

INSTITUT FÜR WASSERBAU

TECHNISCHE HYDROMECHANIK UND
WASSERBAULICHES VERSUCHSWESEN
O. PROFESSOR DR. HELMUT KOBUS

**UNIVERSITÄT
STUTTGART**

Wissenschaftlicher Bericht

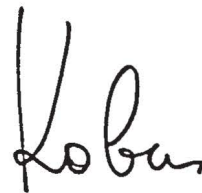
Nr. HWV 007

STRÖMUNGSTRANSPORT UND DISPERSION
IN PORENGRUNDWASSERLEITERN

Stuttgart, im Dezember 1978



Dipl.-Phys. B. Rinnert



o.Prof. Dr. H. Kobus

VORWORT

Der vorliegende Bericht fasst den derzeitigen Wissensstand über Dispersionserscheinungen im Untergrund zusammen. Er entstand aus dem Bemühen, für die eigenen Forschungsarbeiten den neuesten Stand der Forschung aufzuarbeiten und in vergleichender Form darzustellen, sowie eine gezielte Einführung in die nicht einfache Thematik zu bieten.

Der Bericht wurde von Herrn Rinnert zusammengestellt und verfasst. Er enthält zwei Teile:

- Die Kapitel 1 bis 4 wurden auf der Basis eines von H. Kobus im Sommer 78 verfassten Beitrags zu einer interdisziplinären Studie des Umweltbundesamtes mit dem Titel "Simulationsmodelle für die Ausbreitung von Wasserinhaltsstoffen im Grundwasser" von Herrn Rinnert überarbeitet und zum Teil neu gefasst.
- Die Kapitel 5 bis 9 wurden von Herrn Rinnert selbständig erarbeitet; sie sind das Ergebnis eines einjährigen Literaturstudiums mit kritischer Sichtung und Auswertung der verfügbaren Unterlagen. Diese Ausarbeitung stellt einen wesentlichen Bestandteil der zur Zeit von Herrn Rinnert bearbeiteten Dissertation über Dispersion in porösen Medien dar.

H. Kobus

GLIEDERUNG

Seite

Vorwort

1.	EINLEITUNG	1
1.1	Zielsetzung	1
1.2	Hydraulischer Zeitmaßstab der Grundwasserverschmutzung	2
2.	KLASSIFIZIERUNG VON AUSBREITUNGS- UND TRANSPORTVOR- GÄNGEN IM GRUNDWASSER	4
2.1	Allgemeines	4
2.2	Wasserinhaltsstoffe	4
2.3	Quellen	8
	2.3.1 Örtlicher Aspekt	8
	2.3.2 Zeitlicher Aspekt	12
2.4	Wege der Wasserinhaltsstoffe	12
	2.4.1 Ungesättigte Zone	12
	2.4.2 Gesättigte Zone	14
3.	TRANSPORTMECHANISMEN	16
3.1	Transportgleichung	16
3.2	Konvektiver Transport	17
3.3	Diffusion und Dispersion	17
3.4	Reaktionen	21
4.	PRINZIPIELLE MATHEMATISCHE BESCHREIBUNGSMÖGLICHKEITEN FÜR TRANSPORTVORGÄNGE VON WASSERINHALTSSTOFFEN	23
4.1	Vollständiges Gleichungssystem	23
4.2	Vereinfachte Beziehungen für homogene, isotrope Grundwasserleiter	25
4.3	Tracer	27
4.4	Aktive Substanzen	28
4.5	Vereinfachte Transportgleichungen	28

5.	BESCHREIBUNG VON DIFFUSION UND DISPERSION	32
5.1	Mathematische Beschreibung der Dispersion	32
5.1.1	Diffusionsgleichung	32
5.1.2	Entwicklung der makroskopischen Dispersionsgleichung	33
5.1.3	Allgemeinste Form der Dispersionsgleichung	38
5.2	Dispersionskoeffizienten	41
5.2.1	Mathematische Beschreibung von Dispersionskoeffizienten	41
5.2.2	Theoretische Ansätze zur Ermittlung von D_L und D_T aus Strömungsgrößen und Fluidparametern	45
5.2.2.1	Dimensionsanalyse	45
5.2.2.2	Theoretische Modelle für D_O , D_L , D_T	52
6.	LABOREXPERIMENTE ZUR BESTIMMUNG VON DISPERSIONSKOEFFIZIENTEN	55
6.1	Versuchsanordnungen zur Bestimmung von D_L	55
6.1.1	Kontinuierliche Tracerzugabe	56
6.1.2	Pulsförmige Tracerzugabe	63
6.2	Experimente zur Bestimmung von D_T	68
6.3	Modellkonzeption und Meßverfahren	72
6.4	Zusammenfassung und Vergleich der Ergebnisse aus Labormessungen	73
6.4.1	Dominierende Einflußgrößen	73
6.4.2	Einfluß weiterer Parameter	76
7.	BESTIMMUNG VON DISPERSIONSKOEFFIZIENTEN FÜR AUSBREITUNGSVORGÄNGE IN DER NATUR	78
7.1	Übertragbarkeit von Modellmessungen auf Naturverhältnisse	78
7.2	Bestimmung von Dispersionskoeffizienten in der Natur	80

8.	BESTIMMUNG VON DISPERSIONSKOEFFIZIENTEN IN INHOMO- GENEN UND ANISOTROPEN PORÖSEN MEDIEN	85
8.1	Experimentelle Untersuchungen	85
	8.1.1 Inhomogene Medien	85
	8.1.2 Anisotrope Medien	85
8.2	Theoretische Untersuchungen	86
	8.2.1 Einfluß stetig veränderlicher ortsabhängiger Porosität	86
	8.2.2 Einfluß zufällig verteilter Kenngrößen des Grundwasserleiters	87
9.	ZUSAMMENFASSUNG	95
10.	LITERATURVERZEICHNIS	98
10.1	Bücher	98
10.2	Zeitschriftenaufsätze	98

1. EINLEITUNG

1.1 Zielsetzung

Der Transport von Wasserinhaltsstoffen im Grundwasser wird von physikalischen, chemischen und biologischen Faktoren beeinflusst. Primär wichtig für die Beschreibung von Ausbreitungsvorgängen im Grundwasser ist eine korrekte Beschreibung der Grundwasserströmung, welche die Wasserinhaltsstoffe mit sich führt. Hierbei kommen verschiedene Transportmechanismen zum Tragen, die im folgenden näher beschrieben werden sollen. Es ist jedoch nicht möglich, die hydraulischen Transportvorgänge losgelöst von den chemischen und biologischen Prozessen im Untergrund zu betrachten. Zwischen den strömungsbedingten Ausbreitungsvorgängen einerseits und den chemischen und biologischen Prozessen im Untergrund andererseits bestehen Wechselbeziehungen, die bei der mathematischen Beschreibung der Transportvorgänge von vorneherein mitberücksichtigt werden müssen.

Zur Beschreibung von Ausbreitungsvorgängen in natürlichen Grundwasserleitern ist man auf numerische Simulationsmodelle angewiesen, weil im allgemeinen die Komplexität der Strömung und der Transport- und Reaktionsmechanismen keine analytische Lösung ermöglicht.

Die bisher bekannten Simulationsmodelle sind nicht allgemein einsetzbar, weil eine Reihe von physikalischen und chemisch-biologischen Zusammenhängen noch nicht hinreichend geklärt ist. Ohne tieferes Verständnis dieser Zusammenhänge können einige der Parameter, die man zur Beschreibung von Ausbreitungsvorgängen in ein Simulationsmodell einbringen muß, nur unbefriedigend angegeben werden. Häufig werden auch mathematische Vereinfachungen getroffen, deren Zulässigkeit aus

physikalischer Sicht nicht von vorneherein abgeschätzt werden kann. Schließlich fehlt es in aller Regel an einer ausreichenden Anzahl von Naturmeßdaten zur Verifizierung der Simulationsmodelle.

Ziel des ersten Teils des vorliegenden Berichts (Kapitel 1 bis 4) ist es daher, die physikalischen Zusammenhänge des Transports und der Ausbreitung von Wasserinhaltsstoffen im Grundwasser zu erläutern und systematisch darzustellen, um so eine Basis für die Klassifizierung der in der Praxis auftretenden Probleme aus hydraulischer Sicht zu schaffen. Damit erhält man auch eine Beurteilungsbasis, nach der die Zulässigkeit vereinfachender Annahmen überprüft und die Zuordnung praktischer Problemstellungen zu den verschiedenen verfügbaren Modelltypen getroffen werden kann.

Es wird davon ausgegangen, daß alle Fragen und Probleme im Zusammenhang mit der Grundwasserströmung an sich ausgeklammert bleiben, da die Gesetzmässigkeiten der Grundwasserströmung ausreichend bekannt und die verfügbaren Lösungsmethoden an zahlreichen praktischen Aufgaben erprobt sind. Ebenso sollen hier Ausführungen über die Ursachen der Grundwasserverschmutzung oder über Maßnahmen zu deren Eindämmung oder Verhinderung ausgeklammert bleiben.

Im zweiten Teil des Berichts (Kapitel 5 bis 9) wird näher auf die physikalische Dispersion im Grundwasserleiter eingegangen. Ohne hinreichend genaue Kenntnis der Dispersions-eigenschaften kann man keine realistischen Ausbreitungsrechnungen durchführen. Fragen der Abhängigkeit der Dispersion von Fluideigenschaften, Bodenkenngrößen, Eigenschaften der transportierten Stoffe sowie Probleme ihrer Bestimmung in Natur und Modell bilden daher den Schwerpunkt des zweiten Teils dieses Berichts.

1.2 Hydraulischer Zeitmaßstab der Grundwasserverschmutzung

Wegen ihrer grundsätzlichen Bedeutung für die Probleme der

Grundwasserverschmutzung sei hier eine prinzipielle hydraulische Erwägung genannt. Grundwasserleiter unterscheiden sich von anderen Wasserkörpern in erster Linie dadurch, daß sie sehr langsam durchflossen werden. Ein charakteristisches Zeitmaß für die Durchströmung ist die mittlere Verweilzeit, definiert als

$$\text{Mittlere Verweilzeit } T = \frac{\text{Volumen des Gewässerkörpers}}{\text{Volumenstrom}} \quad (1)$$

Diese Verweilzeit gibt grössenordnungsmässig an, wie lange es dauert, bis der Inhalt eines Gewässerkörpers einmal vollständig ausgetauscht wird. Typische Verweilzeiten für Grundwasserleiter liegen in der Grössenordnung von Jahren, Jahrzehnten oder Jahrhunderten, für Fliessgewässer hingegen bei wenigen Tagen.

Grundwasserleiter reagieren demnach auf jegliche Veränderung nur sehr langsam. Während sich eine plötzlich einsetzende Wasserverschmutzung in einem Fliessgewässer schon nach Tagen im gesamten Gebiet bemerkbar macht, kann dies im Grundwasser viele Jahre dauern. Dies mag mit die Ursache dafür sein, daß Grundwasserverschmutzungen bis jetzt nicht in dem Umfang beobachtet wurden wie die Verschmutzung von Oberflächengewässern. Wesentlich ist jedoch die Tatsache, daß dieselben Reaktionszeiträume auch für jede Art von Reinigungsmaßnahmen gelten: Während ein Fluß bei umfassenden Sanierungsmaßnahmen in relativ kurzer Zeit auf eine gewünschte Gewässergüte gebracht werden kann, kann es Jahrzehnte dauern, bis die Verschmutzung eines Grundwasserleiters rückgängig gemacht ist. Gerade dieser langfristige Zeitaspekt macht es erforderlich, den Fragen der Grundwasserverschmutzung schon in ihren Anfängen besondere Aufmerksamkeit zukommen zu lassen.

2. KLASSIFIZIERUNG VON AUSBREITUNGS- UND TRANSPORTVORGÄNGEN IM GRUNDWASSER

2.1 Allgemeines

Will man Ausbreitungs- und Transportvorgänge im Grundwasser einer generellen Klassifizierung unterziehen, so bietet sich hierfür an, zunächst einmal zu unterscheiden nach:

- Beschaffenheit und Zusammensetzung der Wasserinhaltsstoffe;
- "Quellen" von Wasserinhaltsstoffen: d.h. die Art und Weise, wie die Inhaltsstoffe in das Grundwasser gelangen, wobei nach Ort und Zeit der Zugabe unterschieden werden kann;
- Wege der Wasserinhaltsstoffe;

Diese drei Arten von Klassifizierungsmerkmalen werden im folgenden näher erläutert.

2.2 Wasserinhaltsstoffe

Hier sollen diejenigen Merkmale besprochen werden, die für die hydromechanischen Vorgänge wichtig sind und somit Einfluß auf das Strömungs- oder Konzentrationsfeld haben.

Zunächst unterscheidet man zwischen gelösten, suspendierten und emulgierten Stoffen.

- Gelöste Substanzen sind an die Wasserteilchen gebunden und weisen keine Relativbewegung zum Wasser auf. Man muß unterscheiden zwischen Stoffen, welche die Dichte und die Zähigkeit des Wassers nicht oder nur unwesentlich verändern (hydrodynamisch neutrale Stoffe) und solchen, bei denen diese Fluideigenschaften verändert werden, was wiederum Auswirkungen auf das Strömungsverhalten hat.
- Suspendierte Stoffe liegen im Grundwasser in aller Regel in einer Form vor, bei der sie sich hydrodynamisch wie

gelöste Stoffe verhalten. Das heißt, daß sie von der Strömung in der Schwebelage gehalten werden ("Schwebstoffe") und daß ihre jeweilige Sinkgeschwindigkeit vernachlässigbar klein ist. Dies ist für sehr kleine Partikeldurchmesser oder sehr kleine Dichteunterschiede zwischen Feststoff und Wasser zutreffend. Bei entsprechend grobem bzw. schwerem Suspensionsmaterial kommt die Einwirkung der Schwerkraft zum Tragen, d.h. die Sinkgeschwindigkeit der Partikel muß berücksichtigt werden, was in der Regel zu Ablagerungserscheinungen im Korngerüst führt.

- Emulgierte Stoffe weisen Eigenschaften auf, die eine Vermischung und Lösung im Grundwasser nicht zulassen. Der Transport solcher Stoffe im Grundwasser ist deshalb grundsätzlich anderer Natur als in den beiden vorgenannten Fällen. Es tritt eine Verdrängungsströmung mit einer Trennfläche zwischen Grundwasser und Emulsion auf, wobei den chemischen Reaktionen an der Trennfläche besondere Beachtung gewidmet werden muß.

Wasserinhaltsstoffe können des Weiteren unterschieden werden nach perseveranten, persistenten oder refraktären und nach abbaubaren Substanzen.

- Perseverante Stoffe sind solche, die weder chemischen oder biologischen Reaktionen ausgesetzt sind noch durch Absetzen oder Ausfällen dem Grundwasser entzogen werden. Dies sind im hydromechanischen Sinne konservative Stoffe.
- Persistente oder refraktäre Stoffe sind solche Substanzen, die zwar nicht chemisch oder biologisch abgebaut werden, aber durch physiko-chemische Vorgänge am Korngerüst angelagert werden. Auf diese Weise werden sie dem Grundwasser entzogen, was bei der Auf-

stellung entsprechender Bilanzgleichungen für ein Kontrollvolumen des Grundwassers berücksichtigt werden muß.

- Abbaubare Substanzen sind solche Wasserinhaltsstoffe, die durch chemische oder biologische Prozesse umgewandelt und abgebaut werden und auf diese Art und Weise aus dem Grundwasser eliminiert werden. Auch solche Abbauvorgänge müssen in den entsprechenden Transportgleichungen in der Bilanz mit berücksichtigt werden.

Aus hydromechanischer Sicht lassen sich mischbare Wasserinhaltsstoffe unterscheiden nach Tracern und aktiven Stoffen sowie nach konservativen und nicht konservativen Substanzen. Insgesamt ergibt sich folgende Klassifizierung:

(1) Tracer: hydrodynamisch neutrale, mischbare Substanzen. Hierzu gehören alle gelösten oder suspendierten Wasserinhaltsstoffe bei sehr geringen Konzentrationen oder aber auch diejenigen Stoffe bei beliebigen Konzentrationen, die keine merkliche Änderung der Dichte oder der Zähigkeit des Grundwassers verursachen. Für Tracer gilt ($\rho = \text{const}$) und ($\eta = \text{const}$), was die mathematische Simulierung des Transports von Tracern erheblich vereinfacht. Zahlreiche praktische Probleme anthropogen verursachter Grundwasserunreinigungen können mathematisch als Tracer-Transportprobleme behandelt werden. Tracer können sowohl konservativ (perseverant) als auch nicht konservativ (persistent, ausfallend, abbaubar) sein.

(2) Hydrodynamisch aktive, mischbare Substanzen:

Hierzu zählen alle diejenigen Wasserinhaltsstoffe, die eine Dichte- oder Zähigkeitsänderung des Grundwassers bewirken und dadurch die Durchlässigkeit und das Strömungsfeld "aktiv" beeinflussen und verändern. Dichte- und/oder Zähigkeitsänderungen bewirken Änderungen der Durchlässigkeit, und Dichteunterschiede verursachen zudem Auftriebseffekte. Beispiele

hierfür sind hohe Feststoff- oder Salzkonzentrationen, oder auch Temperaturunterschiede bei Warm- oder Kaltwassereinleitungen. Die Wirkung der aktiven Wasserinhaltsstoffe kann zu drastischen Veränderungen des Strömungsfeldes führen, so daß hier eine getrennte Betrachtung von Strömungsfeld und Konzentrationsfeld nicht mehr zulässig ist. Auch aktive Substanzen können sowohl konservativ als auch nicht-konservativ sein.

(3) Nicht mischbare Substanzen: Emulgierte Stoffe können gegenüber dem Grundwasser sowohl eine unterschiedliche Dichte ρ als auch eine unterschiedliche Zähigkeit η aufweisen. Auch hier können Reaktionen mit dem Korngerüst auftreten, also ein konservatives oder nicht-konservatives Verhalten vorkommen.

Die Zuordnung eines Wasserinhaltsstoffes zu dieser Klassifikation ist nicht immer von vorneherein eindeutig und auch je nach Untersuchungsgebietsgröße und Betrachtungszeitraum unterschiedlich. So kann beispielsweise ein sehr langsam reagierender Inhaltsstoff dann als "konservativ" behandelt werden, wenn die Aufenthaltszeit im Untersuchungsgebiet sehr viel kürzer ist als die erforderliche Zeit für die Abbaureaktion; hingegen muß für großräumige und langfristige Betrachtungen diese Reaktion mit berücksichtigt werden.

Ebenso fließend ist in vielen Fällen der Übergang vom "Tracer" zum "aktiven" Wasserinhaltsstoff. Streng genommen bewirkt jeder Fremdstoff eine Veränderung der Dichte und der Zähigkeit, aber ab welchen Konzentrationen sich diese Änderungen merklich auf das Strömungsfeld auswirken, ist in der Regel nicht bekannt.

Die rechnerische Erfassung von Ausbreitungsvorgängen im Grundwasser wird entscheidend geprägt von der Art von Wasserinhaltsstoffen, die beschrieben werden sollen. Hier ist

noch in vielen Fällen ungeklärt, ab welcher Grenze vereinfachende Annahmen zulässig sind.

Der vorliegende Bericht befaßt sich im folgenden ausschließlich mit der Ausbreitung mischbarer Wasserinhaltsstoffe, d.h. Mehrphasenströmungen (Wasser/Luft, Wasser/Öl) sollen hier nicht erwähnt werden.

2.3 Quellen

2.3.1 Örtlicher Aspekt

Grundwasserleiter sind in aller Regel Gebiete mit einer relativ großen horizontalen Ausdehnung im Vergleich zur Mächtigkeit des Grundwasserleiters. Legt man deshalb für großräumige Betrachtungen eine horizontal-ebene Betrachtungsweise für den Grundwasserkörper zugrunde, so kann man hierfür punktförmige, linienförmige und flächige Einleitungen unterscheiden.

"Punktförmige" Einleitungen von Wasserinhaltsstoffen stellen alle diejenigen Verschmutzungsquellen dar, welche Inhaltsstoffe örtlich konzentriert in das Grundwasser abgeben. So stellt beispielsweise eine Mülldeponie für eine großräumige Betrachtung in aller Regel eine punktförmige Einleitung dar (Bild 1). Ebenso sind für eine horizontal-ebene Betrachtung Schluckbrunnen als punktförmige Einleitungen zu bezeichnen, unabhängig davon, ob nun örtlich der Brunnen über die gesamte Mächtigkeit des Grundwasserleiters verfiltert ist oder nur über einen Teil. Auch alle Verschmutzungsquellen zufolge von örtlichen Unfällen können in aller Regel für großräumige Grundwasserbetrachtungen als punktförmig angesehen werden.

Linienförmige Einleitungen in Grundwasserleiter stellen vor allem Flüsse und Kanäle dar (Bild 2). Oberflächengewässer weisen in aller Regel eine direkte hydraulische Verbindung

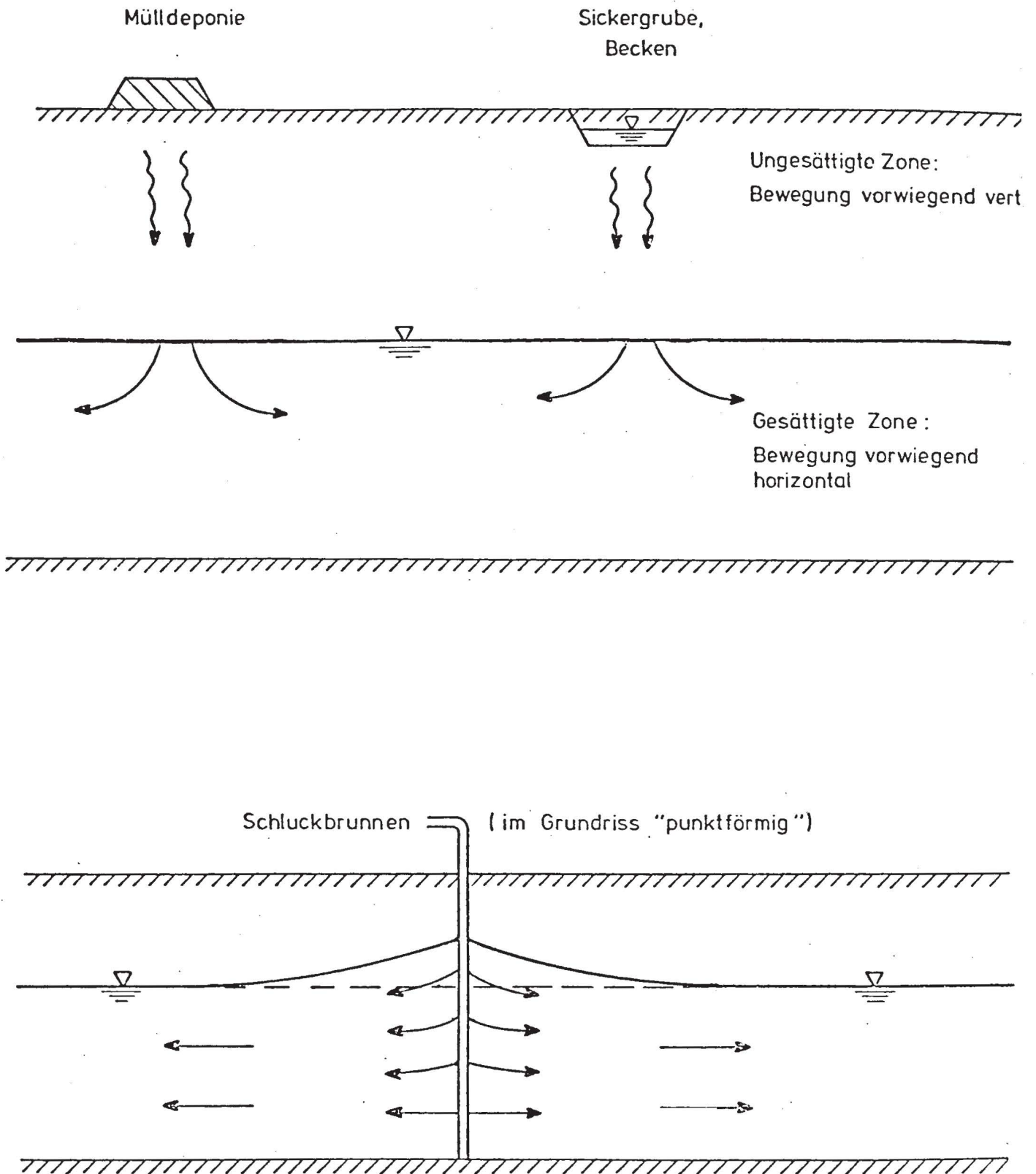


Bild 1: "Punktförmige" Verschmutzungsquellen

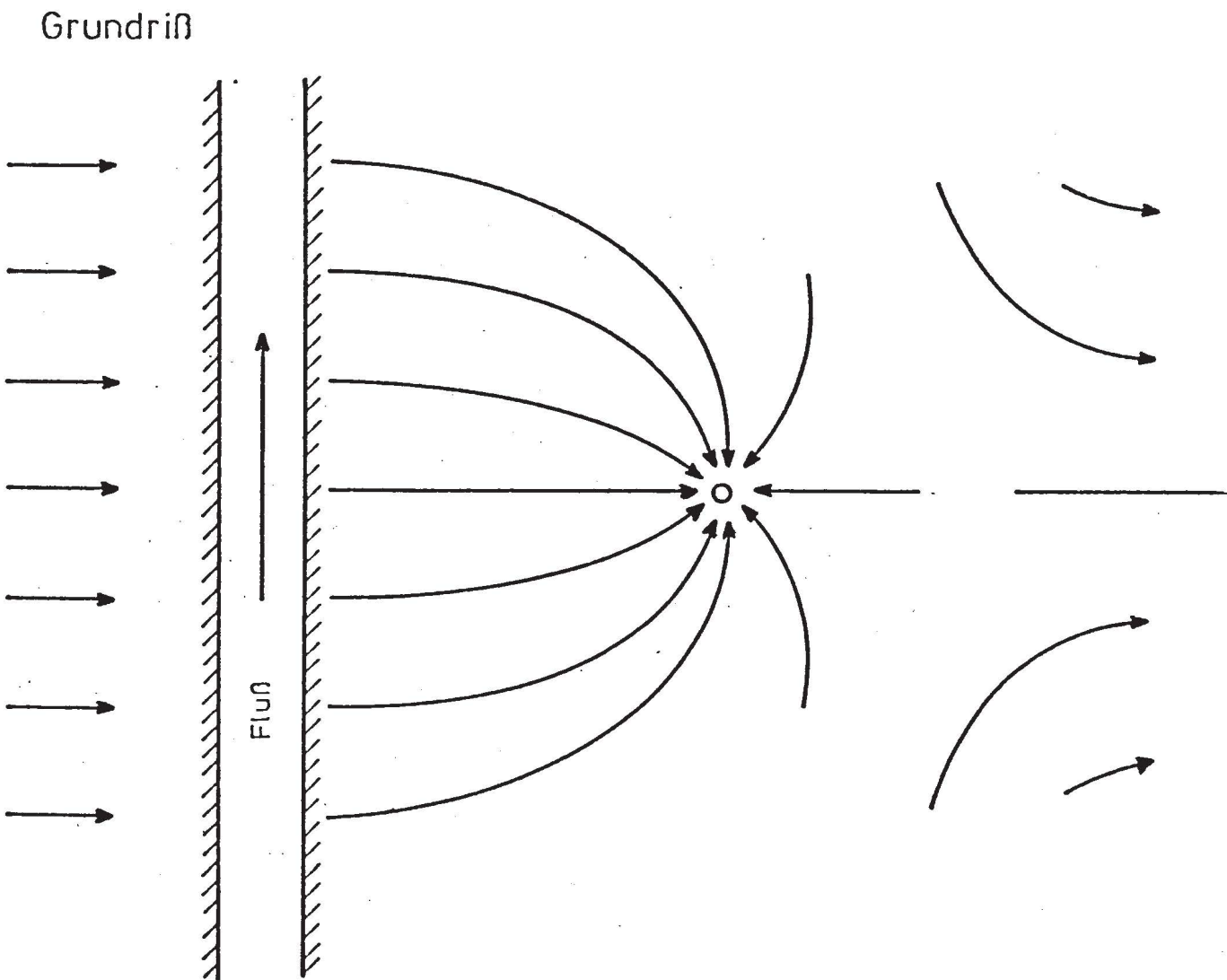
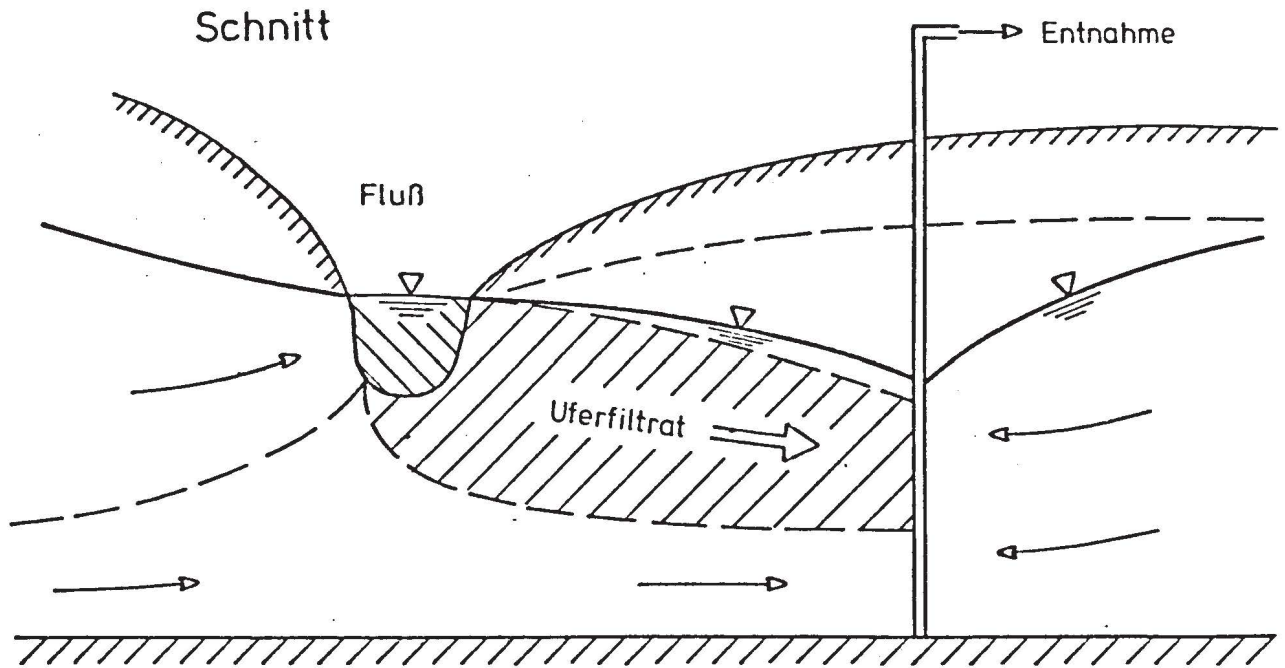


Bild 2: "Linienförmige" Verschmutzungsquellen: Fließgewässer

zum Grundwasser auf, und sie stehen in ständigen Wechselwirkungen mit dem Grundwasser. Je nach hydrologischer Situation wird Wasser vom Oberflächengewässer in das Grundwasser eingespeist oder aus diesem abgeführt. Da Oberflächengewässer auf Veränderungen der hydrologischen Gegebenheiten sehr viel rascher reagieren als das Grundwasser, gilt grundsätzlich, daß bei Hochwassersituationen stets in das Grundwasser eingespeist wird, während bei Niedrigwassersituationen die Oberflächengewässer vom Grundwasser gespeist werden. Hierbei werden Wassermengen ausgetauscht, welche ein Vielfaches der anthropogen bedingten punktförmigen Einleitungswassermengen ausmachen können. Die im Oberflächengewässer enthaltenen Wasserinhaltsstoffe können hierbei in das Grundwasser eingetragen werden.

Allerdings ist hierbei besonders zu beachten, daß sich an der Gewässersohle eine sogenannte "Selbstdichtungsschicht" ausbilden kann. Diese Schicht, in der Regel von einigen Dezimetern Mächtigkeit, weist eine wesentlich geringere Durchlässigkeit als der Grundwasserleiter auf, was eine Reduzierung des Wasseraustauschs bewirkt und bis zur vollständigen Versiegelung des Fließgewässers gegenüber dem Grundwasser führen kann. Gleichzeitig übt diese Schicht die Wirkung eines Filters aus, in welchem die physikalische Ausfällung und chemische und biologische Umsetzung besonders intensiv ist. Diese Schicht an der Gewässersohle ist äußerst komplex und bis heute einer Berechnung noch weitgehend unzugänglich.

Flächige Einleitungen von Wasserinhaltsstoffen entstehen dadurch, daß mit dem Niederschlag Wasserinhaltsstoffe auf dem Weg der Grundwasserneubildung in den Grundwasserkörper gelangen, sei es, daß sie bereits im Niederschlag enthalten sind, oder aber, daß bei der Durchsickerung der Oberflächenschichten Wasserinhaltsstoffe aufgenommen und mittransportiert werden, wie beispielsweise Düngemittel oder Produkte aus landwirtschaftlicher Nutzung.

2.3.2 Zeitlicher Aspekt

Bezüglich der Zeitdauer der Zufuhr von Wasserinhaltsstoffen zum Grundwasserleiter sind zu unterscheiden:

- Einmalige Zugabe, wie dies beispielsweise bei Unfällen (Auslaufen von Tankwagen, Rohrbrüche, etc.) auftritt. Hierbei wird zu einem bestimmten Zeitpunkt plötzlich eine bestimmte endliche Menge von Wasserinhaltsstoffen freigegeben.

- Eine kontinuierliche Zugabe über lange Zeiträume, wie beispielsweise bei der Einleitung von Industrierwasser durch Schluckbrunnen, welche je nach Betriebsbedingungen über sehr lange Zeiträume konstant bleiben kann. In solchen Fällen wird sich im Grundwasserleiter nach genügend langer Zeit ein Gleichgewichtszustand einstellen, welcher von den hydrologischen Randbedingungen und den Bedingungen der Zugabe vorgegeben ist. Solche quasi-stationären Zustände können dann mit Hilfe von stationären Modellen erfasst werden.

- Zeitlich veränderliche Zugabe, wie beispielsweise beim Eindringen von Uferfiltrat aus Flüssen oder Kanälen. Die Ausbreitungs- und Transportvorgänge müssen in diesem Fall durch instationäre Modelle beschrieben werden.

2.4 Wege der Wasserinhaltsstoffe

2.4.1 Ungesättigte Zone

In der ungesättigten Zone werden Wasserinhaltsstoffe mit dem einsickernden Niederschlag überwiegend in vertikaler Richtung transportiert. Die Strömung erfolgt im ungesättigten Bereich unter dem Einfluß der Schwerkraft und unter Wirkung von Kapillarkräften. Die Strömungsverhältnisse in diesem Bereich werden dadurch sehr kompliziert, daß hier stets eine Mehrphasenströmung vorliegt, die sich je nach

Sättigungsgrad unterschiedlich verhält. Ein entscheidendes Merkmal dieses Bereiches ist auch, daß die Transportwege hier in aller Regel kurz sind, nämlich in der Größenordnung des Flurabstands oder kleiner. Dies bedeutet, daß in der ungesättigten Zone die Transporterscheinungen sehr lokal betrachtet werden müssen, und daß hierfür die örtlichen Details der Bodenstruktur von ausschlaggebender Bedeutung sind. Es erscheint daher so gut wie ausgeschlossen, jemals realistische Transportmodelle für diesen Bereich zu erstellen, die Prognoserechnungen für praktische Aufgabenstellungen zulassen, weil eine entsprechend genaue Beschreibung der örtlichen Bodenstruktur nicht möglich ist (wie beispielsweise die Berücksichtigung von Spalten, Klüften, Wurzeln, kleineren Toneinlagerungen etc.).

So wesentlich diese Zone für die chemischen und biologischen Abbauprozesse ist, so wenig sinnvoll erscheint es, für diesen Bereich detaillierte Transportmodelle zu entwickeln. Statt dessen erscheint es angebracht und den jeweils zur Verfügung stehenden Naturdaten angemessen, wenn für die Beschreibungen der Transportvorgänge in diesem Bereich lediglich angesetzt wird, daß die Strömungsrichtung vertikal ist, wobei von der Oberfläche bis zum Grundwasserleiter eine mittlere Strömungszeit angesetzt werden kann, welche entweder aus entsprechenden Sickermessungen im Labor oder in der Natur gewonnen oder aber aus hydrologischen Betrachtungen der Regression zwischen Niederschlag und Grundwasserständen ermittelt werden kann. Eine erste Größenordnungsangabe für typische Sickergeschwindigkeiten gibt A.H. Blair in Cole 1974 (Bild 3). Aus den oben genannten Gründen können diese Werte jedoch nur als grobe Richtwerte angesehen werden, von denen tatsächliche Werte drastisch abweichen können.

Es gibt unzählige experimentelle Untersuchungen über Sickervorgänge im ungesättigten Bereich, die jedoch aus den genannten Gründen zu keinen allgemein gültigen Folgerungen

für die hier angesprochene Thematik führen. Es wird daher darauf verzichtet, die entsprechenden Literaturstellen hier zu diskutieren. Stattdessen wird auf die Fachliteratur (Hydrologie, Bodenkunde, Landwirtschaftlicher Wasserbau) verwiesen.

Bodenart	Infiltrationsgeschwindigkeit in mm/h
Sande	> 20
Sandige und schluffige Böden	10 - 20
Lehm	5 - 10
Tonige Böden	1 - 5
Tonige Böden mit Natriumverbindungen	< 1

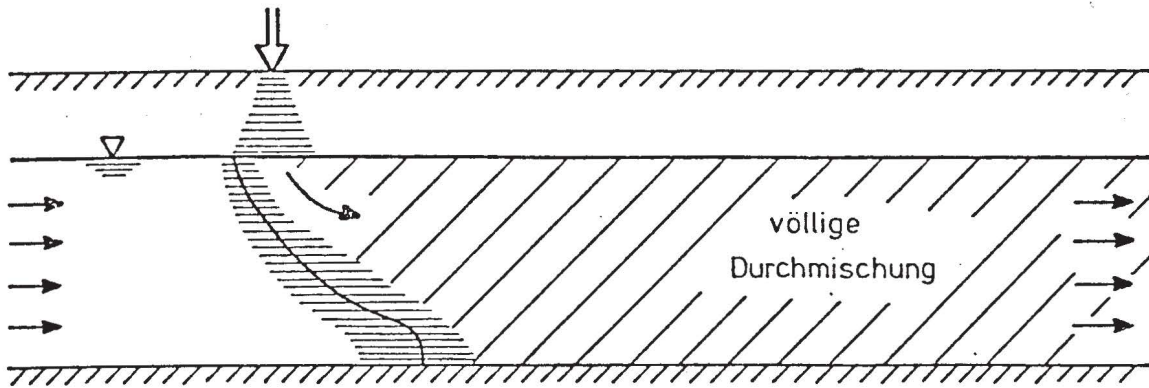
Bild 3: Typische Infiltrationsgeschwindigkeiten in ungesättigtem Bereich nach A.H. Blair

2.4.2 Gesättigte Zone

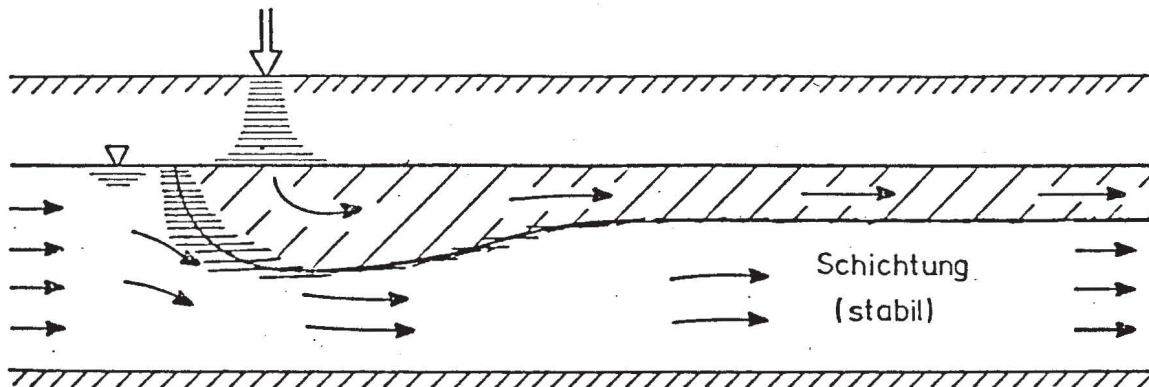
In der gesättigten Zone des Grundwasserleiters erfolgen Transportvorgänge von Wasserinhaltsstoffen vorwiegend in horizontaler Richtung. Je nach Art der transportierten Wasserinhaltsstoffe und Beschaffenheit des Grundwasserleiters kann sich nach genügend langem Fließweg eine vertikale Durchmischung über die Mächtigkeit des Grundwasserleiters einstellen, oder aber es treten Schichtungseffekte im Grundwasserleiter auf. Letztere können drastische Auswirkungen auf die Konzentrationsverteilung der Wasserinhaltsstoffe und auf das Strömungsfeld im Grundwasser haben, wie dies schematisch in Bild 4 dargestellt ist.

Aus chemisch-biologischer Sicht muß man im gesättigten Grundwasserleiter zwischen aerobem und anaerobem Bereich unterscheiden; für die Strömungsmechanik ist diese Unterscheidung jedoch nicht von Belang.

Punktförmige Einleitung einer neutralen Substanz:



Spezifisch leichtere Substanz:



Spezifisch schwerere Substanz:

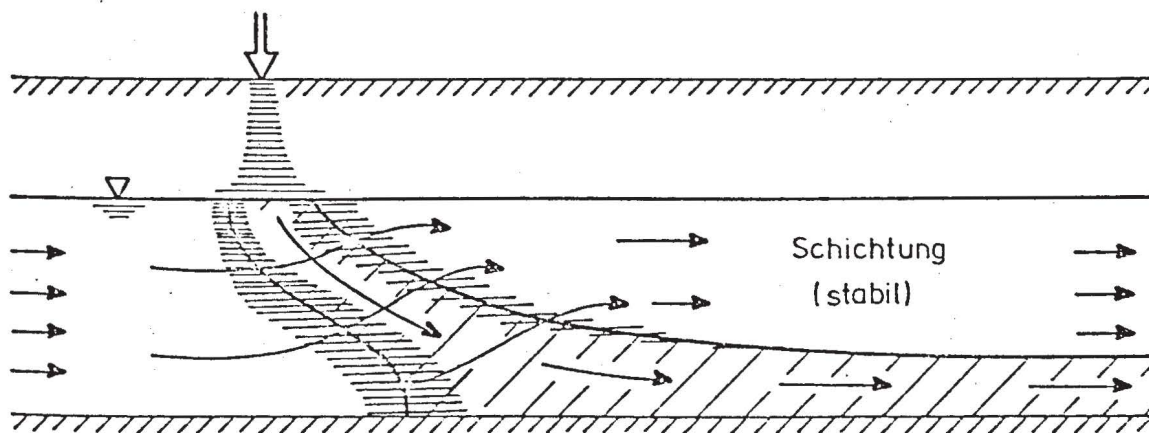


Bild 4: Schichtungseffekte bei Dichteunterschieden

3. TRANSPORTMECHANISMEN

3.1 Transportgleichung

Wenn man den Transport von Wasserinhaltsstoffen in einem Grundwasserleiter beschreiben will und zunächst davon ausgeht, daß das Strömungsfeld bekannt sei, dann lässt sich aus einer Betrachtung der Massenbilanz des Wasserinhaltsstoffes für ein Volumenelement folgende allgemeine Transportgleichung ableiten, (unter Zugrundelegung des Koordinatensystems und der Bezeichnungen aus Kapitel 4):

$$\frac{\partial c}{\partial t} = \operatorname{div} (D \cdot \operatorname{grad} c) - \operatorname{div} (\vec{v} \cdot c) + \sum R \quad (2a)$$

$$\frac{\partial c}{\partial t} = \frac{\partial}{\partial x_i} \left[(D_m + D_{ij}) \frac{\partial c}{\partial x_j} \right] - v_i \frac{\partial c}{\partial x_i} + \sum R \quad (2b)$$

Diese Gleichung beschreibt die Veränderungen der Konzentration des Wasserinhaltsstoffs zufolge der Strömung mit den Geschwindigkeitskomponenten u, v, w , zufolge des Korngerüsts und zufolge physikalischer, chemischer oder biologischer Erscheinungen. Gleichung (2) ist die sogenannte "Dispersionsgleichung". Auf sie wird in Kapitel 5 noch näher eingegangen. An dieser Stelle dient sie lediglich zur Erläuterung der Transportmechanismen.

Die linke Seite in Gleichung (2) gibt die gesamte zeitliche Änderung der Konzentration an einem festen Ort an. Das erste Glied auf der rechten Seite gibt den Transport zufolge Dispersion an, das zweite Glied den konvektiven Transport, und das dritte enthält alle "Reaktionen", die eine zeitliche Veränderung der Konzentration bewirken.

3.2 Konvektiver Transport

Gelöste oder suspendierte Wasserinhaltsstoffe werden von der Strömung mit der jeweiligen Geschwindigkeit des Wassers mittransportiert. Diese Transportart nennt man Konvektion.¹⁾

Um die Bedeutung der einzelnen Transportmechanismen vergleichen zu können, muß man die jeweiligen Zeitmaßstäbe betrachten. Ein charakteristisches Zeitmaß für den konvektiven Transport erhält man aus der Länge L des betrachteten Gebiets und der Strömungsgeschwindigkeit U zu

$$T_K = L/U \quad (3)$$

T_K ist diejenige Zeit, die ein Partikel benötigt, um das betrachtete Untersuchungsgebiet der Länge L mit der charakteristischen Geschwindigkeit U zufolge konvektiven Transports zu durchlaufen. Sie ist direkt vergleichbar mit der in Gleichung (1) definierten mittleren Verweilzeit T.

3.3 Diffusion und Dispersion

In den folgenden Ausführungen werden Begriffe erläutert, die zur Beschreibung des dispersiven Transports notwendig sind. Fragen der quantitativen Beschreibung durch sogenannte Dispersionskoeffizienten werden im Kapitel 5 ausführlich diskutiert.

Mischbare Wasserinhaltsstoffe erfahren im Grundwasser eine zusätzliche Ausbreitung als Folge von Dispersionsvorgängen.

1) Manche Autoren, z.B. Klotz (1973), verwenden den Begriff Advektion anstelle Konvektion und bezeichnen mit Konvektion einen Transportmechanismus, der durch Dichteunterschiede hervorgerufen wird.

Diese ergeben sich aufgrund der kombinierten Wirkung von molekularer Diffusion und mechanischer, korngerüstbedingter Dispersion. Wegen der Untrennbarkeit der beiden Mechanismen hat sich die Bezeichnung Dispersion für den resultierenden Transportmechanismus eingebürgert. Molekulare Diffusion findet immer dann statt, wenn Gradienten eines chemischen Potentials (also Konzentrationsgradienten) vorliegen. Dies ist ein physiko-chemischer Prozess, der selbst in ruhendem Wasser auftritt. Molekulare Diffusion bildet stets einen Teil der Dispersion; bei großen Fließgeschwindigkeiten ist ihr Beitrag klein im Vergleich zur mechanischen Dispersion; wenn die Strömungsgeschwindigkeit gegen Null geht, bleibt letztlich ausschließlich der Anteil der molekularen Diffusion wirksam.

Mechanische oder korngerüstbedingte Dispersion ist im Gegensatz hierzu nicht nur von den Stoffeigenschaften, sondern auch von der Strömung abhängig. Sie entsteht dadurch, daß bei der Durchströmung des Korngerüsts die Geschwindigkeitsverteilung nicht gleichförmig ist. Hierbei lassen sich drei Effekte unterscheiden:

- wegen der Haftbedingung an den Rändern weist die Strömung in einer Stromröhre ein (parabolisches) Geschwindigkeitsprofil auf, wodurch Teilchen im Fließquerschnitt mit unterschiedlicher Geschwindigkeit vorwärts transportiert werden;
- die Poren des Korngerüsts haben unterschiedliche Abmessungen, wodurch die Maximalgeschwindigkeit auf der Porenachse von Pore zu Pore variiert.
- die Stromröhren beschreiben (mikroskopisch betrachtet) sehr gewundene Bahnen durch die Porenkanäle. Um von einem Punkt im Grundwasserleiter zu einem anderen zu kommen, benötigt daher ein Teilchen eine Fließzeit, die vom "eingeschlagenen" Weg abhängt und nicht mehr nur vom Abstand der beiden Punkte (wegabhängige Abstandsgeschwindigkeit). Zusätzlich führen die ge-

wundenen Bahnen zu einer Versetzung quer zur (mikroskopisch betrachteten) Strömungsrichtung.

Die gemeinsame Wirkung der mechanischen, korngerüstbedingten Dispersion und der molekularen Diffusion verursacht eine Ausbreitung von Wasserinhaltsstoffen und einen Abbau von Konzentrationsgradienten.

Bei der Dispersion handelt es sich um einen irreversiblen physikalischen Prozess, der immer nur auf eine Verminderung örtlicher Konzentrationen hinwirkt. Formaler ausgedrückt ist das Volumen V_2 , in dem sich eine einmalig zugegebene Menge eines Wasserinhaltsstoffes zur Zeit t_2 befindet, immer größer als das Volumen V_1 , in dem sich die gleiche Menge zu einem früheren Zeitpunkt t_1 befand. Entsprechend ist die maximale Konzentration

$$c_{\max}(t_1) > c_{\max}(t_2) \quad (4)$$

Das Dispersionsverhalten eines Grundwasserleiters wird durch Dispersionskoeffizienten beschrieben, welche in Analogie zum Diffusionskoeffizienten für molekulare Diffusion (Ficksches Gesetz) definiert werden. Im generellen Fall (anisotroper Grundwasserleiter) muß der Dispersionskoeffizient als Tensorgröße angesehen werden (siehe Kapitel 4).

Ein Zeitmaßstab für den dispersionsbedingten Transport ergibt sich aus dem Dispersionskoeffizienten und der Länge L des betrachteten Untersuchungsgebietes:

$$T_D = L^2/D \quad (5)$$

T_D ist die Zeit, die ein Partikel brauchen würde, um bei einem Konzentrationsgradienten von Eins die Strecke L zurückzulegen. Man beachte, daß dieser Zeitmaßstab mit dem Quadrat der Bezugslänge L anwächst.

Ein Vergleich der typischen Zeitmaßstäbe T_K und T_D zeigt folgendes:

$$\frac{T_K}{T_D} = \frac{L/u}{L^2/D} = \frac{D}{L \cdot u} \quad (6)$$

Für $D = \text{const.}$ in gleichförmiger Strömung ist

$$\frac{T_K}{D} \sim \frac{1}{L} \quad (7)$$

Mit zunehmender Größe des betrachteten Gebiets geht die anteilige Bedeutung der Dispersion zurück und kann schließlich gegenüber dem konvektiven Transport vernachlässigt werden.

Zu demselben Ergebnis kommt auch Fried (1975) aus einer Betrachtung der analytischen Lösung für den Fall einer punktförmigen Quelle in einer Grundströmung. Für den asymptotischen Grenzfall sehr großer Zeiten ergibt sich dort, daß die Ausdehnung b der Vermischungszone in Längsrichtung proportional zu (\sqrt{t}) anwächst, während der konvektiv zurückgelegte Weg L direkt proportional zur Zeit t ist. Demnach gilt:

$$b \sim \sqrt{t} \sim \sqrt{L} \quad (8)$$

$$\frac{b}{L} \sim \frac{1}{\sqrt{L}} \quad (9)$$

Mit zunehmender Zeit wächst die Ausdehnung b der Vermischungszone zwar an, wächst aber langsamer als L , so daß für große Werte von L die Vermischungszone an relativer Bedeutung verliert und letztlich vernachlässigt werden kann.

3.4 Reaktionen

Unter "Reaktionen" werden hier alle Mechanismen zusammengefasst, welche zu einer zeitlichen Änderung der Konzentration im Innern des betrachteten Elements führen. Dies kann physikalische, chemische oder biologische Ursachen haben:

- Absatz- und Ausfällungserscheinungen
- Stoff- oder Wärmeaustausch
- Adsorption am Korngerüst und Resorptionerscheinungen
- Chemische Reaktionen
- Biologische Abbauvorgänge

Ansätze für die rechnerische Erfassung solcher Erscheinungen werden in genereller Form wie folgt angegeben:

$$\frac{\partial c}{\partial t} = -k \cdot f(c) \quad (10)$$

Der Beiwert k und die Funktion $f(c)$ sind sowohl vom Trägerfluid als auch vom betrachteten Inhaltsstoff abhängig und müssen jeweils vom Chemiker vorgegeben werden. Bei der einfachsten Art einer Reaktion ist die Konzentrationsänderung direkt proportional der Konzentration selbst. In diesem Fall lautet die Reaktionsgleichung:

$$\frac{\partial c}{\partial t} = -k_1 \cdot c \equiv -\frac{c}{T_R} \quad (11)$$

Als Lösung ergibt sich das exponentielle Abbaugesetz

$$c(t) = c_0 \cdot e^{-t/T_R} \quad (12)$$

wie es zahlreichen physikalischen und chemischen Prozessen zugrunde liegt. Hierbei gibt der Zeitmaßstab T_R die Reaktionszeit an, in der die ursprüngliche Konzentration c_0 auf den Wert $(1/e) \cdot c_0$ abgebaut ist.

Für die Erarbeitung von Simulationsmodellen muß die Form des jeweils relevanten Reaktionsgesetzes einschliesslich der zugehörigen Reaktionskonstanten bekannt sein. Hierbei ist zunächst unerheblich, ob diese Ansätze geschlossen lösbar sind oder der numerischen Berechnung bedürfen.

Zur Abschätzung der relativen Bedeutung der Reaktionsprozesse im Vergleich zu konvektivem und dispersivem Transport ist es wiederum erforderlich, die jeweiligen Zeitmaßstäbe zu betrachten.

Konservative Substanzen zeigen keine Veränderungen mit der Zeit; für sie gilt ($T_R = \infty$).

Wenn die Reaktionszeit sehr viel größer ist als die anderen Zeitmaßstäbe ($T_R \gg T_K, T_D$), dann verläuft die Reaktion so allmählich, daß die betrachtete Substanz in guter Näherung als konservativer Stoff behandelt werden kann.

Ist die Reaktionszeit hingegen sehr viel kleiner als die anderen Zeitmaßstäbe ($T_R \ll T_K, T_D$), dann ist die betrachtete Substanz sehr rasch abgebaut, bevor noch ein nennenswerter konvektiver oder dispersiver Transport erfolgen konnte. In diesem Fall findet keine Ausbreitung statt, und die Grundwasserverschmutzung bleibt ein lokal eng begrenztes Problem.

4. PRINZIPIELLE MATHEMATISCHE BESCHREIBUNGSMÖGLICHKEITEN FÜR TRANSPORTVORGÄNGE VON WASSERINHALTSSTOFFEN

4.1 Vollständiges Gleichungssystem

Zur Beschreibung von Transportvorgängen in Grundwasserleitern stehen folgende Beziehungen zur Verfügung:

- das Darcy-Gesetz für die Filterströmung
- die Kontinuitätsgleichung für das Wasser
- die Zustandsgleichung für Dichte und Zähigkeit des Wassers
- der Massenerhaltungssatz für den Wasserinhaltsstoff

Der folgenden Betrachtung sei ein kartesisches Koordinatensystem (x,y,z) zugrunde gelegt, in dem die x - y -Ebene in der Horizontalen liegt und die z -Achse vertikal der Schwerkraft entgegen ausgerichtet ist.

Definitionen:

x,y,z	[m]	kartesische Koordinaten
u_a, v_a, w_a	[m/s]	Komponenten der Abstandsgeschwindigkeit
p	[N/m ²]	Strömungsdruck
ρ_w	[kg/m ³]	Dichte des Wassers
g	[m/s ²]	Erdbeschleunigung
h	[m]	Standrohrspiegelhöhe
$(k_o)_{ij}$	[m ²]	Permeabilitätstensor
k_{ij}	[m/s]	Durchlässigkeitstensor des Grundwasserleiters
k_f	[m/s]	Durchlässigkeitsbeiwert für isotrope Medien
c	[kg/m ³]	Konzentration des Wasserinhaltsstoffs
R	[s ⁻¹]	Reaktionsterme
D	[m ² /s]	Dispersionskoeffizient (Tensor)
n	[-]	Porosität
n_e	[-]	effektive Porosität

Operatoren:

$$\frac{\tilde{D}}{\tilde{D}t} \equiv \frac{\partial}{\partial t} + u_a \frac{\partial}{\partial x} + v_a \frac{\partial}{\partial y} + w_a \frac{\partial}{\partial z} \quad (13)$$

$$\nabla \equiv \frac{\partial}{\partial x} + \frac{\partial}{\partial y} + \frac{\partial}{\partial z} \quad (14)$$

Bei Gleichungen in tensorieller Schreibweise wird im folgenden die Summenkonvention angewandt, (d.h.: In einem Produkt indizierter Größen, in dem ein Index in beiden Faktoren vorkommt, muß über den Wertebereich dieses gemeinsamen Index summiert werden, z.B.

$$a_i \cdot b_i = a_1 \cdot b_1 + a_2 \cdot b_2 + a_3 \cdot b_3 \quad (15)$$

Für den allgemeinen Fall eines anisotropen Grundwasserleiters, in dem sowohl die Dichte als auch die Zähigkeit von der Konzentration des Wasserinhaltsstoffes abhängen, lauten die makroskopischen Bestimmungsgleichungen:

1) Darcy-Gesetz (für die Abstandsgeschwindigkeit)

$$\vec{v}_a = (v_{a1}, v_{a2}, v_{a3}) \text{ und } \vec{x} = (x_1, x_2, x_3)$$

$$(v_a)_i = -k_{ij} \frac{\partial h}{\partial x_j} = -\left(k_0\right)_{ij} \frac{e \cdot g}{\eta \cdot n_e} \frac{\partial h}{\partial x_j} \quad (16)$$

mit
$$h = \frac{p}{e \cdot g} + z \quad (17)$$

2) Kontinuitätsgleichung für das Grundwasser

$$\frac{\tilde{D}e}{\tilde{D}t} + e \cdot \operatorname{div} \vec{v}_a = 0 \quad (18)$$

3) Zustandsgleichung für die Dichte und Viskosität:

$$e = f_1(c) \quad (19)$$

$$\eta = f_2(c) \quad (20)$$

4) Transportgleichung für Tracer:

$$\frac{\tilde{D}c}{\tilde{D}t} = \nabla \cdot (D \cdot \nabla c) + \sum R \quad (21)$$

Mit den Gleichungen (16) bis (21) stehen somit 7 Bestimmungsgleichungen für die 7 Unbekannten

$$u_a, v_a, w_a, h, \rho, \eta, c, \text{ jeweils als f (x, y, z, t)}$$

zur Verfügung, welche simultan gelöst werden müssen.

$(k_o)_{ij}$ und D_{ij} sowie die Reaktionsgleichungen müssen dazu bekannt sein.

Mathematisch gesehen bilden die Gleichungen (18) bis (21) ein nichtlineares System partieller Differentialgleichungen, weil z.B. in der Dispersionsgleichung (21) zur Berechnung von c ein Dispersionskoeffizient benötigt wird, der u.a. von ρ und η abhängt, die wiederum von c bestimmt werden.

4.2 Vereinfachte Beziehungen für homogene, isotrope Grundwasserleiter

Da es keine direkte Methode zur Lösung dieses Gleichungssystems gibt, müssen zur Lösung praktischer Probleme Vereinfachungen getroffen werden.

Eine wesentliche Vereinfachung ergibt sich für homogene, isotrope Grundwasserleiter, für die man die skalaren Größen k_f und D erhält, die aber immer noch von Strömungsgrößen (ρ, η, \vec{v}_a) und Bodenkenngrößen (z.B. d_{50}) abhängen. Gleichung (16) vereinfacht sich zu

$$(\vec{v}_a)_i = - \frac{k_f}{n_e} \frac{\partial h}{\partial x_i} \quad (22)$$

und Gleichung (18) zu

$$\nabla^2 h = \frac{S_o}{k_f} \frac{\partial h}{\partial t} \quad (23) \quad \text{mit} \quad S_o = \frac{1}{e} \frac{\partial(e \cdot \eta)}{\partial h} \quad (24)$$

Die Koppelung der Differentialgleichungen besteht weiterhin. Zur Lösung eines so vereinfachten Ausbreitungsschemas schlägt Fried (1975) ein Verfahren vor, das in zwei Schritten ablaufen soll:

- 1) Zur Zeit t sei die Konzentrationsverteilung bekannt. Mit den Zustandsgleichungen (19) und (20) wird in jedem Punkt $\varrho(c,t)$ und $\eta(c,t)$ berechnet, daraus mittels Gleichung (23) die Verteilung der Piezometerhöhen und mit Gleichung (22) das Geschwindigkeitsfeld.
- 2) Daraus läßt sich unter der Annahme, daß ϱ und η in einem klein gewählten Zeitschritt dt konstant bleiben, aus Gleichung (21) die Konzentrationsverteilung zum Zeitpunkt $(t + dt)$ bestimmen.

Der erste Teil des Lösungsschemas bereitet keine Schwierigkeiten. Erst bei der Lösung von Gleichung (21) wird die große Bedeutung des sogenannten Dispersionskoeffizienten deutlich: Wäre er eine wirkliche Konstante, d.h. völlig unabhängig von Bodenkenngrößen und Strömungsparametern, so ließe sich auch der zweite Teil des Schemas sofort lösen. Aus theoretischen Ansätzen, Laborversuchen und Feldmessungen weiß man jedoch, daß D in sehr komplexer Weise sowohl von Strömungsparametern und Bodenkenngrößen als auch von den Stoffeigenschaften der Wasserinhaltsstoffe abhängt. Ohne hinreichende Kenntnis dieser Abhängigkeiten bleibt jedes Modell zur Berechnung eines Ausbreitungsvorganges unvollständig. Das ist einer der Gründe, weshalb in den folgenden Kapiteln ausführlich auf die Problematik der Dispersionskoeffizienten eingegangen wird. Sobald jedoch geklärt ist, wovon der Dispersionskoeffizient abhängt, kann man diese Erkenntnis in Gleichung (21) einbauen. Das Problem der mathematischen Beschreibung von Transportvorgängen im Grundwasser besteht damit im wesentlichen in der Lösung der Gleichungen (21) und (23) für vorgegebene Rand- und Anfangs-

bedingungen. Hierbei ist zwischen hydrodynamisch "neutralen" und "aktiven" Wasserinhaltsstoffen zu unterscheiden.

4.3 Tracer

Tracer sind hydrodynamisch neutrale Wasserinhaltsstoffe. Die Mehrzahl der zu betrachtenden Substanzen im Grundwasser tritt in so kleinen Konzentrationen auf, daß die hierdurch verursachten Dichteänderungen des Grundwassers vernachlässigbar klein bleiben. In diesem Fall kann die Dichte ρ als konstant angenommen werden, so daß die Bestimmungsgleichungen jetzt lauten:

$$(v_a)_i = - \frac{k_f}{n_e} \frac{\partial h}{\partial x_i} \quad (25)$$

$$\nabla^2 h = \frac{S_o}{k_f} \frac{\partial h}{\partial t} \quad (26)$$

$$\frac{\tilde{D}c}{\tilde{D}t} = \nabla (D \nabla c) + \sum R \quad (27)$$

Da die Konzentrationsverteilung eindeutig aus Gleichung (27) bestimmt werden kann, ist hier eine Entkoppelung von Gleichung (25) und (26) sowie (27) möglich. Die Lösung des Gleichungssystems erfolgt in drei Schritten:

- a) Berechnung der Verteilung von h aus Gleichung (26), unabhängig von der Konzentrationsverteilung.
- b) Daraus wird mittels Gleichung (25) die Geschwindigkeitsverteilung ermittelt.
- c) Mit bekannten Werten für v_a wird die Konzentrationsverteilung aus Gleichung (27) berechnet.

Diese Entkoppelung der Bestimmungsgleichungen stellt eine enorme Vereinfachung des Lösungsschemas dar und wird der Simulation von Ausbreitungsvorgängen in aller Regel zugrunde gelegt.

4.4 Aktive Substanzen

Hydrodynamisch aktive Stoffe sind Substanzen, welche eine merkliche Veränderung der Dichte (oder der Zähigkeit) mit der Konzentration bewirken, wie beispielsweise Temperaturerhöhungen oder -erniedrigungen im Grundwasser oder starke Salzkonzentrationen.

In diesem Fall ist die oben genannte Entkoppelung von Strömungsfeld und Konzentrationsfeld nicht zulässig; vielmehr müssen die Gleichungen (19) bis (23) simultan gelöst werden.

4.5 Vereinfachte Transportgleichungen

Die Lösung des Gleichungssystems zur Ermittlung des Strömungs- und Konzentrationsfeldes wird mitunter wesentlich erleichtert, wenn man berücksichtigt, wie der Dispersions-tensor im betreffenden Fall aussieht.

Der Dispersionskoeffizient D ist im allgemeinen Fall eine Tensorgröße, deren Komponenten sowohl von der jeweils betrachteten Ausbreitungsrichtung als auch vom Absolutwert der Geschwindigkeit abhängen. Im allgemeinsten Fall eines dreidimensionalen Ausbreitungsvorganges ergibt sich ein symmetrischer Tensor D_{ij} , ($i, j = 1, 2, 3$), zweiter Ordnung mit neun Komponenten, von denen sechs voneinander verschieden sind. In einem Geschwindigkeitsfeld mit ($v_a = \text{const.}$) vereinfacht sich Gleichung (2), wenn man das kartesische Koordinatensystem so wählt, daß eine der Achsen parallel zu v_a zeigt. Somit fallen die Hauptachsen des Dispersionstensors mit den Koordinatenachsen zusammen, und nur die drei Diagonalkomponenten von D_{ij} sind von Null verschieden. Gleichung (2)

lautet dann

$$\begin{aligned} \frac{\partial c}{\partial t} + u_a \frac{\partial c}{\partial x} + v_a \frac{\partial c}{\partial y} + w_a \frac{\partial c}{\partial z} = \\ = D_{xx} \frac{\partial^2 c}{\partial x^2} + D_{yy} \frac{\partial^2 c}{\partial y^2} + D_{zz} \frac{\partial^2 c}{\partial z^2} \end{aligned} \quad (28)$$

Bei dieser Darstellung ist zu beachten, daß sie nur dann gilt (s.o.), wenn nur eine der drei Geschwindigkeitskomponenten von Null verschieden ist. Gleichung (28) beschreibt also den Sonderfall einer eindimensionalen Strömung mit drei-dimensionalen Ausbreitung des Wasserinhaltes. Hier zeigt sich der wesentliche Unterschied zum rein konvektiven Transport, bei dem eine Stoffausbreitung nur in Richtung der Stromlinien möglich ist. Bei diesem Sonderfall haben die drei Komponenten D_{xx}, D_{yy}, D_{zz} nur zwei voneinander verschiedene Werte. Für ein vorgegebenes Strömungsfeld, z.B. $(\vec{v}_a = u_a, 0, 0)$ bezeichnet man die Komponente D_{xx} in Strömungsrichtung als longitudinalen Dispersionskoeffizienten D_L . Da sich die beiden dazu senkrechten Richtungen physikalisch nicht unterscheiden, ist $(D_{yy} = D_{zz} = D_T)$, und man bezeichnet D_T als transversalen Dispersionskoeffizienten.

Eine weitere Vereinfachung von Gleichung (28) ergibt sich für ebene Ausbreitungsvorgänge, wenn die Konzentration nur von zwei Korodinen abhängt, z.B. von x und y . Dann erhält man in einem kartesischen Koordinatensystem, das beliebig bezüglich \vec{v}_a orientiert ist:

$$\begin{aligned} \frac{\partial c}{\partial t} + u_a \frac{\partial c}{\partial x} + v_a \frac{\partial c}{\partial y} = \\ = D_{xx} \frac{\partial^2 c}{\partial x^2} + 2D_{xy} \frac{\partial^2 c}{\partial x \partial y} + D_{yy} \frac{\partial^2 c}{\partial y^2} \end{aligned} \quad (29)$$

Aus Experimenten und aus theoretischen Überlegungen ist bekannt, daß sich in isotropen Medien zwar für den Dispersionskoeffizient D_L in Richtung von \vec{v}_a und für D_T senkrecht zu \vec{v}_a ein einfacher Zusammenhang zwischen D_L bzw. D_T und dem Betrag der Geschwindigkeit \vec{v}_a angeben lässt, nicht aber für D_{xx}, D_{xy}, D_{yy} etc. und v_a (s. 5.2.1). Es ist daher sinnvoll, die Komponenten D_{xx}, D_{xy} und D_{yy} in Abhängigkeit von D_L und D_T sowie vom Winkel α zwischen x-Achse und \vec{v}_a anzugeben..

$$D_{xx} = D_L \cdot \cos^2 \alpha + D_T \cdot \sin^2 \alpha \quad (30)$$

$$D_{xy} = \frac{1}{2} (D_L - D_T) \cdot \sin 2\alpha \quad (31)$$

$$D_{yy} = D_L \cdot \sin^2 \alpha + D_T \cdot \cos^2 \alpha \quad (32)$$

Orientiert man eine Achse des Koordinatensystems in Richtung von \vec{v}_a (z.B. $\alpha = 0$ oder $\alpha = 90^\circ$), so fallen die Hauptachsen von D_{ij} wiederum mit den Koordinatenachsen zusammen, d.h. es wird $D_{xy} = 0$.

Wenn die Konzentration nur noch von einer Koordinate abhängt, z.B. von x , erhält man die Transportgleichung für ein eindimensionales Transportproblem, und Gleichung (29) reduziert sich damit auf:

$$\frac{\partial c}{\partial t} + u_a \frac{\partial c}{\partial x} = D_{xx} \frac{\partial^2 c}{\partial x^2} \quad (33)$$

Der longitudinale Dispersionskoeffizient D_{xx} ist hier nur in bestimmten Fällen, nämlich für ($u_a = |\vec{v}_a|$), mit dem longitudinalen Dispersionskoeffizienten D_L der ebenen Ausbreitung identisch.

Bild 5 zeigt die verschiedenen Bereiche bei einem Ausbreitungsvorgang in einer eindimensionalen Strömung. Unmittelbar nach der Einleitung wird der zugegebene Tracer in alle drei Raumrichtungen transportiert, bis sich eine Vermischung über die Tiefe ergibt. Danach erfolgt eine zweidimensionale Ausbreitung bis zur vollständigen Durchmischung des Tracers über die Breite. Danach findet nur noch eine eindimensionale Ausbreitung statt.

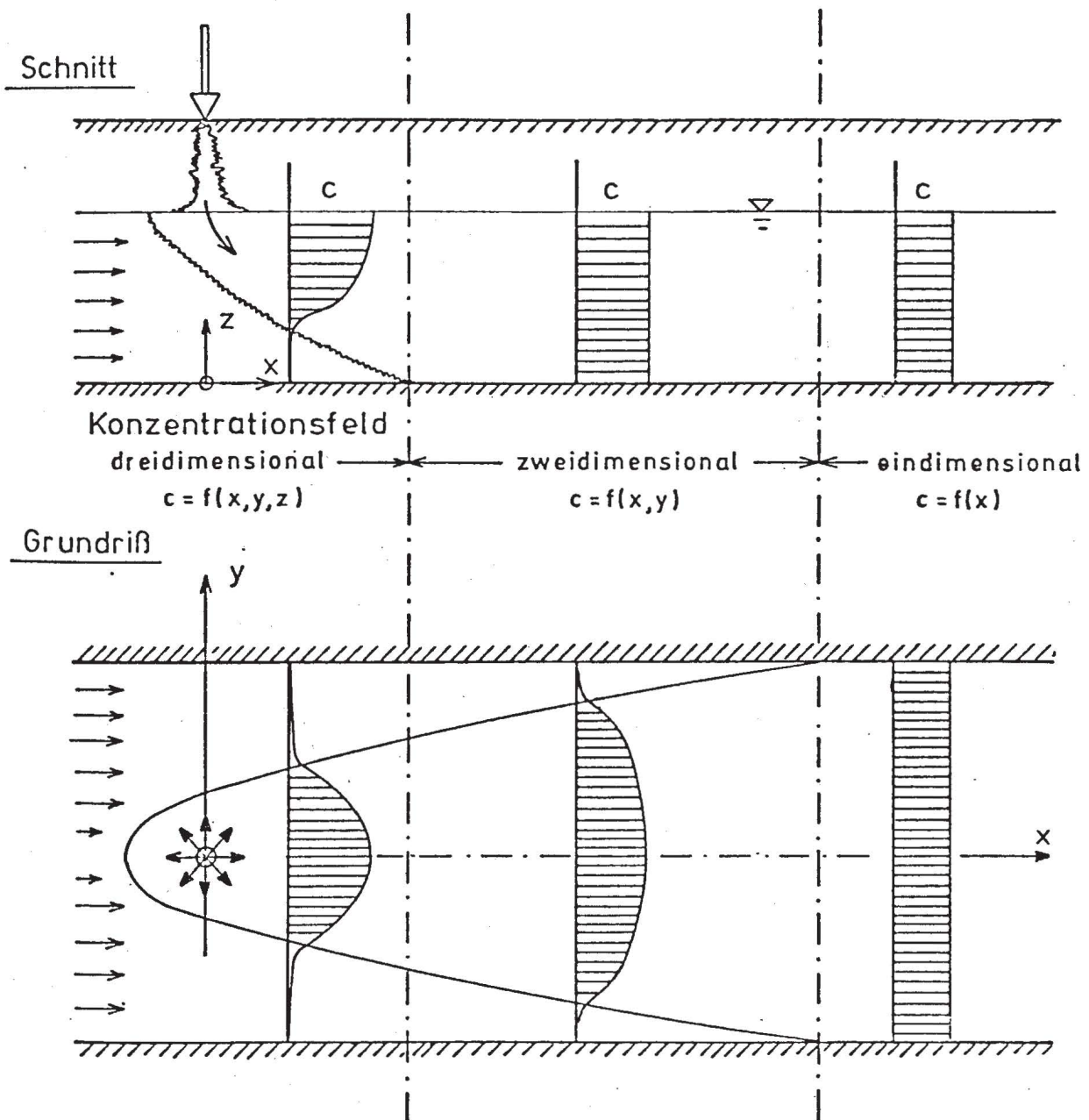


Bild 5: Ausbreitung in einer eindimensionalen Strömung

5. BESCHREIBUNG VON DIFFUSION UND DISPERSION

5.1 Mathematische Beschreibung der Dispersion

In der Literatur gibt es oft Verwechslungen zwischen sog. "Dispersionsgleichungen", die formal ähnlich sind, aber in ihrem physikalischen Hintergrund starke Unterschiede aufweisen. Heller (1963) und Rumer (1972) zeigen, wie man je nach Wahl des Kontrollvolumens formal ähnliche Transportgleichungen erhält.

5.1.1 Diffusionsgleichung:

Die Transportgleichung wird durch eine mikroskopische Bilanzbetrachtung an einem Fluidelement gewonnen, dessen Volumen V klein ist im Vergleich zu den Abmessungen einer Pore (Bild 6 a).

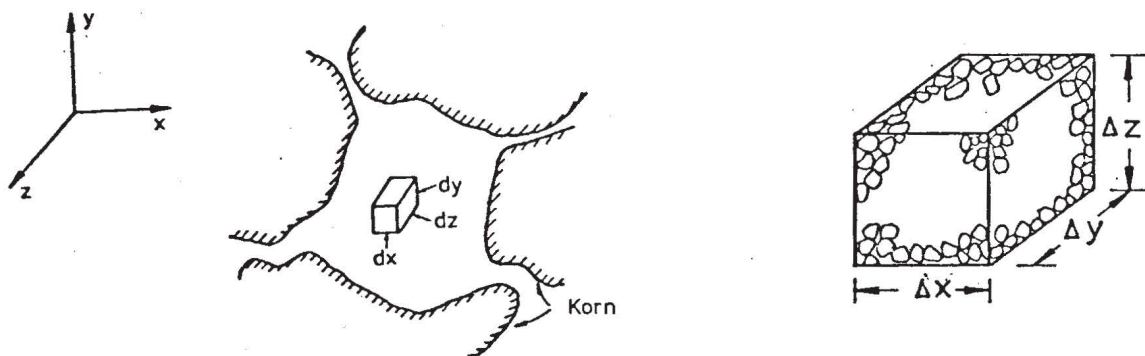


Bild 6 a) Mikroskopisches Kontrollvolumen b) Makroskopisches Kontrollvolumen
(nach Rumer, 1972)

In diesem Fall sind nur molekulare Diffusion und Konvektion am Transport beteiligt. Die zeitliche Änderung der Tracermenge ¹⁾ innerhalb von V ist mit dem Transport über den Rand R von V wie folgt verknüpft:

$$\frac{\partial}{\partial t} \int_V c(\vec{x}, t) \cdot dV = - \int_R c(\vec{x}, t) \cdot \vec{v} \cdot dR + \int_R D_0 (\nabla c(x, t)) \cdot dR \quad (34)$$

¹⁾ Der Einfachheit halber wird im folgenden von "Tracer" gesprochen statt von Wasserinhaltsstoffen.

D_0 ist hier der molekulare Diffusionskoeffizient. Unter der Annahme einer quellen- und senkenfreien Strömung und ortsunabhängigem D_0 läßt sich Gleichung (34) unter Anwendung des Gaußschen Integralsatzes auf folgende Form bringen.

$$\frac{\partial c}{\partial t} = - \vec{\nabla} \cdot \nabla C + D_0 \cdot \nabla^2 C \quad (\text{Diffusionsgleichung}) \quad (35)$$

In diesem Fall ist \vec{v} die Fließgeschwindigkeit im mikroskopischen Kontrollvolumen.

5.1.2 Entwicklung der (makroskopischen) Dispersionsgleichung

Geht man vom mikroskopischen Kontrollvolumen über zum makroskopischen (Bild 6 b), das eine Vielzahl von Poren und Körnern enthält, so ergeben sich Geschwindigkeitsvariationen von Pore zu Pore, die die Verteilung eines Tracers merklich beeinflussen. Wenn diese mittleren Porengeschwindigkeiten zufällig verteilt sind, so ergibt sich eine mathematisch erfaßbare Situation, wie sie u.a. von Scheidegger (1954), de Josselin de Jong (1958), Saffman (1959), Aris (1959) und Bear (1961) untersucht wurde. Sie beschreiben die durch Geschwindigkeitsvariationen und molekulare Diffusion hervorgerufene Verteilung eines Tracers mit einer makroskopischen Dispersionsgleichung. Eindimensional lautet sie für homogene und isotrope Medien:

$$\frac{\partial c}{\partial t} = - \frac{v_f}{n_e} \frac{\partial c}{\partial x} + D \cdot \frac{\partial^2 c}{\partial x^2} \quad (36)$$

Der Dispersionskoeffizient D beschreibt hier die makroskopische Ausbreitung eines Tracers.

Obwohl die Gleichungen (35) und (36) einander formal ähneln, sollten sie deutlich voneinander unterschieden werden. Gleichung (35) bezieht sich auf ein Kontrollvolumen innerhalb einer Pore (nur Fluid), während Gleichung (36) sich auf ein Kontrollvolumen bezieht, das eine für die Annahme statistischer

Geschwindigkeitsverteilungen hinreichend große Zahl von Poren und Körnern enthält. An dieser Stelle scheint es ratsam, etwas näher auf den eben gezeigten Übergang zur makroskopischen Darstellung und auf den daraus resultierenden Dispersionskoeffizienten einzugehen. Dann wird auch deutlich, warum diese sog. Mikro-Makro-Prozedur zwar geeignet ist zur Aufstellung der (Dispersions-) Transportgleichung, aber warum daraus keinerlei Zusammenhang zwischen physikalisch meßbaren Größen und dem Dispersionskoeffizienten hergestellt werden kann. Unter Vernachlässigung von Adsorptions- und Zerfallreaktionen sowie des Einflusses der molekulären Diffusion lautet die Bilanzgleichung für die Tracermenge an einem mikroskopischen Kontrollvolumen (Bild 6a)

$$\frac{\partial(\rho \cdot c)}{\partial t} + \frac{\partial(\rho \cdot c \cdot u)}{\partial x} + \frac{\partial(\rho \cdot c \cdot v)}{\partial y} + \frac{\partial(\rho \cdot c \cdot w)}{\partial z} = 0 \quad (37)$$

Hier ist $\vec{v} = (u, v, w)$ der momentane Geschwindigkeitsvektor eines Fluidpartikels, ρ die Dichte des Trägerfluids und c die momentane Konzentration des Tracers im Kontrollvolumen. Gleichung (22) läßt sich vereinfacht schreiben:

$$\frac{\tilde{D}(\rho \cdot c)}{\tilde{D}t} + \rho \cdot c \cdot \operatorname{div} \vec{v} = 0 \quad (38)$$

Für inkompressible Medien ist ($\operatorname{div} \vec{v} = 0$); Gleichung (38) vereinfacht sich auf

$$\frac{\tilde{D}(\rho \cdot c)}{\tilde{D}t} = \rho \cdot \frac{\tilde{D}c}{Dt} + c \cdot \frac{\tilde{D}\rho}{\tilde{D}t} = 0 \quad (39)$$

Die Kontinuitätsbedingung für das Trägerfluid muß ebenfalls erfüllt werden. Sie lautet:

$$\frac{\tilde{D}\rho}{\tilde{D}t} + \rho \cdot \operatorname{div} \vec{v} = 0 \quad (40)$$

Wegen $\operatorname{div} \vec{v} = 0$ (41)

und $\frac{\tilde{D}e}{\tilde{D}t} = 0$ (42)

ergibt sich letztlich

$$\frac{\tilde{D}c}{\tilde{D}t} = \frac{\partial c}{\partial t} + u \frac{\partial c}{\partial x} + v \frac{\partial c}{\partial y} + w \frac{\partial c}{\partial z} = 0 \quad (43)$$

Die Geschwindigkeit \vec{v} läßt sich wie folgt darstellen:

$$\vec{v} = \vec{v}_m + \vec{v}^{\circ} \quad (44)$$

wobei \vec{v}_m die mittlere Geschwindigkeit in der Nachbarschaft eines mikroskopischen Punkts ist und \vec{v}° die räumliche Abweichung von diesem Mittelwert.

Entsprechend ist die Tracerkonzentration

$$c = c_m + c^{\circ} \quad (45)$$

Wenn man die Geschwindigkeit \vec{v} über das Porenvolumen eines makroskopischen Kontrollvolumens ΔV (Bild 5b) integriert und durch das Porenvolumen ($n \cdot \Delta V$) dividiert, erhält man den makroskopischen Mittelwert \bar{v} :

$$\bar{v} = \frac{1}{n \cdot \Delta V} \int_{\Delta V} \vec{v} \, dV = \frac{1}{n \cdot \Delta V} \left\{ \int_{\Delta V} \vec{v}_m \cdot dV + \int_{\Delta V} \vec{v}^{\circ} \cdot dV \right\} \quad (46)$$

Da der räumliche Mittelwert von \vec{v}° gleich Null ist, ist $(\bar{v} = \vec{v}_m)$.

Eine entsprechende räumliche Mittelung für c liefert $(\bar{c} = c_m)$.

Setzt man Gleichung (44) und (45) in Gleichung (43) ein und mittelt jeden Term durch Integration über das makroskopische Kontrollvolumen, so erhält man nach einigen Zwischenschritten:

$$\frac{\partial c_m}{\partial t} + u_m \frac{\partial c_m}{\partial x} + v_m \frac{\partial c_m}{\partial y} + w_m \frac{\partial c_m}{\partial z} + \frac{\partial}{\partial x} (\overline{u \dot{c}}) + \frac{\partial}{\partial y} (\overline{v \dot{c}}) + \frac{\partial}{\partial z} (\overline{w \dot{c}}) = 0 \quad (47)$$

Der erste Term in Gleichung (47) stellt die zeitliche Änderung der mittleren Konzentration im makroskopischen Kontrollvolumen dar, die nächsten drei den Transport durch Konvektion. Die letzten drei Terme repräsentieren den zusätzlichen Transport durch Dispersion. Betrachtet man der Einfachheit halber eine eindimensionale Strömung parallel zur x-Richtung, so sieht man, daß die dispersiven Transportanteile

$$\frac{\partial}{\partial y} (\overline{v \dot{c}}) \quad (48)$$

und

$$\frac{\partial}{\partial z} (\overline{w \dot{c}}) \quad (49)$$

nicht verschwinden, obwohl v_m und w_m gleich Null sind:

$$\frac{\partial c_m}{\partial t} + u_m \frac{\partial c_m}{\partial x} = - \frac{\partial}{\partial x} (\overline{u \dot{c}}) - \frac{\partial}{\partial y} (\overline{v \dot{c}}) - \frac{\partial}{\partial z} (\overline{w \dot{c}}) \quad (50)$$

Für homogene, isotrope Medien können wie beim Fick'schen Diffusionsgesetz Dispersionskoeffizienten definiert werden:

$$\overline{u \dot{c}} = -D_1 \frac{\partial c_m}{\partial x} \quad (51)$$

$$\overline{v \dot{c}} = -D_2 \frac{\partial c_m}{\partial y} \quad (52)$$

$$\overline{w \dot{c}} = -D_2 \frac{\partial c_m}{\partial z} \quad (53)$$

Auf die Unterschiede zwischen D_1 und D_2 soll in 5.2 eingegangen werden. Nach der Definition in Gleichung (51) ergibt sich D_1 zu

$$D_1 = - \frac{\overline{\dot{u} \dot{c}}}{\partial c / \partial x} \quad (54)$$

Hier zeigt sich, daß wegen der Unmöglichkeit einer Messung von $(\overline{\dot{u} \dot{c}})$ der Dispersionskoeffizient so nicht bestimmt werden kann. Daher ist man auf eine Korrelation zwischen leicht meßbaren Größen (z.B. Filtergeschwindigkeit, Korn-durchmesser) und dem Dispersionskoeffizienten angewiesen, wenn man ihn experimentell bestimmen will.

Der bisher unberücksichtigte Anteil der molekularen Diffusion an der makroskopischen Bilanz kann durch hinzufügen der Terme

$$-D_0 \frac{\partial(\rho c)}{\partial x} \quad (56) \quad -D_0 \frac{\partial(\rho c)}{\partial y} \quad (57) \quad -D_0 \frac{\partial(\rho c)}{\partial z} \quad (58)$$

etc. in Gleichung (37) berücksichtigt werden, wobei D_0 der molekulare Diffusionskoeffizient des Tracers im Fluid ist. Die resultierende Transportgleichung für den vereinfachten Strömungsfall, wie er Gleichung (50) zugrunde liegt, ergibt sich dann unter Verwendung von Gleichung (51) bis (53) (bei $\rho = \text{const.}$) und nach Integration über das makroskopische Kontrollvolumen)

$$\begin{aligned} \frac{\partial c_m}{\partial t} + u_m \frac{\partial c_m}{\partial x} = \\ = \frac{\partial}{\partial x} \left[(D_m + D_1) \frac{\partial c_m}{\partial x} \right] + \frac{\partial}{\partial y} \left[(D_m + D_2) \frac{\partial c_m}{\partial y} \right] + \frac{\partial}{\partial z} \left[(D_m + D_2) \frac{\partial c_m}{\partial z} \right] \quad (59) \end{aligned}$$

wobei D_m der sogenannte effektive molekulare Diffusionskoeffizient ist. D_m unterscheidet sich vom molekularen Diffusionskoeffizient D_0 in Gleichung (34) und (35) dadurch, daß er die molekulare Diffusion im makroskopischen Bereich (Fluid + poröses Medium) beschreibt, während D_0 nur die Diffusion in einem fluidgefüllten Kontrollvolumen beschreibt. Im Vorgriff auf 5.2.2.2 sei hier schon ange-

merkt, daß ($D_m/D_0 < 1$) und abhängig von der Struktur des porösen Mediums ist (Klinkenberg, 1951). Falls u_m gegen Null geht, gehen auch die in Gleichung (51) bis (53) definierten Dispersionskoeffizienten D_1 und D_2 gegen Null, so daß sich Gleichung (59) wie folgt reduziert:

$$\frac{\partial c_m}{\partial t} = D_m \left(\frac{\partial^2 c_m}{\partial x^2} + \frac{\partial^2 c_m}{\partial y^2} + \frac{\partial^2 c_m}{\partial z^2} \right) \quad (60)$$

Das ist die makroskopische Diffusionsgleichung in porösen Medien.

5.1.3 Allgemeinste Form der Dispersionsgleichung

Bachmat und Bear (1964) sowie Gelhar und Collins (1971) geben die Dispersionsgleichung in allgemeinsten Form für homogene, isotrope poröse Medien an unter Vernachlässigung von Adsorption und chemischer Reaktionen. Sie lautet in tensorieller Schreibweise in kartesischen Koordinaten:

$$\frac{\partial c}{\partial t} = \frac{\partial}{\partial x_i} \left(D'_{ik} \frac{\partial c}{\partial x_k} - (v_a)_i \cdot c \right) + D_m \frac{\partial}{\partial x_i} \left(\frac{\partial c}{\partial x_i} \right) \quad (61)$$

In vektorieller Darstellung lautet sie entsprechend:

$$\frac{\partial c}{\partial t} = \text{div} \left[(D + D_m) \cdot \text{grad } c \right] - \text{div} (\vec{v}_a \cdot c) \quad (62)$$

Hierbei ist D bzw. D'_{ik} der Dispersionstensor oder auch der sogenannte Koeffizient der korngerüstbedingten oder mechanischen Dispersion.

In der Literatur gibt es bei der Nomenklatur bezüglich der Dispersionskoeffizienten zwei Lager. Ein Teil der Autoren bezeichnet die Summe ($D + D_m$) in Gleichung (62) als Dispersionskoeffizient, die anderen meinen damit nur den mechanischen

Anteil D. Wie später gezeigt wird, ist es sinnvoll, sich der zuerst genannten Bezeichnungsweise anzuschließen, da D und D_m für $v_a \neq 0$ immer zusammen auftreten und nicht voneinander getrennt werden können. Es wird später noch gezeigt, daß je nach physikalischen Bedingungen der eine oder andere Anteil überwiegt.

Die allgemeine Dispersionsgleichung wird von Bachmat und Bear (1964) auch in beliebigen krummlinigen Koordinaten für homogene, isotrope Medien angegeben. Die resultierende Gleichung ist ohne weitergehende mathematische Erläuterungen nicht brauchbar und soll an dieser Stelle nicht zitiert werden. Erwähnenswert sind jedoch die von den o.g. Autoren angegebenen Sonderfälle, weil sie auch praktisch relevante Strömungsfälle berücksichtigen; z.B. wird für ebene Grundwasserströmungen die Dispersionsgleichung in orthogonalen krummlinigen Koordinaten in Richtung der Strom- und Potentiallinien angegeben.

Bei den bisherigen Betrachtungen blieben Adsorptionsreaktionen sowie Zerfallerscheinungen eines Tracers unberücksichtigt. In der Natur sind diese Mechanismen jedoch im allgemeinen nicht a priori vernachlässigbar. Es sollen daher die entsprechenden Dispersionsgleichungen genannt werden.

Bear (1972) sowie Wilson und Miller (1978) geben die Dispersionsgleichung für einen Tracer an, der sowohl am Korngerüst adsorbiert wird, als auch radioaktivem Zerfall unterliegt. Die von diesen Autoren am Beispiel des radioaktiven Zerfalls dargestellten Ergebnisse gelten ganz allgemein auch für alle Reaktionen erster Ordnung. Falls nur Reaktionen erster Ordnung auftreten, ergibt sich

$$\frac{\partial c}{\partial t} = \frac{\partial}{\partial x_i} \left(D_{ij} \frac{\partial c}{\partial x_j} \right) - (V_a)_i \frac{\partial c}{\partial x_i} - \lambda \cdot c \quad (63)$$

Hierin ist der Dispersionskoeffizient D_{ij} die Summe aus effektivem molekularem Diffusionskoeffizient D_m und mechanischem Dispersionskoeffizient D'_{ij} . $\lambda [s^{-1}]$ ist die charakteristische Reaktionskonstante des Tracers aus dem Reaktionsgesetz

$$\frac{\partial c}{\partial t} = - \lambda \cdot c \quad (64)$$

Falls sowohl Reaktionen erster Ordnung als auch Adsorption am Korngerüst auftritt, muß man die Adsorptionsgleichung kennen, die den Zusammenhang zwischen der Konzentration c des Tracers in der flüssigen Phase und seiner Konzentration s auf der Kornoberfläche angibt. Aus s läßt sich eine äquivalente, auf das Porenvolumen bezogene Konzentration s'

$$s' = \frac{1-n}{n} \cdot s \quad (65)$$

berechnen, wobei der Faktor $(1-n/n)$ das Verhältnis Kornvolumen zu Porenvolumen angibt. Damit lautet die Transportgleichung unter Berücksichtigung von Adsorption und Reaktionen erster Ordnung

$$\frac{\partial}{\partial t} \left(c + \frac{1-n}{n} \cdot s \right) = \frac{\partial}{\partial x_i} \left(D_{ij} \frac{\partial c}{\partial x_j} \right) - (V_a)_i \frac{\partial c}{\partial x_i} - \lambda \left(c + \frac{1-n}{n} \cdot s \right) \quad (66)$$

Im chemischen Gleichgewichtszustand ist s proportional zu c , d.h. $(s = a_1 \cdot c)$. Dann ergibt sich aus Gleichung (66) nach Einführung eines sogenannten Verzögerungsfaktors

$$f_d = \left(1 + \frac{1-n}{n} a_1 \right) \quad (67)$$

$$f_d \cdot \frac{\partial c}{\partial t} = \frac{\partial}{\partial x_i} \left(D_{ij} \frac{\partial c}{\partial x_j} \right) - (V_a)_i \frac{\partial c}{\partial x_i} - \lambda \cdot f_d \cdot c \quad (68)$$

Schreibt man (68) in der Form

$$\frac{\partial c}{\partial t} = \frac{\partial}{\partial x_i} \left(\frac{D_{ij}}{f_d} \cdot \frac{\partial c}{\partial x_j} \right) - \frac{(v_a)_i}{f_d} \frac{\partial c}{\partial x_i} - \lambda \cdot c \quad (69)$$

so erkennt man, woher f_d seinen Namen hat: Die Adsorption erzeugt einen Effekt, der einer Verminderung der mittleren Geschwindigkeit und des Dispersionskoeffizienten gleichkommt.

Im Falle des nicht vorhandenen chemischen Gleichgewichts ist der Zusammenhang zwischen s und c komplizierter. Seine Darstellung überschreitet den Rahmen dieses Berichts (Bear, 1972).

5.2 Dispersionskoeffizienten

5.2.1 Mathematische Beschreibung von Dispersionskoeffizienten

Eine Reihe von theoretischen Arbeiten haben sich mit dem Problem befaßt, eine möglichst allgemeingültige mathematische Formulierung der Abhängigkeit von D_{ij} von physikalischen Größen zu finden, die Fluideigenschaften und das poröse Medium charakterisieren, z.B. Nikolaevskij (1959), Scheidegger (1961), Bear (1961), Bachmat und Bear (1964), Poreh (1965) und de Josselin de Jong (1972). Diese grundlegenden Untersuchungen waren nötig, weil die aus einfachsten Strömungsfällen gewonnenen Aussagen über D_{ij} nicht brauchbar sind für Strömungskonfigurationen, in denen \vec{v}_a ortsabhängig ist und damit auch D_{ij} . Das gleiche gilt in noch stärkerem Maße für Ausbreitungsvorgänge in anisotropen Medien.

Läßt man den Einfluß der molekularen Diffusion außer Betracht, so führen physikalische Betrachtungen zu folgenden Schlüssen: Der sogenannte mechanische Dispersionskoeffizient

ent D'_{ij} ist das innere Produkt zweier Tensoren, des Tensors der "geometrischen Dispersivität" a_{ijklm} und des Tensors $(v_l v_m / v_a)$. a_{ijklm} spiegelt den Einfluß der Porenmatrix auf den dispersiven Transport wider, während $(v_l v_m / v_a)$ den Einfluß des Geschwindigkeitsvektors \vec{v}_a auf die Dispersion darstellt. In kartesischen Koordinaten ergibt sich D'_{ij} als symmetrischer Tensor zweiter Ordnung:

$$D'_{ij} = a_{ijklm} \cdot v_l v_m / |\vec{v}_a| \quad (70)$$

In homogenen, isotropen Medien sind die Komponenten von a_{ijklm} konstant und bleiben selbst bei Drehung des Koordinatensystems unverändert. Wegen dieser Symmetrieeigenschaften kann der Tensor a_{ijklm} in kartesischen Koordinatensystemen in der Form

$$a_{ijklm} = \lambda \cdot \delta_{ij} \cdot \delta_{lm} + 2 \cdot \mu \cdot \delta_{il} \delta_{jm} \quad (71)$$

dargestellt werden, wo λ und μ Konstante sind und δ das sog. Kronecker-Delta. Damit ergibt sich aus (70) und (71)

$$D'_{ij} = \lambda \cdot |\vec{v}_a| \cdot \delta_{ij} + 2 \cdot \mu \cdot v_i v_j / |\vec{v}_a| \quad (72)$$

Betrachtet man nun den Spezialfall einer Strömung mit gleichförmiger Geschwindigkeit, z.B. $\vec{v}_a = (u_a, 0, 0)$ in x-Richtung, so ergeben sich folgende Koeffizienten von D'_{ij} :

$$D'_{11} = (\lambda + 2\mu) \cdot u_a \quad (73)$$

$$D'_{22} = D'_{33} = \lambda \cdot u_a \quad (74)$$

und für $i \neq j$

$$D'_{ij} = 0 \quad (75)$$

Schreibt man in (73)

$$\lambda + 2\mu = a_{1111} = a_L \quad (76)$$

und

$$\lambda = a_{2211} = a_{3311} = a_T \quad (77)$$

dann kann man, wie in der Literatur üblich, die Dispersionskoeffizienten als Produkt einer Geschwindigkeit und einer mit Dispersivität bezeichneten Kenngröße des porösen Mediums darstellen:

$$D_L = a_L \cdot |\vec{v}_a| \quad (78)$$

$$D_T = a_T \cdot |\vec{v}_a| \quad (79)$$

Wenn man wie im vorliegenden Beispiel eine Koordinatenachse in Hauptströmungsrichtung legt, werden die Koordinatenachsen die Hauptachsen des Dispersionstensors. Er hat dann die Form

$$D_{ij} = \begin{bmatrix} a_L \cdot |\vec{v}_a| & 0 & 0 \\ 0 & a_T \cdot |\vec{v}_a| & 0 \\ 0 & 0 & a_T \cdot |\vec{v}_a| \end{bmatrix} \quad (80)$$

Das bedeutet physikalisch, daß es in einem homogenen, isotropen Medium nur zwei voneinander verschiedene Komponenten von D'_{ij} gibt, nämlich den sogenannten longitudinalen Dispersionskoeffizient D'_L zur Beschreibung der Dispersion in Richtung von \vec{v}_a und den sogenannten transversalen Dispersionskoeffizienten D'_T , der die Dispersion in jeder Richtung senkrecht zu \vec{v}_a beschreibt. In dem zuvor genannten Beispiel wäre ($D'_L = D'_{11}$) und ($D'_T = D'_{22} = D'_{33}$).

Dieses Ergebnis deckt sich mit dem, das sich für den gleichen Strömungsfall in 5.1.2 (Gleichung (50)) ergab: Es findet ein Stofftransport durch Dispersion auch in den Richtungen statt, in denen die (makroskopische) mittlere Geschwindigkeit Null ist.

Man kann also festhalten, daß es in homogenen, isotropen Medien ausreicht, statt des Dispersionstensors D'_{ij} nur die beiden Komponenten D'_L und D'_T zu verwenden.

Wesentlich komplizierter wird die Darstellung von D'_{ij} in anisotropen Medien. Auch für diesen Fall gibt es theoretische Ansätze für D'_{ij} , die aber für praktische Anwendungen zu unhandlich sind, weil D'_{ij} seinen Tensorcharakter behält (Poreh 1965).

In den folgenden Betrachtungen werden wir uns fast ausschließlich mit homogenen, isotropen Medien und damit nur mit D'_L und D'_T befassen. Wenn man die bislang ausgeklammerte molekulare Diffusion berücksichtigt, so ergibt sich

$$D_L = D_L + D_m \quad (81)$$

und

$$D_T = D_T + D_m \quad (82)$$

Wegen $(D_L = a_L |\vec{v}_a|)$ und $(D_T = a_T |\vec{v}_a|)$ erhält man auch hier für $|\vec{v}_a| \rightarrow 0$

$$D_L = D_T = D_m \quad (83)$$

5.2.2 Theoretische Ansätze zur Ermittlung von $D_{L,T}$ und D_T aus Strömungsgrößen und Fluidparametern

Die folgenden Aussagen beziehen sich auf ein idealisiertes poröses Medium. Es besteht gänzlich aus Kugeln eines Durchmessers d und ist vollkommen homogen und isotrop.

5.2.2.1 Dimensionsanalyse

Dispersionskoeffizienten können durch eine Beziehung zwischen sieben physikalischen Größen beschrieben werden:

$$D_{L,T} = f_{1,2} (g\Delta\rho, \eta_1, \eta_2, v_a, d, D_0) \quad (84)$$

mit $v_a = |\vec{v}_a|$, d = mittlerer Korndurchmesser, η_1, η_2 = dynamische Zähigkeit des Trägerfluids bzw. der Tracerlösung vor der Vermischung.

Dabei können folgende Vereinfachungen getroffen werden:

- D_0 unabhängig von der Konzentration c des Inhaltsstoffes
- η ist nicht von c abhängig

Damit lassen sich für $D_{L,T}$ vier dimensionslose Größen bilden:

$$D_{L,T}/D_0 \quad ; \quad \frac{v_a \cdot d}{D_0} \quad ; \quad \eta_1/\eta_2 \quad ; \quad g\Delta\rho d^3 / (\eta_1 \cdot D_0) \quad (85)$$

Für den Fall, daß man den Wasserinhaltsstoff als Tracer betrachten kann ($\rho \neq f(c)$, $\eta \neq f(c)$), reduziert sich (85) auf:

$$\frac{D_{L,T}}{D_0} = f_{1,2} \left(\frac{v_a \cdot d}{D_0} \quad ; \quad \frac{\nu/D_0}{v_a \cdot d/\nu} \text{ oder} \right) \quad (86)$$

$$\frac{D_{L,T}}{v_a \cdot d} = f_{1,2} \left(\frac{v_a \cdot d}{D_o} ; \frac{\nu/D_o \text{ oder}}{v_a \cdot d/\nu} \right) \quad (87)$$

Diese dimensionslosen Kenngrößen werden wie folgt bezeichnet:

$$\text{molekulare Peclet-Zahl} \quad Pe = \frac{v_a \cdot d}{D_o} \quad (88)$$

$$\text{Schmidt-Zahl} \quad Sc = \nu/D_o \quad (89)$$

$$\text{Reynoldszahl des Kornes} \quad Re = \frac{v_a \cdot d}{\nu} \quad (90)$$

$$\text{inverse dynamische Pecletzahl} \quad Pe = \frac{D_{L,T}}{v_a \cdot d} \quad (91)$$

Wenn zwei der ersten drei Kennzahlen vorgegeben sind, liegt auch die dritte fest, weil sie sich eindeutig aus den anderen beiden ergibt, z.B.

$$Re = Pe/Sc \quad (92)$$

Die molekulare Pecletzahl kann als ein Maß für den Grad der Durchmischung innerhalb einer Pore interpretiert werden. Betrachtet man eine Pore als annähernd radialsymmetrisch mit dem Durchmesser der Größenordnung d , so kann man das Verhältnis der Zeit t_D , die zur vollständigen Vermischung eines Tracers infolge Diffusion benötigt wird, zu der Zeit t_K , die zum Durchfließen der Pore nötig ist, abschätzen. Es ist (s. Kap. 3.2)

$$t_K \approx d/v_a \quad (93)$$

und (s. Kap. 3.4)

$$t_D \approx d^2/D_o \quad (94)$$

Daraus ergibt sich

$$t_D/t_K = v_a \cdot d/D_o = Pe \quad (95)$$

Bei ($Pe \ll 1$) kommt es zu einer vollständigen Durchmischung innerhalb des Porenraumes durch Diffusion; für ($Pe \gg 1$) ist nahezu kein Konzentrationsabbau durch Diffusion spürbar.

Eine Vielzahl von Experimenten zur Bestimmung von D_L und D_T wurde durchgeführt und die Ergebnisse in einer Form gemäß Gleichung (86) oder (87) dargestellt.

In Bild 7 bzw. 8 ist der experimentell ermittelte Zusammenhang zwischen (D_L/D_O) bzw. der inversen dynamischen Pecletzahl Pe' und der molekularen Pecletzahl Pe dargestellt. Man sieht, daß die verfügbaren Dispersionskoeffizienten zwar der oben angegebenen Beziehung gehorchen, daß aber doch ganz erhebliche Streubreiten auftreten. Dafür können vielerlei Effekte maßgeblich sein, auf die teilweise in Kap. 6.5 eingegangen wird. Einer der Gründe könnten die verschiedenen Schmidtzahlen sein, die bei der Vielzahl der Experimente und verwendeten Materialien auf keinen Fall nur einen Wert annehmen.

In Bild 7 und 8 kann man mehrere Bereiche physikalisch unterscheiden:

Zone 1: $Pe \lesssim 0,4$: Hier überwiegt molekulare Diffusion den konvektiven Transport. Für ($Pe \rightarrow 0$) geht (D_L/D_O) auf einen konstanten Wert

$$D_L/D_O = D_m/D_O = \frac{1}{f \cdot n}, \quad (96)$$

wobei f ein Faktor nach Klinkenberg (1951) ist, der aus einer Analogie zwischen elektrischer Leitfähigkeit und Diffusion im porösen Medium bestimmt werden kann. (D_m/D_O) liegt für unkonsolidierte Medien etwa bei $2/3$.

Zone 2: $0,4 \lesssim Pe \lesssim 5$. In diesem Bereich liegen die Transportanteile aus molekularer Diffusion und mechanischer Dispersion in der gleichen Größenordnung (Übergangszone).

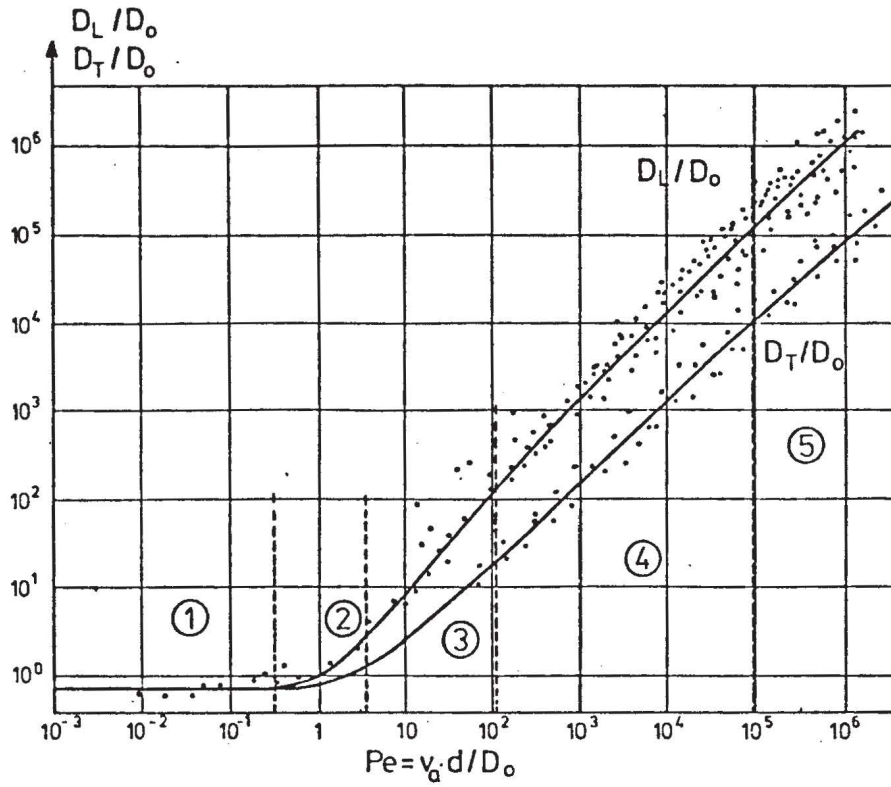


Bild 7: D_L und D_T als Funktion der molekularen Pecletzahl (nach Bear, 1972)

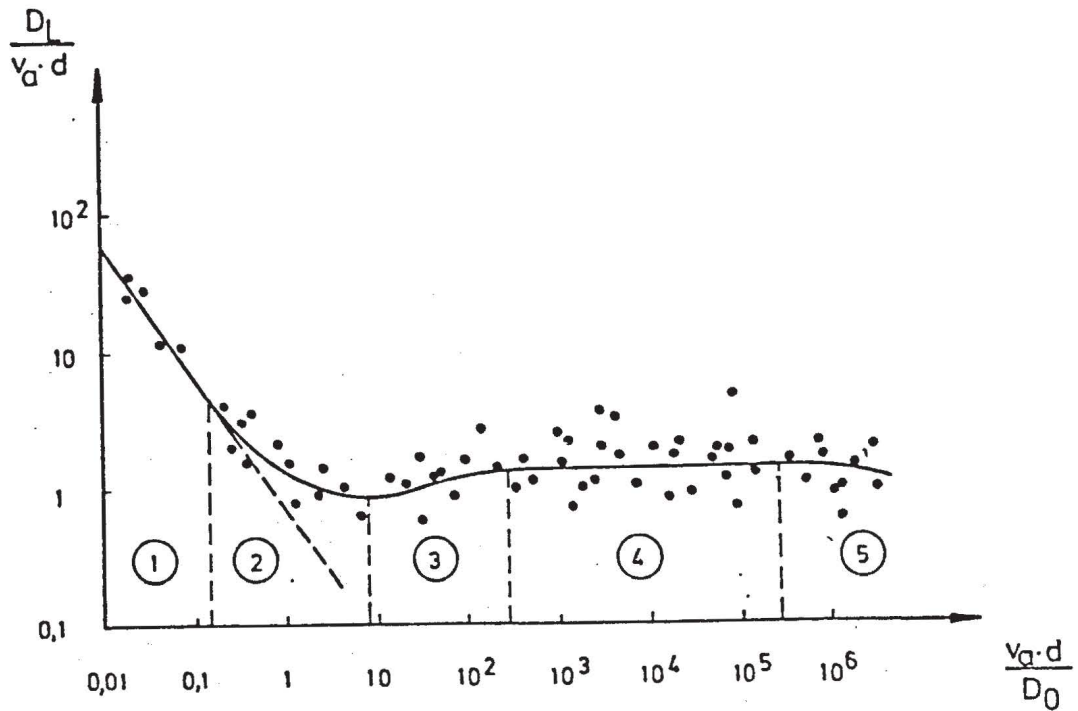


Bild 8: Inverse dynamische Pecletzahl in Abhängigkeit von der molekularen Pecletzahl (nach Fried, 1975)

Zone_3: $5 \lesssim Pe \lesssim 100$: Hier überwiegt mechanische Dispersion, jedoch führt die transversale Vermischung durch Diffusion zu einer Verringerung der in Längsrichtung transportierten Tracermenge und verhindert damit ein zu schnelles Anwachsen von (D_L/D_O) .

$$D_L/D_O = (D_m/D_O) + \alpha \cdot (Pe)^m \quad (97)$$

mit $\alpha \approx 0,5$ und $1 \lesssim m \lesssim 1,2$

Zone_4: $100 \lesssim Pe \lesssim 10^5$ und $Re < 1$ (Gültigkeit des Darcygesetzes): Hier dominiert völlig die mechanische Dispersion. Der Tracer fließt so schnell durch eine Pore, daß die Querdiffusion vernachlässigbar klein ist.

$$D_L/D_O = \beta \cdot Pe \quad (98)$$

$$\text{mit } \beta = 1,8 \pm 0,4$$

Berücksichtigt man die Definition der Pecletzahl

$$Pe = \frac{v_a \cdot d}{D_O} \quad (99)$$

so ergibt sich aus Gl. (98)

$$D_L = \beta \cdot d \cdot v_a = a_L \cdot v_a \quad (100)$$

Diese Näherung ($D_L = a_L \cdot v_a$) wird für praktische Anwendungen meist verwendet, auch in Zone 3.

Hier ist a_L [m] die sogenannte longitudinale Dispersivität und stellt eine reine Bodenkenngröße dar. In diesem Bereich der Pecletzahl ist die oft gewünschte Aufteilung von D_L in eine strömungsabhängige und in eine vom Medium bestimmte Größe zulässig.

Zone_5: $Pe \gtrsim 10^5$: Hier wird ($Re > 1$), d.h. es vollzieht sich mit wachsender Pecletzahl der Übergang zu turbulenter Strömung. Über diesen Bereich außerhalb der Gültigkeit des

Darcygesetzes liegen nur wenige Messungen vor, weil ($Re \gg 1$) keine praktische Bedeutung für Ausbreitungsvorgänge im Grundwasser hat.

Für D_T ergeben sich formal die gleichen Abhängigkeiten wie für D_L , jedoch mit anderen Koeffizienten. Die aus Experimenten bestimmten Werte für D_T/D_0 als Funktion von Pe (Bild 7) liegen in weitaus geringerer Zahl vor und bieten daher wenig Vergleichsmöglichkeiten (Bear 1961, Perkins/Johnston 1963, Harleman/Rumer 1963, List/Brooks 1967, Bruch 1970). Zudem ist die experimentelle Bestimmung von D_T schwieriger und die Vertrauenswürdigkeit der Ergebnisse durch ihre große Schwankungsbreite in Frage gestellt (s. Kap. 6.2).

Die relativ große Streubreite der in Bild 7 und 8 dargestellten Dispersionskoeffizienten, die durch die doppeltlogarithmische Auftragung optisch unterdrückt wird, rührt nicht nur vom Einfluß bisher nicht berücksichtigter Parameter (s. Kap. 6.4), sondern auch von Ungenauigkeiten und Fehlern bei der Versuchsauswertung und Interpretation her. Einige Experimentatoren haben ihre Ergebnisse durch unüberlegtes "Dimensionslos-Machen" in eine unbrauchbare Form gebracht: Experimentell gewonnene Ergebnisse wurden z.B. in folgender Form dargestellt:

$$- \text{Ebach/White (1958): } D_L/\nu = 1,92 Re^{1,06} \quad (101)$$

$$- \text{Harleman/Rumer (1963): } D_L/\nu = 0,66 Re^{1,2} \quad (102)$$

$$- \text{Hoopes/Harleman (1965): } D_L/\nu = 1,7 Re^{1,2} \quad (103)$$

$$- \text{Bruch/Street (1967): } D_L/\nu = 1,8 Re^{1,205} \quad (104)$$

Diese Darstellungen täuschen vor, die Viskositätsabhängigkeit von D_L zu beinhalten. Formuliert man z.B. das Resultat von Harleman/Rumer (1963) um zu

$$D_L = 0,66 \cdot \frac{(v_a \cdot d)^{1,2}}{\nu^{0,2}} \quad (105)$$

so kann man daraus schließen, daß D_L sinkt, wenn ν zunimmt. Neuere Experimente von Klotz (1973) zeigen jedoch eine Zunahme von D_L bei steigender Zähigkeit. Bei näherer Betrachtung zeigt es sich, daß keiner der Autoren, die (D_L/ν) als Funktion der Reynoldszahl aufgetragen haben, den Einfluß der Zähigkeit untersucht hat. Bestimmt man die Abhängigkeit von D_L von den tatsächlich variierten Größen v_a und d , so ergibt sich z.B. für die Experimente von Harleman/Rumer (1963)

$$D_L \sim (v_a \cdot d)^{1,2} \quad (106)$$

Dieses Ergebnis fügt sich sehr gut in Bild 7 in Zone 3 ein und zeigt, daß die falsch dargestellte Zähigkeitsabhängigkeit nur durch die nicht gerechtfertigte Einbeziehung einer Größe zustande kam, die nicht variiert wurde. Auch Darstellungen

$$D_L/D_0 = f(Pe) \quad (107)$$

resultieren meist aus Messungen, bei denen nur v_a variiert wurde. Hier kommt durch Auftragung in dimensionslosen Größen deshalb keine falsche Aussage zustande, weil D_L bei wachsendem D_0 abnimmt.

Die in Bild 8 dargestellte Abhängigkeit der inversen dynamischen Pecletzahl von der molekularen Pecletzahl enthält die gleiche Information wie die Darstellung in Bild 7. Auch hier lassen sich die gleichen Bereiche unterscheiden wie in Bild 7. Zusätzlich bietet Bild 8 den Vorteil, daß man für die Grenzbereiche ($Pe \ll 1$) und ($Pe < 100$) und ($Re < 1$) jeweils Geraden erhält. Für $Pe < 1$ ergibt sich

$$D_L/(v_a \cdot d) \approx 1/Pe = D_0/(v_a \cdot d) \quad (108)$$

d.h. hier erhält man im Grenzfall verschwindender Geschwindigkeit ($D_L \approx D_0$), während man aus Bild 7 den genaueren Wert ($D_L \approx 0,7 D_0$) ablesen kann. Bei großen Peclet-

zahlen, aber Reynoldszahlen ($Re < 1$) ergibt sich eine Parallele zur Pe-Achse, d.h.

$$\frac{D_L}{v_a \cdot d} = \text{const.} \quad (109)$$

oder

$$D_L \sim v_a \cdot d \quad (110)$$

5.2.2.2 Theoretische Modelle für D_O, D_L, D_T

Neben Mitteln der Dimensionsanalyse wurden theoretische Modelle entwickelt und angewandt, um zu klären, von welchen Größen die Dispersionskoeffizienten abhängen und durch welche Gesetzmäßigkeiten diese Abhängigkeiten beschrieben werden können. Zwei verschiedene Modelltypen wurden entwickelt: Geometrische und statistische Modelle. Eine erste Übersicht über Modellvorstellungen geben Biggar/Nielsen (1960), eine sehr ausführliche Darstellung liefern Perkins/Johnston (1963) sowie Bear (1972). Eine Zusammenfassung findet sich in Bertsch (1978).

Geometrische Modelle: Das poröse Medium wird so stark vereinfacht dargestellt, daß der Vermischungsprozess durch exakte mathematische Methoden analysiert werden kann. Als einfachstes Modell nimmt Taylor (1953) eine Kapillarröhre konstanten Querschnitts an, in der sich zwei Flüssigkeiten mischen. Danel (1952) erweitert Taylors Modell auf ein Bündel gerader Kapillarröhren mit verschiedenen Durchmessern, Aris (1956) auf unregelmäßig geformte Röhren. Einen weiteren Modelltyp stellen die Mischzellenmodelle dar, bei denen man sich die Poren als Mischzellen vorstellt, die durch Verbindungskanäle hintereinander "geschaltet" sind. Bear (1960) erzielt mit einem solchen eindimensionalen Modell unter den folgenden vereinfachenden Annahmen zur Erklärung der Dispersion

- a) vollständige Vermischung in einer sog. Elementarzelle
- b) Durchfluß durch die Verbindungskanäle mit der mittleren Geschwindigkeit

erstaunlich realistische Ergebnisse, die auch einer experimentellen Prüfung standhalten. Eine Erweiterung der Mischzellentheorie auf verschiedene Zelltypen (voll durchgängig oder sog. Totwasser-Poren) brachte keine wesentlich neuen Erkenntnisse. Geometrische Modelle können zwar einige Aspekte des dispersiven Transports erklären, in anderen wesentlichen Fragen (z.B. Querdispersion) zeigten sich jedoch ihre durch zu grobe Vereinfachungen bedingten Grenzen.

Statistische Modelle: Der zweite Ansatz basiert auf der Betrachtung der mikroskopischen Bewegung eines markierten Teilchens, wobei aus der räumlichen Mittelung der Bewegung eine makroskopische Beschreibung des Transportvorganges gewonnen wird. Die Wahrscheinlichkeitsverteilung des Ortes eines Teilchens kann als die räumliche Verteilung der relativen Konzentration einer Tracerwolke interpretiert werden, die zu einem bestimmten Zeitpunkt um einen bestimmten Ort konzentriert war und sich dann unter den gleichen mittleren Bedingungen fortbewegt.

Danckwerts (1953) war der erste, der das "Zufallsschrittmodell" eindimensional bei der Untersuchung der Effizienz chemischer Reaktionsketten untersuchte, obwohl auch nur mit einer Mischzellenanordnung. Longitudinale Dispersion wird dann durch die Diffusionsgleichung beschrieben, wobei D_L eine Funktion der Länge der Mischzelle und der mittleren Geschwindigkeit ist. Den ersten Schritt zur Behandlung der Dispersion im dreidimensionalen Raum tat Scheidegger (1954) durch die Einführung eines sog. Zufallsschrittprozesses (random walk process), bei dem die Bewegung eines Teilchens als Summe kleinster, zufälliger Bewegungen interpretiert wird. Sein Modell, in dem übrigens molekulare Diffusion vernachlässigt wird, liefert jedoch einen skalaren isotropen Dispersionskoeffizienten, d.h. es besteht kein Unterschied zwischen D_L und D_T .

Einen Fortschritt brachte de Josselin de Jongs (1958) Arbeit, weil er zum ersten Mal als Resultat $D_L \neq D_T$ erhielt. Er be-

trachtet das poröse Medium als ein Netzwerk miteinander verbundener, gerader Kanäle gleicher Länge, die zufällig orientiert, aber gleichmäßig in alle Richtungen verteilt sind und mit einer definierten Hauptströmungsrichtung durchflossen werden. Als Resultat erhält er für die Wahrscheinlichkeit, ein Teilchen nach einer großen Zahl von "Elementarschritten" an einem bestimmten Punkt P nach einer bestimmten Zeit zu finden, eine Gaußverteilung in drei Dimensionen um den Punkt P. Linien gleicher Konzentration sind Ellipsoide um einen Punkt, der sich mit der mittleren Geschwindigkeit fortbewegt. D_L und D_T können aus den Standardabweichungen bestimmt werden. Eine ähnliche Modellvorstellung entwickelt Saffman (1959, 1960), der zusätzlich die molekulare Diffusion miteinbezieht. Er erhält D_L und D_T als Funktion der Filtergeschwindigkeit, des Porendurchmessers, der Porenkanallänge, des molekularen Diffusionskoeffizienten und der Zeit.

Analogie - Modelle

Zur Bestimmung der Abhängigkeit von D_m/D_o von Parametern des porösen Mediums sind Ansätze verwendet worden, die auf einer Analogie zwischen elektrischer Leitfähigkeit und molekularer Diffusion basieren (Klinkenberg, 1951, Grane/Gardner, 1961). Dem Verhältnis (D_m/D_o) entspricht hierbei das Verhältnis der Leitfähigkeit im porösen Medium zur Leitfähigkeit der reinen Ionenlösung. Dieser Zusammenhang wurde schon in Gleichung (96) dargestellt.

6. LABOREXPERIMENTE ZUR BESTIMMUNG VON DISPERSIONS- KOEFFIZIENTEN

In diesem Kapitel sollen die zur Bestimmung von D_L und D_T notwendigen Versuchsanordnungen beschrieben, die Auswerteverfahren dargestellt und die mit bisherigen Messungen erzielten Ergebnisse zusammengefaßt werden.

6.1 Versuchsanordnungen zur Bestimmung von D_L

Aus einer Vielzahl von experimentellen Anordnungen, die in der Literatur beschrieben sind, ist der prinzipielle Versuchsaufbau bekannt. Die Mehrzahl der Experimente zur Bestimmung von D_L sind eindimensionale Säulenexperimente, bei denen die Konzentration des Tracers über den Querschnitt der Säule konstant ist und nur in Strömungsrichtung variiert. Solche Experimente stammen z.B. von de Josselin de Jong (1958), Biggar/Nielsen (1960), Bear (1961), Rumer (1962), Harleman/Rumer (1963), Bertsch (1970, 1971) und in großer Zahl von Klotz (1973). Einige wenige Experimente dienten zur Bestimmung von D_L (und D_T) aus zweidimensionalen Ausbreitungsvorgängen, z.B. die von Bear (1961) und Bruch (1970). Die daraus bestimmten longitudinalen Dispersionskoeffizienten sind jedoch nicht mit den aus eindimensionalen Ausbreitungsvorgängen bestimmten Koeffizienten gleichzusetzen! Die meisten experimentellen Untersuchungen wurden in unkonsolidierten Medien durchgeführt (Bertsch 1978), wobei entweder Kugeln und Perlen oder sandige bzw. kiesige Medien benutzt wurden, die durch geometrische Parameter charakterisiert werden können wie z.B. Porosität, Korndurchmesser, Kornform, Kornverteilungskurve, Ungleichförmigkeitsgrad etc.

Der prinzipielle Aufbau einer solchen Versuchsanordnung und die Methoden zur Bestimmung von D_L sind relativ einfach, wie in Bild 9 stark schematisch dargestellt: Das poröse Medium ist homogen und isotrop und wird in Richtung

der Längsachse eines meist zylindrischen Körpers durchflossen, dessen Querabmessungen klein sind im Verhältnis zur Länge. Die Dispersionsgleichung lautet in diesem Fall:

$$\frac{\partial c}{\partial t} = -w_a \cdot \frac{\partial c}{\partial z} + D_L \cdot \frac{\partial^2 c}{\partial z^2} \quad (111)$$

wobei $c = c(z, t)$, w_a = Abstandsgeschwindigkeit in z-Richtung

Die Lösung dieser Gleichung ist abhängig von den gewählten Rand- und Anfangsbedingungen. Man benutzt im wesentlichen zwei verschiedene Verfahren, die sich durch die physikalischen Randbedingungen am Zulauf unterscheiden.

6.1.1 Kontinuierliche Tracerzugabe:

Zur Zeit ($t < 0$) wird das poröse Medium mit der konstanten Geschwindigkeit w_a nur vom Trägerfluid durchströmt. Bei ($t = 0$) tritt eine scharf abgegrenzte Tracerfront mit konstanter Konzentration c_0 in das Medium am Ort ($z = 0$) ein. Diese Konzentration c_0 wird für alle späteren Zeiten im Einlauf aufrechterhalten. Die Rand- und Anfangsbedingungen lauten zusammengefaßt für $c(z, t)$:

$$\begin{aligned} c(0, t) &= c_0 & \text{für } t \geq 0 \\ c(z, 0) &= 0 & \text{für } z > 0 \\ c(\infty, t) &= 0 & \text{für } t \geq 0 \end{aligned} \quad (112)$$

Infolge Dispersion wird durch das Vorrücken der anfänglich scharfen Front durch das poröse Medium der Übergangsbereich von ($c = c_0$) mit fortschreitender Fließdauer immer weiter verbreitert (Bild 9). Durch Bestimmung einer Größe, die die Breite dieser Vermischungszone charakterisiert, kann D_L ermittelt werden (s.u.).

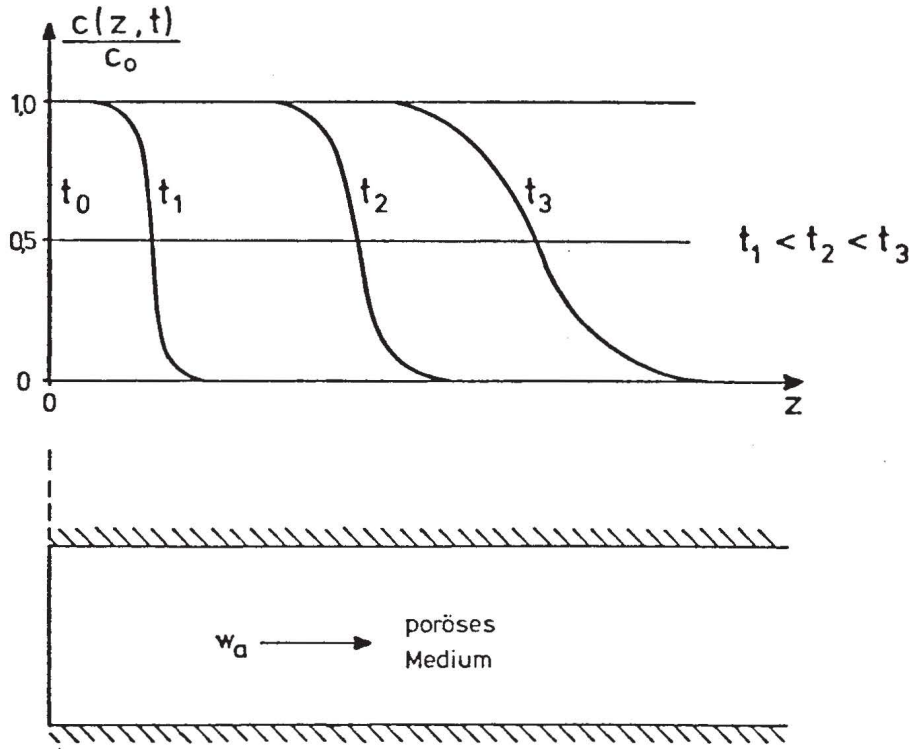


Bild 9: Randbedingungen und Konzentrationsverlauf im ein-dimensionalen Dispersionsexperiment

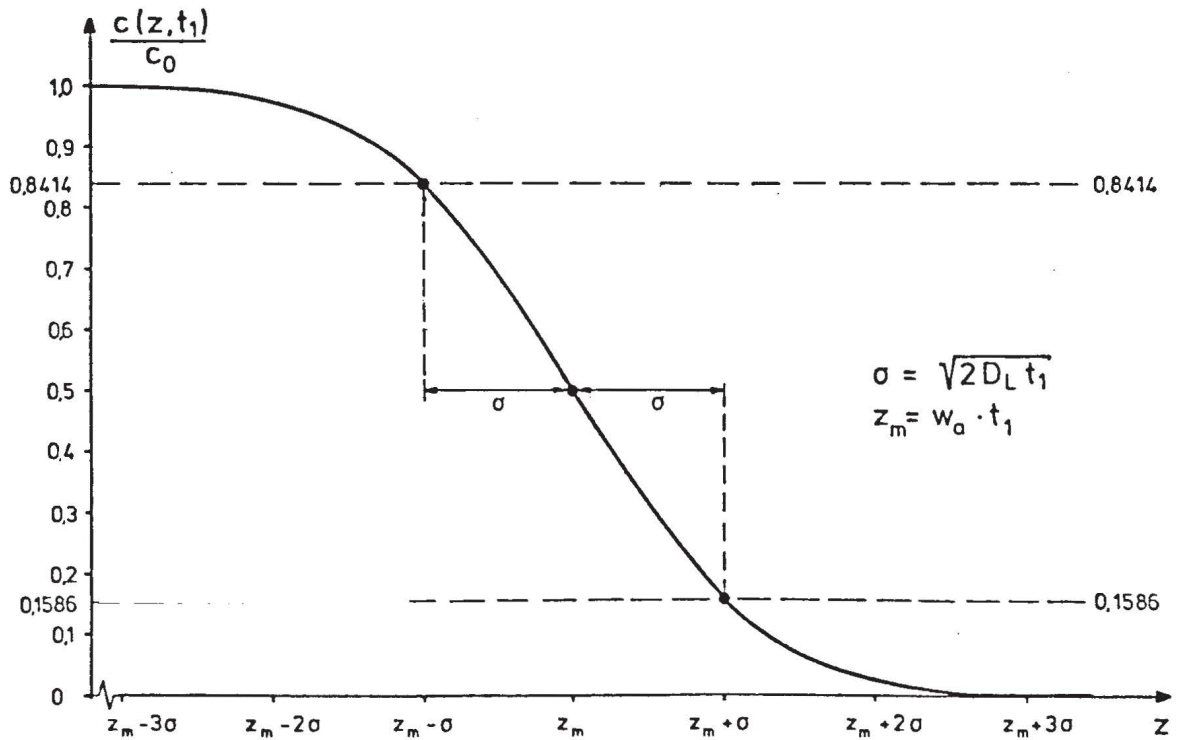


Bild 10: Durchbruchskurve bei kontinuierlicher Tracerzugabe

Bei den angegebenen Randbedingungen lautet die Lösung der Dispersionsgleichung (111) wie folgt (Ogata/Banks 1961), Harleman/Rumer 1963):

$$\frac{\bar{c}(z,t)}{c_0} = \frac{1}{2} \cdot \operatorname{erfc}\left(\frac{z - w_a \cdot t}{2\sqrt{D_L \cdot t}}\right) + \frac{1}{2} \exp\left(\frac{w_a \cdot z}{D_L}\right) \cdot \operatorname{erfc}\left(\frac{z + w_a \cdot t}{2\sqrt{D_L \cdot t}}\right) \quad (113)$$

Ogata/Banks (1961) zeigen, daß der zweite Summand vernachlässigt werden kann, wenn

$$\frac{w_a \cdot z}{D_L} > 20 \quad (114)$$

ist. Dann lautet Gleichung (113) vereinfacht:

$$\frac{c(z,t)}{c_0} = \frac{1}{2} \left(1 - \operatorname{erf}\left(\frac{z - w_a \cdot t}{2\sqrt{D_L \cdot t}}\right) \right) \quad (115)$$

Hierbei ist

$$\operatorname{erf}(a) = \frac{2}{\sqrt{\pi}} \int_0^a e^{-t^2} dt \quad (116)$$

das Gaußsche Fehlerintegral und

$$\operatorname{erfc}(a) = 1 - \operatorname{erf}(a) \quad (117)$$

das komplementäre Gaußsche Fehlerintegral. Die Funktion $\operatorname{erf}(a)$ liegt tabelliert in mathematischen Standardwerken vor (z.B. Bronstein/Semendjajew, Verlag Teubner, Leipzig, 1972).¹⁾

¹⁾ Da mitunter auch

$$\Phi(a) = \frac{2}{\sqrt{2\pi}} \int_0^a e^{-t^2/2} dt$$

als Gauß'sches Fehlerintegral bezeichnet wird, sollte man stets vor Gebrauch einer solchen Tafel zur Auswertung genau auf die Definition von $(\operatorname{erf}(a))$ achten.

Auswertungsverfahren: Üblicherweise wird mit einem der später genannten Meßverfahren an verschiedenen Stellen des porösen Mediums in bestimmten Zeitintervallen der Konzentration eines Tracers gemessen. Zu einem festen Zeitpunkt sieht die örtliche Konzentrationsverteilungskurve (sog. Durchbruchskurve) so aus, wie in Bild 10 schematisch dargestellt. Aus einigen dieser "Momentaufnahmen" läßt sich D_L bestimmen. In Tabelle 1 ist das Auswertungsverfahren schematisch dargestellt. Die Auswertung wird wesentlich erleichtert, wenn man zu jedem Meßzeitpunkt t die Verteilung der relativen Konzentrationen $(c(z)/c_0)$ über dem Ort z bzw. über dem Abstand $(z-z_0)$ vom Mittelpunkt z_0 der Verteilung wo, $(c(z_0)/c_0 = 0,5)$ ist, aufträgt. Dann läßt sich für jede Verteilungskurve sofort die Breite der Vermischungszone und daraus nach dem in Tabelle 1 dargestellten Verfahren der longitudinale Dispersionskoeffizient D_L bestimmen.

In einigen Fällen liegen keine Konzentrationsmessungen zu verschiedenen Zeiten an verschiedenen Punkten vor, sondern nur Messungen $c(t)$ an einem festen Ort. Das ist z.B. der Fall, wenn $c(t)$ im Ausfluß gemessen wird. Unter den in (117) angegebenen Randbedingungen sieht die Konzentrationsverteilung an einem festen Punkt z wie in Bild 11 aus. Anders als bei der Darstellung $(c(z,t)/c_0)$ über z ist diese Kurve nicht symmetrisch zum Punkt z_0 mit der relativen Konzentration $(c/c_0 = 0,5)$.

Für Zeiten

$$t < z_0/w_a \quad (118)$$

verläuft die Kurve steiler als für Zeiten

$$t > z_0/w_a \quad (119)$$

Darin spiegelt sich der Zeiteinfluß wider. Bei

$$t < z_0/w_a \quad (120)$$

Standardabweichung: $\sigma(t) = \sqrt{2 \cdot D_L \cdot t}$

Breite $b(t)$ der Vermischungszone

$$b(t) = 2 \cdot \sigma(t) = z_2(t) - z_1(t)$$

wobei

$$z_1(t) = w_a \cdot t - \sqrt{2 D_L \cdot t}$$

$$z_2(t) = w_a \cdot t + \sqrt{2 D_L \cdot t}$$

und wegen $\operatorname{erf}(a) = -\operatorname{erf}(-a)$

$$c(z_1)/c_0 = 0,5 \left(1 - \operatorname{erf}\left(\frac{-\sqrt{2 D_L \cdot t}}{2 \sqrt{D_L \cdot t}}\right) \right) = 0,5 \cdot \left(1 + \operatorname{erf}\left(\frac{\sqrt{2}}{2}\right) \right)$$

$$c(z_2)/c_0 = 0,5 \left(1 - \operatorname{erf}\left(\frac{\sqrt{2 D_L \cdot t}}{2 \sqrt{D_L \cdot t}}\right) \right) = 0,5 \left(1 - \operatorname{erf}\left(\frac{\sqrt{2}}{2}\right) \right)$$

Mit $\operatorname{erf}\left(\frac{\sqrt{2}}{2}\right) = 0,6827$ ergibt sich

$$c(z_1)/c_0 = 0,8414 \quad \text{und} \quad c(z_2)/c_0 = 0,1586$$

Mit $b(t) = 2 \cdot \sigma(t) = 2 \sqrt{2} \cdot \sqrt{D_L t}$
ergibt sich $b^2(t) = 8 D_L t$

Durch eine Auftragung von $b^2(t)$ über t für alle Meßzeitpunkte t läßt sich D_L aus der Steigung m der Ausgleichsgerade bestimmen

$$D_L = \frac{1}{8} \text{ m}$$

Tabelle 1: Bestimmung von D_L bei kontinuierlicher Tracerzugabe aus Messungen der örtlichen Konzentrationsverteilung zu bestimmten Zeitpunkten

ist die Vermischungszone schmaler als bei

$$t > z_0/w_a \quad (121)$$

Formal sieht man diesen Zeiteinfluß auch im Argument der Fehlerfunktion in Gleichung (115). Die Vorgehensweise zur Bestimmung von D_L aus dem zeitlichen Verlauf der Konzentration ist ähnlich dem oben beschriebenen Verfahren für den örtlichen Verlauf von (c/c_0) . In Tabelle 2 ist das Auswertungsverfahren für kontinuierliche Tracerzugabe bei Messung des zeitlichen Konzentrationsverlaufs an einem festen Ort schematisch dargestellt. Steht zur Messung der Konzentration nur ein Ort zur Verfügung, muß eine Reihe von Versuchen mit identischen Rand- und Anfangsbedingungen durchgeführt werden, um einen vertrauenswürdigen Wert für D_L zu erhalten.

In gewissen Fällen kann von dem in Tabelle 2 dargestellten Verfahren abgewichen werden, insbesondere wenn die Breite der Vermischungszone klein ist gegenüber dem bis zum Meßpunkt z zurückgelegten Fließweg. Bezeichnet man mit t_0 die Zeit bis zum Eintreffen der Front in z bei rein konvektivem Transport, so vereinfacht sich die Bestimmungsgleichung in Tabelle 2 unter Berücksichtigung von

$$w_a = z/t_0 \quad (122)$$

zu

$$D_L = \frac{z^2}{8 t_0^3} \cdot (t_2 - t_1)^2 \quad (123)$$

Bei dieser Näherung entfällt somit die explizite Bestimmung der Abstandsgeschwindigkeit w_a .

Oft wird die Tracerkonzentration am Auslauf gemessen und statt in Abhängigkeit von der Zeit als Funktion des ausgeflossenen Volumens aufgetragen. Bei stationärem Fließen mit dem Volumenstrom Q ergibt sich das ausgeflossene Volumen V als

Als charakteristische Breite des zeitlichen Konzentrationsverlaufs wird die Zeitdifferenz

$$T = t_2 - t_1$$

gewählt. t_1 bzw. t_2 sind die Zeitpunkte, zu denen das Argument der Gåußschen Fehlerfunktion gerade

($\pm 1/\sqrt{2}$) ist.

$$\frac{c(t_1)}{c_0} = \frac{1}{2} \left(1 - \operatorname{erf}\left(\frac{1}{\sqrt{2}}\right) \right) = 0,1586 \quad \leadsto \quad \frac{z - w_a \cdot t_1}{2\sqrt{D_L \cdot t_1}} = \frac{1}{\sqrt{2}} \quad (\text{II/1})$$

$$\frac{c(t_2)}{c_0} = \frac{1}{2} \left(1 - \operatorname{erf}\left(\frac{-1}{\sqrt{2}}\right) \right) = 0,8414 \quad \leadsto \quad \frac{z - w_a \cdot t_2}{2\sqrt{D_L \cdot t_2}} = \frac{-1}{\sqrt{2}} \quad (\text{II/2})$$

Daraus ergibt sich aus Gleichung II/1 und II/2

$$\sqrt{D_L} = \frac{z - w_a t_1}{\sqrt{2} \sqrt{t_1}}$$

$$\sqrt{D_L} = \frac{z - w_a t_2}{-\sqrt{2} \sqrt{t_2}}$$

Addition der letzten beiden Gleichungen und Quadrieren liefert

$$D_L = \frac{1}{8} \left(\frac{z - w_a t_1}{\sqrt{t_1}} - \frac{z - w_a t_2}{\sqrt{t_2}} \right)^2$$

Die Auswertung von (II/1) oder (II/2) allein hätte schon zur Bestimmung von D_L genügt, aber üblicherweise werden beide verwendet, um mögliche Asymmetrien in der Konzentrationsverteilung zu berücksichtigen.

Tabelle 2: Bestimmung von D_L bei kontinuierlicher Tracerzugabe aus Messungen des zeitlichen Konzentrationsverlaufes an einem festen Ort

$$V(t) = Q \cdot t = w_a \cdot n_e \cdot A \cdot t \quad (124)$$

wobei A der Fließquerschnitt ist. Führt man die Bezeichnungen $V(t_0) = V_0$, $V(t_1) = V_1$ und $V(t_2) = V_2$ ein, so ergibt sich mit Gl. (123)

$$D_L = \frac{w_a}{8 \cdot n_e \cdot A \cdot V_0} (V_2 - V_1)^2 \quad (125)$$

6.1.2 Pulsförmige Tracerzugabe

Bei diesem Verfahren wird zum Zeitpunkt ($t = 0$) am Ort ($z = 0$) eine Tracermenge M so zugegeben, daß sie in einer sehr dünnen Schicht gleichmäßig verteilt in das poröse Medium einfließt. Die mathematisch idealisierte Anfangsbedingung lautet dann:

$$c(z, t=0) = M \cdot \delta(z) \quad (126)$$

wobei ($\delta(z)$) die Dirac'sche Deltafunktion ist, für die gilt

$$\delta(z) = \begin{cases} 1 & \text{für } z=0 \\ 0 & \text{für } z \neq 0 \end{cases} \quad (127)$$

und

$$\int_{-\infty}^{+\infty} \delta(z) dz = 1 \quad (128)$$

Unter diesen Anfangsbedingungen lautet die Lösung der ein-dimensionalen Dispersionsgleichung (111):

$$c(z, t) = \frac{M}{A \cdot n_e \sqrt{4\pi \cdot D_L \cdot t}} \cdot \exp \left[-\frac{(z - w_a \cdot t)^2}{4 D_L \cdot t} \right] \quad (129)$$

Sie ist in Bild 12 graphisch dargestellt. Diese Gaußschen Glockenkurven verbreitern sich mit wachsender Zeit ständig und verlieren gleichzeitig an Höhe, beides bewirkt durch die Terme $(D_L \cdot t)$. Für einen idealen Tracer ist die Fläche zwischen jeder Glockenkurve und der z-Achse gleich, da die gesamte Tracermenge im Fluid mittransportiert wird (kein Zerfall, keine Adsorption). Als Breite b einer solchen Kurve wird der Abstand der beiden Wendepunkte bezeichnet, in denen das Argument der Exponentialfunktion gleich $(-0,5)$ ist. Wenn zur Zeit t_1 der eine Wendepunkt bei z' , der andere bei z'' liegt, muß gelten:

$$z'(t_1) = w_a \cdot t_1 - \sqrt{2D_L \cdot t_1} \quad (130)$$

$$z''(t_1) = w_a \cdot t_1 + \sqrt{2D_L \cdot t_1} \quad (131)$$

Daraus ergibt sich

$$b(t_1) = 2 \sqrt{2D_L \cdot t_1} \quad (132)$$

und damit

$$D_L = \frac{b^2(t_1)}{8t_1} \quad (133)$$

Das Auswerteverfahren hängt wiederum davon ab, ob die örtliche Verteilung der Konzentration zu verschiedenen Zeitpunkten oder der zeitliche Verlauf der Konzentration an einem festen Ort bestimmt werden soll.

Im ersten Fall bestimmt man aus der örtlichen Konzentrationsverteilung für jeden Zeitpunkt t die zugehörige Breite $(b(t))$ der Glockenkurve und trägt dann $(b^2(t))$ über t auf. Die Steigung der Ausgleichsgerade ist gleich $(8D_L)$. Dieser Weg bietet den Vorteil, ohne Kenntnis der mitunter schwer bestimmbar bzw. nicht hinreichend genau bekannten Größen M und n_e das gesuchte D_L zu bestimmen. Eine weitere Möglichkeit bietet das Aufsuchen der Maxima $(c_m(t))$ der ört-

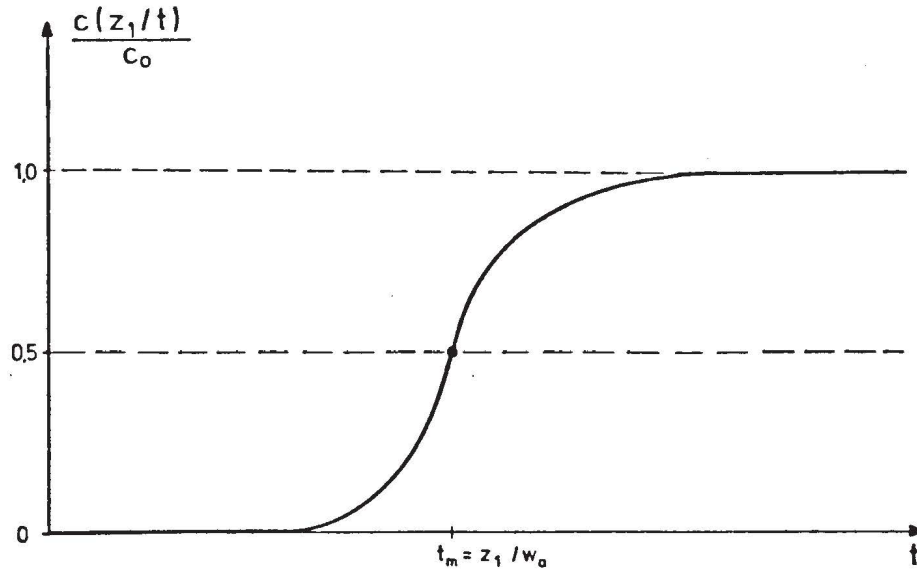


Bild 11: Zeitlicher Konzentrationsverlauf an einem festen Ort bei kontinuierlicher Tracerzugabe

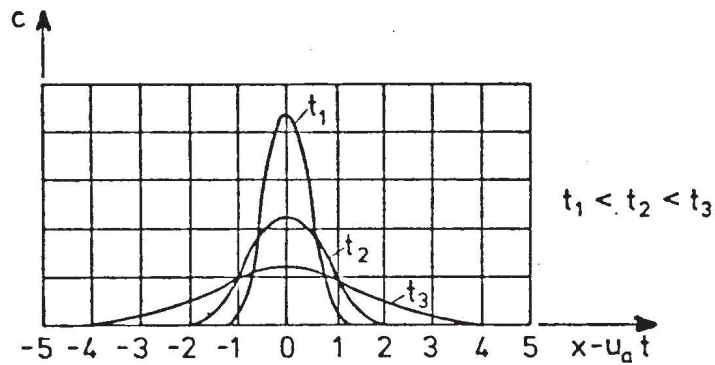


Bild 12: Verteilung einer dünnen Tracerschicht zu verschiedenen Zeiten nach der Impfung (nach Klotz, 1973)

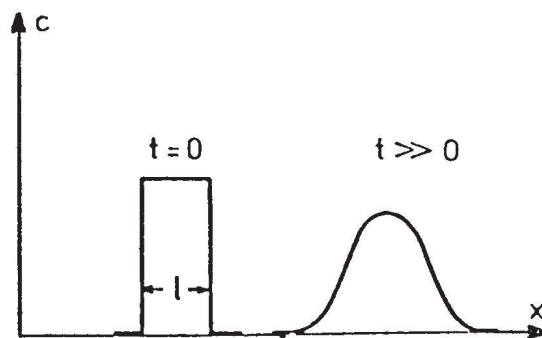


Bild 13: Ausbreitung einer Tracerschicht endlicher Ausdehnung

lichen Konzentrationsverteilung zu den einzelnen Zeiten t , wobei

$$c_m(t) = \frac{M}{A \cdot n_e \cdot \sqrt{4\pi \cdot D_L \cdot t}} \quad (134)$$

Trägt man für jeden Zeitpunkt t das zugehörige $c_m(t)$ über $(1/\sqrt{t})$ auf, so erhält man D_L aus der Steigung m der Ausgleichsgerade als

$$D_L = \frac{M^2}{A^2 \cdot n_e^2 \cdot 4\pi \cdot m^2} \quad (135)$$

Dieses Verfahren ist nur sinnvoll, wenn sowohl M und n_e genügend genau bekannt sind als auch die Absolutwerte von $c_m(t)$.

Falls aus meßtechnischen Gründen nur eine kontinuierliche Aufzeichnung des zeitlichen Konzentrationsverlaufes an einem Ort (z.B. am Auslauf) möglich ist, wird die Auswertung dadurch erschwert, daß die Kurve $(c(t))$ über t keine Gaußsche Glockenkurve mehr ist, da t sowohl im Zähler als auch im Nenner des Exponentialausdrucks sowie im Nenner des ersten Faktors vorkommt. In diesem Fall wird D_L aus dem Maximum $c_m(t)$ der zeitlichen Konzentrationsverteilung bestimmt.

Aus

$$c_m(t) = \frac{M}{A \cdot n_e \cdot \sqrt{4\pi \cdot D_L \cdot t}} \quad (136)$$

folgt

$$D_L = \frac{M^2}{A^2 \cdot n_e^2 \cdot 4\pi \cdot t \cdot c_m^2(t)} \quad (137)$$

Physikalisch gesehen ist natürlich die in Gleichung (133) formulierte Randbedingung in der Natur nicht realisierbar, da man keine unendlich dünne Tracerschicht herstellen kann. Vielmehr wird man am Anfang statt des δ -Peaks einen Rechteckpuls mit endlicher Breite l_0 haben, wie in Bild 13 dargestellt, dessen Flächeninhalt der zugegebenen Tracermenge M entspricht (Fried 1975). Die Lösung der Dispersionsgleichung unter diesen Randbedingungen ist kompliziert und für praktische Zwecke ungeeignet (Hunt 1978). Durch Dispersion zerfließt der Rechteckpuls und ist daher nach genügend langer Zeit kaum mehr von einem zerfließenden δ -Puls zu unterscheiden. Die Zeit t_0 , ab der sich die Maximalkonzentrationen für δ -Puls und Rechteckpuls um weniger als N % unterscheiden, ist abhängig von l_0 und D_L (Hunt 1978 und Wilson/Miller 1978):

$$t_0 \geq \frac{l_0^2}{0,48 \cdot N \cdot D_L} \quad (138)$$

Daraus folgt für den Abstand z_0 ab dem man vereinfachend mit dem δ -Puls rechnen kann

$$z_0 \geq \frac{w_a \cdot l_0^2}{0,48 \cdot D_L} \quad (139)$$

Hierbei wurde $N = 1$ und

$$z_0 = w_a \cdot t_0 \quad (140)$$

benutzt.

Vor der Auswertung von Dispersionsversuchen mit pulsförmiger Tracerzugabe sollte mittels Gleichung (139) nachgeprüft werden, ob das vereinfachte Auswertungsverfahren überhaupt angewandt werden kann.

Sowohl die kontinuierliche als auch die pulsförmige Tracerzugabe sind prinzipiell gleichwertig und liefern die gleiche

Information. Für welche man sich entscheidet, hängt u.a. von den zur Verfügung stehenden experimentellen Mitteln ab.

6.2 Experimente zur Bestimmung von D_T

Experimente zur Bestimmung von D_T liegen in weit geringer Zahl vor als für D_L . Das liegt einerseits am höheren versuchstechnischen Aufwand, andererseits an der schon früh gewonnenen Erkenntnis, daß die Abhängigkeiten von D_L und D_T von Fluid- und Mediumparametern gleichartig sind und sich nur in den Absolutwerten unterscheiden (Bear 1961; Harleman/Rumer 1963; List/Brooks 1967; Bruch 1970; Tyagi 1971).

Hinsichtlich der Randbedingungen sind hauptsächlich zwei experimentelle Methoden zur Bestimmung von D_T zu unterscheiden: Bear (1961) verwendet eine punktförmige Einleitung in eine gleichförmige Strömung, um daraus sowohl D_L als auch D_T zu bestimmen. Die Lösung der Dispersionsgleichung lautet für diesen Fall für eine eindimensionale Strömung in x-Richtung (Hunt 1978)

$$c(x,y,t) = \frac{M}{4\pi \cdot n_e \cdot \sqrt{D_L \cdot D_T}} \cdot \exp \left[\frac{-(x-u_a \cdot t)^2}{4D_L \cdot t} - \frac{y^2}{4D_T \cdot t} \right] \quad (141)$$

Zu jedem Zeitpunkt t sind die Linien gleicher Konzentration Ellipsen um den Ort der Maximalkonzentration $P_m(u_a \cdot t/0)$. Die Ellipsengleichung ergibt sich, wenn man das Argument der Exponentialfunktion in (141) gleich einer Konstanten, z.B. (-1) setzt und berücksichtigt, daß bei einem δ -Puls die Standardabweichungen der Konzentrationsverteilung

$$\sigma_L = \sqrt{2D_L \cdot t} \quad (142)$$

und

$$\sigma_T = \sqrt{2D_T \cdot t} \quad (143)$$

sind.

$$\frac{(x - u_a \cdot t)^2}{2 \sigma_L^2} + \frac{y^2}{2 \sigma_T^2} = 1 \quad (144)$$

Durch Ermittlung der Konzentrationsverteilung zu verschiedenen Zeiten t können damit sowohl D_L als auch D_T bestimmt werden.

Das zweite und weitaus häufiger angewandte Verfahren ist u.a. bei Harleman/Rumer (1963) und bei List/Brooks (1967) beschrieben. In Bild 14 ist die Versuchsanordnung mit den Randbedingungen schematisch dargestellt: In einer eindimensionalen Strömung wird der Zulauf in zwei Bereiche geteilt. In der einen Hälfte fließt reines Wasser zu, in der anderen Hälfte fließt fortwährend Wasser mit einer konstanten Tracerkonzentration c_0 in das Medium ein. Die ankommende Tracerfront zerläuft sowohl in longitudinaler als auch in transversaler Richtung. Im Bereich zwischen Einleitungsquerschnitt und der in x -Richtung fortschreitenden Tracerfront stellt sich nach einiger Zeit eine stationäre Konzentrationsverteilung ein, bei der die longitudinale gegen die transversale Dispersion vernachlässigt werden kann. Wenn die undurchlässigen Berandungen so weit voneinander entfernt sind, daß die Konzentration an der unteren Berandung überall gleich c_0 ist und an der oberen Berandung gleich Null, können folgende Randbedingungen für die stationäre Lösung formuliert werden:

$$c(0, y) = c_0 \quad \text{für} \quad -B < y \leq 0 \quad (145)$$

$$c(0, y) = 0 \quad \text{für} \quad 0 < y < +B \quad (146)$$

$$\frac{\partial c}{\partial y} = 0 \quad \text{für} \quad y = \pm B \quad (147)$$

In diesem Fall lautet die Dispersionsgleichung

$$u_a \cdot \frac{\partial c}{\partial x} = D_L \frac{\partial^2 c}{\partial x^2} + D_T \frac{\partial^2 c}{\partial y^2} \approx D_T \frac{\partial^2 c}{\partial y^2} \quad (148)$$

Als Lösung erhält man (Harleman/Rumer 1963):

$$\frac{c(x,y)}{c_0} = \frac{1}{2} \left(1 - \operatorname{erf} \frac{y}{2\sqrt{D_T \cdot x/u_a}} \right) \quad (149)$$

Zur Auswertung von Konzentrationsmessungen an bestimmten Punkten (x,y) schreibt man Gleichung (149) wie folgt um:

$$\operatorname{erf} \left(\frac{y}{2\sqrt{D_T \cdot x/u_a}} \right) = 1 - 2 \frac{c(x,y)}{c_0} \quad (150)$$

Für jeden Meßpunkt kann man sich die Größe

$$1 - 2 \frac{c(x,y)}{c_0} \quad (151)$$

berechnen und daraus mittels einer Tabelle des Gaußschen Fehlerintegrals das Argument

$$\frac{y}{2\sqrt{D_T \cdot x/u_a}} \quad (152)$$

bestimmen. Trägt man für jeden Punkt P (x,y)

$$\frac{y}{2\sqrt{D_T \cdot x/u_a}} \quad \text{über} \quad \frac{y}{2 \cdot \sqrt{x/u_a}} \quad (153)$$

auf, so erhält man als Steigung m der Ausgleichsgerade

$$D_T = 1/ m^2 \quad (154)$$

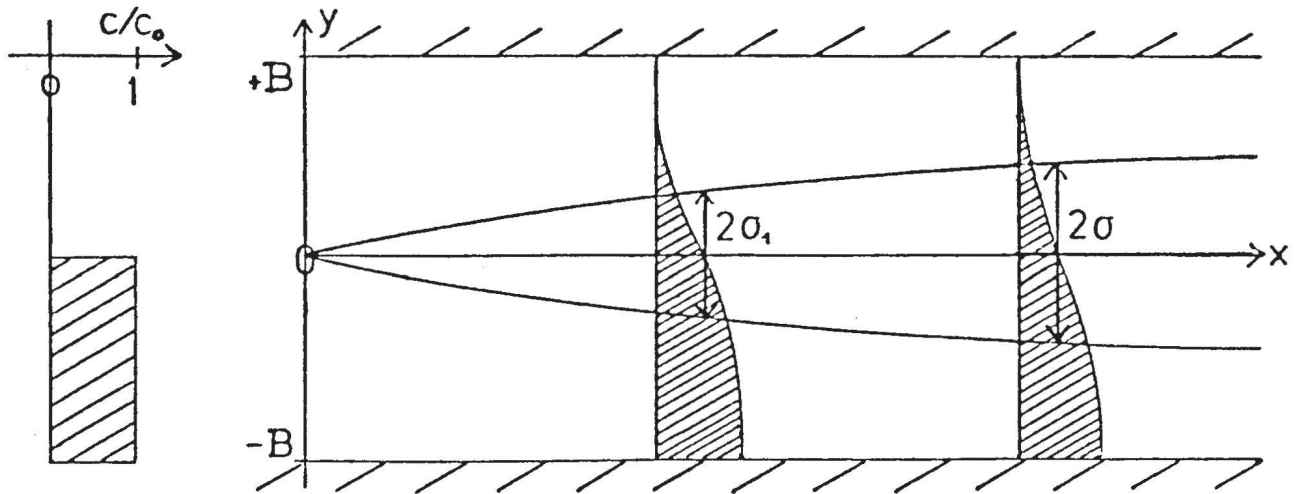


Bild 14: Transversale Dispersion in einer eindimensionalen Strömung

6.3 Modellkonzeption und Meßverfahren

Ein typischer Modellaufbau zur Untersuchung von Transportvorgängen in porösen Medien ist in Bild 9 dargestellt. Ein im Vergleich zu seinem Durchmesser langer Plexiglaszylinder beherbergt zwischen zwei Vorkammern das poröse Medium, dessen mittlerer Korndurchmesser höchstens etwa $1/30$ des Säulendurchmessers sein darf, wenn man den Wandeinfluß (erhöhte Permeabilität) in vertretbaren Grenzen halten will (Rose/Passioura 1970). Die Vorkammern sind vom porösen Medium durch Lochbleche und feinmaschige Drahtnetze getrennt, um das Eindringen von Sand o.ä. in die Vorkammern zu verhindern. Die Steuerung des Durchflusses erfolgt durch die beiden Überlaufgefäße. Weitere Einzelheiten des Versuchsaufbaus und der Vorbereitung wie z.B. Probleme des Einbaus des porösen Mediums, der Entlüftung des Wassers oder der "Einfahrzeit" des Modells sollen hier nicht erörtert werden; sie werden z.B. in Arbeiten von Bear (1961), Harleman/Rumer (1963), Bertsch (1970), Tyagi (1971) und Klotz (1975) beschrieben.

Meßverfahren: Die angewandten Meßverfahren zur Bestimmung der Konzentration sind in erster Linie abhängig vom verwendeten Tracer.

Ein nahezu idealer und daher viel verwendeter Tracer ist NaCl-Lösung (Kochsalz). Hierbei kann für Konzentrationen c_i des Tracers mit

$$c_i \leq 10^{-1} \text{ mol/l} \quad (155)$$

die konzentrationsabhängige elektrische Leitfähigkeit der Lösung bestimmt werden. Dazu werden meist Leitfähigkeitsmeßsonden direkt in das poröse Medium eingebaut (de Josselin de Jong 1958; Bear 1961; Rumer 1962; Harleman/Rumer 1963; Bruch 1970; Klotz 1973).

Neben den in-situ Messungen mit NaCl wurden Versuche durchgeführt, bei denen im Auslauf Proben entnommen wurden, die man anschließend chemisch analysierte. Biggar/Nielsen (1960) verwendeten eine 0,1 n- CaCl_2 -Lösung als Tracer und bestimmten die Cl^- -Konzentration im Ausfluß durch Titration mit AgNO_3 -Lösung. Ähnlich verfuhr Bertsch (1970), der mit 0,87n- SrCl_2 -Lösung arbeitete und Sr^{++} durch Titration mit Titriplex III - Lösung und Cl^- mit AgNO quantitativ bestimmte.

Ein weiteres Verfahren stellt die Lichtabsorptionsmessung in Tracerlösungen dar, wie sie Bear (1961) und Klotz (1973) anwandten. Hierbei wird die Abhängigkeit des Absorptionsgrades von der Tracerkonzentration im Ausfluß zur Messung des zeitlichen Konzentrationsverlaufes benutzt. Bei radioaktiven Tracern wie z.B. $\text{NH}_4^{82}\text{Br}$ oder Na^{131}J werden kollimierte Strahlungsdetektoren verwendet (Klotz 1973, 1975), die die beim radioaktiven Zerfall ausgestrahlten Quanten zählen. Da die Zahl der zerfallenden Atome proportional zur gerade vorhandenen Anzahl der Atome ist, läßt sich auf diese Weise der zeitliche Konzentrationsverlauf an einem festen Ort bestimmen.

Bei allen Tracern muß darauf geachtet werden, daß die Anfangskonzentrationen möglichst gering gewählt werden, damit der Konzentrationseinfluß auf die Dichte, die Zähigkeit und auf den molekularen Diffusionskoeffizienten (bei kleiner Geschwindigkeit) vernachlässigt werden können.

6.4 Zusammenfassung und Vergleich der Ergebnisse aus Labormessungen

6.4.1 Dominierende Einflußgrößen

Über die in Bild 7 und 8 dargestellten Ergebnisse hinaus sind noch weitere Modellexperimente durchgeführt worden, um die Abhängigkeiten der Dispersionskoeffizienten von bisher nicht berücksichtigten Parametern zu klären.

Einen umfassenden Überblick geben Klotz (1973, 1975) für den longitudinalen Dispersionskoeffizienten D_L sowie List/Brooks (1967) für den lateralen Dispersionskoeffizienten D_T . Daneben analysiert Tyagi (1971) eine Vielzahl von Experimenten und stellt $(D_{L,T}/\nu)$ als Funktion der Reynolds- und Pecletzahl dar. Wie schon zuvor dargelegt, leiden diese Darstellungen an einer nicht gerechtfertigten Einbeziehung der Viskositätsabhängigkeit der Dispersionskoeffizienten, die nie gemessen wurde.

Eine ausführliche Literaturübersicht mit Aufzählung der experimentellen Ergebnisse gibt Bertsch (1978) für D_L und D_T . Die Brauchbarkeit der dort dargestellten Ergebnisse wird dadurch stark eingeschränkt, daß nur die Abhängigkeit von D_L und D_T von der Fließgeschwindigkeit aufgetragen oder mit einer Näherungsformel beschrieben wird. Dadurch wird bei konstanter Geschwindigkeit eine Streuung der Dispersionskoeffizienten von mitunter mehr als zwei Zehnerpotenzen vorgetäuscht. Im Vergleich zwischen Bild 15 und 16 werden die Nachteile einer Darstellung des longitudinalen Dispersionskoeffizienten nur als Funktion der Geschwindigkeit deutlich. Beide Bilder basieren auf Experimenten von Bertsch (1970) zur Bestimmung des longitudinalen Dispersionskoeffizienten D_L , die mit homogenen Sanden verschiedener Körnungen durchgeführt wurden. In Bild 15 ist D_L nur in Abhängigkeit von der Filtergeschwindigkeit v_f dargestellt. Hier gibt es häufig bei gleicher Geschwindigkeit deutlich verschiedene Dispersionskoeffizienten, d.h. eine eindeutige und umkehrbare Zuordnung zwischen Dispersionskoeffizient und Geschwindigkeit existiert nicht. Berücksichtigt man hingegen in der Darstellung auch die Abhängigkeit des Dispersionskoeffizienten vom mittleren Korndurchmesser d_{50} durch die in Bild 16 gezeigte Auftragungsweise, so nimmt einerseits die Streuung der Ergebnisse stark ab, andererseits ergibt sich ein eindeutiger Zusammenhang zwischen D_L und $(v_f \cdot d_{50})$. Dadurch kann man z.B. im Gegensatz zu Bild 15 aus Bild 16 bei gegebenen d_{50} und v_f einen guten Schätzwert für D_L

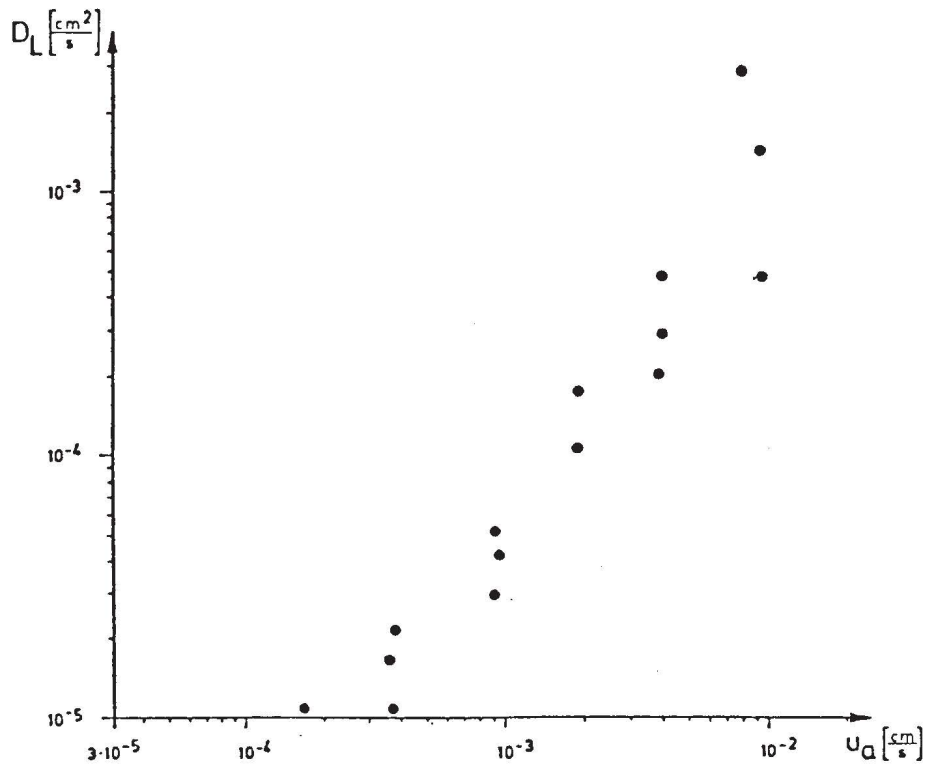


Bild 15: Dispersionskoeffizient D_L in Abhängigkeit von der Abstandsgeschwindigkeit

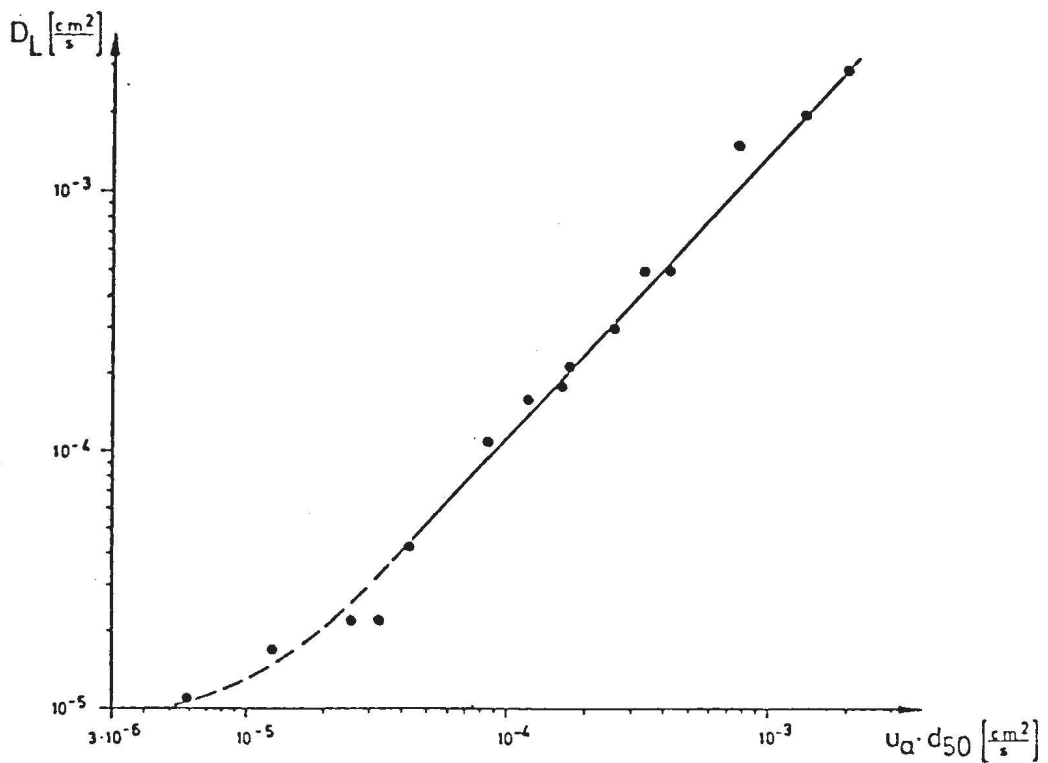


Bild 16: Dispersionskoeffizient D_L in Abhängigkeit von $(u_a \cdot d_{50})$

ermitteln. Wenig sinnvoll erscheint auch die Festlegung einer oberen Grenze für praktisch relevante Geschwindigkeiten ($v_f \approx 2 \text{ mm/s}$), weil dadurch ein großer Teil der Laborversuche als unbrauchbar verworfen wird, die zwar bei höheren Geschwindigkeiten, aber auch bei kleineren Korndurchmessern durchgeführt wurden und deshalb trotz der hohen Geschwindigkeiten durchaus in dem für Grundwasserströmungen typischen Pecletzahlen-Bereich liegen. Einer Korrektur bedarf auch die aus einer Ausgleichsgerade für kleine Geschwindigkeiten gewonnene Geschwindigkeitsabhängigkeit des molekularen Diffusionskoeffizienten, da sie keineswegs der physikalischen Realität entspricht.

6.4.2 Einfluß weiterer Parameter

Klotz (1973, 1975) fand aus etwa 1500 Laborexperimenten folgende qualitative Abhängigkeiten des longitudinalen Dispersionskoeffizienten D_L und des molekularen Diffusionskoeffizienten D_m von Stoffeigenschaften des porösen Mediums, des Fluids und des Tracers sowie von Strömungsparametern. Die Abhängigkeiten für D_T entsprechen denen von D_L qualitativ; deshalb wird im folgenden nur D_L betrachtet.

Tracer: Der molekulare Diffusionskoeffizient D_m hängt sowohl vom verwendeten Tracer als auch von dessen Konzentration ab. Mit steigender Konzentration wächst D_m leicht an.

Geschwindigkeit: D_L wächst mit zunehmender Abstandsgeschwindigkeit v_a und ist im Bereich $Pe > 5$ und $Re < 1$ in guter Näherung darstellbar als $D_L = a_L \cdot v_a$.

Temperatur: D_L und D_m wachsen mit zunehmender Temperatur des Grundwassers, d.h. abnehmender Viskosität, an.

Porosität: Mit abnehmender Porosität, d.h. zunehmender Verdichtung, wachsen sowohl D_L als auch D_m . (Diese Aussage steht im Widerspruch zu Messungen von Hoffmann (1969).)

Korndurchmesser: D_m und D_L nehmen mit wachsendem mittlerem Korndurchmesser zu.

Kornverteilung: D_m und D_L sind bei Vorhandensein von Über- oder Unterkorn größer als für echte Einkorn-Medien.

Ungleichförmigkeit: D_m und D_L wachsen bei zunehmendem Ungleichförmigkeitsgrad.

Kornform: D_L und D_m nehmen um so mehr zu, je mehr die Kornform von der einer Kugel abweicht (Kugelförmig → linsenförmig → walzenförmig).

Rundungsgrad: Mit abnehmendem Rundungsgrad (vollkommen rund → splittrig) nehmen D_m und D_L zu.

k_f -Wert: Die Frage, ob ein Zusammenhang zwischen dem Durchlässigkeitsbeiwert k_f und dem Dispersionskoeffizienten D_L besteht, läßt sich nicht eindeutig beantworten, da die Abhängigkeiten teils gleichläufig, meist aber gegenläufig sind.

7. BESTIMMUNG VON DISPERSIONSKOEFFIZIENTEN FÜR AUSBREITUNGSVORGÄNGE IN DER NATUR

7.1 Übertragbarkeit von Modellmessungen auf Naturverhältnisse

Angesichts der großen Verweilzeit von Wasserinhaltsstoffen im Grundwasser und der geringen Fließgeschwindigkeiten stellt die Untersuchung von Ausbreitungsvorgängen in der Natur eine mitunter langwierige und schwierige Aufgabe dar. Es wäre daher vorteilhaft, wenn man in einem verkleinerten Labormodell des Untersuchungsgebiets die Ausbreitungsvorgänge untersuchen könnte. Die Ähnlichkeitsforderungen, die erfüllt werden müssen, um die Übertragbarkeit von Modellmessungen auf Naturverhältnisse zu gewährleisten, sind vielfältig und können nur in wenigen Spezialfällen erfüllt werden.

Neben Heller (1963) befaßt sich vor allem Bachmat (1967) mit diesen Fragestellungen. Aus einer Reihe von Ähnlichkeitsforderungen leitet er für bestimmte, die Grundwasserströmung und Transportvorgänge charakterisierende Größen Maßstabsfaktoren als Verhältnis einer bestimmten Größe im Modell zu der entsprechenden Größe in der Natur ab. Neben der geometrischen und kinematischen Ähnlichkeit müssen auch die Verhältnisse der Kräfte in Modell und Natur gleich sein, die die Strömung bestimmen. Aus diesen Ähnlichkeitsforderungen lassen sich strömungsmechanische Kennzahlen ableiten, z.B. eine makroskopische Reynoldszahl

$$Re^* = \frac{V_a \cdot k_o / a_{L,T}}{n^2 \cdot \gamma} \quad (156)$$

Neben den physiko-chemischen Größen muß vor allem der Dispersionsmechanismus den Ähnlichkeitsforderungen genügen. Das ist dann der Fall, wenn die Pecletzahl

$$Pe = \frac{V_a \cdot a_{L,T}}{D_o} \quad (157)$$

in einander entsprechenden Punkten von Modell (m) und Natur (n) den gleichen Wert hat, d.h. es muß $(Pe)_m = (Pe)_n$ sein oder in der im folgenden verwendeten Schreibweise

$$(Pe)_r = \frac{(Pe)_m}{(Pe)_n} = 1 \quad (158)$$

Bei genauer Betrachtung der Ähnlichkeitskriterien stellen sich große Schwierigkeiten ein, wenn man gleichzeitig alle Kriterien erfüllen will. Es zeigt sich z.B., daß man Dispersionseffekte, die in einem bestimmten Bereich eines Grundwasserleiters auftreten, nicht in einem Modell simulieren kann, daß das gleiche Medium und das gleiche Fluid enthält.

Aus den Bedingungen

$$(Re)_r = 1 \quad \text{und} \quad (Pe)_r = 1 \quad (159)$$

und der vereinfachenden Annahme

$$(D_0)_r = 1 \quad (160)$$

folgt für einen gewählten Längenmaßstab

$$L_r = 10^{-s} \quad , \quad (s \geq 1) \quad (161)$$

daß das erforderliche Verhältnis der kinematischen Zähigkeiten ν_r in der Größenordnung

$$\nu_r \approx 10^{-s-1} \quad (162)$$

sein muß, d.h. ν_m darf höchstens 1 % des Wertes für Grundwasser haben. Das Problem ist dann, eine Flüssigkeit zu finden, die eine wesentlich geringere Zähigkeit η aufweist als Wasser (und möglichst größeres ρ), ein schlechter elektrischer Leiter ist, gleichzeitig aber in der Lage sein muß,

einen Elektrolyten aufzulösen (falls Konzentrationen aus Leitfähigkeitsmessungen ermittelt werden sollen) bei Konzentrationen c , bei denen $\rho(c)$ und $\eta(c)$ lineare Funktionen von c sind.

Einige der oben aufgeführten Kriterien können unter bestimmten Voraussetzungen vernachlässigt werden. Für Reynoldszahlen sehr viel kleiner als Eins entfällt z.B. die Bedingung $((Re)_r = 1)$, desgleichen muß $((Pe)_r = 1)$ nicht erfüllt sein, wenn die Pecletzahl wesentlich größer als Eins ist. Bei einem idealen Tracer reduzieren sich die Ähnlichkeitsforderungen auf vier Bedingungen

$$\left(\frac{L_1}{L_2}\right) = 1 \quad (163)$$

$$\frac{v_r \cdot t_r}{X_r} = 1 \quad (164)$$

$$\frac{t_r \cdot (k_0)_r \cdot h_r}{n_r \cdot X_r^2} = 1 \quad (165)$$

$$(D_0)_r = \frac{X_r^2}{t_r} \quad (166)$$

Auch hier können nicht alle Forderungen gleichzeitig erfüllt werden.

Das größte Problem stellt die Erfüllung der Ähnlichkeitsforderungen für die Bodenkenngrößen k_0 und n dar, da sich deren Werte stark mit der Absolutlänge ändern, d.h. die Bodenkenngrößen eines natürlichen Aquifers weisen großräumige Inhomogenitäten auf, die im Modell nicht simuliert werden können. Auf die Auswirkungen dieser Inhomogenitäten (sog. Maßstabseffekt) wird in Kapitel 8.2 näher eingegangen.

7.2. Bestimmung von Dispersionskoeffizienten in der Natur

Bei praktischen Problemen der Schadstoffausbreitung im Grundwasser spielt die Bestimmung der Dispersionskoeffizienten

eine zentrale Rolle, da z.B. nur bei hinreichend genauer Kenntnis der Dispersionskoeffizienten Prognoserechnungen über die weitere Ausbreitung eines Schadstoffes möglich sind. Im Labor lassen sich zwar bei einfachen Rand- und Anfangsbedingungen Dispersionskoeffizienten experimentell bestimmen, jedoch ist eine Übertragung dieser Koeffizienten auf Naturverhältnisse aus den in 7.1 genannten Gründen nicht möglich.

Zur Ermittlung der Dispersionskoeffizienten ist man daher auf Naturmessungen der Konzentrationsverteilung eines Wasserinhaltsstoffes angewiesen, aus der auf die Dispersionskoeffizienten rückgeschlossen werden kann, wie in Bild 17 prinzipiell dargestellt.

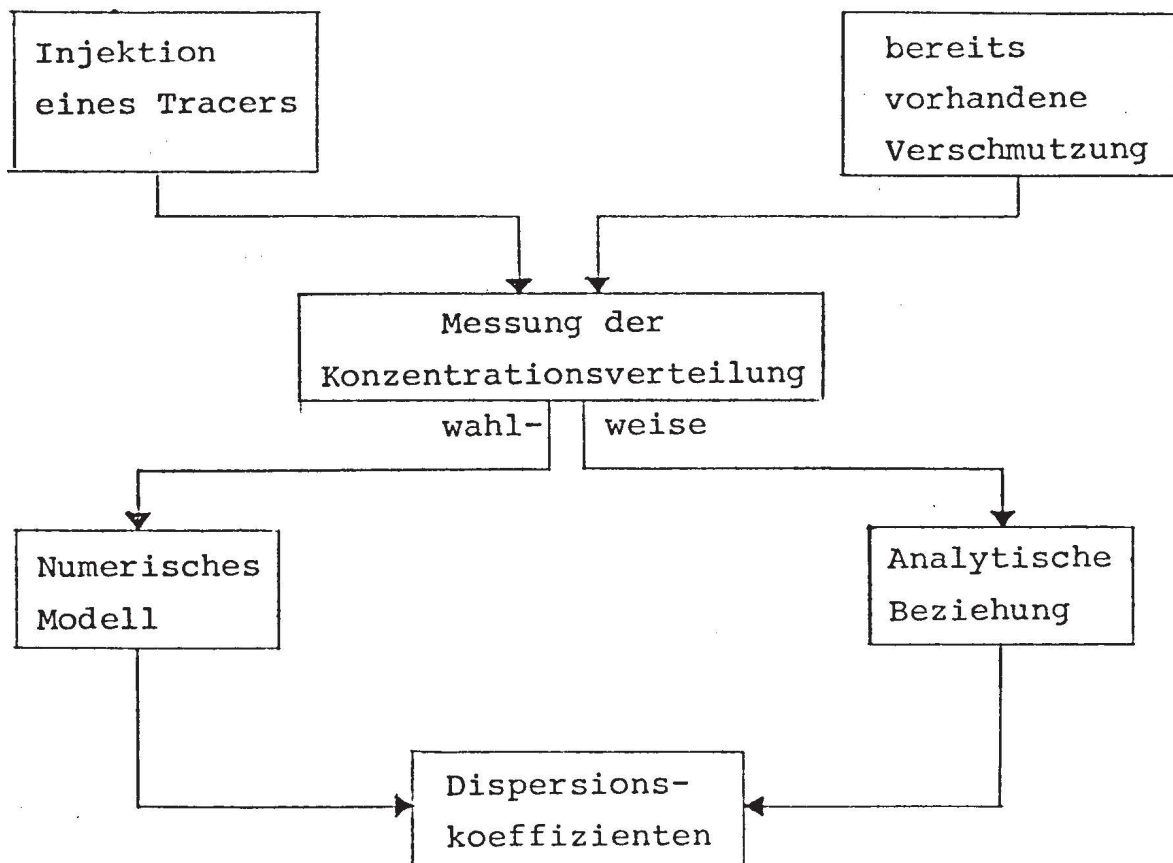


Bild 17: Experimentelle Bestimmung von Dispersionskoeffizienten (nach Fried 1975)

Fried (1975) gibt einen Überblick über die gebräuchlichsten Methoden zur Bestimmung des longitudinalen Dispersionskoeffizienten D_L aus Naturmessungen. Dabei werden je nach mittlerer Fließlänge l verschiedene Bereiche definiert, in denen mit diversen Techniken gearbeitet wird:

Nahbereich (I)	$l \lesssim 4 \text{ m}$
Bereich (II)	$4 \text{ m} \lesssim l \lesssim 20 \text{ m}$
Bereich (III)	$20 \text{ m} \lesssim l \lesssim 100 \text{ m}$
Fernbereich (IV)	$l \gtrsim 100 \text{ m}$

Die angegebenen Zahlenwerte geben natürlich bestenfalls die Größenordnungen an, innerhalb derer ein bestimmtes Verfahren sinnvoll ist. Die Übergänge sind fließend.

Nahbereich I: Hier wird die sog. Einbrunnen-Pulstechnik angewandt. Dazu wird in einen über die ganze Mächtigkeit verfilterten Brunnen ein radioaktiver Tracer momentan injiziert. Als Tracer kommen z.B. Brom (^{82}Br), Jod (^{131}J) oder Chrom (^{57}Cr) zur Anwendung, weil sie eine geringe Halbwertszeit aufweisen (1,5 bis 30 Tage), sehr schwach radioaktiv und in sehr geringer Konzentration gut nachweisbar sind. Mit einem in den Brunnen eingebrachten Szintillationszähler kann die Verteilung der Konzentration über der Tiefe zu einem festen Zeitpunkt oder die zeitliche Konzentrationsverteilung in einer bestimmten Tiefe bestimmt werden. Aus letzterer kann man D_L berechnen (Fried, 1971), aus ersterer erhält man die Permeabilitätsverteilung. Die Meßapparatur kann nur Impulse zählen, die von Atomen innerhalb eines annähernd kugelförmigen Bereiches um die Sonde herrühren, dessen Größe von der Porosität und Zusammensetzung der einzelnen Schichten abhängt. Die gemessene Impulsrate ist daher nur eine integrale Größe über ein bestimmtes Meßvolumen und nur dann für eine Schicht repräsentativ, wenn das Meßvolumen innerhalb der Schicht bleibt.

Bereich II: In diesem Bereich wendet man neben Einbrunnen-Methoden auch sog. Mehrbrunnen-Methoden an (Bild 18): In einen vollkommenen Injektionsbrunnen wird ein Tracer momentan eingegeben und dessen zeitliche Konzentrationsverteilung in mehreren auf konzentrischen Kreisen um den Infiltrationsbrunnen liegenden Beobachtungsbrunnen aufgezeichnet. Wegen der größeren räumlichen Ausdehnung kann hier (^{82}Br) wegen seiner kurzen Halbwertszeit (36 Stunden) nicht mehr verwendet werden, sondern nur noch (^{131}J) oder (^{57}Cr). Aus der pulsförmigen Tracerzugabe und der stark vereinfachten Annahme, daß sich die Filtergeschwindigkeit im Bereich bis zu 6 - 12 m im Umkreis um den Brunnen nicht ändert und in diesem Bereich durch einen einzigen Vektor dargestellt werden kann, wird aus der Lösung der eindimensionalen Dispersionsgleichung D_L bestimmt. Je nachdem, wie gut diese Näherung mit der Natur übereinstimmt, schwankt die Vertrauenswürdigkeit eines so bestimmten Dispersionskoeffizienten.

Bereich III: Im Bereich zwischen 20 und 100 m können Mehrbrunnen-Methoden nur noch beschränkt angewandt werden. Einerseits kann die Strömung vom Injektionsbrunnen zu einem Beobachtungsbrunnen nicht mehr näherungsweise eindimensional betrachtet werden, andererseits sind die Kosten für die große Anzahl von Beobachtungsbrunnen sehr hoch. Daher verwendet man üblicherweise eine geoelektrische Methode: In einen Injektionsbrunnen wird Kochsalz (NaCl) zugegeben und die Veränderung des Widerstands oder des elektrischen Potentials als Maß für die Salzkonzentration des Bodens zwischen Brunnen und einer Reihe von Meßsonden bestimmt. Die Meßsonden werden nur in geringe Tiefen eingebracht (einige dm) und stören daher die Grundwasserströmung nicht. Je nach Randbedingungen werden verschiedene Varianten der geoelektrischen Meßmethoden angewandt. Die Auswertung basiert auf einer Anzahl von vereinfachenden Annahmen; z.B. wird angenommen, daß die geologischen und hydrologischen Parameter stromab des Brunnens die gleichen sind, wie in der Umgebung des Brunnens. Außerhalb des Nahbereiches des Brun-

nens wird eine eindimensionale Strömung angenommen. Die eindimensionale Dispersionsgleichung wird angewandt, um unter den gegebenen Randbedingungen durch Variation von D_L und D_T eine möglichst gute Übereinstimmung zwischen Experiment und theoretischer Lösung zu erzielen.

Bereich IV (Fernbereich): Bei großräumigen Verschmutzungsproblemen tritt der Einfluß der Dispersion gegenüber dem konvektiven Transport in großem Abstand von einer punktförmigen Schadstoffeinleitung zurück. In diesem Fall wird meistens nur die Abstandsgeschwindigkeit aus Konzentrationsmessungen in einer Reihe von Beobachtungsbrunnen bestimmt. Man kann allgemein feststellen, daß die Bestimmung von Dispersionskoeffizienten in der Natur wegen der großen Vereinfachungen, die getroffen werden müssen, nur einen groben Schätzwert liefern kann. In der Praxis reichen diese groben Werte aber meist aus, um z.B. den Verschmutzungsbereich einer Schadstoffeinleitung (undichtes Giftfaß etc.) abzuschätzen.

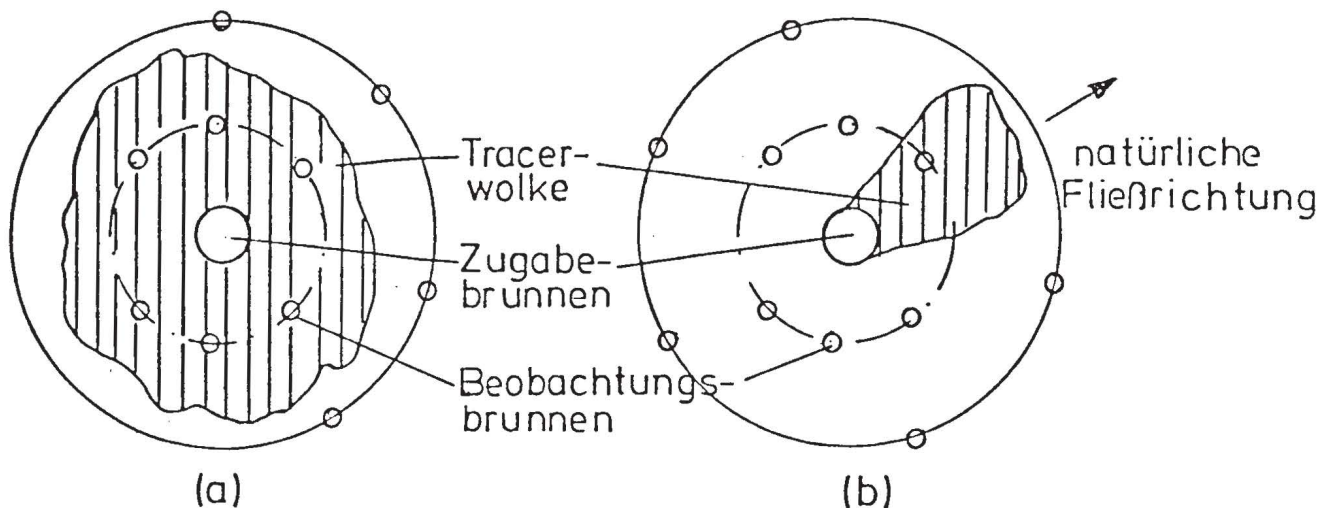


Bild 18: Mehrbrunnenmethode a) Einleitung mit großer Piezometerhöhendifferenz b) Einleitung ohne Störung des Strömungsfeldes (nach Fried, 1975)

8. BESTIMMUNG VON DISPERSIONSKOEFFIZIENTEN IN INHOMOGENEN UND ANISOTROPEN PORÖSEN MEDIEN

8.1 Experimentelle Untersuchungen

8.1.1 Inhomogene Medien

Im Verhältnis zur Anzahl der Laborversuche in homogenen Medien gibt es nur wenige experimentelle Untersuchungen zum Einfluß der Inhomogenität des Mediums. Dabei überwiegen Experimente in Medien, die eine Inhomogenität der Porosität aufweisen. Fälschlicherweise werden mitunter auch Experimente mit verschiedenen Medien und daher auch verschiedener Porosität als Untersuchungen über den Einfluß von Inhomogenitäten interpretiert (Bertsch 1979).

Erste Experimente von Shamir/Harleman (1967 b) und Bruch (1970) lieferten Werte von D_L für geschichtete poröse Medien, die je Schicht einen Wert der Porosität n aufweisen. Inwieweit die Ergebnisse Rückschlüsse auf den Einfluß von n zulassen ist fraglich, weil im Experiment nur der kombinierte Effekt aus Variation der mittleren Korngröße, des Unförmigkeitsgrades und der Porosität bestimmt wird.

8.1.2 Anisotrope Medien

Über longitudinale Dispersion in anisotropen und inhomogenen Medien liegen Versuchsergebnisse von Greenkorn/Kessler (1969) sowie von Greenkorn (1970) vor. Ein Vergleich der aus Laborexperimenten und Naturmessungen bestimmten Werte von D_L zeigt, daß die Dispersionskoeffizienten D_L bzw. Dispersivitäten a_L (im Bereich mit $D_L = a_L \cdot v$) in der Natur um Zehnerpotenzen höher sein können als im Modell, selbst bei Verwendung des gleichen natürlichen porösen Mediums im Labor. Bei Laborversuchen mit homogenen Medien liegt a_L

je nach Korngröße in der Größenordnung von 0,1 bis 1 mm, während bei Grundwassermarkierungsversuchen folgende Größenordnungen von a_L gefunden wurden (Lenda/Zuber 1970):

Sand:	$1 \text{ cm} < a_L < 50 \text{ cm}$
Kies:	$20 \text{ cm} < a_L < 100 \text{ cm}$
Grobkies:	$1 \text{ m} < a_L < 10 \text{ m}$
klüftiges Gestein	$5 \text{ m} < a_L < 100 \text{ m}$

Im ungünstigsten Fall liegen somit vier Zehnerpotenzen zwischen D_L -Werten aus Laborversuchen und denen aus Naturmessungen, die nicht allein mit den schon beschriebenen Ungenauigkeiten der Naturmessungen erklärt werden können. Selbst wenn man in einem Ausschnitt eines natürlichen porösen Mediums im Laborexperiment D_L bestimmt, ergibt sich ein bis zu zwei Zehnerpotenzen kleinerer Wert als bei Naturmessungen im betreffenden Gebiet. Diese Phänomene sind **unter** dem Namen "Maßstabeffekt" bekannt und werden zur Zeit in vielfältiger Weise untersucht (s. Kapitel 8.2.2)

8.2 Theoretische Untersuchungen

8.2.1 Einfluß stetig veränderlicher ortsabhängiger Porosität

Der Einfluß geringer Porositätsänderungen wird von Dagan (1967) anhand eines theoretischen Modells beschrieben. Eine jüngere theoretische Arbeit von Lin (1977) zeigt die Auswirkungen einer ortsabhängigen Porosität in einem eindimensionalen Ausbreitungsvorgang. Hierbei wird angenommen, daß zwischen zwei festen Punkten mit bekannter effektiver Porosität n_e eine beliebige, aber stetige Veränderung von n_e erfolgt, die sich durch eine eindeutige Zuordnung von x und $n_e(x)$ auszeichnet. Die Ortsabhängigkeit von n_e bewirkt eine Ortsabhängigkeit der Abstandsgeschwindigkeit v_a und des longitudinalen Dispersionskoeffizienten D_L . Die Randbedingungen sind so gewählt, daß der Durchfluß Q kon-

stant bleibt. Die eindimensionale Dispersionsgleichung lautet in diesem Fall:

$$\frac{\partial c}{\partial t} = \mathcal{D}_L(x) \frac{\partial^2 c}{\partial x^2} - V_a(x) \frac{\partial c}{\partial x} \quad (167)$$

oder unter Berücksichtigung von

$$V_a(x) = \frac{Q}{A} \cdot \frac{1}{n_e(x)} \quad (168)$$

$$\frac{\partial c}{\partial t} = \frac{Q}{A \cdot n_e(x)} \cdot \left[a_L \frac{\partial^2 c}{\partial x^2} - \frac{\partial c}{\partial x} \right] \quad (169)$$

Unter den vorgegebenen Randbedingungen (kontinuierliche Zugabe) ist diese Differentialgleichung selbst bei bekannter Porosität ($n_e(x)$) entweder gar nicht oder nur mit großem Aufwand geschlossen zu lösen. Daher wird eine numerische Lösungsmethode (Differenzenverfahren) angewandt. Die berechneten Konzentrationsverteilungen werden verglichen mit der analytischen Lösung, die sich bei der mittleren Porosität in einem homogenen Medium ergibt. Dabei zeigt es sich, daß bei linearem bzw. leicht gekrümmten Verlauf der Porositätsfunktion die berechnete Konzentrationsverteilung weniger als 15 % von der Verteilung abweicht, die sich im homogenen Medium mit mittlerer Porosität ergibt.

8.2.2 Einfluß zufällig verteilter Kenngrößen des Grundwasserleiters

Aus einer Vielzahl experimenteller Untersuchungen ist bekannt, daß die Porosität und andere Aquifer - Kenngrößen (k_f , d) eine örtliche Verteilung aufweisen. Gelhar (1977) weist darauf hin, daß selbst in kleinen Aquifervolumina der k_f - Wert bis zu drei Zehnerpotenzen variiert und die Porosität um einige zehn Prozent schwankt. Dadurch ergibt sich eine räumliche Verteilung der Piezometerhöhen und damit

auch der Filtergeschwindigkeiten. Da Dispersionskoeffizienten sowohl von Bodenkenngrößen als auch von der Geschwindigkeit abhängen, bewirken die zuvor genannten Effekte eine starke räumliche Variation der Dispersionskoeffizienten. Zur quantitativen Erfassung dieser räumlichen Verteilungen betrachtet Gelhar (1977) zuerst die Einflüsse der k_f - Variationen auf die Piezometerhöhen. Er geht dabei von folgenden Annahmen aus:

- a) Medium und Fluid können als Kontinuum betrachtet werden.
- b) Es besteht eine räumliche Korrelation zwischen den Eigenschaften des Mediums (k_f) und den Piezometerhöhen (h).
- c) Der Logarithmus des k_f - Wertes weist eine Gaußverteilung auf (gute Näherung experimentell ermittelter Daten).

Gelhar betrachtet das k_f - Kontinuum als räumlich stochastische Größe. Während eine einzelne Zufallsgröße durch ihre Wahrscheinlichkeitsdichte beschrieben werden kann, wird ein kontinuierliches Zufallsfeld durch verknüpfte Wahrscheinlichkeitsdichten zwischen allen Feldpunkten beschrieben. Daraus läßt sich eine Kovarianzfunktion bestimmen, die eine Aussage über räumliche Korrelation liefert. Als Ergebnis erhält man eine Beziehung zwischen der Varianz der abhängigen Größe (h) und der Varianz der Eingangsgröße (k_f). Für ein eindimensionales poröses Medium erhält man im stationären Fall unter gespannten Bedingungen mit

$$\frac{d}{dx} \left(k_f(x) \cdot \frac{dh}{dx} \right) = 0 \quad (170)$$

folgende Beziehungen zwischen den Varianzen von h und k_f

$$\sigma_h^2 = I^2 \cdot l^2 \cdot \sigma_{k_f}^2 \quad (171)$$

Hier ist I der mittlere Gradient von h , l stellt eine repräsentative Korrelationslänge dar. Wendet man die gleichen Methoden für ein Medium mit dreidimensionaler Variation von k_f an, so erhält man mittels stochastischer Analyse einen ähnlichen Zusammenhang zwischen (σ_h) und (σ_{k_f}) :

$$\sigma_h^2 = \frac{1}{3} I^2 \cdot \lambda^2 \cdot \sigma_{k_f}^2 \quad (172)$$

I ist der mittlere Gradient der Piezometerhöhen in Hauptströmungsrichtung und ein "integraler" Maßstab, d.h. eine mittlere Korrelationslänge der k_f -Werte. Um die ein- und dreidimensionalen Lösungen vergleichen zu können, sucht man ein Verhältnis (l/λ) bei dem die Kovarianzfunktion in beiden Fällen gleich sind. Das ist bei $(l/\lambda \approx 2,5)$ der Fall. Bei eindimensionaler Variation des k_f -Werts ergibt sich mit (171)

$$\sigma_h^2 = I^2 \cdot l^2 \cdot \sigma_{k_f}^2 \quad (173)$$

und bei dreidimensionaler Verteilung mit (172)

$$\sigma_h^2 = \frac{1}{18,7} I^2 \cdot l^2 \cdot \sigma_{k_f}^2 \quad (174)$$

Bei gleicher Varianz der Verteilung des k_f -Wertes ergibt sich im dreidimensionalen Fall eine Varianz der Piezometerhöhenverteilung, die nur etwa 5 % der entsprechenden Varianz im eindimensionalen Fall ausmacht, d.h. dreidimensionale Verteilungen von k_f in natürlichen porösen Medien haben einen wesentlich geringeren Einfluß auf die Piezometerhöhen - Verteilung als eindimensionale Variation von k_f . Resultate aus eindimensionalen Untersuchungen dürfen daher nicht zur Vorhersage von räumlichen Veränderungen irgendwelcher Strömungseigenschaften verwendet werden (z.B. $h, v, D_{L,T}$).

Aufbauend auf diesen Ergebnissen untersucht Gelhar (1978), von welchen statistischen Eigenschaften eines porösen Mediums der longitudinale Dispersionskoeffizient D_L und der transversale Dispersionskoeffizient D_T in einer eindimensionalen Strömung unter gespannten Bedingungen abhängen.

Erste Ansätze in diese Richtung finden sich schon bei Mercado (1967), der den Einfluß eines geschichteten Aquifers (je Schicht ein k_f -Wert) auf das rein konvektive Wandern einer Tracerfront untersucht und folgenden Zusammenhang zwischen der Standardabweichung (σ_x) der Frontposition und der Standardabweichung (σ_{k_f}) der diskreten k_f -Verteilung angibt:

$$\sigma_x = \left(\sigma_{k_f} / \bar{k}_f \right) \cdot \bar{u}_a \cdot t \quad (175)$$

\bar{k}_f bzw. \bar{u}_a sind die Mittelwerte von k_f bzw. u_a . Da man einen Dispersionskoeffizienten D_L definieren kann als zeitliche Änderung der Varianz (σ_x^2), erhält man aus Gleichung (175) mit

$$\bar{x} = \bar{u}_a \cdot t \quad (176)$$

$$D_L = \frac{1}{2} \cdot \frac{d}{dt} (\sigma_x^2) = \left(\frac{\sigma_{k_f}}{\bar{k}_f} \right)^2 \cdot \bar{x} \cdot \bar{u}_a \quad (177)$$

Da zwischen D_L und der Dispersität a_L in einem weiten Pecletzahlbereich

$$D_L = a_L \cdot \bar{u}_a \quad (178)$$

ist, ergibt sich hier

$$a_L = \left(\sigma_{k_f} / \bar{k}_f \right)^2 \cdot \bar{x} \quad (179)$$

d.h. in heterogenen natürlichen Medien ist die Dispersivität a_L und damit auch D_L abhängig vom a soluten zurückgelegten Weg. Das ist ein wichtiger Unterschied zu homogenen Medien, für die a_L unabhängig von der Fließlänge ist.

Im Gegensatz zu Mercados diskreter Verteilung stellt Gelhar (1978) alle den Transport beeinflussenden Größen als eine Summe aus dem Mittelwert der entsprechenden Verteilung und der Abweichung von diesem Mittelwert dar. In der in Bild 19 dargestellten Konfiguration variiert k_f nur in z-Richtung. Bei konstantem hydraulischem Gradienten I und konstanter Porosität n_e wird die Abstandsgeschwindigkeit u_a aus dem Darcygesetz bestimmt.

$$u_a = \overline{u_a} + \tilde{u}_a = (\overline{k_f} + \tilde{k}_f) I / n_e \quad (180)$$

örtlicher Wert = Mittelwert + Abweichung vom Mittelwert

Entsprechend lassen sich auch die anderen Größen zerlegen. Die Dispersionsgleichung lautet in diesem Fall

$$\frac{\partial c}{\partial t} + \frac{\partial}{\partial x} (u_a \cdot c) = \frac{\partial}{\partial x} (D_L \cdot \frac{\partial c}{\partial x}) + \frac{\partial}{\partial z} (D_T \cdot \frac{\partial c}{\partial z}) \quad (181)$$

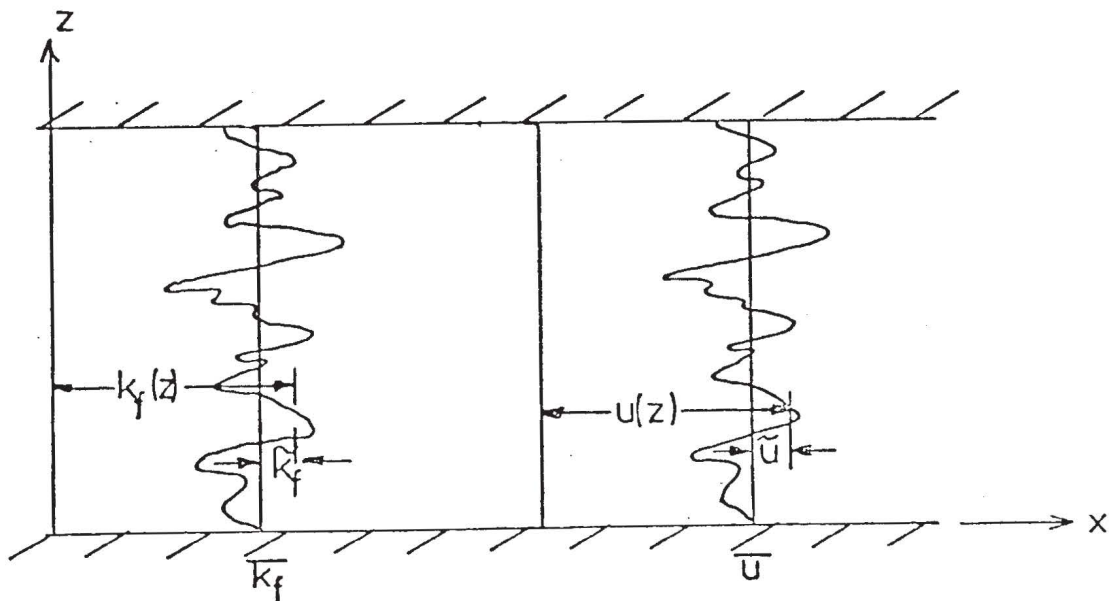


Bild 19: Variation des k_f -Wertes und der Filtergeschwindigkeit über der Tiefe in einem gespannten Grundwasserleiter (nach Gelhar, 1977)

Sie wird mittels ($c = \bar{c} + \tilde{c}$) usw. nach stochastischen Verfahren ausgewertet und führt letztlich auf eine Dispersionsgleichung für die Mittelwerte c, u_a etc. In dieser Gleichung ist eine zeitabhängige Größe $A(t)$ enthalten, die sog. Makrodispersivität.

Für große Zeiten ergibt sich mit

$$\bar{a}_T = \bar{D}_T / \bar{u}_a \quad (182)$$

$$A(t=\infty) = A_\infty = \frac{\sigma_{k_f}^2}{k_f^2} \cdot \frac{1^2}{\bar{a}_T} \quad (183)$$

Die longitudinale Dispersivität hat den Grenzwert

$$(\bar{a}_L)_\infty = \bar{a}_L + A_\infty \approx A_\infty \quad \text{wegen } \bar{a}_L \ll A_\infty \quad (184)$$

Für sehr kleine Zeiten

$$t \ll \frac{1^2}{\bar{u}_a \bar{a}_T} \quad (185)$$

ist

$$A(0) = \bar{u}_a \cdot t \cdot \frac{\sigma_{k_f}^2}{k_f^2} \quad (186)$$

Dieses Resultat ist identisch mit Mercados Ergebnis (179).

Nach großer aber endlicher Zeit

$$t \gg \frac{1^2}{\bar{u}_a \bar{a}_T} \quad (187)$$

ist

$$A(t) = \frac{\sigma_{k_f}^2 \cdot 1^2}{k_f^2 \cdot \bar{a}_T} \left[1 - 2 \cdot \sqrt{\frac{l^2}{\pi \bar{a}_T \cdot x}} + \dots \right] \quad (188)$$

Wegen der Zeitabhängigkeit der Dispersivität ist auch der Dispersionskoeffizient D_L zeitabhängig. Löst man die Dispersionsgleichung unter vorgegebenen Randbedingungen (z.B. δ -Puls-Zugabe), so ergibt sich für kleine Zeiten bzw. Fließwege eine asymmetrische Konzentrationsverteilung, d.h. der dispersive Transport gehorcht in diesem Bereich nicht dem Fickschen Gesetz. Die Asymmetrie verschwindet mit wachsender Zeit; für große Zeiten ergibt sich eine Gauß-Verteilung. Zur Abschätzung der Größenordnung der Makrodispersivität dienen folgende typische Werte:

$$\begin{aligned} \sigma_{k_f} / \bar{k}_f &= 0,5 && \text{(unterer Bereich in natürlichen Böden)} \\ l &= 1 \text{ m} && \text{(typisch für Sandstein)} \\ \bar{a}_T &= 1 \text{ cm} && \text{(typisch für Labormessungen)} \end{aligned}$$

Damit ergibt sich $A_\infty = 25 \text{ m}$, ein Wert in der Größenordnung, die Fried (1975) als äquivalente longitudinale Dispersivität aus Naturmessungen erhielt. Die Fließwege bis zum Erreichen von A sind verhältnismäßig lang:

Nach einem Fließweg

$$L = 10 \cdot A_\infty = 250 \text{ m} \quad (189)$$

ist erst ein Wert

$$A = 0,5 \cdot A_\infty \quad (190)$$

erreicht, nach

$$L = 400 A_\infty = 10 \text{ km} \quad (191)$$

ist

$$A = 0,9 \cdot A_\infty \quad (192)$$

Die Asymmetrie der Konzentrationsverteilung verschwindet dagegen schon nach wenigen Metern.

Der große Einfluß der Heterogenität auf die Dispersivität a_L wird deutlich, wenn man betrachtet, welchen Korndurchmesser d ein homogenes Medium haben müßte, das den gleichen

Wert a_L aufweisen soll. Aus Experimenten von Rumer (1962) und Harleman/Rumer (1963) ergab sich für homogene und isotrope Medien mit annähernd kugelförmigen Korn:

$$0,5 \leq a_L/d \leq 1,5 \quad (193)$$

Um ($a_L = 25 \text{ m}$) zu erzielen, müßte man ein Medium mit Kugeln nehmen, deren Durchmesser größenordnungsmäßig bei 25 m liegen müßte.

Obwohl die dargestellte Methode den bisher besten Weg zur Vorhersage longitudinaler Dispersionskoeffizienten in porösen Medien darstellt, hängt ihre Verwendbarkeit noch stark davon ab, wie gut die statistischen Parameter $\sigma_{k_f}/\overline{k_f}$, l und $\overline{a_T}$ bestimmbar sind.

9. ZUSAMMENFASSUNG

Der vorliegende Bericht befaßt sich mit Fragen des Transports von Wasserinhaltsstoffen im Grundwasser, die wegen der vielerorts vorhandenen oder zu befürchtenden Verunreinigung des Grundwassers immer mehr an Bedeutung gewinnen.

Der erste Teil des Berichts umfaßt die Kapitel 1 bis 4. Hier liegt der Schwerpunkt auf den hydraulischen Aspekten des Transports von löslichen Wasserinhaltsstoffen.

Neben einer Betrachtung des hydraulischen Zeitmaßstabes der Grundwasserverschmutzung müssen die Ausbreitungs- und Transportvorgänge im Grundwasser einer generellen Klassifizierung unterzogen werden, die sich auf die Beschaffenheit und Zusammensetzung der Wasserinhaltsstoffe, auf die Art und Weise, wie sie ins Grundwasser gelangen und auf die verschiedenen Wege, die sie im Grundwasser nehmen, bezieht.

Anhand der Transportgleichung können die einzelnen Transportanteile (Konvektion, Diffusion, Dispersion) beschrieben und durch ein für jede Transportart charakteristisches Zeitmaß miteinander verglichen werden. Das vollständige Gleichungssystem zur Beschreibung des Transports von Wasserinhaltsstoffen kann nur für einfachste Rand- und Anfangsbedingungen geschlossen gelöst werden, ansonsten ist man auf numerische Näherungsverfahren angewiesen.

Den zweiten Teil des Berichtes bilden die Kapitel 5 bis 9. Hier wird vor allem auf die quantitative Beschreibung des dispersiven Transports eingegangen und dabei insbesondere auf die Probleme bei der Bestimmung der Dispersionskoeffizienten.

Im allgemeinen Fall ist zur Beschreibung des dispersiven Transports ein Dispersionstensor nötig, der sich in homo-

genen und isotropen Medien auf zwei skalare Dispersionskoeffizienten reduzieren läßt, nämlich auf einen sog. longitudinalen Dispersionskoeffizienten D_L in Richtung einer (makroskopisch betrachteten) Stromlinie und einen transversalen Dispersionskoeffizienten D_T senkrecht dazu. Aus Experimenten im Labor und aus dimensionsanalytischen Betrachtungen ergab sich, daß sich D_L als Funktion der molekularen Pecletzahl sowie der Schmidt- bzw. Reynoldszahl darstellen läßt, sofern man sekundäre Abhängigkeiten von anderen Parametern nicht in Betracht zieht. D_L und D_T lassen sich für praktische Zwecke in guter Näherung ausdrücken als ein Produkt der Abstandsgeschwindigkeit v_a mit einer nur vom Medium abhängenden sog. Dispersivität a_L bzw. a_T .

Da sich Dispersionskoeffizienten nicht direkt bestimmen lassen, muß man aus Messungen der Konzentrationsverteilung eines Tracers diese Koeffizienten ermitteln. Das ist im Labor bei einfachsten Rand- und Anfangsbedingungen möglich, weil hierfür geschlossene analytische Lösungen der Transportgleichung zur Verfügung stehen. Die meisten Experimente dienten zur Ermittlung von D_L , da die longitudinale Dispersion etwa um eine Zehnerpotenz größer ist als die transversale und daher einen geringeren versuchstechnischen Aufwand erfordert.

Die experimentellen Anordnungen zur Bestimmung von D_L und D_T wurden beschrieben und die Auswerteverfahren für die wichtigsten Methoden der Tracerzugabe (kontinuierlich und δ -Puls-Zugabe) ausführlich dargestellt. In einem Überblick über bisher durchgeführte Messungen wurden auch die Abhängigkeiten von D_L und D_T von sekundären Einflußgrößen (Kornform, Verteilung, Zähigkeit des Fluids etc.) aufgezeigt sowie anschließend Fragen der Übertragbarkeit von Modellexperimenten auf Naturverhältnisse diskutiert. Da diese Übertragbarkeit immense praktische Probleme mit sich bringt, sind zur Bestimmung von D_L oder D_T in einem

natürlichen Grundwasserleiter Naturmessungen nötig. Die experimentellen Methoden zur Ermittlung von D_L wurden kurz angesprochen und kritisch beurteilt.

Den Abschluß des Berichtes bildet eine Darstellung neuerer theoretischer Ansätze zur Erklärung des sog. Maßstabs-effekts. In einer Vielzahl von Experimenten sowohl im Labor als auch in natürlichen Grundwasserleitern war festgestellt worden, daß einerseits die Dispersivitäten $a_{L,T}$ in homogenen Medien bis zu fünf Zehnerpotenzen kleiner sind als in natürlichen Medien, daß andererseits auch die aus einer Bodenprobe eines natürlichen Grundwasserleiters ermittelten Werte von $a_{L,T}$ um ein bis zwei Größenordnungen kleiner sind als die aus einer in-situ-Messung bestimmten Werte. Die beschriebenen theoretischen Ansätze haben durch die stochastische Betrachtung des dispersiven Transports in inhomogenen Medien einen wesentlichen Fortschritt bei der Erklärung des Maßstabs-effekts und bei der Bestimmung der Dispersivitäten natürlicher Grundwasserleiter gebracht.

Während für den longitudinalen dispersiven Transport umfangreiche theoretische und experimentelle Arbeiten zu seiner quantitativen Erfassung und Beschreibung vorliegen, gibt es bei der transversalen Dispersion noch eine Reihe von Fragen, die untersucht werden müssen. Eines dieser Probleme stellt z.B. der Einfluß von Dichteunterschieden auf den resultierenden transversalen Dispersionskoeffizienten dar. Falls die Konzentration eines Wasserinhaltsstoffes bei der Einleitung so groß ist, daß der Dichteunterschied gegenüber dem Grundwasser nicht mehr vernachlässigt werden kann, wird die Querdurchmischung des Wasserinhaltsstoffes über die Tiefe durch den Dichteunterschied verringert. Die theoretische Beschreibung und experimentelle Untersuchung dieser Problemstellung ist Gegenstand eines geplanten Forschungsvorhabens.

10. LITERATURVERZEICHNIS

10.1 Bücher

Bear, J.: "Dynamics of Fluids in Porous Media", American Elsevier, Publishing Co., New York, 1972.

Crank, J.: "The Mathematics of Diffusion", At the Clarendon Press, Oxford, 1956.

Developments in Soil Science 2, "Fundamentals of Transport Phenomena in Porous Media, Elsevier Publishing Co., Amsterdam, 1972.

Fried, J.J.: "Groundwater Pollution", American Elsevier Publishing Co., New York, 1975.

Lumley, J.L., Panofsky, H.A.: "The Structure of Atmospheric Turbulence", John Wiley and Sons, 1964.

Raudkivi, A.J., Callander, R.A.: "Analysis of Groundwater Flow", Edward Arnold, London, 1976.

Scheidegger, A.E.: "The Physics of Flow Through Porous Media", University of Toronto Press, 1974.

de Wiest, R.J.M.: "Flow Through Porous Media", Academic Press, New York, 1969.

10.2 Zeitschriftenaufsätze

Aris, R.: "On the Dispersion of a Solute in a Fluid Flowing Through a Tube", Proc. Royal Soc. of London, Series A, Vol. 235, 1956.

Aris, R.: "The Longitudinal Diffusion Coefficient in Flow Through a Tube with Stagnant Pockets", Chem. Eng. Sci., Vol. 11, 1959.

Bachmat, Y.: "On the Similitude of Dispersion Phenomena in Homogeneous and Isotropic Porous Mediums", Water Research, Vol. 3. No. 4, 1967.

Bachmat, Y., Bear, J.: "The General Equations of Hydrodynamic Dispersion in Homogeneous, Isotropic Porous Mediums", Journal of Geophys. Res. 69, 1964.

Bear, J.: "Scales of Viscous Analog Models for Ground Water Studies", Proc. Amer. Soc. Civil Eng. Hydraulic Div. No. 86, HY2, 1960.

Bear, J.: "Some Experiments in Dispersion", Geophys. Research 66, 1961.

Bear, J.: "Hydrodynamic Dispersion" in de Wiest, R.J.M.: "Flow Through Porous Media", Academic Press, New York and London, 1969.

Bertsch, W.: "Hydrodynamische Dispersion von SrCl_2 -Lösung in Einkornsanden bei gesättigtem Fließen", Deutsche Gewässerkundl. Mitteilungen 14 (5), 1970.

Bertsch, W.: "Hydrodynamische Dispersion von SrCl_2 -Lösung in Einkornsanden bei gesättigtem Fließen", Teil II, Deutsche Gewässerkundl. Mitteilungen 15 (3), 1971.

Bertsch, W.: "Die Koeffizienten der longitudinalen und transversalen hydrodynamischen Dispersion - ein Literaturüberblick", Deutsche Gewässerkundl. Mitteilungen 22 (2), 1978.

Biggar, J.W., Nielsen, D.R.: "Diffusion Effects in Miscible Displacement Occuring in Saturated und Unsaturated Porous Materials", J. Geophys. Res. 65 (9), 1960.

Bredehoeft, J.D., Pinder, G.F.: "Mass Transport in Flowing Groundwater", Water Res. 9 (1), 1973.

Bruch, J.C.: "Two-Dimensional Dispersion Experiments in a Porous Medium", Water Res. 6 (3), 1970.

Bruch, J.C., Street, R.L.: "Two-Dimensional Dispersion", J. Sanit Eng. Div., Amer. Soc. Civil Eng., SA 6, 1967.

Dagan, G.: "Hydrodynamic Dispersion in an Nonhomogeneous Porous Column", J. Geophys. Res. 72 (16), 1967.

Dagan, G.: "Some Aspects of Heat and Mass Transfer in Porous Media", in - Developments in Soil Science 2 - (siehe Bücherliste.)

Danckwerts, P.V.: "Continuous Flow Systems; Distribution of Residence Times", Chem. Eng. Sci. 2, 1953.

De Josselin de Jong, G.: "Longitudinal and Transverse Diffusion in Granular Deposits", Transactions AGU 39 (1), 1958.

Ebach, E.A., White, R.R.: "Mixing of Fluids Flowing Through Beds of Packed Solids", AICHE Journal 4 (2), 1958.

Eldor, M., Dagan, G.: "Solutions of Hydrodynamic Dispersion in Porous Media", Water Res. 8 (5), 1972.

Fried, J.J.: "A Mathematical Model for the Single-Well Pulse Technique", Proc. Symp. Water Resour. Indian Inst. Sci., Bangalore, 1971.

Fried, J.J.: "Dispersionsuntersuchungen in porösen Medien - moderne Trends in der Umweltforschung", gwf-Wasser/Abwasser 117 (4), 1976.

Gelhar, L.W.: "Stochastic Analysis of Macrodispersion in Aquifers", Int. Seminar in Hydrology and Water Resources, Universidad Simón Bolívar, Caracas, 1978.

Gelhar, L.W., Collins, M.A.: "General Analysis of Longitudinal Dispersion in Nonuniform Flow", Water Res. 7(6), 1971.

Gelhar, L.W. et al.: "Stochastic Analysis of Spatial Variability in Subsurface Flows", New Mexico Institute of Mining and Techn., Socorro, N.M., 1977.

Gershon, N.D., Nir, A.: "Effects of Boundary Conditions of Models on Tracer Distribution in Flow Through Porous Media", Water Res. Res. 5 (4), 1969.

Greenkorn, R.A.: "Dispersion in Heterogeneous Nonuniform Anisotropic Porous Media", Water Pollution Control Research Series 16060 DLL, 1970.

Greenkorn, R.A., Kessler, D.P.: "Dispersion in Heterogeneous Uniform Anisotropic Porous Media", Industrial and Engineering Chemistry 61 (9), 1969.

Harleman, D.R.F., Rumer, R.R.: "Longitudinal and Lateral Dispersion in an Isotropic Porous Medium", Fluid Mechanics 16, 1963.

Hassinger, R.C., v. Rosenberg, D.U.: "A Mathematical and Experimental Examination of Transverse Dispersion Coefficients", Soc. Petrol Eng. J. 8, 1968.

Heller, J.P.: "The Interpretation of Model Experiments for the Displacement of Fluids Through Porous Media", AICHE Journal 9 (4), 1963.

Hoffmann, B.: "Über die Ausbreitung gelöster Kohlenwasserstoffe im Grundwasserleiter", Mitt. Inst. f. Wasserwirtschaft und Landwirtschaftlicher Wasserbau der TU Hannover, 16, 1969.

Hoopes, J.A., Harleman, D.R.F.: "Waste Water Recharge and Dispersion in Porous Media", Report No. 75, Hydrodyn. Lab. Mass. Inst. Techn. 1965.

Hunt, B.: "Dispersive Sources in Uniform Ground-Water-Flow", J. of the Hydr. Div. ASCE, HY1, 1978.

de Josselin de Jong, G.: "Longitudinal and Transverse Diffusion in Granular Deposits", Trans. Amer. Geoph. Union, 39, 1958.

de Josselin de Jong, G.: "The Tensor Character of the Dispersion Coefficient in Anisotropic Porous Media", in Developments in Soil Science 2 (siehe Bücherliste).

Klinkenberg, L.J.: "Analogue Between Diffusion und Electrical Conductivity in Porous Rocks", Bull. Geolog. Soc. Am., 62, 1951.

Klotz, D.: "Untersuchungen zur Dispersion in porösen Medien", Z. Deutsch. Geol. Ges. 124, 1973.

Klotz, D.: "Physical Fundamentals of the Mixing of Solutions of Pollutants and Sewage in Porous Media, Water Research, 9, 1975.

Klotz, D., Moser, H.: "Hydrodynamic Dispersion as Aquifer Characteristic - Model Experiments with Radioactive Tracers", Isotope Techniques in Groundwater Hydrology, Proc. Symp. Vienna, Vol. II, 1974.

Lawson, D.W., Elrick, D.E.: "A New Method for Determining and Interpreting Dispersion Coefficients in Porous Media", IAHR-ISSS Proc. Second Symp. in Fundamentals of Transport Phenomena in Porous Media, Uni. of Guelph, Ontario, Canada, 1972.

Lenda, A., Zuber, A.: "Tracer Dispersion in Groundwater Experiments", Isotope Hydrology, 1970.

Lin, S.H.: "Longitudinal Dispersion in Porous Media with Variable Porosity", Journal of Hydrology, 34, 1977.

List, E.J., Brooks, N.H.: "Lateral Dispersion in Saturated Porous Media", J. Geophy. Res. 72 (10), 1967.

Marino, M.A.: "Longitudinal Dispersion in Saturated Porous Media", J. Hydr. Div. ASCE, HY1, 1974.

Marino, M.A.: "Distribution of Contaminants in Porous Media Flow", Water Res. Res. 10 (5), 1974.

Mercado, A.: "The Spreading Pattern of Injected Waters in a Permeable Stratified Aquifer, Symp. on Artificial Recharge and Management of Aquifers, Haifa, IASH Pub. 72, 1967.

Nikolaevskii, V.N.: "Convective Diffusion in Porous Media", Pri.Kl. Mat. Mekh., 23 (16), 1959.

Ogata, A., Banks, R.B.: "A Solution of the Differential Equation of Longitudinal Dispersion in Porous Media", US Geol. Survey Prof. Paper 411-A, 1961.

Perkins, T.K., Johnstone, O.C.: "A Review of Diffusion and Dispersion in Porous Media", J. Soc. Petrol. Engrs., 3, 1963.

Poreh, M.: "The Dispersivity Tensor in Isotropic and Axisymmetric Mediums", J. Geophys. Res., 70, 1965.

Rose, D.A., Passioura, J.B.: "The Analysis of Experiments on Hydrodynamic Dispersion", Soil Science 111, 1971a.

Rose, D.A., Passioura, J.B.: "Gravity Segregation during Miscible Displacement Experiments", Soil Science 111, 1971b.

Rumer, R.R.: "Longitudinal Dispersion in Steady and Unsteady Flow", J. Hydr. Div. Proc. ASCE, 88, HY4, 1962.

Rumer, R.R. jr.: "On the Derivation of a Convective-Dispersion Equation by Spatial Averaging", in Developments in Soil Science 2 (siehe Bücherliste).

Saffman, P.G.: "Theory of Dispersion in a Porous Medium", Fluid Mechanics 6, 1959.

Saffman, P.G.: "Dispersion due to Molecular Diffusion and Macroscopic Mixing in Flow through a Network of Capillaries", Fluid Mechanics 7, 1960.

Shamir, U.Y., Harleman, D.R.F.: "Numerical Solutions for Dispersion in Porous Media", Water Res. Res., 3 (2), 1967a.

Shamir, U.Y., Harleman, D.R.F.: "Dispersion in Layered Porous Media", J. Hydr. Div. Proc. Am. Soc. Civ. Eng. 93, HY5, 1967b.

Scheidegger, A.E.: "Statistical Hydrodynamics in Porous Media", J. Appl. Physics 25, 1954.

Scheidegger, A.E.: "General Theory of Dispersion in Porous Media", J. Geophys. Res. 66 (10), 1961.

Scheidegger, A.E.: "Deterministic and Statistic Characterization of Porous Media and Computational Methods of Analysis", in - Developments in Soil Science 2 - (siehe Bücherliste).

Tagamets, T., Sternberg, Y.M.: "A Predictor-Corrector Method for Solving the Convection-Dispersion Equation for Adsorption in Porous Media", Water Res. Res. 10 (5), 1974.

Taylor,G.: "Dispersion of Soluble Matter in Solvent
Flowing Slowly Through a Tube", Proc. Royal Soc. London
219 A, 1953.

Tyagi,A.K. et al.: "Dispersion of Pollutants in Saturated
Porous Media", Water Resources Scientific Information Center,
US Department of the Interior, 1971.

Wilson,J.L., Miller,P.J.: "Two-Dimensional Plume in Uniform
Groundwater Flow", J. Hydr. Div. ASCE, HY4, 1978.