985 untersucht den Wärmetransport in einem Grundwasserleiter mit ausgeprägter geologischer Schichtung (Bild 3). Eine vereinfachte Berechnung mit 2 Schichten, die die tatsächliche geologische Struktur angenähert repräsentieren, erlaubt hier eine zu der Rechnung mit Berücksichtigung aller geologischen Schichten vergleichbare Modellierung des Stofftransports (Bild 3). Je ausgeprägter und homogener die geologische Schichtung



vorliegt, desto leichter läßt sich ein schematisiertes Schichtenmodell formulieren.

Die weitgehendste Vereinfachung im Sinne eines Schichtenmodells ist die Aufteilung des Aquifers in zwei Bereiche. Deans, 1963 untersucht den Transport mit Berücksichtigung der Konvektion in einer mobilen Region. In der zweiten Region ist kein Transport erlaubt (immobiler Transportebene). Unter Annahme völliger Durchmischung in beiden Bereichen wird der Massenfluß proportional zur Konzentrationsdifferenz angenommen. Das Modell wird von Coats und Smith, 1964 um den Dispersionsterm in der mobilen Schicht erweitert. Skopp et al., 1981 lassen in beiden Ebenen einen Transport in Längsrichtung zu. Ein weiteres Modell von Skopp und Warrick, 1974 erlaubt die Berücksichtigung des konvektiven und dispersiven Transports in der mobilen Region und eines dazu vertikalen diffusiven Transports in der immobilen Schicht. Weitere Schichtenansätze sind in Herr, 1985 beschrieben.

### 2.2.3 Tiefenintegrierte Modellierung

Eine für die Berechnung von großräumigen Strömungs- und Transportproblemen oft praktizierte Vereinfachung ist die Bildung von mittleren Strömungswerten (Bild 2c). Bei einem Aquifer mit weit größerer lateraler als vertikaler Ausdehnung bedeutet es, daß in der Regel die allgemeine, dreidimensionale Differentialgleichung integriert wird und die örtlichen Aquiferparameter wie Durchlässigkeitsbeiwert und spezifischer Speicherkoeffizient durch die integralen Kenngrößen des Aquifers wie Transmissivität und Speicherkoeffizient ersetzt werden. Im Sinne eines Schichtenmodells entspräche dies einer Schematisierung des Aquifers auf nur eine Transportebene. Es wird deutlich, daß hier alle vernachlässigten konvektiven Transportanteile bei der Berechnung des Stofftransports in dem dispersiven Transportterm berücksichtigt werden müssen.

Die Ergebnisse von Feldversuchen zeigen, daß für die Beschreibung des dispersiven Transports in inhomogenen Medien mit konstanten Dispersionskoeffizienten ein hinreichend großer Betrachtungsmaßstab gewählt werden muß, über welchem sowohl die konvektiven als auch die dispersiven Transportanteile sinnvoll gemittelt werden können. Vor Erreichen dieses repräsentativen Elementarvolumens ist der Dispersionskoeffizient vom Betrachtungsmaßstab abhängig und wächst vom Dispersionskoeffizienten bei überwiegend korngerüstbedingter Vermischung stetig bis zum asymptotischen

Makrodispersionskoeffizienten an, der die Geschwindigkeitsvariation infolge geologischer Inhomogenität repräsentiert (Bild 4). Die stark vereinfachte Berechnung durch die Mittelung über die gesamte Mächtigkeit erscheint deshalb für praktische Fragestellungen zu weitreichend.

### 3. NUMERISCHE MODELLIERUNG DES VERTIKAL-EBENEN STOFFTRANSPORTS LÄNGS EINER STROMRÖHRE

#### 3.1 Allgemeines

In der vorliegenden Arbeit soll in ersten Ansätzen untersucht werden, inwieweit ein erweiterter mehrparametrischer Dispersionsansatz in Form eines Schichtenmodells den dreidimensionalen Charakter des Stofftransports vorteilhaft beschreiben läßt. Zunächst muß der einfachste Schichtenansatz (Berücksichtigung einer mobilen und einer immobilen Transportebene nach Coats und Smith) im Vergleich zu der tiefenintegrierten Modellierung gesetzt werden. Hier interessiert es, ob diese wenig aufwendige Erweiterung der Transportmodellierung eine wesentliche Verbesserung mit sich bringt.

Die Modellierung mit mehreren mobilen Schichten wird in dieser Arbeit nicht weiter verfolgt. Sie wird auf wenige Anwendungsfälle beschränkt bleiben, da der Mehraufwand einer dreidimensionalen Modellierung gegenüber dieser Art der Modellierung mit Zunahme der Schichtenanzahl zunehmend geringer wird.

Gemäß der Zielsetzung wird im folgenden für ausgewählte Konfigurationen der Stofftransport mit drei Berechnungsverfahren berechnet und untereinander verglichen. Vereinfacht wird nur der vertikal-ebene Transport betrachtet. Sinngemäß lassen sich die Ergebnisse auf dreidimensionale Ausbreitungsvorgänge übertragen. Zum Teil werden die Ergebnisse durch Modellversuche belegt.

Die drei Berechnungsverfahren sind:

- vertikal-ebene Berechnung mit einem Random-Walk-Modell (Bild 2a)  
(Programm Layer, siehe Kapitel 3.2 und Anhang)
- Berechnung mit einem Schichtenansatz (mobil-immobil; Bild 2b)  
(Programm Dismo, siehe Kapitel 3.3 und Anhang)
- Tiefenintegrierte, eindimensionale Berechnung (Bild 2c)  
(Programm Dismo, Programm Mini, siehe Kapitel 3.4 und Anhang)

#### 3.2 Vertikal-ebene Modellierung mit der Random-Walk-Methode

Das Berechnungsprogramm wurde im Rahmen einer Diplomarbeit angefertigt (Koerner, 1986). Die nachstehenden Ausführungen wurden im wesentlichen aus dieser Arbeit übernommen.



Das Random-Walk-Verfahren beruht auf theoretischen Grundlagen der statistischen Physik, die in Chandrasekhar, 1943 zusammengefaßt sind. Scheidegger, 1961 und De Josselin de Jong, 1958 übertragen diese Methode zum ersten Mal auf die Beschreibung des dispersiven Transports in einem porösen Medium. Sie stellten fest, daß Diffusions- und Dispersionsvorgänge im porösen Medium als Zufallsbewegungen von Markierungsteilchen beschrieben werden können. Somit kann der Stofftransport anhand von Tracerteilchen simuliert werden, die in einem Strömungsfeld fortbewegt werden. Jedem Teilchen wird als Repräsentant der Schadstofffahne eine Masse zugesprochen. Die Teilchen bewegen sich auf Bahnen, die sich aus einer Vielzahl von hintereinander folgenden Einzelsprüngen zusammensetzen. Jeder Transportschritt besteht aus einer konvektiven Bewegung und einer zufallsbehafteten dispersiven Bewegung. Jeder weitere Transportschritt ist unabhängig vom vorherigen. Die Anzahl der Transportschritte muß hoch sein, um eine repräsentative dispergierende Tracerfront zu erhalten. Die Punkte bewegen sich unabhängig voneinander; ihre Gesamtheit stellt die maximale Schadstoffmasse dar. Anhand der Anzahl von Teilchen, die sich in einem bestimmten Volumen zu einem definierten Zeitpunkt befinden, kann man auf die Schadstoffkonzentration zurückschließen. Als Hilfe wird ein Gitterraster über den betrachteten Aquifer gelegt und die Anzahl der Tracerteilchen pro Gitterzelle gezählt. Die Anzahl gibt Aufschluß über die Konzentration in der Gitterzelle.

Zur Nachahmung der Dispersionsvorgänge mit dem Random-Walk-Verfahren wird der Lösungsansatz der Transportgleichung in einem homogenen, ein-dimensionalen Aquifer herangezogen. Mit den Randbedingungen der momentanen Tracerzugabe am Ort ( $x = 0$ ) und zur Zeit ( $t = 0$ ) ergibt sich die Konzentrationsverteilung

$$c(x) = \frac{c}{2 \sqrt{D_L t}} \exp\left(-\frac{(x-vt)^2}{4D_L t}\right) \quad (3.1)$$

mit  $c_0 = \frac{\Delta M}{A n_e}$

$$D_L = v \alpha_L$$

$\Delta M$  = momentan eingetragene Schadstoffmasse g

A = Querschnittsfläche des Aquifers m

$n_e$  = Porosität

$D_L$  = Dispersionskoeffizient  $m^2/s$

Ihr Verlauf ist in Bild 6 dargestellt. Die Kurve beschreibt die gleiche Form wie die Gauß'sche Normalverteilung, die man in der Wahrscheinlichkeitsrechnung vorfindet:

$$f(x) = \frac{1}{\sqrt{2\pi\sigma^2}} \exp\left(-\frac{(x-\mu)^2}{2\sigma^2}\right) \quad (3.2)$$

Für die Gleichungen (3.1) und (3.2) liegen folgende Analogien vor:

$$\begin{array}{ccc} c & \longleftrightarrow & f \\ vt & \longleftrightarrow & \mu \\ D_L t & \longleftrightarrow & \frac{\sigma^2}{2} \end{array} \quad (3.3)$$

Mit dieser Formulierung entsteht eine Normalverteilung mit dem Mittelwert

$$\mu = vt \quad (\text{Weglänge}) \quad (3.4)$$

und der Standardabweichung

$$\sigma = \pm \sqrt{2D_L t} \quad (\text{Vermischungsbreite}) \quad (3.5)$$

Sie dient als Basis der Random-Walk-Methode, in der Teilchen zur Simulation des Stofftransports eingesetzt werden. Um eine normalverteilte Dichte der Teilchen um den Mittelwert  $\mu$  zu erhalten, müssen diese die Weglänge  $\mu$  zurücklegen und sich danach um ein Vielfaches der Vermischungsbreite vor- bzw. zurückbewegen. Dieser Faktor muß stochastisch erzeugt werden. Dazu wird eine Zufallsvariable definiert, mit der der zweite Sprung behaftet wird. Die Zufallsvariable kann unterschiedlich als normal- oder gleichverteilt angenommen werden (Bild 7).

Bei der Überlagerung von vielen Einzelbewegungen, die durch eine gleichverteilte Zufallsvariable gesteuert werden, entsteht wieder eine Normalverteilung. Somit verhält sich der dispersive Sprung mit gleichverteilter Zufallsvariable nach  $n$  Schritten äquivalent dem Sprung mit normalverteilter Zufallsvariable.

In Bild 7 erkennt man, daß  $M$  dem konvektiven und  $U$  dem dispersiven Transport entspricht.

Bei normalverteilter Zufallsvariable  $Z'$  mit Mittelwert 0 und Standardabweichung 1 ist die Weglänge, die ein Teilchen pro Zeitschritt  $t$  zurücklegt

$$x = v \Delta t + Z' \sqrt{2D_L t} \quad (3.6)$$

und bei gleichverteilter Zufallsvariablen im Intervall 0,1 gilt

$$x = v \Delta t \pm Z \sqrt{6D_L \Delta t} \quad (3.7)$$

Erst eine Vielzahl von Punkten und Einzelbewegungen spiegelt den tatsächlichen Transport wider.

Die für den eindimensionalen Transport in x-Richtung hergeleiteten Beziehungen können auf den zwei- bzw. dreidimensionalen Transport erweitert werden (Prickett et al., 1981).

In dieser Arbeit soll die Strömung immer parallel zu den Schichtgrenzen eines geologisch geschichteten Grundwasserleiters sein. Dadurch vereinfacht sich der Aufwand wesentlich. Im einzelnen wird bei der Berechnung des Stofftransports wie folgt vorgegangen:

#### Berechnung des konvektiven Transports:

Jedes Teilchen bewegt sich mit der Abstandsgeschwindigkeit  $v_a$  der Schicht fort, in der es sich zum Zeitpunkt der Berechnung befindet. Das Teilchen wird nur in x-Richtung konvektiv transportiert (Bild 8), da die Strömung parallel zu den Schichtgrenzen verläuft.

#### Berechnung des dispersiven Transports:

Beim dispersiven Sprung vollzieht das Teilchen einen zufallsbedingten Transportschritt. Dazu wurde die Steuerung des Sprungs mit der gleichverteilten Zufallszahl RANF ( ) der Programmiersprache FORTRAN gewählt.

Die Beschreibung des dispersiven Schrittes quer zur Strömungsrichtung erfolgt analog dem dispersiven Transport in Gleichung (3.7), wobei die longitudinale Dispersivität durch die transversale ersetzt wird:

$$x_{disp} = \pm z_1 \sqrt{6\alpha_L \Delta t v_a} \quad (3.8)$$

$$z_{dsp} = \pm z_2 \sqrt{6\alpha_T \Delta t v_a} \quad (3.9)$$

$Z_1$  und  $Z_2$  sind zwei voneinander unabhängige Zufallszahlen. Dadurch kann sich das Teilchen an einen durch Zufall bestimmten Ort in den in Bild 8 angegebenen Rahmen begeben.



Spiegelung an einer undurchlässigen Berandung:

Durch die Bewegung quer zur Strömungsrichtung kann ein Teilchen bei der Berechnung über die Deckschicht bzw. das Liegende hinauspringen. Dies ist physikalisch nicht möglich und muß in der numerischen Berechnung verhindert werden. Sobald ein Tracerteilchen auf einen undurchlässigen Rand trifft, wird es dort reflektiert (Bild 8).

Korrektur bei Überspringen einer Schichtgrenze:

Bei der Berechnung muß außerdem sichergestellt werden, daß ein Partikel bei Erreichen einer Schichtgrenze an dieser reflektiert wird oder gemäß dem Strömungsverhalten der angrenzenden Schicht in diese hineintransportiert wird (Ackerer, 1984). Dieser Schritt wird konstruiert, in dem das Partikel auf die Schichtgrenze zurückgesetzt wird und mit dem verbleibenden Zeitschritt einen weiteren dispersiven Sprung vollzieht. Dieser Sprung muß zufällig in beide Schichten erfolgen können (Bild 8).

Für das Teilchen in Bild 8 (untere Abbildung) gilt:

$$\begin{aligned} z_{disp} &= -z_2 \sqrt{6\alpha_{T1} v_{a1} \Delta t_1} + z_3 \sqrt{6\alpha_{T1} v_{a1} \Delta t_2} \\ z_{disp} &= -z_2 \sqrt{6\alpha_{T1} v_{a1} \Delta t_1} - z_3 \sqrt{6\alpha_{T2} v_{a2} \Delta t_2} \end{aligned} \quad (3.10)$$

mit  $\Delta t = \Delta t_1 + \Delta t_2$

Berechnung der mittleren Schadstofffront und der äquivalenten Dispersivität:

Nach einer Vielzahl von Transportschritten kann aus der Punktverteilung der mittlere konvektive Transport und die äquivalente Dispersivität bestimmt werden:

Mittelwert der Punktverteilung  $\bar{x} = \frac{\sum_{i=1}^n x_i}{n}$  (3.11)

mit  $\bar{x}$  = mittlerer zurückgelegter Weg aller Punkte

$x_i$  = Ortskoordinaten der Einzelteilchen

$n$  = Gesamtanzahl der Teilchen

Standardabweichung der Punkteverteilung

$$\sigma^2 = \frac{\sum_{i=1}^n (x_i - \bar{x})^2}{n-1} \quad (3.12)$$

Mit  $(\bar{x} = \bar{v}_a t)$  und  $(\sigma = \sqrt{2\alpha_L \bar{x}})$  kann sowohl die mittlere Abstandsgeschwindigkeit als auch die äquivalente Dispersivität berechnet werden:

$$v_a = \frac{\bar{x}}{t} \quad (3.13)$$

$$\alpha_L = \frac{\sigma^2}{2\bar{x}} \quad (3.14)$$

#### Wahl eines geeigneten Zeitschritts:

Für die Wahl des Zeitschritts wurden zwei Kriterien angelegt:

Zum einen soll ein Teilchen dispersiv nicht über die gesamte Mächtigkeit einer Schicht springen. Im vorliegenden Programm ist der Sprung auf ein Drittel der Schichtmächtigkeit begrenzt über

$$\Delta t < \frac{m^2}{9.6 \cdot v_a \cdot \alpha_T} \quad (3.15)$$

Als zweites Kriterium wurde der maximale konvektive Schritt festgelegt. Erst nach vielen Einzelsprüngen bekommt man die gewünschte repräsentative Punkteverteilung (Normalverteilung).

$$\Delta t < \frac{m_{\min}}{v_{a, \max}} \quad (3.16)$$

mit  $m_{\min}$  = kleinste Schichtmächtigkeit

$v_{a, \max}$  = maximale Geschwindigkeit

Hierbei ist der kleinere Zeitschritt maßgebend.

#### Festlegung einer Festkonzentrationsrandbedingung:

Um einen konstanten Schadstoffzufluß zu simulieren, müssen Teilchen an Infiltrationsstellen zugegeben werden. Wenn man bei der Berechnung die Punkte gleichmäßig über die Tiefe verteilt einsetzt, bleibt unberücksichtigt, daß Schichten mit großer Geschwindigkeit mehr Masse mitführen. Dies soll in Bild 9 veranschaulicht werden.

Das Bild 9 zeigt schematisch einen Aquifer mit zwei Schichten unterschiedlicher Geschwindigkeit. Zu jedem Zeitschritt werden sechs Punkte an der Zugabestelle gleichmäßig verteilt erzeugt. Zusätzlich wird ein Raster zur Bestimmung der Konzentrationen erstellt. Nach drei Zeitschritten befinden sich in der ersten oberen Zelle doppelt so viel Teilchen wie in der unteren. Demnach ist die Konzentration in der oberen Schicht mit geringerer Ge-

schwindigkeit größer.

Dies wird verhindert, indem die Teilchen gemäß dem prozentualen Durchfluß der jeweiligen Schicht eingesetzt werden:

$$\frac{NP_i}{N} = \frac{Q_i}{Q_{ges}} \quad (3.17)$$

- mit N : Gesamtanzahl der Punkte
- NP<sub>i</sub> : Anzahl der Punkte in der i-ten Schicht
- Q<sub>i</sub> : Durchfluß in der i-ten Schicht
- Q<sub>ges</sub> : Gesamtdurchfluß

#### Berechnung der Durchbruchskurve:

Die Berechnung der Konzentrationsverteilung erfolgt über die Anzahl der Teilchen, die in jedem Zeitschritt den Beobachtungspunkt erreichen. Die Partikel werden aufaddiert. Im Berechnungsprogramm (siehe Listing) werden sie anschließend zur Einsparung von Rechenzeit eliminiert.

Im Anhang ist das erstellte Programm beigelegt. Der Programmaufbau orientiert sich streng an die obigen Ausführungen. Da das Programm durch Kommentarkarten in sich verständlich abgefaßt ist, wird auf eine weitergehende Dokumentation verzichtet. In Bild 10 ist beispielhaft eine Berechnung des Transports von Schadstoffen in einem geschichteten Aquifer aufgetragen. Die Schichtenstruktur ist an der Ausbreitung deutlich zu erkennen.

### 3.3 Beschreibung des Stofftransports mit einer mobilen und einer immobilen Transportebene

Das Bild 11 zeigt die für den idealisierten Aquifer gewählte Notation. Die eindimensionale Transportgleichung lautet dann:

$$\theta_m \frac{\partial c_m}{\partial t} = -\theta_m v_{a,m} \frac{\partial c_m}{\partial x} + \theta_m D_{L,m} \frac{\partial^2 c_m}{\partial x^2} - \alpha (c_m - c_{i,m}) \quad (3.18)$$

$$\theta_{im} \frac{\partial c_{im}}{\partial t} = \alpha (c_m - c_{im}) \quad (3.19)$$

Der Dispersionskoeffizient und die Abstandsgeschwindigkeit als Kennwerte der mobilen Transportebene werden mit einem Indices m versehen, um zu unterstreichen, daß ihre Bedeutung und ihre Größe von der zugrundege-



legten Modellvorstellung abhängig ist.

Eine analytische Lösung der Transportgleichung ist nur begrenzt möglich und führt in der Regel zu unübersichtlichen Lösungen (Herr, 1985). In dieser Arbeit wird die numerische Aufbereitung weiterverfolgt.

Das betrachtete Lösungsgebiet wird in einzelne Zellen unterteilt (Bild 11) und für jedes Element die Massenbilanz aufgestellt (Bild 12).

#### Konvektion:

Der konvektive Transport wird explizit berechnet (Bild 12).

Der Zeitschritt wird so gewählt, daß sich pro Zeitschritt die Stofffront genau um einen Zellabstand weiterbewegt:

$$\Delta t = \frac{\Delta x}{v_{a,m}} \quad (3.20)$$

Die numerische Dispersion wird mit diesem Verfahren vermieden. Diese Festlegung des Zeitschrittes muß allerdings bei der Berechnung des Austausches durch Wahl eines geeigneten Lösungsverfahrens berücksichtigt werden, da das Zeitinkrement bei der zeitlichen Diskretierung ebenfalls linear in den Austausch eingeht.

#### Dispersion

Der dispersive Term wird implizit formuliert (Bild 12).

#### Austausch

In dem gewählten Rechengang wird der konvektive und dispersive Transport vom Austauschvorgang entkoppelt. Zunächst wird für einen Zeitschritt die Konvektion und die Dispersion in der mobilen Region berechnet (Bild 13). Mit diesen Konzentrationen erfolgt dann über den Zeitschritt  $\Delta t$  der Austausch zwischen beiden Schichten. Dieser wird durch einen analytischen Berechnungsgang nach Herzer approximiert (Bild 14).

Nach der Berechnung von Konvektion, Dispersion und Austausch ist die Transportberechnung für einen Zeitschritt abgeschlossen. Bild 15 gibt für ein Anwendungsbeispiel den typischen Verlauf der Durchbruchkurve und den Konzentrationsverlauf in Strömungsrichtung an.

### 3.4 Eindimensionale, tiefenintegrierte Beschreibung

Die Lösung der Transportgleichung läßt sich für eine Vielzahl unterschiedlicher Rand- und Anfangsbedingungen analytisch angeben. Die für die weiteren Berechnungen gewählten Randbedingungen sind in Bild 5 und Bild 16 zusammengestellt. In Bild 16 ist die geschlossene Lösung nach Ogata und Banks, 1962 mit aufgenommen.

#### 4. ANWENDUNG DER DREI VERFAHREN AUF AUSGEWÄHLTE BEISPIELE

##### 4.1 Vergleich mit Experimenten

Der Fick'sche Ansatz zur Beschreibung der vorwiegend korngerüstbedingten Dispersion kann zuverlässig in einem homogenen Modellaquifer überprüft werden. Die Makrodispersion als Folge von vereinfachten Annahmen hinsichtlich des Aquiferaufbaus ist nur schwer durch Laborexperimente nachvollziehbar. Hier kommen Experimente an einem Versuchstand mit großem Fließweg und einem komplex aufgebauten, inhomogenen Modellaquifer den Anforderungen am nächsten. Experimente mit einem einfach gehaltenen porösen Medium können nur tendenziell Aussagen hinsichtlich des Stofftransports geben. Die Verifikation eines erweiterten Dispersionsansatzes macht in erster Linie die Anbindung der Untersuchungen an Naturdaten notwendig.

Herr, 1985, untersucht einen homogenen Einkornsand mit geometrisch definierten Inhomogenitäten kleinerer Durchlässigkeit (Keramikwürfel). Damit entsteht künstlich ein Aquifer mit zwei verschiedenen porösen Medien, der dem Zweischichtenansatz entspricht. Die im Versuch gemessenen Durchbruchkurven lassen sich sehr gut mit diesem Schichtenansatz beschreiben (Bild 17). Die Berechnung der Durchbruchkurven nur mit der Berücksichtigung der Fick'schen Dispersion führt zu deutlichen Abweichungen zur gemessenen Kurve.

Ebinger, 1986 untersucht einen Einkornsand mit gut durchlässigen Keramikwürfeln. Die Volumenverhältnisse der Einlagerungen zu dem Einkornsand sind in Bild 17 angegeben. Die Einlagerungen bewirken hier nur eine Vergrößerung der Längsdispersivität. Zur Berechnung der Durchbruchkurven müssen nicht beide Aquiferbereiche getrennt berücksichtigt werden. Dies ist zu erwarten, da die Voraussetzungen für die Unterteilung in eine mobile und immobile Phase auch im hydraulischen Modell nicht gegeben sind.

Koerner, 1986 untersucht einen geschichteten Aquifer. Die kurze Versuchsstrecke von 1,20 m erlaubt nur eine vertikal-ebene Berechnung (Bild 18). Die numerische Berechnung zeigt, daß bei größeren Fließstrecken die Durchbruchkurven geglättet werden und die Schichten mit der geringsten Durchlässigkeit dennoch einen Konzentrationsnachläufer verursachen (Bild 18). Diese Kurven sind nicht mit dem Fick'schen Gesetz beschreibbar. Sie zeigen allerdings einen für den gewählten Zweischichtenansatz typischen Verlauf (siehe Kapitel 3.2).



## 4.2 Numerischer Vergleich

Die dem Vergleich zugrundeliegende Konfiguration ist in Bild 18 gezeigt. Der geschichtete Aquifer wird gewählt, da er dem natürlichen Aufbau eines Porengrundwasserleiters in vielen Fällen am ehesten entspricht.

In den Bildern 19 und 20 sind die Durchbruchkurven nach unterschiedlichen Fließwegen mit dem Random-Walk-Modell berechnet (Kapitel 3.2). Die Kurven lassen nicht mehr erkennen, daß der Grundwasserleiter schichtenweise aufgebaut ist.

Die Kurven werden mit folgenden Lösungen angenähert:

1. Die berechneten Durchbruchkurven werden unabhängig voneinander mit der tiefenintegrierten Lösung nach Ogata und Banks angepaßt (Bild 19 und Bild 20). Die Anpassung läßt eine Variation der Dispersivität und der Geschwindigkeit zu. Der infolge der langsamen Fließgeschwindigkeiten in den wenig durchlässigen Schichten auftretende Konzentrationsnachläufer kann nach kleinen Fließstrecken nur unbefriedigend erfaßt werden. Die äquivalente Dispersivität wächst annähernd linear mit dem Fließweg an (Bild 21). Die für den mittleren Transport maßgebende Abstandsgeschwindigkeit nimmt mit dem Fließweg ab.

Hier wird deutlich, daß für den Gesamttransport bei längeren Fließstrecken der Transportanteil in den langsam durchflossenen Schichten an Bedeutung gewinnt.

2. In einem weiteren Vergleich werden alle Durchbruchkurven mit der eindimensionalen Lösung berechnet, in der die für die Durchbruchkurve nach 10 m Fließstrecke gefundenen Werte der Dispersivität und der Abstandsgeschwindigkeit konstant beibehalten werden. Schon nach dem doppelten Fließweg von 20 m sind deutliche Abweichungen von der Sollkurve sichtbar (Bild 22 und Bild 23).
3. Bei der Berechnung mit dem gewählten Schichtenansatz wird analog dem Punkt 2) vorgegangen:
  - Wahl der Abstandsgeschwindigkeit aus der Durchbruchkurve in 10 m Entfernung:  $v_0 = 2,34 \times 10^{-3}$  m/s
  - Wahl von  $\theta_m/\theta_{im}$  nach dem gewählten Aquiferaufbau:

$$\frac{\theta_m}{\theta_{im}} = \frac{m \text{ (Schicht B,C)}}{m \text{ (Schicht A)}} \longrightarrow \begin{array}{l} \theta_m = 0,62 \\ \theta_{im} = 0,38 \end{array}$$

- Schätzung einer Dispersivität zwischen  $\alpha_{L \text{ Korn}} = 0,2 \text{ mm}$  und  $\alpha_{L \text{ 10m}} = 1 \text{ m}$  und  $\alpha_L = 0,3 \text{ m}$
- Anpassen der Durchbruchskurve in 10 m durch Variation des Austauschterms. Als Austauschterm wird gefunden:

$$\alpha = 7,5 \times 10^{-5} \text{ 1/s}$$

Mit diesen Werten werden alle weiteren Durchbruchskurven berechnet (Bild 22 und Bild 23). Für einen weiten Fließwegbereich kann ohne Variation der einmal bestimmten Parameter eine gute Übereinstimmung der Kurven erreicht werden. Für große Fließwege ist bei dieser ersten Anpassung die Annäherung jedoch noch unbefriedigend.

Die Kurven können sicher durch weitere Modifikation der Parameter besser angenähert werden. Einen ersten Eindruck von der Sensitivität der Parameter vermittelt Bild 24. Hier wird von den oben ermittelten Parametern jeweils eine Größe variiert, während die restlichen Parameter konstant gehalten werden. Die ausführliche Parametervariation sollte Inhalt weitergehender Arbeiten sein.

## 5. ZUSAMMENFASSUNG UND WEITERE VORGEHENSWEISE

In dem vorliegenden Bericht wird eine Vorgehensweise zur verbesserten Beschreibung der Makrodispersion im Feld gegeben. Der Bericht faßt die wesentlichen bisherigen experimentellen Arbeiten im Rahmen des Forschungsvorhabens zusammen. Im Anhang werden die verwendeten numerischen Modelle dokumentiert. Die Programme sind durch zahlreiche Kommentarkarten in sich verständlich. Die Ausgabe der Daten erfolgt derart, daß sie direkt mit einem am Institut verfügbaren Plotprogramm (Programm Kurve, Bearbeiter Herzer) graphisch aufgetragen werden können.

Die ersten experimentellen und numerischen Ergebnisse weisen auf die Tauglichkeit des gewählten Ansatzes hin. Die Arbeiten können als Grundlage für weitergehende Untersuchungen dienen. Unter anderem müssen folgende Fragen geklärt werden:

- Wie eindeutig kann eine Durchbruchskurve mit dem gewählten mehrparametrischen Dispersionsansatz angepaßt werden?
- Ist es besser, die Parameteridentifikation nach einer kurzen oder nach einer langen Transportstrecke der Wasserinhaltsstoffe durchzuführen?
- Wie sensitiv sind die einzelnen Transportparameter für die Berechnungen?
- In welchem Maße ist der modifizierte Dispersionsansatz dem tiefengemittelten Fick'schen Ansatz überlegen?
- Können aus einem bekannten Aquiferaufbau unabhängig von einer gemessenen Stoffausbreitung Rückschlüsse auf die Größe der Transportparameter genommen werden?

Die Anbindung an einen Feldfall soll u. a. im Rahmen eines Forschungsstipendiums des Berichtsverfassers weiterverfolgt werden. Als Grundlage dienen die aufwendigen dreidimensionalen Feldexperimente an der Universität in Waterloo/Kanada.



LITERATURVERZEICHNIS

ACKERER, PH.:

Propagation d'un fluide en aquifer poreux sature en eau. Prise en compte et localisation des Heterogeneites par des outils theoretiques et experimentaux.

Université Louis Pasteur, Strasbourg, 1985

ARIS, R.:

On the Dispersion of a Solute in a Fluid Flowing Through a Tube.

Proc. Roy. Soc. Ser. A 235, 67, 1956

BEIMS, U.:

Auswertung von Gütepumpversuchen.

Zeitschrift für angewandte Geologie, 1983

CHANDRASKHAR, S.:

Stochastic Problems in Physics and Astronomy.

Rev. of Modern Physics, Vol. 15, No. 1, pp. 1 - 90, 1943

COATS, K. H.; SMITH, B. D.:

Dead-end Pore Volume and Dispersion in Porous Media.

Society of Petroleum Engineers Journal, S. 73 - 84, March, 1964

DEANS, H. A.:

A Mathematical Model for Dispersion in the Direction of Flow in Porous Media.

Society of Petroleum Engineers Journal, S. 49 - 53, March, 1963

EBINGER, H.:

Experimentelle Bestimmung des Transports von gelösten Wasserinhaltsstoffen in einem Porengrundwasserleiter mit gut durchlässigen Inhomogenitäten.

Diplomarbeit am Institut für Wasserbau, Universität Stuttgart, 1986

HERR, M.:

Grundlagen der hydraulischen Sanierung verunreinigter Porengrundwasserleiter.

Mitteilung des Instituts für Wasserbau, Universität Stuttgart, 1985

DE JOSSELIN DE JONG, G.:

Longitudinal and Transverse Diffusion in Granular Deposits.

Trans. Amer. Geoph. Union, 39, 1958

KOERNER, B.:

Modellierung des Stofftransports in einem ideal geschichteten Grundwasserleiter mit Hilfe der Random-Walk-Methode.

Diplomarbeit am Institut für Wasserbau, Universität Stuttgart, 1986

OGATA, A.; BANKS, R. B.:

A Solution of the Differential Equation of Longitudinal Dispersion in Porous Media.

U. S. Geological Survey, Professional Paper Nr. 411-4, 1961

PRICKETT, T. A.; NAYNIK, T. G.; LONNQUIST, C. G.:  
A Random-Walk Solute Transport Model for Selected Groundwater Quality  
Evaluations.

Illionois State Water Survey, Bulletin 65, 1981

SCHEIDEGGER, A. E.; DE JOSSELIN DE JONG, G.:

Statistical Hydrodynamics in Porous Media.

Int. Appl. Physics, 25, 1961

SKOPP, J.; GARDNER, W. R.; TYLER, E. J.:

Solute Movement in Structured Soils: Two-Region Model with Small Inter-  
action.

Soil Sci. Soc. Am. J., Vol. 45, S. 837-842, 1981

SKOPP, J.; WARRICK, A. W.:

A Two-Phase Model for the Miscible Displacement of Reactive Solutes in  
Soils.

Soil Sci. Soc. of America, Vol. 38, No. 4, S. 545-550, 1974

SÖLL, T.:

Numerische Modellierung des Wärmetransports und Wärmehaushalts im  
Grundwasser - Konzept zur Berechnung der gegenseitigen Beeinflussung  
von Warm- und Kaltwassereinleitungen.

Wissenschaftlicher Bericht HWV 064, Institut für Wasserbau, Universität  
Stuttgart, 1985

SPITZ, K.:

Dispersion in porösen Medien - Einfluß von Inhomogenitäten und Dichteun-  
terschieden.

Mitteilung des Instituts für Wasserbau, Universität Stuttgart, Heft 60, 1985

TAYLOR, G.:

Conditions under which Dispersion of a Solute in a Stream of Solvent can  
be used to Measure Molecular Diffusion.

Proc. Roy. Soc. Ser. A 225, pp. 473-477, 1954

UFFINK, G. J. M.:

A Random-Walk-Method for the Simulation of Macrodispersion in a Stratified  
Aquifer.

IAHS Publication No. 146, Relation of Groundwater Quantity and Quality, 1983

$$\text{Reynoldszahl } Re = \frac{v_0 d}{\nu}$$

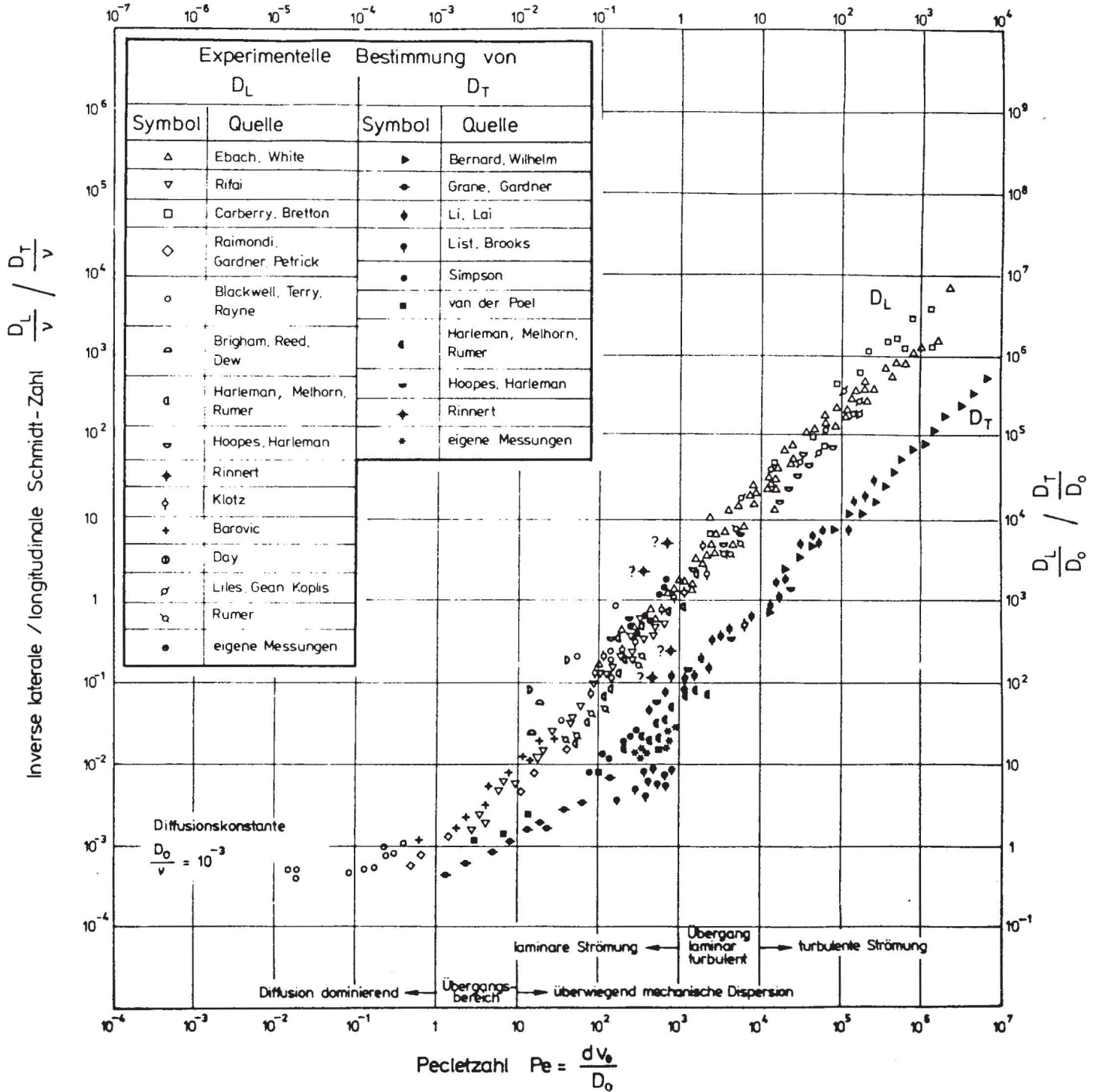
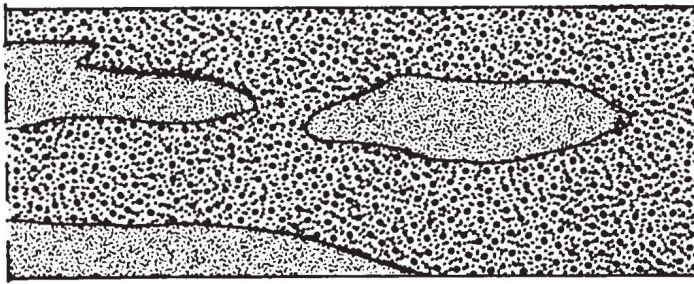


Bild 1: Experimentell bestimmte Dispersionskoeffizienten des dispersiven Stofftransports in homogenen, isotropen Modellböden (aus Spitz, 1985)

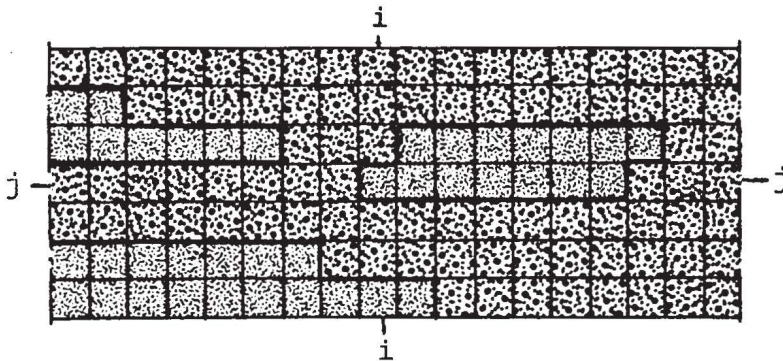


NATUR

TRANSPORTPARAMETER

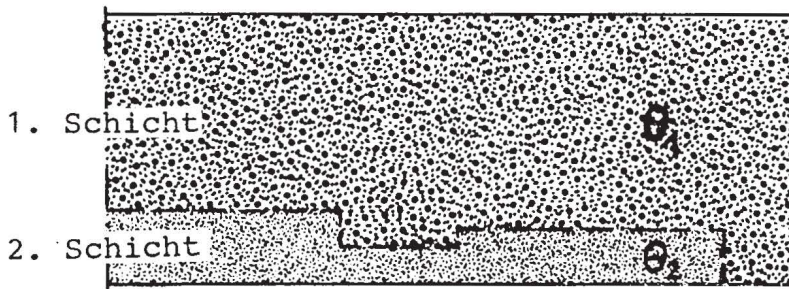


VERTIKAL - EBENE MODELLIERUNG



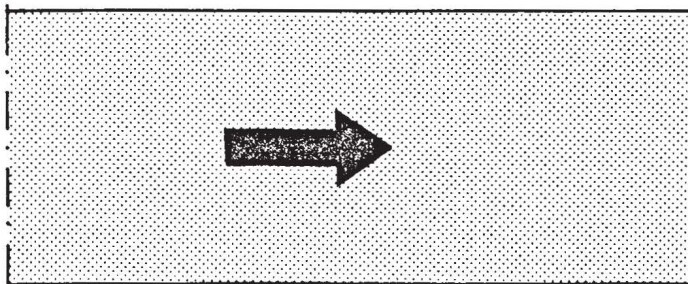
Volumenanteile :  $n_{ei,j}$   
 Konvektion :  $v_{ai,j}$   
 Dispersion :  $\alpha_{Li,j}$  ;  $\alpha_{Ti}$

SCHICHTENMODELLE



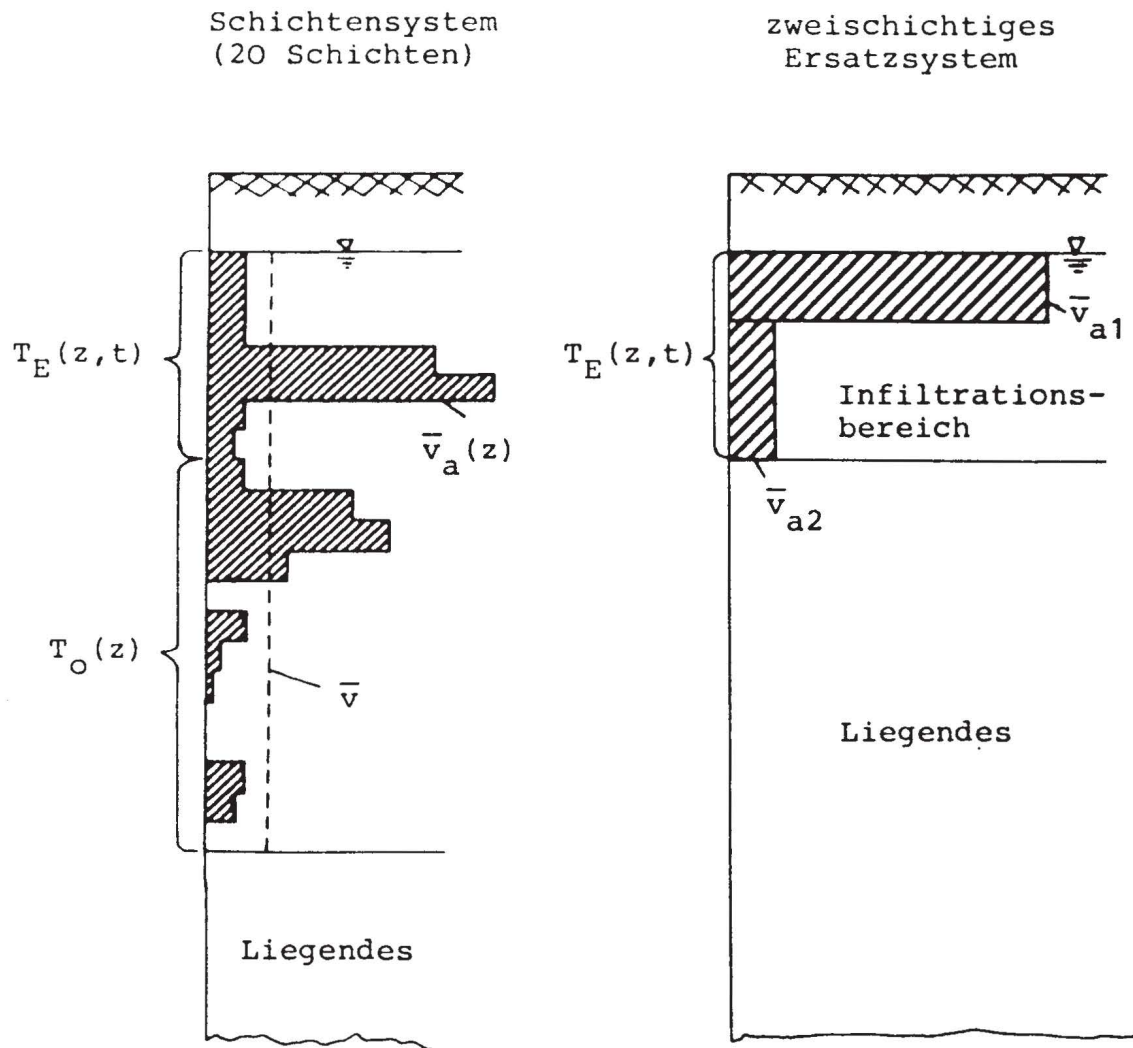
Volumenanteile :  $\theta_i$   
 Konvektion :  $v_{ai,j}$   
 Dispersion :  $\alpha_{Li}$   
 Übergangsterm :  $\alpha_i$

TIEFENINTEGRIERTE BETRACHTUNG

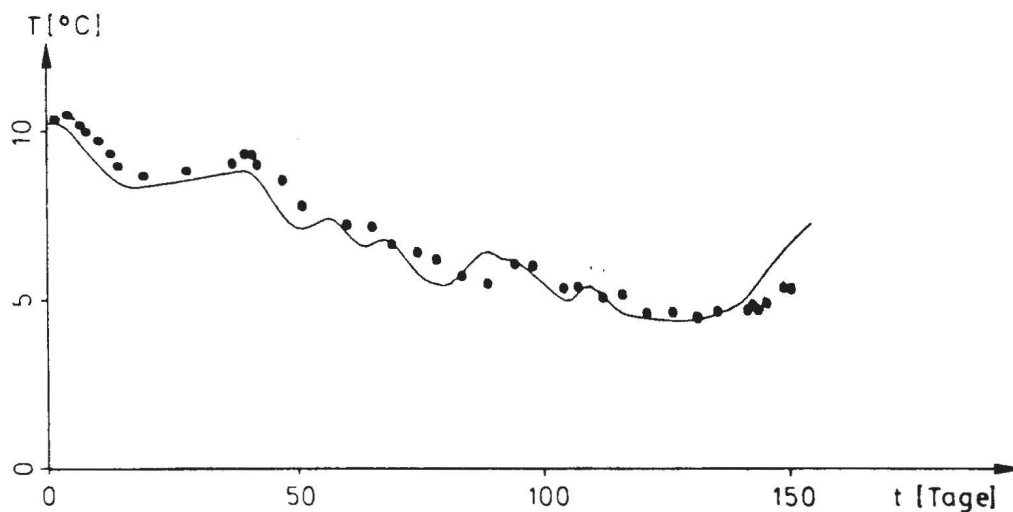


Volumenanteile :  $\bar{n}_e$   
 Konvektion :  $\bar{v}_a$   
 Dispersion :  $\bar{\alpha}_L$

Bild 2: Numerische Approximation des Stofftransports (vereinfacht vertikal-ebene Darstellung)



Meßstelle T0508 (105 m Entfernung von der Infiltrationsstelle)



— berechnet (zwei Schichten)  
 ... gemessen

Bild 3: Wahl des zweischichtigen Ersatzsystems (aus Söll, 1985)

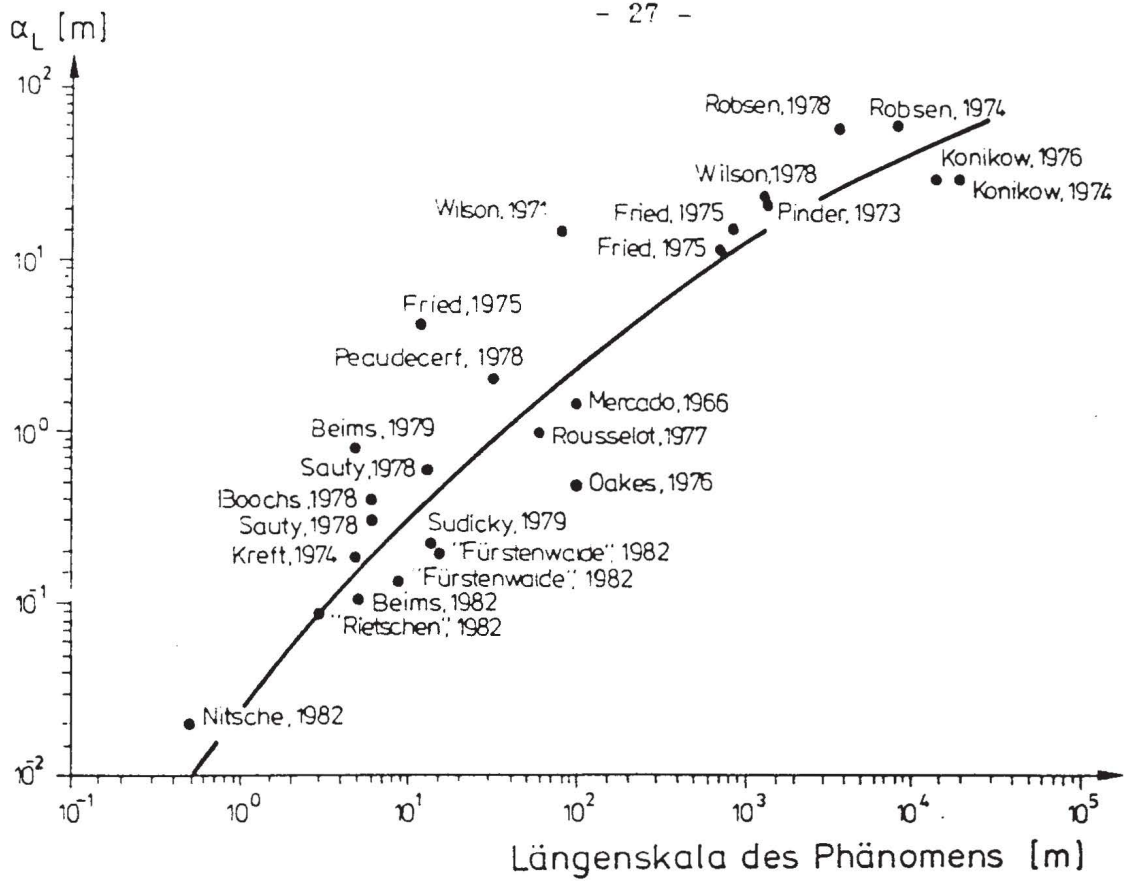
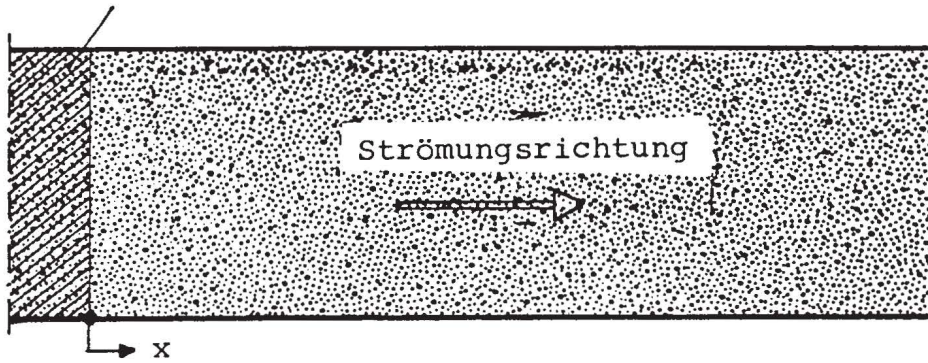
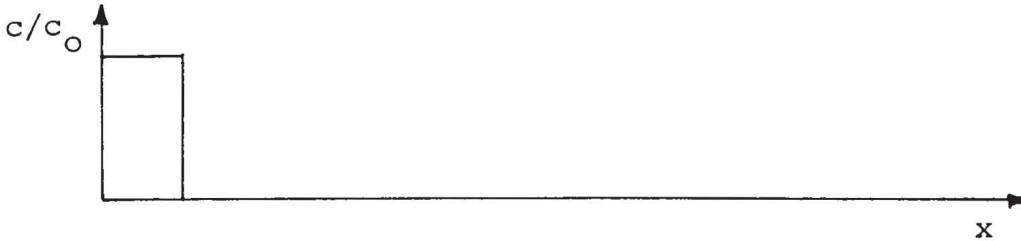


Bild 4: Skalenabhängigkeit der Dispersivität (nach Beims, 1982)

Anfangsverteilung der Stoffkonzentration zur Zeit  $t=0$



Konzentration



Konzentrationsverteilung zum Zeitpunkt  $t > 0$

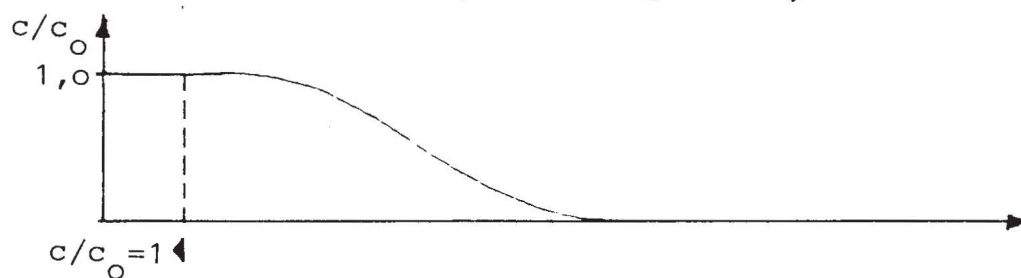


Bild 5: Strömungskonfiguration und Randbedingungen



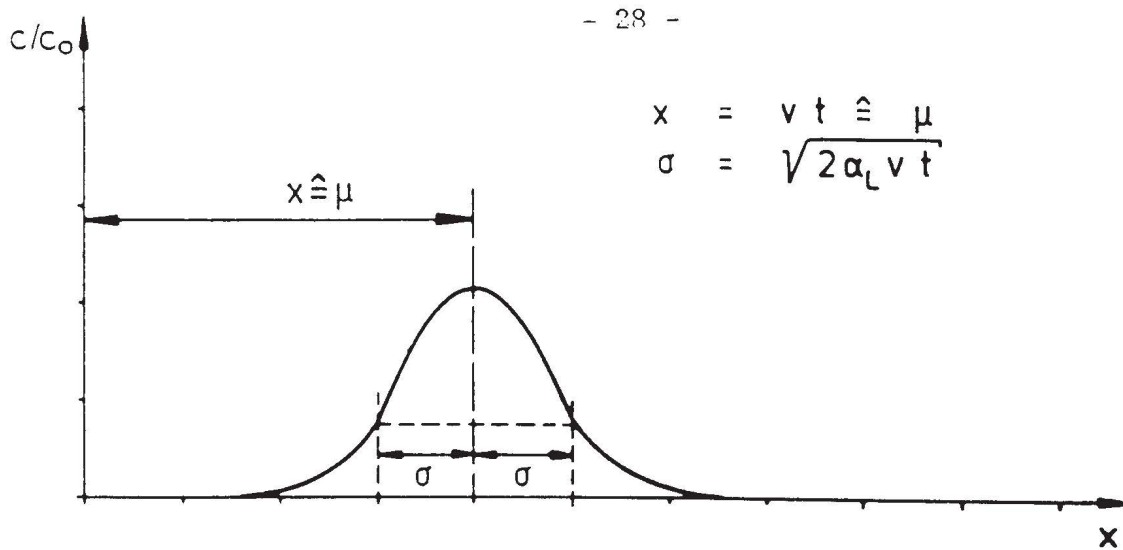
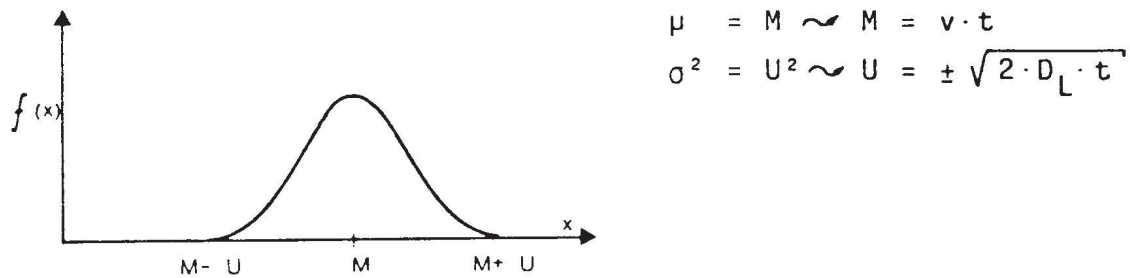
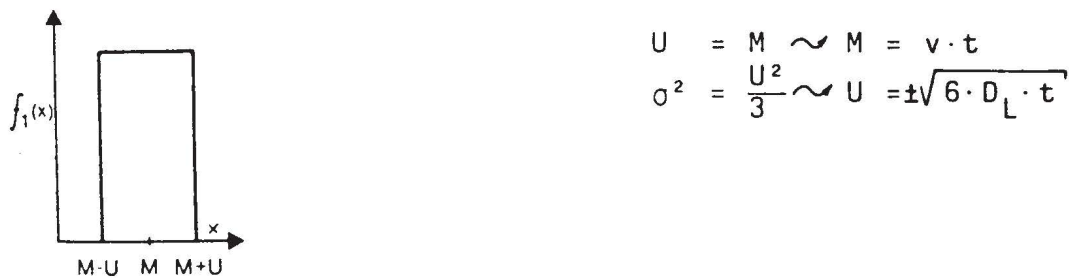


Bild 6: Konzentrationsverteilung zur Zeit t bei momentanem Stoffeintrag

Wahrscheinlichkeitsverteilung bei normalverteilter Zufallsvariablen  $\bar{z}$



Wahrscheinlichkeitsverteilung nach wenigen Transportschritten bei gleichverteilter Zufallsvariablen z



Wahrscheinlichkeitsverteilung nach n Transportschritten bei gleichverteilter Zufallsvariablen

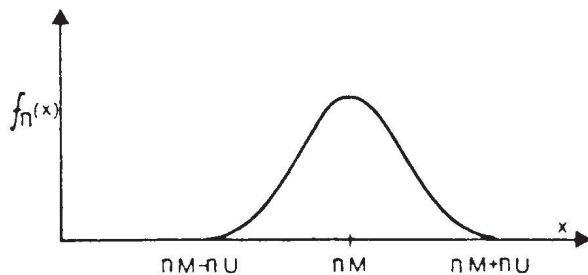
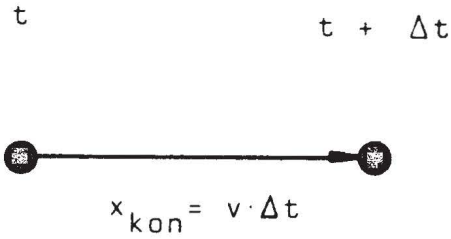
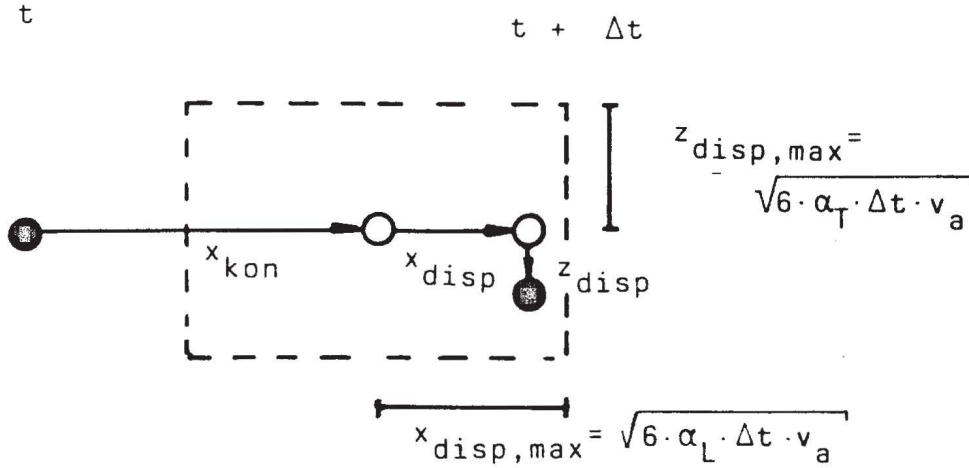


Bild 7: Wahrscheinlichkeitsverteilung mit Hilfe einer Zufallszahl (nach Uffink, 1983)

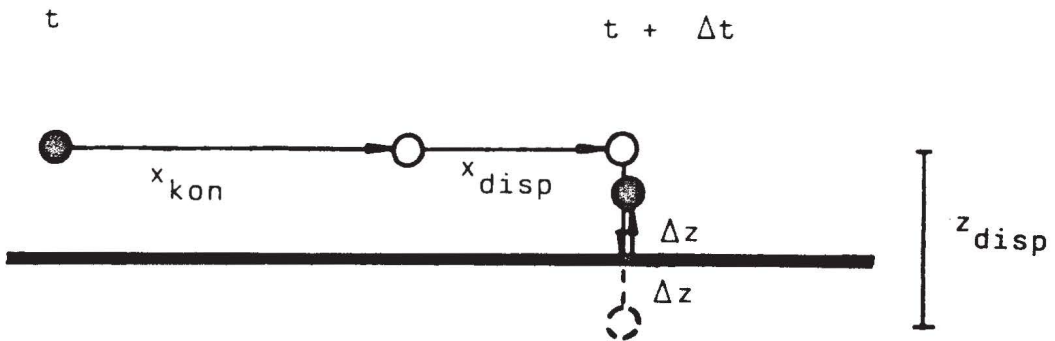
KONVEKTION



KONVEKTION UND DISPERSION



REFLEKTION AN EINER UN DURCHLÄSSIGEN BERANDUNG



KORREKTUR DES DISPERSIVEN SPRUNGS AN EINER SCHICHTGRENZE  
(SPIEGELUNG AN DISKONTINUITÄTEN)

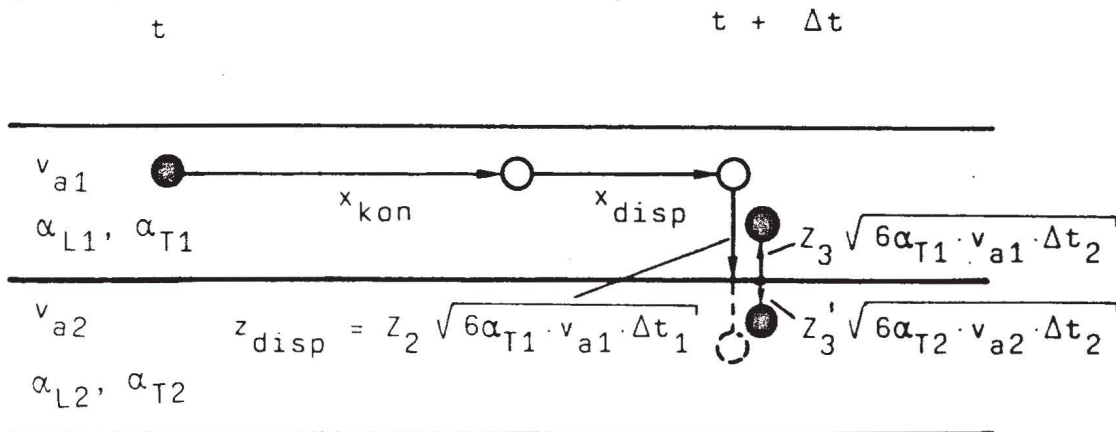


Bild 8: Teilchenbewegung für einen Zeitschritt  $\Delta t$  (aus Koerner, 1986)

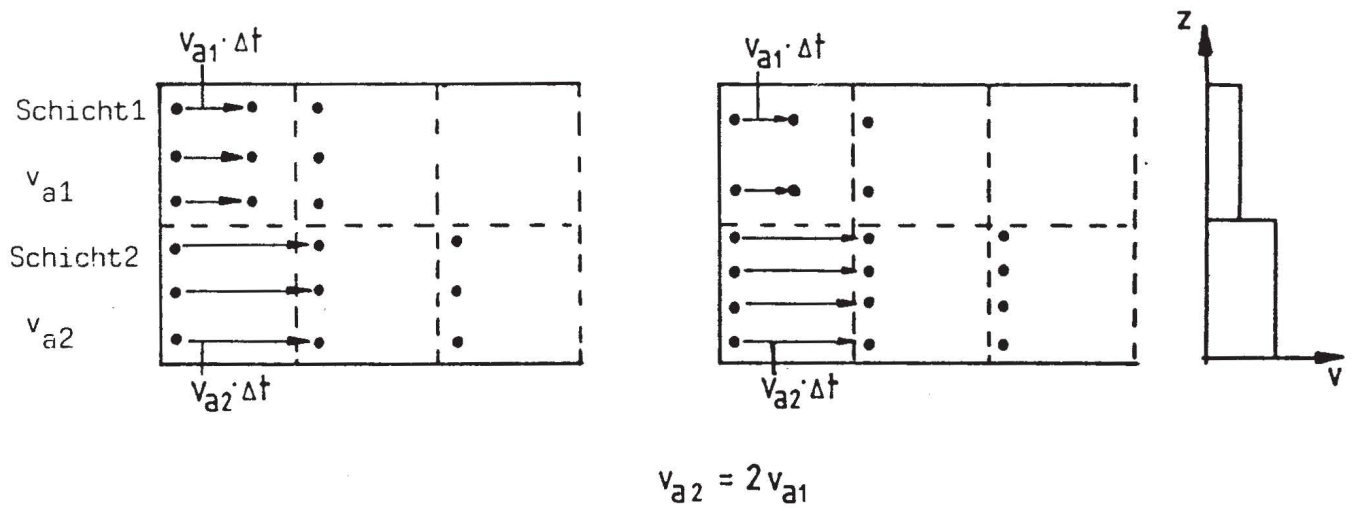


Bild 9: Prozentuale Verteilung der Punkte mit der Random-Walk-Methode (Festkonzentrationsrandbedingung) (aus Koerner, 1986)



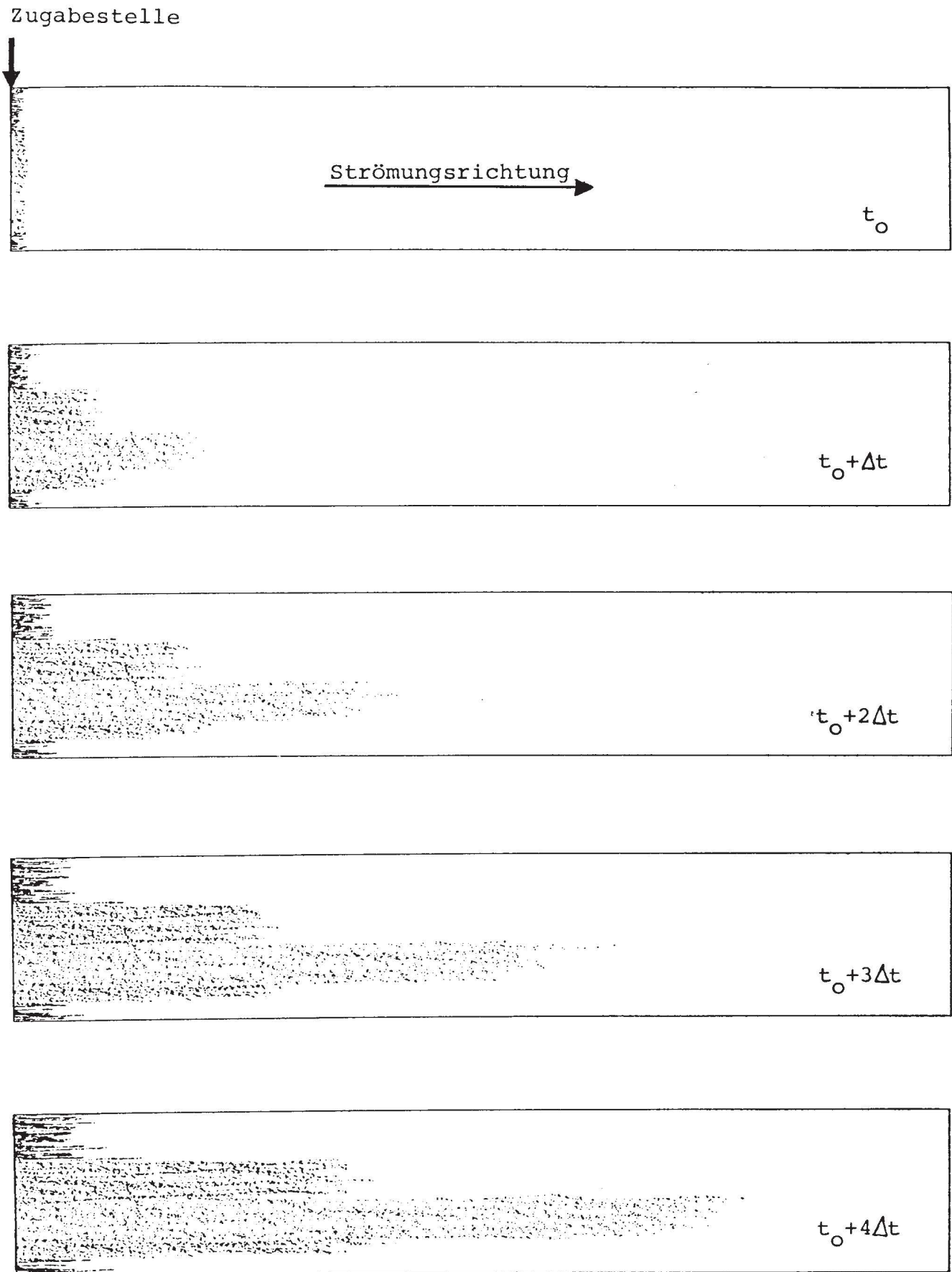
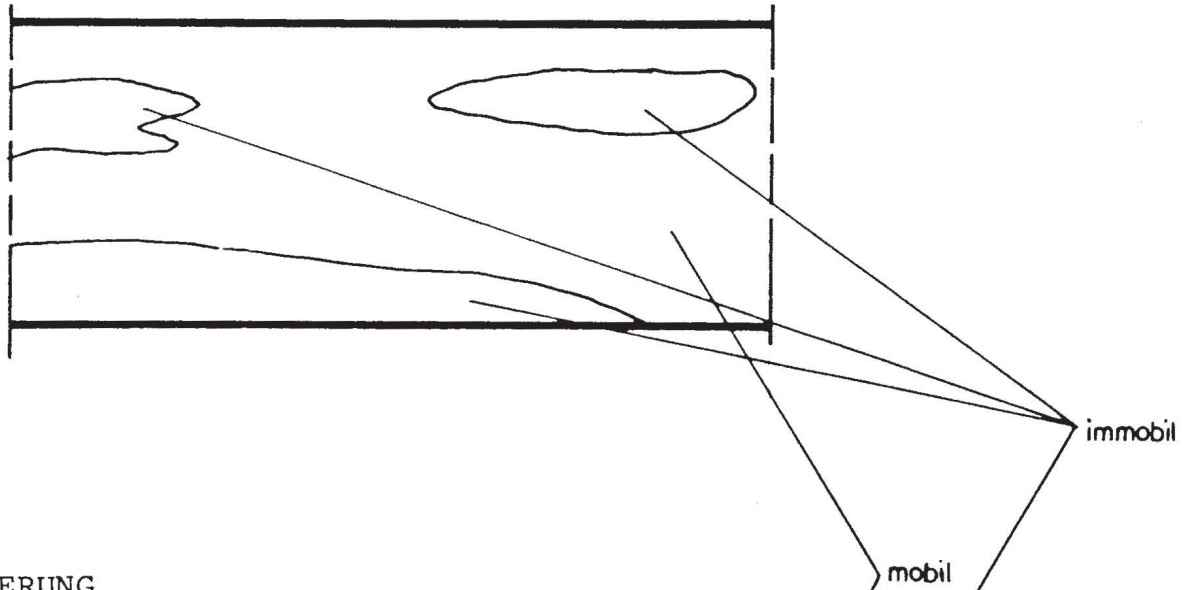
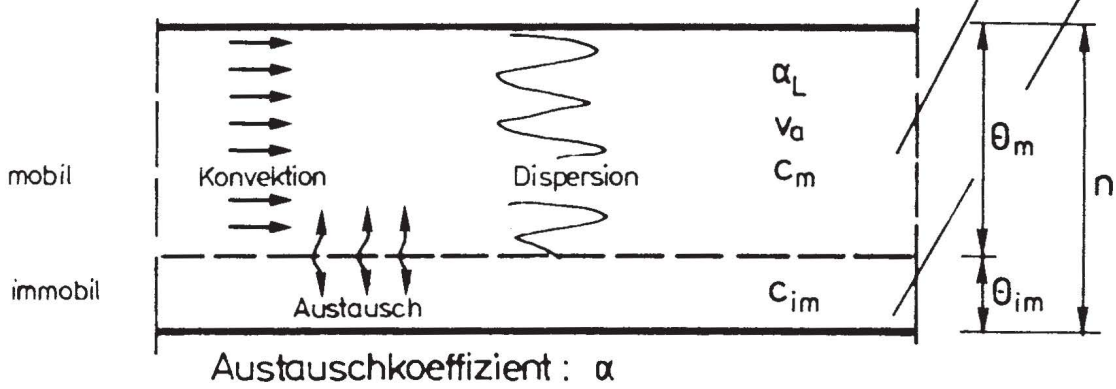


Bild 10: Berechnung der Ausbreitung einer Tracerfront in einem geschichteten Aquifer (aus Koerner, 1986)

GRUNDWASSERLEITER



IDEALISIERUNG



DISKRETISIERUNG

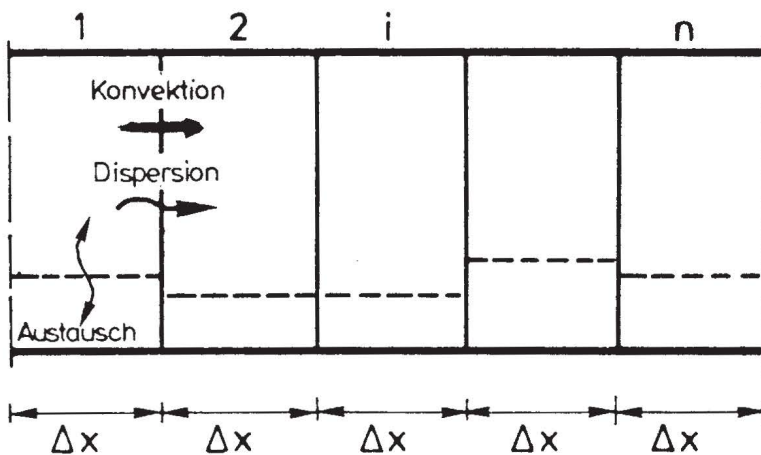
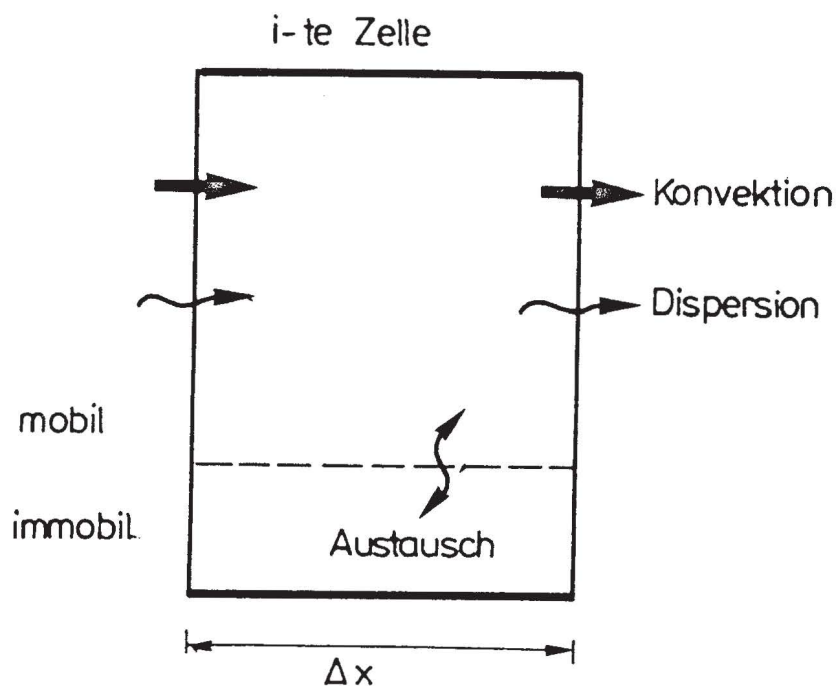


Bild 11: Modellierung des Stofftransports mit einer mobilen und einer immobilen Transportebene



KONVEKTION:  $\Delta t \theta_m v_x (c_{i-1}^t - c_i^t)$

DISPERSION:  $\Delta t \theta_m D_L \frac{c_{i-1}^{t+\Delta t} - 2c_i^{t+\Delta t} + c_{i+1}^{t+\Delta t}}{\Delta x}$

AUSTAUSCH :  $\Delta x \Delta t \alpha (c_{i,m}^t - c_{i,im}^t)$

SPEICHERUNG:  
 -- mobil :  $\Delta x \theta_m (c_i^{t+\Delta t} - c_i^t)$

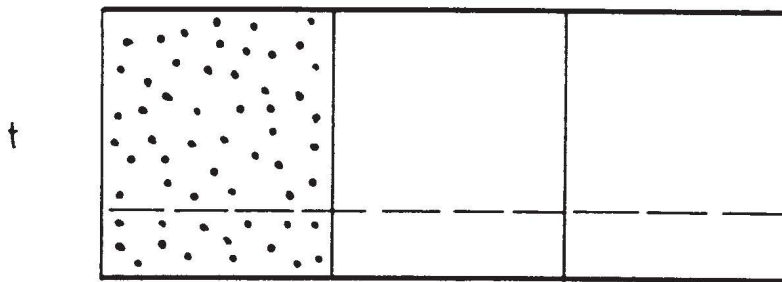
-- immobil :  $\Delta x \theta_{im} (c_{i,im}^{t+\Delta t} - c_{i,im}^t)$

$c^t$  sind die Konzentrationen nach dem konvektiven und dispersiven Transportschritt ( Bild 13 )

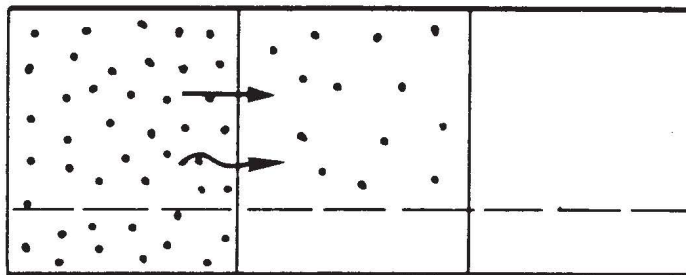
Bild 12: Kontrollvolumen und Massenbilanz



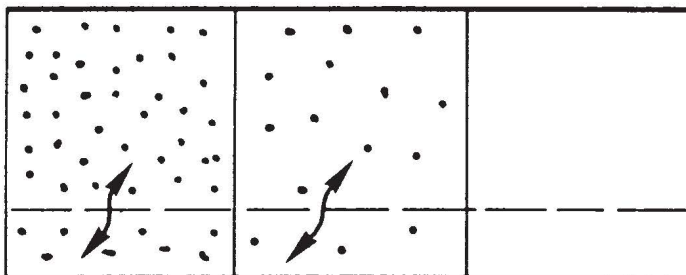
KONZENTRATION ZUM  
ZEITPUNKT



1. Zwischenschritt  
Konvektion und Dispersion für einen  
Zeitschritt  $\Delta t$



2. Zwischenschritt  
Austausch zwischen mobiler und immobil  
er Region für einen Zeitschritt  $\Delta t$



KONZENTRATION ZUM  
ZEITPUNKT

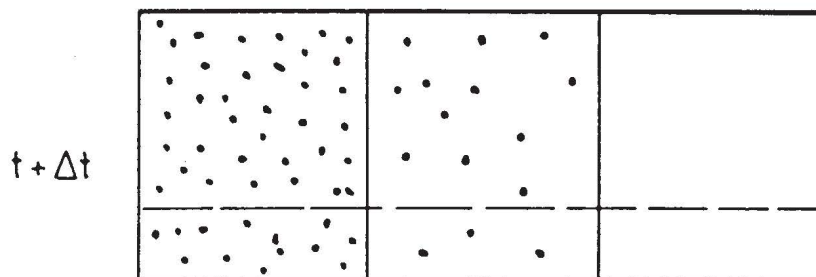
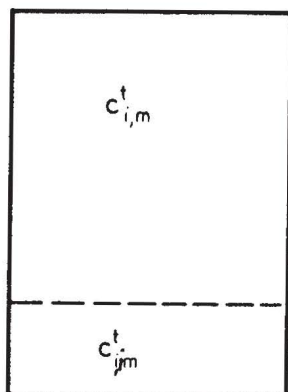


Bild 13: Rechenablauf zur Berechnung von Konvektion, Dis-  
persion und Austausch



MASSEN Bilanz  
( insgesamt ) :

$$\frac{dc_{i,m}}{dt} = - \frac{\theta_{im}}{\theta_m} \frac{dc_{j,m}}{dt}$$

ÜBERGANG :

$$\frac{dc_{i,m}}{dt} = \alpha (c_{i,m} - c_{i,m})$$

RANDBEDINGUNGEN :

$$t = 0 : \quad c_{i,m} = c_{i,m}^t \\ c_{i,m} = c_{i,m}^t$$

$$t \rightarrow \infty : \quad \frac{dc_{i,m}}{dt} = 0$$

KONZENTRATIONSVORLAUF IN ABHÄNGIGKEIT DER ZEIT :

mobile Region : 
$$c_{i,m}(t) = - \frac{\theta_{im}}{\theta_m} c_m(t) + c_3$$

immobile Region : 
$$c_{i,m}(t) = c_3 \theta_m + c_2 e^{-\frac{\alpha}{\theta_m} t}$$

mit 
$$c_2 = \theta_m (c_{i,m}^{t=0} - c_{i,m}^{t=0})$$

$$c_3 = c_{i,m}^{t=0} + \frac{\theta_{im}}{\theta_m} c_{i,m}^{t=0}$$

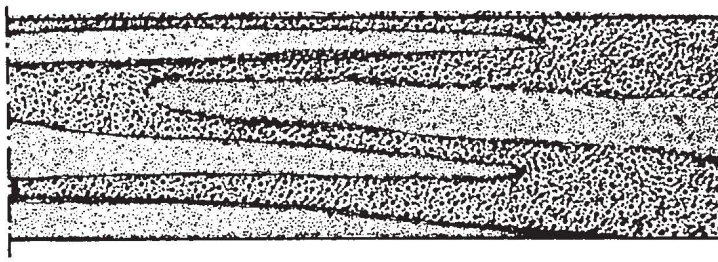
KONZENTRATIONSVERTeilUNG ZUM ZEITPUNKT  $t = t + \Delta t$  :

$$c_{i,m}^{t+\Delta t} = c_{i,m}^t - \theta_{im} f(\Delta t) \Delta c$$

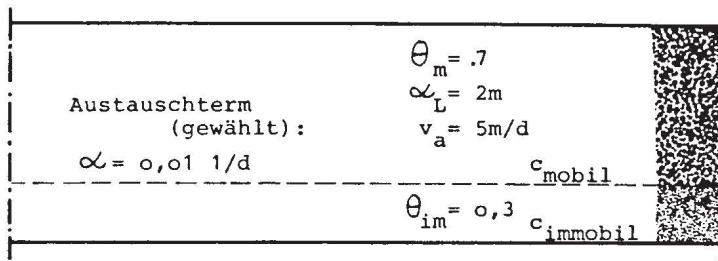
$$c_{i,m}^{t+\Delta t} = c_{i,m}^t + \theta_m f(\Delta t) \Delta c$$

mit 
$$\Delta c = c_{i,m}^t - c_{i,m}^t \quad f(\Delta t) = 1 - e^{-\frac{\alpha}{\theta_m} \Delta t}$$

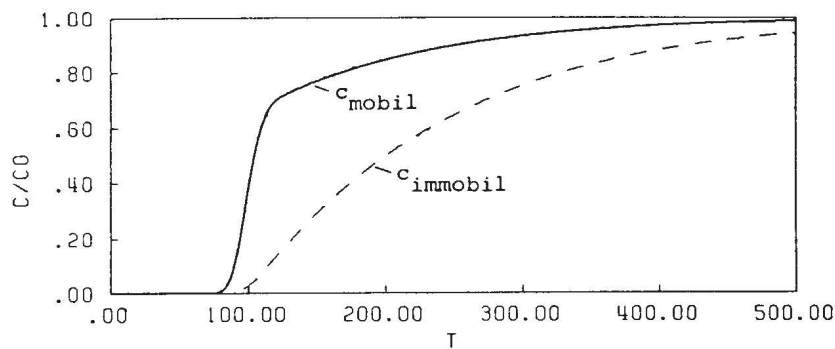
KONFIGURATION:



SCHEMATISIERUNG:



DURCHBRUCHSKURVE in x = 500m :



KONZENTRATIONSVERTeilUNG ZUM ZEITPUNKT t = 100d

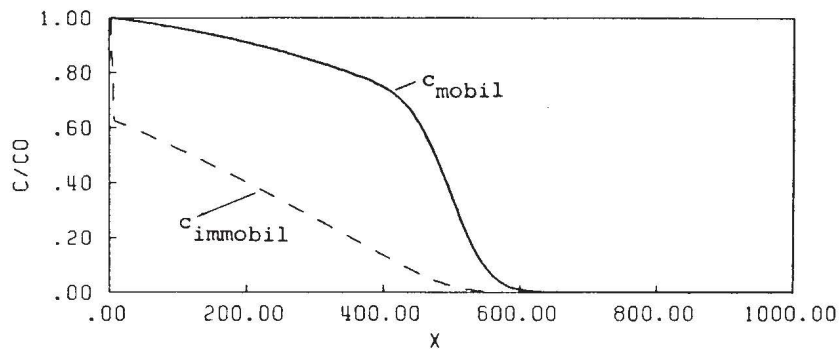
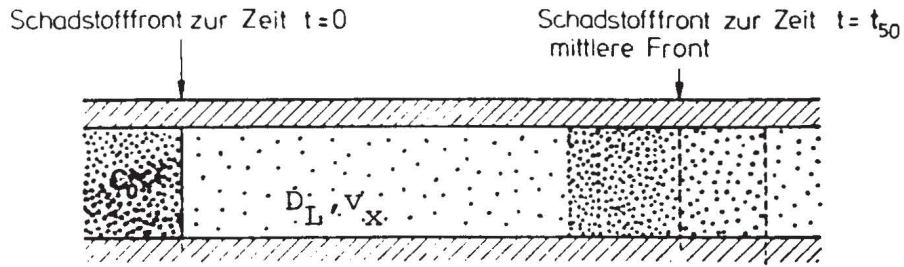


Bild 15: Anwendungsbeispiel



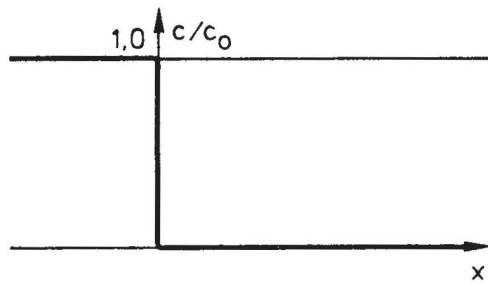
STRÖMUNGSKONFIGURATION :



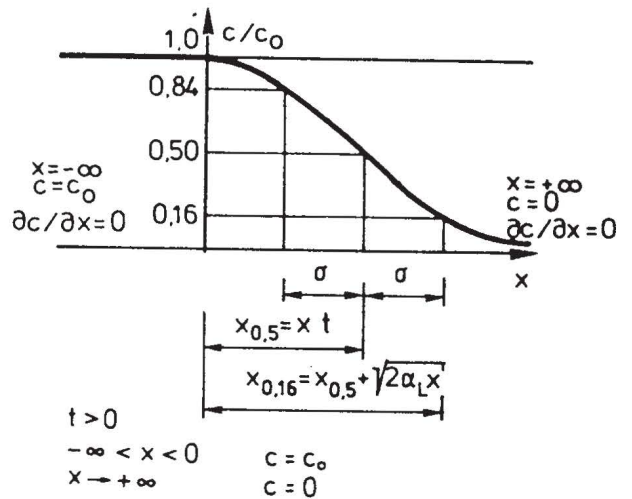
DIFFERENTIALGLEICHUNG :

$$\frac{\partial c}{\partial t} = D_L \frac{\partial^2 c}{\partial x^2} - v_x \frac{\partial c}{\partial x}$$

ANFANGS- UND RANDBEDINGUNGEN:



$$\begin{aligned} t \leq 0 \\ -\infty < x < 0 & c = c_0 \\ 0 \leq x < \infty & c = 0 \end{aligned}$$



$$\begin{aligned} t > 0 \\ -\infty < x < 0 & c = c_0 \\ x \rightarrow +\infty & c = 0 \end{aligned}$$

LÖSUNG :

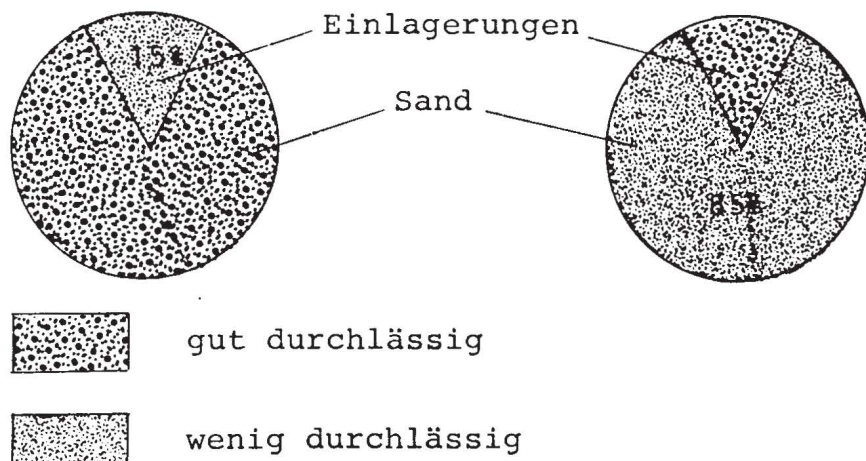
$$\frac{c}{c_0} = \frac{1}{2} \operatorname{erfc} \left( \frac{x - v_x t}{2\sqrt{D_L t}} \right) + \frac{1}{2} \exp \left( \frac{v_x \cdot x}{D_L} \right) \operatorname{erfc} \left( \frac{x + v_x t}{2\sqrt{D_L t}} \right)$$

$$\frac{v_x \cdot x}{D_L} > 20 \quad : \quad \frac{c}{c_0} = \frac{1}{2} \operatorname{erfc} \left( \frac{x - v_x t}{2\sqrt{D_L t}} \right)$$

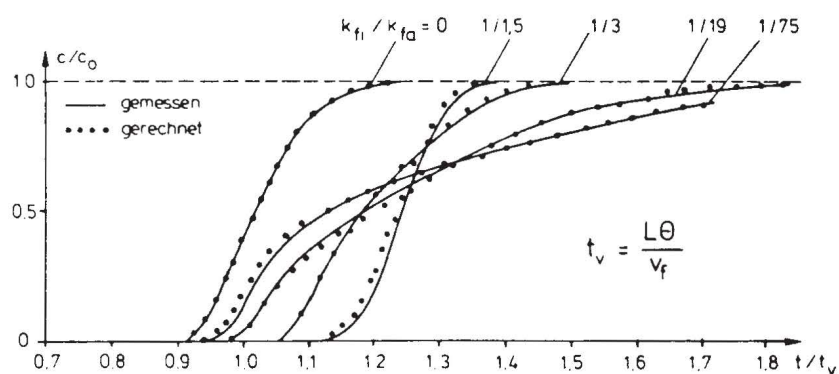
Bild 16: Eindimensionaler Stofftransport in Strömungsrichtung

Versuche Herr, 1985

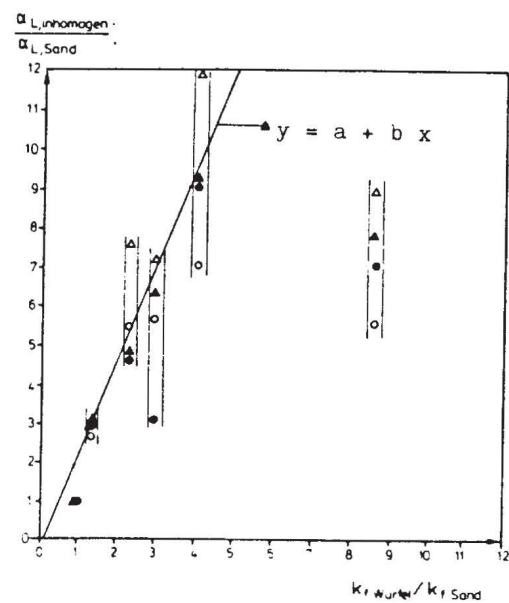
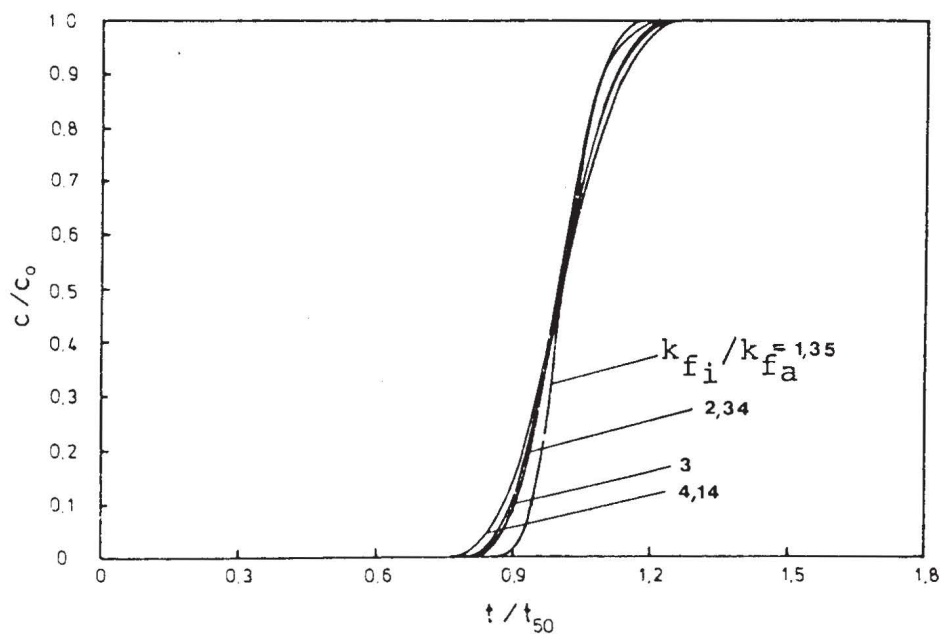
Versuche Ebinger, 1986



Versuche Herr, 1985



Versuche Ebinger, 1986



Zugaberversuch      Spulversuch:  
 o großes  $v_f$       Δ großes  $v_f$   
 • kleines  $v_f$       ▲ kleines  $v_f$

Bild 17: Experimente in einem Modellaquifer mit lokalen Inhomogenitäten

Sand	Mächtigkeit [cm]
A	5.9
B	5.6
C	4.8
B	2.5
A	2.2

	$d_{50}$ in mm	$\alpha_L$ in cm	$\alpha_T$ in cm
Sand A	0,28	0,400	0,0020
Sand B	0,57	0,114	0,0057
Sand C	0,86	0,180	0,0090

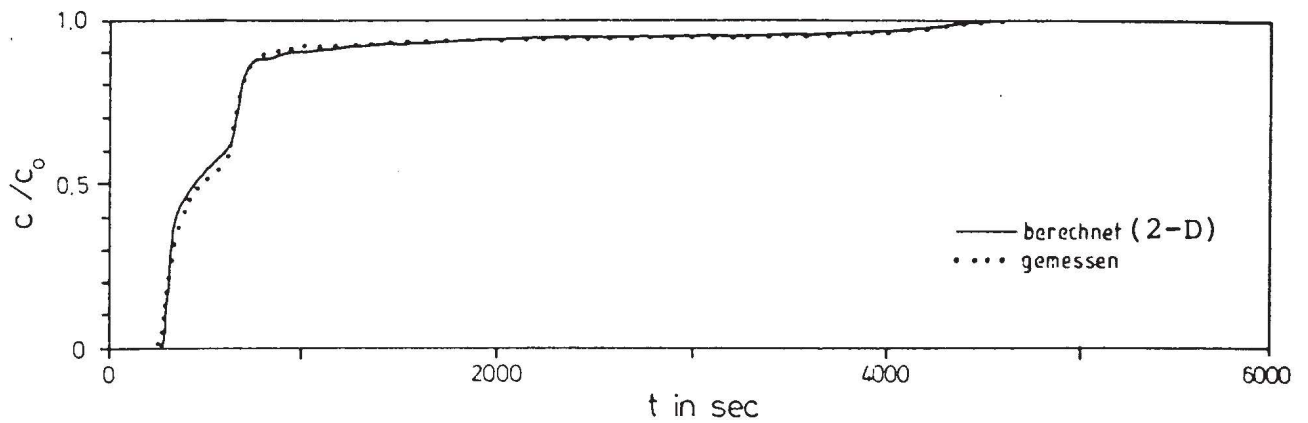
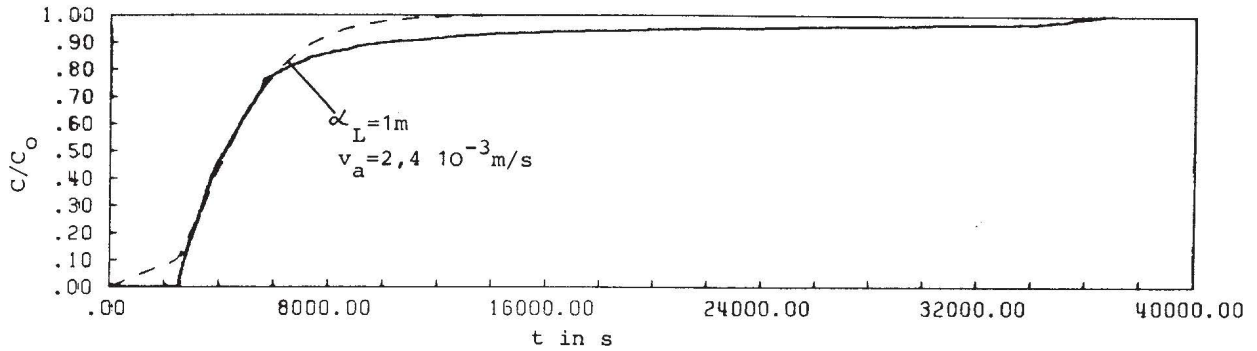


Bild 18: Geschichteter Aquifer

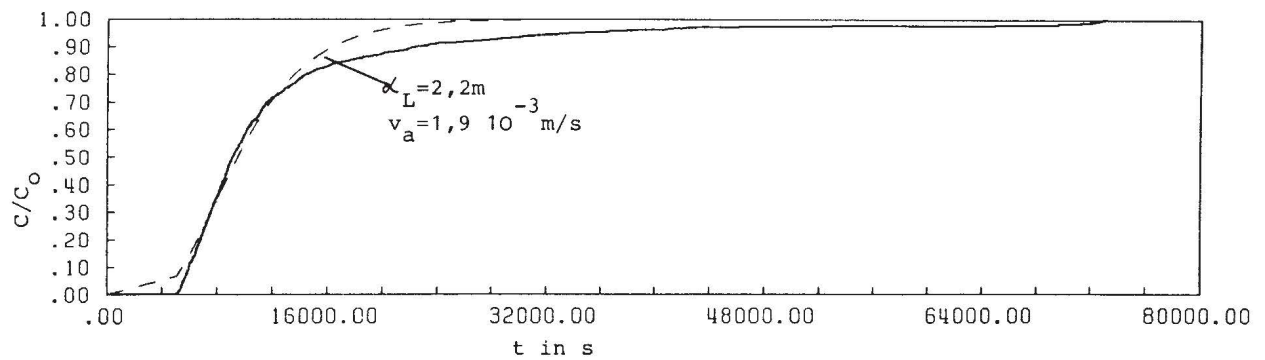
KURVENKENNUNG:

zweidimensionale Berechnung ———  
eindimensionale Approximation - - - -

x = 10 m



x = 20 m



x = 30 m

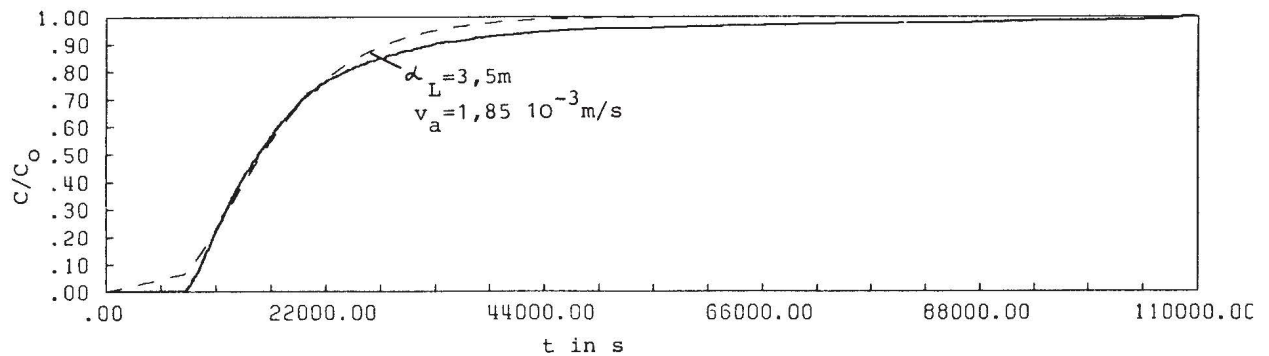
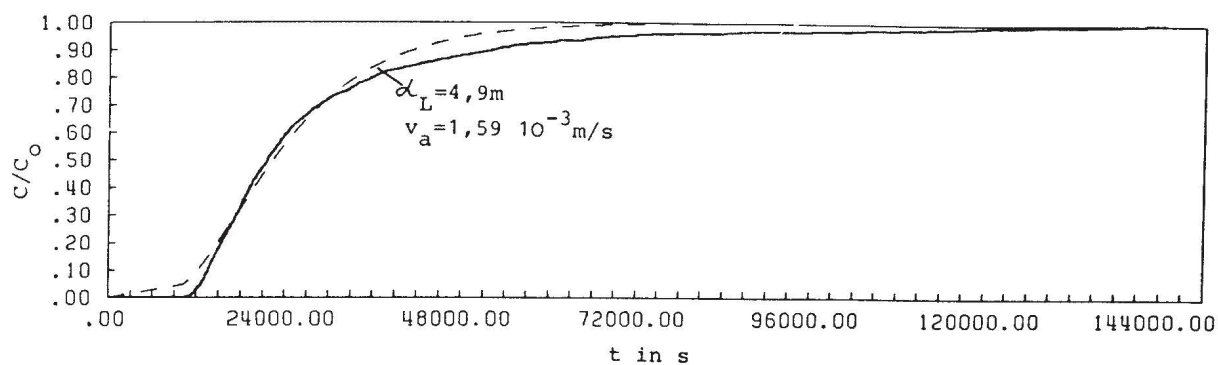


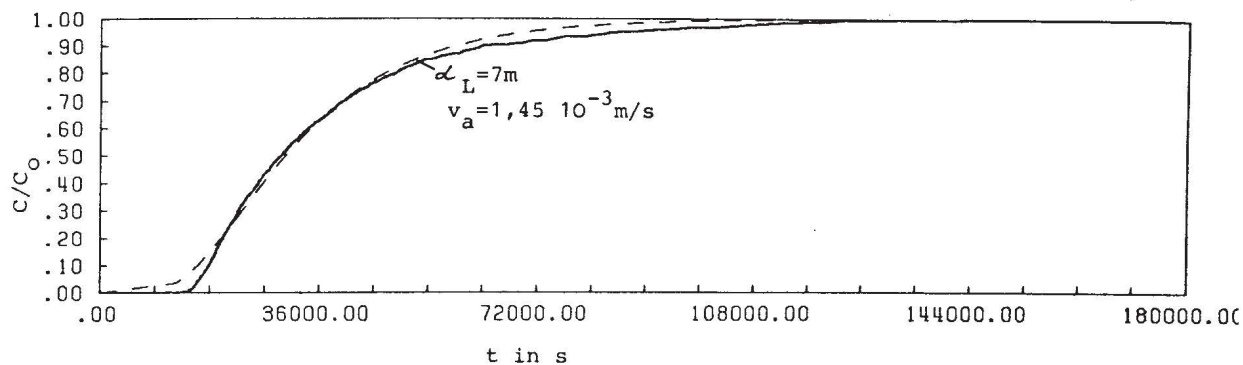
Bild 19: Durchbruchkurven nach einem Fließweg von 10 m, 20 m und 30 m ( zweidimensionale Berechnung, eindimensionale Annäherung )



x = 40 m



x = 50 m



x = 100 m

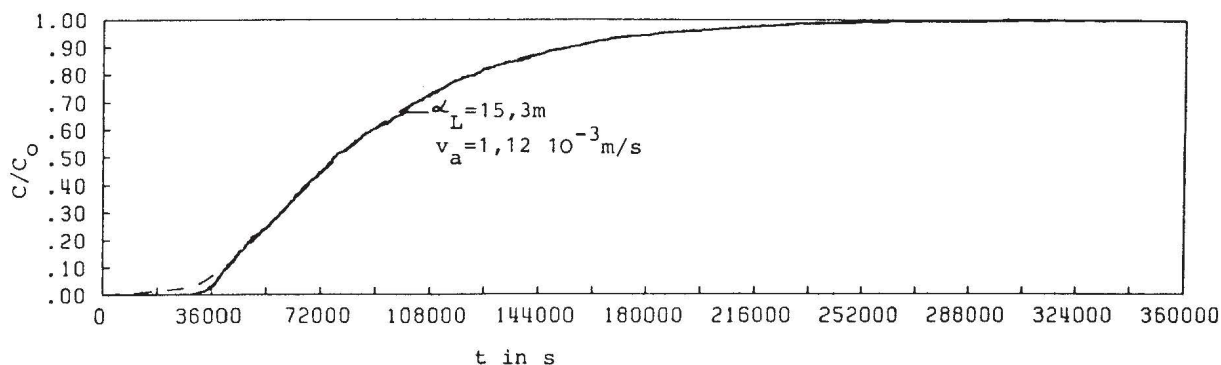


Bild 2o: Durchbruchkurven nach einem Fließweg von 40 m, 50 m und 100 m (zweidimensionale Berechnung, eindimensionale Annäherung)

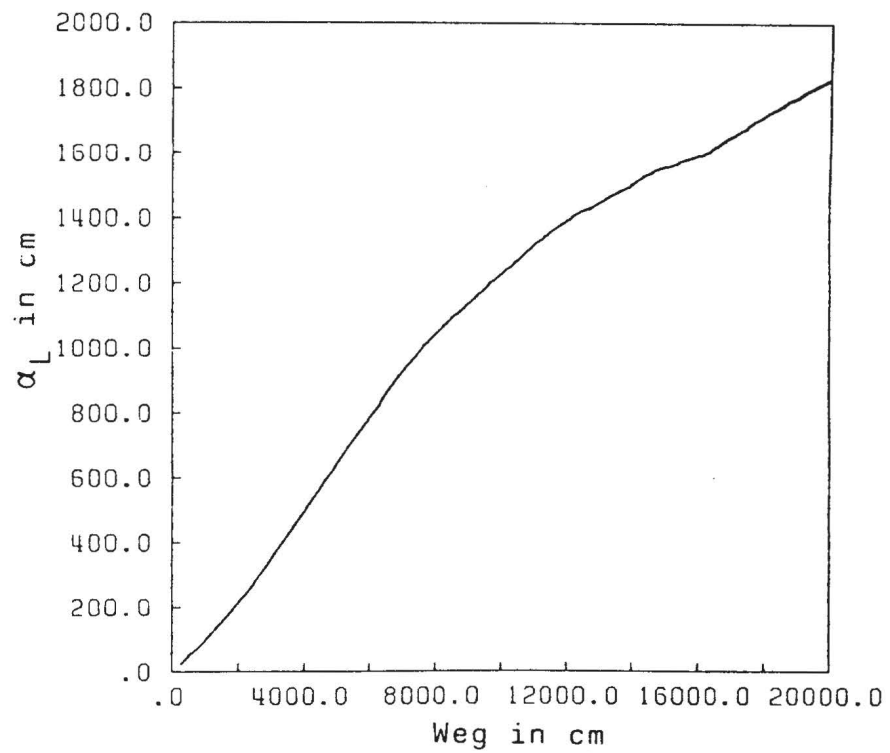
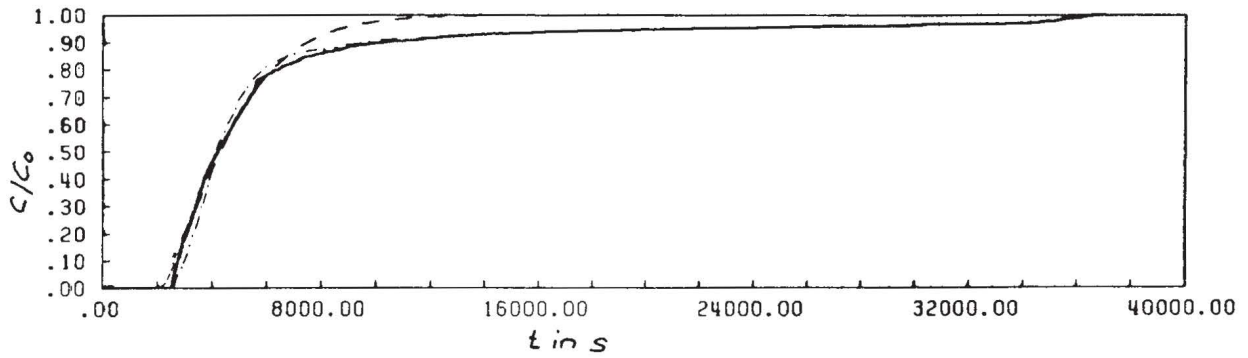


Bild 21: Fließwegabhängigkeit der äquivalenten Dispersivität  
(aus Koerner, 1986)

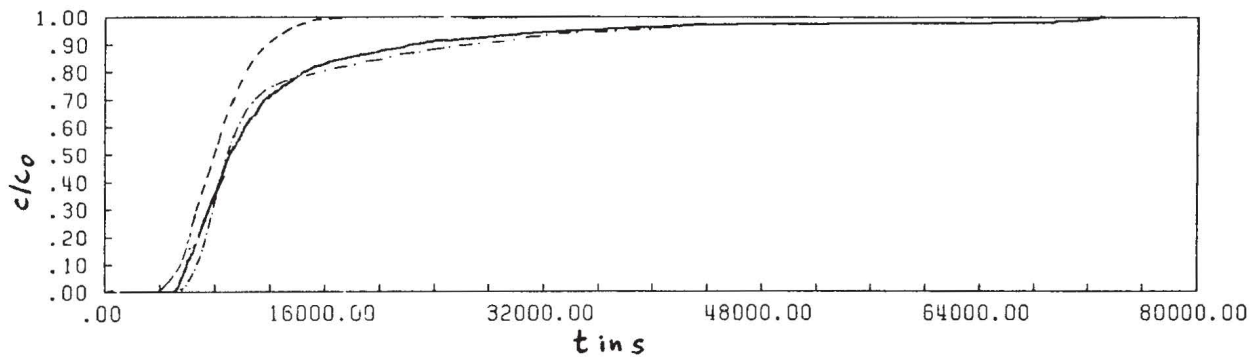
KURVENKENNUNG:

zweidimensionale Berechnung ————  
Schichtenansatz — · — · —  
eindimensionale Berechnung - - - - -

x = 10 m



x = 20 m



x = 30 m

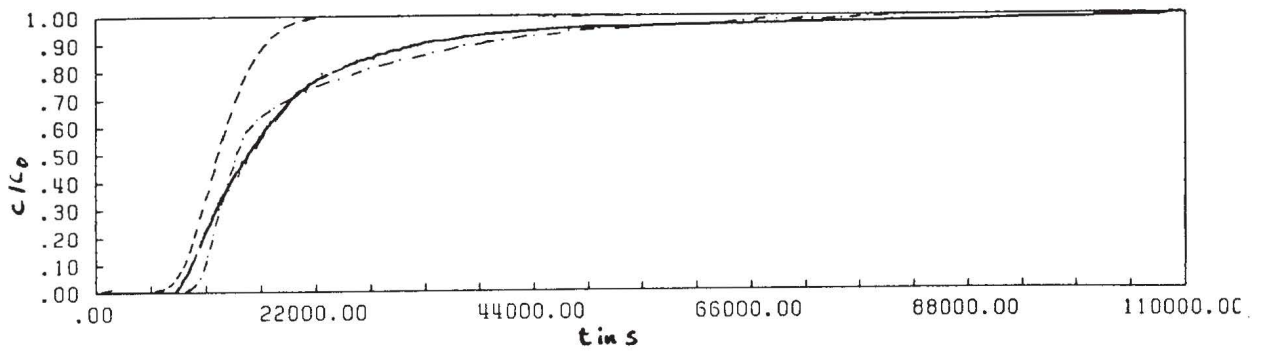
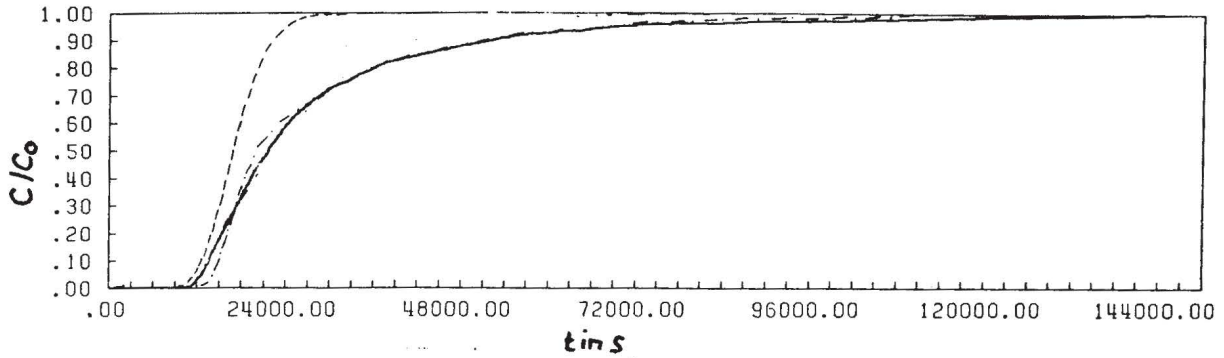


Bild 22: Durchbruchkurven nach einem Fließweg von 10 m, 20 m und 30 m (2-D-Berechnung, Annäherung mit dem Schichtenansatz 1-D-berechnung für konstante Transportparameter)

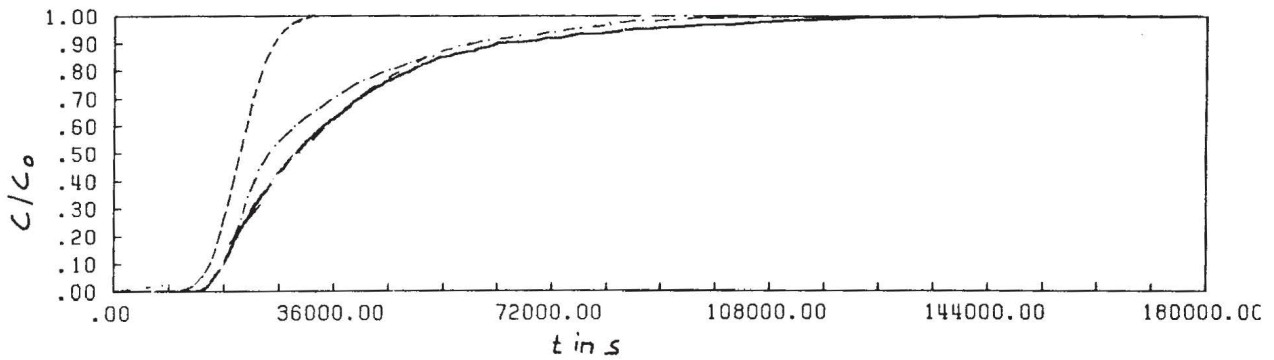
KURVENKENNUNG:

zweidimensionale Berechnung —————  
Schichtenansatz - - - - -  
eindimensionale Berechnung - - - - -

x = 40 m



x = 50 m



x = 100 m

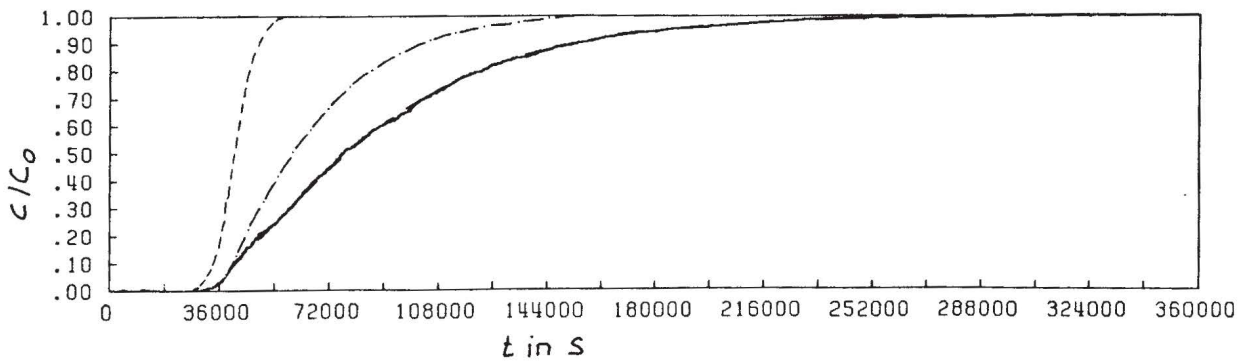


Bild 23: Durchbruchkurven nach einem Fließweg von 40 m, 50 m und 100 m (2-D-Berechnung, Annäherung mit dem Schichtenansatz 1-D-berechnung für konstante Transportparameter)



KURVENKENNUNG:

— Schichtenmodell:  $v = 2.4 \cdot 10^{-3}$  m/s  
 $\alpha_L = 0.3$  m  
 $\theta_m^L = 0.62$   
 $\alpha = 7.5 \cdot 10^{-5}$  1/s

..... Halbierung des angegebenen Parameters

--- Verdopplung des angegebenen Parameters

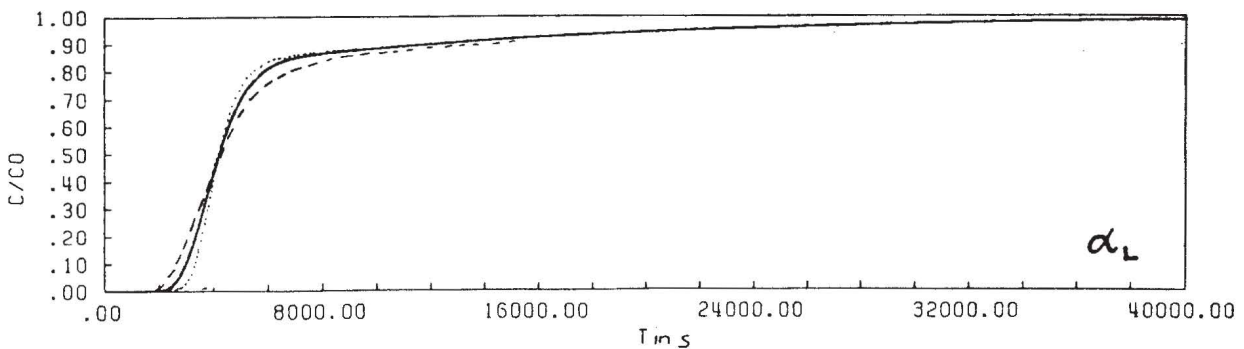
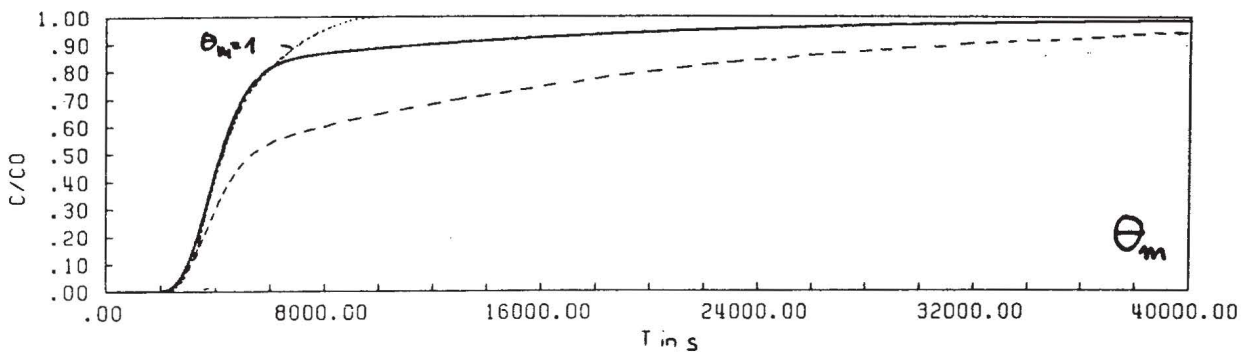
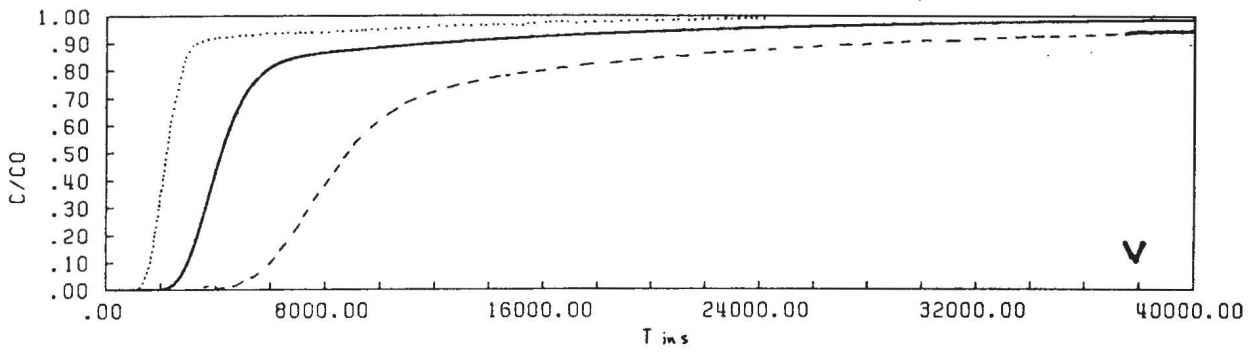
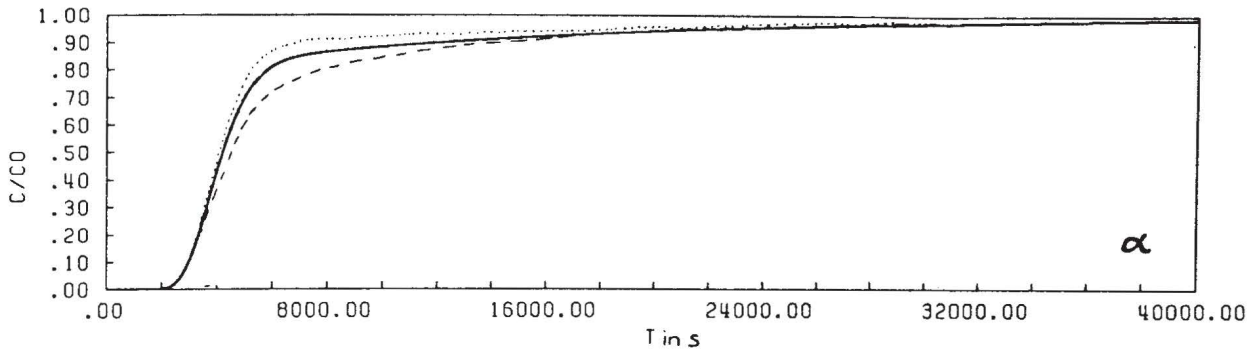


Bild 24: Variation der Transportparameter

ANHANG:  
Programmlistings



```
C ANFANGSZUWEISUNGEN
  IN =7
  IOUT1 =1
  IOUT2 =2
  IOUT3 =3
  MAXPKT=10000
  MAXLAY=50
  MAXQ =200
  MAXTIM=MAXPKT
  CALL SECOND(TT)
  CALL RANSET(TT)
  TIME=0.
  ITIM=1
  IPUNKT=0
  IQUER=0
  SNP=0.
  C(ITIM)=0.
  T(ITIM)=0.
CCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCC
C
C EINLESEN DER DATEN
C
C AQUIFERDATEN
C MAECHTIGKEIT (Z=0 : AQUIFERSOHLE)
  READ (IN,400) TEXT
  READ (IN,*) NL
  READ (IN,400) TEXT
  READ (IN,*) (Z(I),I=1,NL+1)
C DISPERSIVITAETEN IN STROEMUNGSRICHTUNG
  READ (IN,400) TEXT
  READ (IN,*) (ALPHAL(I),I=1,NL)
C DIPERSIVITAETEN QUER ZUR STROEMUNGSRICHTUNG
  READ (IN,400) TEXT
  READ (IN,*) (ALPHAT(I),I=1,NL)
C DURCHLAESSIGKEITEN
  READ (IN,400) TEXT
  READ (IN,*) (AKF(I),I=1,NL)
C DELTAH,LAENGE,POROSITAET
  READ (IN,400) TEXT
  READ (IN,*) DELTAH,DELTAL,ANE
C BERECHNUNG DER ABSTANDSGESCHWINDIGKEITEN
  DO 10 I=1,NL
10 VA(I)=AKF(I)*DELTAH/DELTAL/ANE
C
C DATEN ZUM STOFFTRANSPORT
C
C ANZAHL DER EINGESETZTEN TEILCHEN
  READ (IN,400) TEXT
  READ (IN,*) NP,IRBGN
C STARTWERTE DER TEILCHEN
  CALL SETPKT (NL,NP,XP,ZP,MAXPKT,MAXLAY,Z,NPL,VA,IRBGN,LAY)
C GEWUENSCHTE ANZAHL VON TRANSPORTSCHRITTEN
  READ (IN,400) TEXT
  READ (IN,*) NTIM
C ZEITSCHRITT DELTAT
  READ (IN,400) TEXT
  READ (IN,*) DELTAT
  READ (IN,400) TEXT
  READ (IN,*) XL,TPLOT
C KORREKTUR DES EINGELESENEN ZEITSCHRITTES ?
  CALL SETDT(Z,VA,ALPHAT,MAXLAY,NL,DELTAT)
  FNP=FLOAT(NP)
C DATEN ZUR BERECHNUNG DER FLIESSWEGABHAENIGKEIT VON ALPHAL
  READ (IN,400) TEXT
```



```
      READ (IN,*)   IWAY
      READ (IN,400) TEXT
      READ (IN,*)   TSTEP
      IF(IWAY.EQ.1) XL=1000000.
      TALPHA=TSTEP
C
C   AUSGABE DER EINGELESENEN DATEN
C
      WRITE (IOUT1,410)
      DO 20 II=1,NL
      I=NL+1-II
      AM=Z(I+1)-Z(I)
20  WRITE (IOUT1,420) I,AM,Z(I+1)
      WRITE (IOUT1,430)
      DO 30 II=1,NL
      I=NL+1-II
30  WRITE (IOUT1,440) I,VA(I),ALPHAL(I),ALPHAT(I)
      WRITE (IOUT1,450)
      WRITE (IOUT1,460) NP,DELTAT,NTIM
      WRITE (IOUT1,480)
      DO 35 IZ=1,NL
35  WRITE (IOUT1,481) IZ,NPL(IZ)
      CALL PKTDAT (IOUT3,XP,ZP,Z,MAXPKT,MAXLAY,NL,XL,NP,
      1TIME,TPLOT,IPUNKT)
CCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCC
C
C   BERECHNUNG VON HILFSGROESSEN
C
      DO 40 I=1,NL
      DSX(I)=SQRT(VA(I)*ALPHAL(I)*6.*DELTAT)
      40 DSZ(I)=SQRT(VA(I)*ALPHAT(I)*6.*DELTAT)
CCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCC
C   ZEITSCHLEIFE
CCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCC
      DO 200 J=1,NTIM
      TIME=TIME+DELTAT
CCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCC
C   SCHLEIFE UEBER ALLE PUNKTE
C
      DO 100 I=1,NP
      IZ=LAY(I)
C
C   KONVEKTIVER TRANSPORTSCHRITT
      XKON=VA(IZ)*DELTAT
C
C   DISPERSIVER TRANSPORT IN X-RICHTUNG
      RT=2.*(RANF()-.5)
      XDISP=RT*DSX(IZ)
C
C   NEUE XP-KOORDINATE
      XP(I)=XP(I)+XKON+XDISP
C   C(T) UND ELIMINIERUNG DES PUNKTES MIT XP.GT.XL
      IF (XP(I).GE.XL) THEN
      CALL CONC(C,T,MAXTIM,ITIM,TIME,DELTAT,FNP,SNP)
      IF(NP.EQ.1) GOTO 210
      CALL DESPKT(XP,ZP,MAXPKT,NTIM,NP,I,LAY)
      END IF
C
C   DISPERSIVER TRANSPORT IN Z-RICHTUNG
      ZDISP=RT*DSZ(IZ)
C
C   NEUE ZP-KOORDINATE
      ZP(I)=ZP(I)+ZDISP
C   KORREKTUR VON ZP BEI SPRUNG UEBER EINE DISKONTINUITAET
```



```
C      SUBROUTINE SETPKT SETZT DIE TEILCHEN EIN
CCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCC
      SUBROUTINE SETPKT (NL,NP,XP,ZP,MAXPKT,MAXLAY,Z,NPL,VA,IRBGN,LAY)
      DIMENSION XP(MAXPKT),ZP(MAXPKT),LAY(MAXPKT)
      DIMENSION Z(MAXLAY),VA(MAXLAY),NPL(MAXLAY)

C
      IF(IRBGN.EQ.0) GOTO 50

C
C      FESTKONZENTRATIONSBEDINGUNG
      QGES=0.
      IPUNKT=0

C      GESAMTDURCHFLUSS
      DO 10 IZ=1,NL
10    QGES=QGES+VA(IZ)*(Z(IZ+1)-Z(IZ))
C      FORMEL: NP(IZ)/NP(GES)=Q(IZ)/QGES
      DO 20 IZ=1,NL
      QIZ=VA(IZ)*(Z(IZ+1)-Z(IZ))
      PNPL=QIZ/QGES
20    NPL(IZ)=IFIX(PNPL*FLOAT(NP))
C      VERSETZEN DER PUNKTE PRO SCHICHT
      DO 40 IZ=1,NL
      IF(NPL(IZ).EQ.0) GOTO 40
C      GLEICHMAESSIGES VERSETZEN PRO SCHICHT
      DO 30 I=1,NPL(IZ)
      IPUNKT=IPUNKT+1
      DZ=(Z(IZ+1)-Z(IZ))/FLOAT(NPL(IZ)+1)
      XP(IPUNKT)=0.
      IF(I.EQ.1) THEN
      ZP(IPUNKT)=Z(IZ)+DZ
      ELSE
      ZP(IPUNKT)=ZP(IPUNKT-1)+DZ
      LAY(IPUNKT)=IZ
      END IF
30    CONTINUE
40    CONTINUE
C      GESAMTANZAHL DER EINGELESENEN PUNKTE
      NP=IPUNKT
      RETURN
50    CONTINUE

C
C      TEILCHEN WERDEN GLEICHMAESSIG EINGESETZT
      DZ=(Z(NL+1)-Z(1))/FLOAT(NP+1)
      IPUNKT=0
      LIMES=2
      ZP(1)=DZ+Z(1)
      XP(1)=0.
      LAY(1)=1
      DO 60 I=2,NP
      XP(I)=0.
      ZP(I)=ZP(I-1)+DZ
      IF(ZP(I).LT.Z(LIMES)) THEN
      IPUNKT=IPUNKT+1
      NPL(LIMES-1)=IPUNKT
      LAY(I)=LIMES-1
      ELSE
      IPUNKT=1
      LIMES=LIMES+1
      NPL(LIMES-1)=IPUNKT
      LAY(I)=LIMES-1
      END IF
60    CONTINUE
      RETURN

C
      END
```

















```
C      SUBROUTINE FALPHA BERECHNET DIE FLIESSWGABHAENGIGE DISPERSIVITAET
CCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCC
      SUBROUTINE FALPHA (AQUER,XQUER,TQUER,VQUER,MAXQ,XP,MAXPKT,
1          NP,IQUER,TALPHA,TSTEP,TEMPS)
C
      DIMENSION AQUER(MAXQ),XQUER(MAXQ),TQUER(MAXQ),VQUER(MAXQ)
      DIMENSION XP(MAXPKT)
C
      IQUER=IQUER+1
      TALPHA=TALPHA+TSTEP
      TQUER(IQUER)=TEMPS
      XQUER(IQUER)=0.
C
C      BESTIMMUNG DES MITTELWERTES IN X-RICHTUNG
      DO 10 I=1,NP
10      XQUER(IQUER)=XQUER(IQUER)+XP(I)
      XQUER(IQUER)=XQUER(IQUER)/FLOAT(NP)
C
C      BESTIMMUNG DER STANDARDABWEICHUNG**2
      SIGMAX=0.
      DO 20 I=1,NP
      DIFFX=XP(I)-XQUER(IQUER)
20      SIGMAX=SIGMAX+DIFFX*DIFFX
      SIGMAX=SIGMAX/FLOAT(NP-1)
C
C      BERECHNUNG DER MITTLEREN GESCHWINDIGKEIT
      VQUER(IQUER)=XQUER(IQUER)/TQUER(IQUER)
C
C      BERECHNUNG DER AEQUIVALENTEN DISPERSIVITAET
      AQUER(IQUER)=.5*SIGMAX/XQUER(IQUER)
C
      RETURN
      END
```

```
PROGRAM DISMO (INDAT,OUT1,OUT2,TAPE3=INDAT,TAPE1=OUT1,  
1          TAPE2=OUT2)  
  
C  
C  VERSION   : 10.8.86  
C  BEARBEITER: HEBERLE/SPITZ  
C  
C  DEFINITIONEN  
C  
C  ALPHA    : AUSTAUSCHKOEFFIZIENT ZWISCHEN MOBILER  
C            UND IMMOBILER SCHICHT IN 1/S  
C  ALPHAL   : DISPERSIVITAET IN M  
C  ANE      : VOLUMENANTEIL DER MOBILEN SCHICHT  
C            =>( ANE + DEP ) = 1.  
C  CM(I,J)  : KONZENTRATION IN DER MOBILEN SCHICHT IN G/M**3  
C  CIM(I,J) : KONZENTRATION IN DER IMMOBILEN SCHICHT IN G/M**3  
C            =>I..I-TE ZELLE  
C            =>J..1=ALTER ZEITPUNKT T, 2=NEUER ZEITPUNKT T+DT  
C  DEP      : VOLUMENANTEIL DER IMMOBILEN SCHICHT  
C  DT       : ZEITINKREMENT (TRANSPORT VON ZELLE ZU ZELLE) IN S  
C  DX       : LAENGE EINER ZELLE IN M  
C  LX       : ZELLE,IN DER C(T) BERECHNET WIRD  
C  NTIM     : ANZAHL DER ZEITSCHRITTE  
C  PECLET   : VERHAELTNIS VON DX ZU ALPHAL (GITTER-PECLETZAHL)  
C  VX       : GESCHWINDIGKEIT IN M/S  
C  
C  DIMENSION C(200,2),CIM(200,2),B(200),G(200)  
C  
C  ANFANGSZUWEISUNGEN  
C  
C  TIME=0.  
C  IN=3  
C  IOUT1=1  
C  IOUT2=2  
C  C0=1.  
C  
C  EINLESEN DER EINGABEDATEN  
C  
C  READ (IN,400) TEXT  
C  READ (IN,*)   NX,DX,NTIM,LX  
C  READ (IN,400) TEXT  
C  READ (IN,*)   VX,ALPHAL  
C  READ (IN,400) TEXT  
C  READ (IN,*)   ANE,ALPHA  
C  
C  DT=DX/VX  
C  IF(ALPHAL.GT..0001) THEN  
C  PECLET=DX/ALPHAL  
C  ELSE  
C  PECLET=9999.  
C  END IF  
C  XMITT=VX*DT*FLOAT(NTIM)  
C  
C  WRITE (IOUT1,410) NX,DX,NTIM,LX  
C  WRITE (IOUT1,420) VX,ALPHAL  
C  WRITE (IOUT1,430) ANE,ALPHA  
C  WRITE (IOUT2,*) ' DISMO:VX,AL,XM,NX,LX  
C  WRITE (IOUT2,420) VX,ALPHAL,XMITT,NX,LX  
C  WRITE (IOUT2,430) ANE,ALPHA,PECLET,DX,NTIM  
C  WRITE (IOUT2,*) '           T           C/C0           CIM/C0'  
C  
C  ANFANGSBELEGUNG DER FELDER  
C  
C  DO 10 I=1,NX  
C  C(I,1)=0.
```

```
C(I,2)=0.
CIM(I,1)=0.
CIM(I,2)=0.
B(I)=0.
G(I)=0.
10 CONTINUE
C
C   BERECHNUNG VON KONSTANTEN
C
C   DER ZEITSCHRITT DT WIRD DERART GEWAEHHLT,DASS KONVEKTIV DER
C   TRANSPORT EXAKT VON ZELLE ZU ZELLE ERFOLGT.DADURCH WERDEN
C   DIE TERME MIT FACTM2 GLEICH NULL (FACTM2=0.)
C   DT=DX/VX
C   WRITE (IOUT1,440) DT
C
C   IF(ALPHAL.GT..0001) THEN
C   PECLET=DX/ALPHAL
C   ELSE
C   PECLET=9999.
C   END IF
C   XMITT=VX*DT*FLOAT(NTIM)
C   BANKS=XMITT/ALPHAL
C   WRITE (IOUT1,450) PECLET,XMITT,BANKS
C
C   DL=VX*ALPHAL
C   DEP=1.-ANE
C
C   FACTM1=1./DT
C   FACTM2=-1./DT+VX/DX
C   FACTI1=ANE*(1.-EXP(-ALPHA*DT/ANE))
C   FACTI2=DEP*(1.-EXP(-ALPHA*DT/ANE))
C
C   AA=DL/DX/DX
C   BB=-2.*DL/DX/DX-1./DT
C   CC=DL/DX/DX
C
C====>1.BERECHNUNGSKNOTEN (FESTKONZENTRATION)
C(1,1)=C0
C(1,2)=C0
CIM(1,1)=C0
CIM(1,2)=C0
CCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCC
C   KONZENTRATIONSBERECHNUNG: ZEITSCHLEIFE
CCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCC
DO 200 J=2,NTIM
C
CCCC KONVEKTION UND DISPERSION CCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCC
TIME=TIME+DT
C
C====>2. BERECHNUNGSKNOTEN
DD=FACTM2*C(2,1)-FACTM1*C(1,1)-AA*C(1,2)
C
B(2)=CC/BB
G(2)=DD/BB
C
C====>FELDMITTE
DO 100 I=3,NX-2
DD=FACTM2*C(I,1)-FACTM1*C(I-1,1)
W=BB-AA*B(I-1)
C
B(I)=CC/W
G(I)=(DD-AA*G(I-1))/W
C
100 CONTINUE
```



```

C
C====>BERECHNUNGSKNOTEN NX-1
      DD=FACTM2*C(NX-1,1)-FACTM1*C(NX-2,1)-CC*C(NX,1)
      W=BB-AA*B(NX-2)
C
      B(NX-1)=CC/W
      G(NX-1)=(DD-AA*G(NX-2))/W
C
C      NEUE KONZENTRATIONEN IN DER MOBILEN PHASE
C      NACH DEM KONVEKTIVEN UND DISPERSIVEN SCHRITT
C
      C(NX-1,2)=G(NX-1)
      N=NX-2
110   C(N,2)=G(N)-B(N)*C(N+1,2)
      N=N-1
      IF(N.GT.1) GOTO 110
C====>BERECHNUNGSKNOTEN NX (TRANSMISSIONSRANDBEDINGUNG)
      C(NX,2)=2.*C(NX-1,2)-C(NX-2,2)
C
CCCCC AUSTAUSCH IM ZEITSCHRITT DT CCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCC
C
      DO 120 I=2,NX
      DIFFC=C(I,2)-CIM(I,1)
C      NEUE KONZENTRATIONEN IN DER MOBILEN PHASE
C      =====
      C(I,2)=C(I,2)-FACTI2*DIFFC
C
C      NEUE KONZENTRATIONEN IN DER IMMOBILEN PHASE
C      =====
120   CIM(I,2)=CIM(I,1)+FACTI1*DIFFC
C
      IF(C(LX,2).GT..001)
1WRITE (IOUT2,*) TIME, C(LX,2), CIM(LX,2)
C
C      UMSCHREIBEN DER KONZENTRATIONSFELDER
C
      DO 220 I=1,NX
      C(I,1)=C(I,2)
220   CIM(I,1)=CIM(I,2)
CCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCC
200   CONTINUE
CCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCC
C
C      AUSGABE VON C UEBER X FUER DAS PLOTPROGRAMM KURVE
C
      WRITE (IOUT2,*) -999.,-999.,-999.
      WRITE (IOUT2,*) ' DISMO:VX,AL,XM,NX,LX
      WRITE (IOUT2,420) VX,ALPHAL,XMITT,NX,LX
      WRITE (IOUT2,430) ANE,ALPHA,PECLET,DX,NTIM
      WRITE (IOUT2,*) '      X          C/C0          CIM/C0'
      X=-.5*DX
      DO 210 I=1,NX
      X=X+DX
210   WRITE (IOUT2,*) X,C(I,2),CIM(I,2)
      WRITE (IOUT2,*) -999.,-999.,-999.
C
400   FORMAT (A1)
410   FORMAT (' NX = ',I4,' DX= ',G12.4,' NTIM= ',I4,' LX= ',I4)
420   FORMAT (G10.4,1X,G10.4,1X,G10.4,1X,I5,1X,I5)
430   FORMAT (' NE=',F6.2,' A=',G10.4,' PE=',F8.1,' DX=',F6.2,' NT=',I5)
440   FORMAT (' DT = ',G12.4)
450   FORMAT (' PECLET-ZAHL          : ',G12.4,/,
1      ' MITTLERE FRONT (VX*T)    : ',G12.4,/,
2      ' VERHAELTNIS VX*T/ALPHAL: ',G12.4)

```

```
PROGRAM MINI(DAT1=65, DAT2=65, OUT1=65, OUT2=65,
ITAPE1=DAT1, TAPE2=DAT2, TAPE3=OUT1, TAPE4=OUT2)
CCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCC
C   DIESES PROGRAMM PASST EINE VORGEGEBENE FUNKTION FUNCTI
C   (Z.BSP.: FUNCT1 OGATA UND BANKS, 1961) AN N-WERTEPAARE AN. DIE
C   DIE ANPASSUNG ERFOLGT MIT DER SUBROUTINE ZXMIN DER IMSL-BIBLIOTHEK
C   VERSION 21.APRIL 1986
CCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCC
C
C
C
CCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCC
C   DEFINITION DER VARIABLEN
CCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCC
C   F       = FEHLERQUADRAT
C   FUNCT   = ANGEPASSTE FUNKTION
C   G       = HILFSFELD DER LAENGE NP
C   IER     = FEHLERMELDUNG (SIEHE IMSL)
C   IOPT    = STEUERBEFEHL FUER ZXMIN (0,1,2,3)
C   H       = HILFSFELD DER LAENGE (NP*(NP+1)/2)
C   N       = ANZAHL DER WERTEPAARE
C   NP      = ANZAHL DER GESUCHTEN PARAMETER
C   NSIG    = ABRUCHSKRITERIUM (ZAHL SIGNIFIKANTER DEZIMALSTELLEN)
C   MAXFN   = MAXIMALE ANZAHL DER AUFRUFE FUER FUNCT
C   W       = HILFSFELD DER LAENGE 3*NP
C   X       = LOESUNGSVEKTOR DER LAENGE NP (Z.BSP.: ALPHAL, VA, ...)
C   X1      = X-KOORDINATEN DER WERTEPAARE
C   X2      = Y-KOORDINATEN DER WERTEPAARE
C
C   ALPHAL  = LAENGSDISPERSIVITAET
C   DL      = LAENGSDISPERSIONSKOEFFIZIENTEN
C   KENN=1  = C(T) FUER XL
C   KENN=2  = C(X) FUER T0
C   T0      = ZEITPUNKT FUER DIE BERECHNUNG VON C(X)
C   XL      = ORT BEI DER BERECHNUNG VON C(T)
CCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCC
C
C   DIMENSION X1(100), X2(100), X(2), H(3), G(2), W(6)
C   EXTERNAL FUNCT1
C   COMMON/A/X1, X2, N
C   COMMON/B/XL, T0, KENN, IZAEHL, VA, ALPHAL
C   CHARACTER*80 TEXT(4)
C   DATA NSIG/3/, MAXFN/1000/, IOPT/0/, XL/-999./, T0/-999./
C
CCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCC
C   EINLESEN DER DATEN
CCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCC
C   IN1=1
C   IN2=2
C   IOUT=3
C   IOUT2=4
C   IOUT2=0
C
C   1 T0=-999.
C   XL=-999.
C   EINLESEN VON PARAMETERN VON FILE DAT1
C   READ(IN1, *, END=999) KENN, NP
C   GOTO(10, 20, 30) KENN
C   10 READ(IN1, *, END=999) VA, ALPHAL, XL
C   GOTO 30
C   20 READ(IN1, *, END=999) VA, ALPHAL, T0
C   30 CONTINUE
C
C   EINLESEN DER WERTEPAARE X1, X2 VON FILE DAT2
```



```
C      SUBROUTINE FUNCT1 (LOESUNG NACH OGATA UND BANKS,1961)
CCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCC
C
      SUBROUTINE FUNCT1(NP,X,F)
      DIMENSION X1(100),X2(100),X(2)
      COMMON/A/X1,X2,N
      COMMON/B/XL,T0,KENN,IZAEHL,VA,ALPHAL
      F=0.
      IF(X(1).LT.0.) THEN
      X(1)=-X(1)
      IZAEHL=IZAEHL+1
      END IF
      ALPHAL=X(1)
      IF(NP.EQ.2) VA=X(2)
      DL=VA*ALPHAL
      GOTO (10,20) KENN
C
C      BERECHNUNG VON C UEBER T BEI XL
C
      10 CONTINUE
      DO 30 I=1,N
      30 F=F+(X2(I)-BANKS(XL,X1(I),VA,DL))**2
      RETURN
C
C      BERECHNUNG VON C UEBER X BEI T0
C
      20 CONTINUE
      DO 40 I=1,N
      40 F=F+(X2(I)-BANKS(X1(I),T0,VA,DL))**2
      RETURN
      END
C
CCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCC
C      FUNCTION BANKS
CCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCC
C
      FUNCTION BANKS (X,T,VA,DL)
      PE=VA*X/DL
      IF(PE.GT.20.) PE=20.
      ZAEHL1=X-VA*T
      ZAEHL2=X+VA*T
      IF(DL*T.LE.0.) THEN
      BANKS=0.
      IF(ZAEHL1.LT.0.) BANKS=1.
      ELSE
      ANENN=2.*SQRT(DL*T)
      ARG1=ZAEHL1/ANENN
      IF(ARG1.GT.25.923) ARG1=25.92
      ARG2=ZAEHL2/ANENN
      IF(ARG2.GT.25.923) ARG2=25.92
      BANKS=.5*ERFC(ARG1)
      1 +.5*EXP(PE)*ERFC(ARG2)
      ENDIF
      RETURN
      END
```