

Modellierung von Porenraumgeometrien und Transport in korngestützten porösen Medien

Dissertation
zur Erlangung des Grades
„Doktor der Naturwissenschaften“

am Fachbereich Geowissenschaften
der Johannes-Gutenberg-Universität
in Mainz

vorgelegt von

Frieder Hans Enzmann

geb. in Greifswald

Juli 2000

1. Berichterstatter:

2. Berichterstatter:

Tag der mündlichen Prüfung: 13. Oktober 2000

Erklärung

Hiermit versichere ich gemäß § 11 (3) der Promotionsordnung vom 30. April 1990, daß ich diese als Dissertation vorgelegte Arbeit selbständig verfaßt und alle benutzten Hilfsmittel und Quellen in der Arbeit angegeben habe. Sie ist weder als Prüfungsarbeit für eine andere Prüfung noch ganz oder teilweise als Dissertation an einer anderen Fakultät oder einem anderen Fachbereich eingereicht worden.

Mainz, den 03.07.2000

(Frieder Enzmann)

Danksagung

Ich danke meiner Frau Sabine und meinem Sohn Felix für die Begleitung in den letzten Jahren und für das entgegengebrachte Verständnis und ihre Geduld. Diese Arbeit wäre so kaum möglich gewesen. Insbesondere gilt mein Dank meinen Eltern, die offen für alle Fragen waren, viel Geduld aufbrachten und Unterstützung leisteten, wo es möglich war.

Meinem Mentor, Prof. Dr. D. Schenk möchte ich besonders danken für die wertvolle Hilfe und Unterstützung und die zahlreichen Diskussionen in den Jahren meiner Mitgliedschaft in der Arbeitsgruppe Angewandte Geologie der Universität Mainz sowie das zur Verfügungstellen von Materialien und der Computertechnik. Auch meinen Kollegen Frau Dipl. Geogr. S. Simon, Herrn Dipl. Geol. H. Schmitt, Herrn Dipl. Geol. W. Bott sowie Herrn cand. geol. T. Lob danke ich für die zahlreichen Diskussionen und kritischen Hinweise sowie für die Übernahme anderer Tätigkeiten. Außerdem gilt Dank den Herren Dr. H. Knoke und Dr. T. Hofmann für Anregungen und Diskussionen, die mich oftmals wieder auf das Wesentliche zurückgeführt haben.

Für die Zusammenarbeit mit der Arbeitsgruppe Geophysik, insbesondere den Herren PD Dr. K. Regenauer-Lieb und Herrn Dr. H. Wallner, die mich mathematisch und computertechnisch beraten haben sowie der Arbeitsgruppe Sedimentologie, unter Leitung von Prof. Dr. F. Sirocko, die mir in Rechenzeit-Engpässen mit ihrer zur Verfügung stehenden Technik aushalfen.

Kurzfassung

Poröse Medien spielen in der Hydrosphäre eine wesentliche Rolle bei der Strömung und beim Transport von Stoffen. In diesem Raum finden komplexe Prozesse statt: Advektion, Konvektion, Diffusion, hydromechanische Dispersion, Sorption, Komplexierung, Ionenaustausch und Abbau. Die strömungsmechanischen- und die Transportverhältnisse in porösen Medien werden direkt durch die Geometrie des Porenraumes selbst und durch die Eigenschaften der transportierten (oder strömenden) Medien bestimmt. In der Praxis wird eine Vielzahl von empirischen Modellen verwendet, die die Eigenschaften des porösen Mediums in repräsentativen Elementarvolumen wiedergeben. Die Ermittlung der in empirischen Modellen verwendeten Materialparameter erfolgt über Labor- oder Feldbestimmungsmethoden. Im Rahmen dieser Arbeit wurde das Computermodell PoreFlow entwickelt, welches die hydraulischen Eigenschaften eines korngestützten porösen Mediums aus der mikroskopischen Modellierung des Fluidflusses und Transportes ableitet. Das poröse Modellmedium wird durch ein dreidimensionales Kugelpackungsmodell, zusammengesetzt aus einer beliebigen Kornverteilung, dargestellt. Im Modellporenraum wird die Strömung eines Fluids basierend auf einer stationären Lösung der Navier-Stokes-Gleichung simuliert.

Die Ergebnisse der Modellsimulationen an verschiedenen Modellmedien werden mit den Ergebnissen von Säulenversuchen verglichen. Es zeigt sich eine deutliche Abhängigkeit der Strömungs- und Transportparameter von der Porenraumgeometrie sowohl in den Modellsimulationen als auch in den Säulenexperimenten.

Abstract

Modeling of transport phenomena is a major concern in subsurface aquatic environments. The main processes to be studied are advection, convection, diffusion, hydrodynamic dispersion, sorption, complexation, ion exchange and degradation. Groundwater flow and transport in porous media are linked directly to pore space geometry and fluid properties. In order to predict groundwater flow and subsequently contaminant transport and residence times, we need to parameterise the macroscopic properties of the porous media, e.g. hydraulic conductivity, dispersivity and porosity.

In this thesis, the computermodell PoreFlow was developed. This model compute the effectiv hydraulic properties from the microscopic flow and transport through pore spaces. The pore space in PoreFlow will be represented as an 3D sphere-agglomeration modell with well defined variable sphere radius distribution. In the resulting pore space, the fluid flow will be simulate by solving the Navier-Stokes equation for incompressible fluids. The effectiv parameters for such media can be direct compute from the resulting data.

The simulation results of various model media will be compare with results from flow- and tracer experiments in columns. The simulated and experimental data shows an highly dependense from variation of pore space geometries, resulting from different grain-size distributions.

DANKSAGUNG	III
KURZFASSUNG	IV
ABSTRACT.....	V
ABBILDUNGSVERZEICHNIS	VIII
TABELLENVERZEICHNIS.....	XII
FORMELZEICHEN UND SYMBOLE.....	XIII
1. EINLEITUNG.....	1
1.1 EINLEITUNG IN DIE PROBLEMATIK	1
1.2 FRAGESTELLUNGEN	1
2. STAND DER FORSCHUNG.....	2
Theorie granularer Materialien	2
Theorie poröser Medien.....	2
Fluiddynamik, CFD (Computational Fluid Dynamic).....	3
Bedeutung für die Praxisanwendung in der Hydrogeologie	3
3. THEORETISCHE GRUNDLAGEN	5
3.1 CHARAKTERISIERUNG PORÖSER MEDIEN	5
Porosität	5
Korngrößenverteilung.....	6
Lagerungs- (Packungsdichte)	7
Kornform	7
Porenraumgeometrie.....	8
3.2 STRUKTURMODELLE PORÖSER MEDIEN	10
3.3 STRÖMUNGS- UND TRANSPORTPROZESSE IN PORÖSEN MEDIEN UND MODELLIERUNG	12
Strömungsgleichung eines viskosen Fluids	12
Makroskopische gesättigte Strömungsgleichung (DARCY-Fluß)	13
Makroskopische Modellierung der gesättigten Strömung in einem porösen Medium	15
Makroskopische Modellierung des Transports.....	15
4. POREFLOW – EIN KORN/PORENMODELL ZUR STRÖMUNGS- UND TRANSPORTMODELLIERUNG	21
4.1 REALISATION IN EINEM PC-ANWENDUNGSPROGRAMM.....	21
4.2 AUFBAU DES STRUKTURMODELLS.....	23
4.2.1 <i>Datengrundlage, Eingangsgrößen</i>	23
Vorgabe des Bezugssystems	23
Vorgabe der Kornverteilung	24
4.2.2 <i>Anlagerungsmodellierung (Zusammensetzung) des Mediums</i>	25
Analytische Berechnung der möglichen Lösungsvektoren.....	27
Modifikationsmöglichkeiten des modellierten Mediums	28
4.2.3 <i>Parameterableitung aus dem Modellmedium</i>	28
Kornverteilung.....	28
Porosität	29
Porositätsprofile.....	29
Spezifische innere Oberflächen	29
Porenstrukturen.....	30
Permeabilität, Durchlässigkeitsbeiwert	30
4.3 STRÖMUNGS- UND TRANSPORTMODELLIERUNG IM MODELLMEDIUM.....	31

4.3.1 Diskretisierung des Raumes.....	32
Diskretisierung im MAC-Gitter.....	32
4.3.2 Modellierung des Fluidflusses im Modellmedium.....	33
Explizite stationäre Lösung der Navier-Stokes-Gleichung.....	33
Randbedingungen.....	34
Auswertung und Darstellung der Lösung.....	36
Ableitung der Permeabilität aus der Fluidberechnung.....	36
Simulation von Testproblemen.....	37
Ergebnisse und Interpretation.....	39
4.3.3 Transportmodellierung.....	40
Einsatz der Perkolationstheorie in der Transportmodellierung.....	40
Umsetzung des „Verbrennungsalgorithmus“.....	40
Simulation des Transportes eines idealen Tracers.....	41
Simulation von Tracerpartikeln.....	41
Umsetzung im Modell PoreFlow.....	42
Ableitung von Parametern.....	43
5. VERIFIKATION DES MODELLS POREFLOW.....	60
5.1 VERSUCHSMATERIALEN UND METHODEN.....	60
Glasperlen als Versuchsmaterial.....	60
Versuchsaufbau Durchströmung und Tracertransport.....	61
5.2 VERSUCHSERGEBNISSE.....	62
Bestimmung der Porositäten.....	62
Durchströmungsversuche (Bestimmung der Durchlässigkeit).....	62
Zusammenfassung zur Versuchsdurchführung (Durchlässigkeitsbeiwerte).....	63
Tracerversuche.....	64
Diskussion der Tracer-Versuchsergebnisse (Durchbruchskurven).....	66
Zusammenfassung und Fazit.....	66
5.3 MODELLIERUNGSERGEBNISSE MIT POREFLOW.....	67
Eingangsgrößen zur Mediumgenerierung- und Diskretisierung.....	67
6. INTERPRETATION.....	73
DURCHLÄSSIGKEITSBEIWERTE.....	73
POROSITÄTEN.....	75
DISPERSIVITÄTEN.....	79
7. DISKUSSION UND AUSBLICK.....	81
ANLAGERUNGSMODELLIERUNG.....	81
FLUIDFLUSSMODELLIERUNG.....	81
TRANSPORTMODELLIERUNG.....	82
VERGLEICH MODELLIERUNGEN UND EXPERIMENTERGEBNISSE.....	82
AUSBLICK.....	83
8. ZUSAMMENFASSUNG.....	84
LITERATURVERZEICHNIS.....	85
ANHANG	
ALGORITHMUS ZUR WAHRSCHEINLICHKEITSAUSWAHL EINER KUGEL.....	90
ABBILDUNGEN KONFIGURATION DES TESTPROBLEMS.....	91
DARSTELLUNG ERGEBNISSE BEISPIELRECHNUNGEN.....	91
DARSTELLUNG ERGEBNISSE KUGELGEMISCH 1.....	94
DARSTELLUNG ERGEBNISSE KUGELGEMISCH 2.....	99
DARSTELLUNG ERGEBNISSE KUGELGEMISCH 3.....	104
DARSTELLUNG ERGEBNISSE KUGELGEMISCH 4.....	109

Abbildungsverzeichnis

Abb. 3.1: Beziehungen zwischen Gesamtporen-, Nutzporen- und Haftwasserraum in Abhängigkeit der Korngröße (aus HÖLTING 1989).....	5
Abb. 3.2: Beispiele von Körnungslinien typischer Bodenarten (BUSCH & LUCKNER, 1974).....	6
Abb. 3.3: Kornformen (nach BUSCH & LUCKNER, 1974).....	8
Abb. 3.4: Porenraumgeometrien aus regulären Sechserpackungen und Schnittebenen (BUSCH & LUCKNER, 1974).....	9
Abb. 3.5: Porenraumgeometrien aus regulären Zwölferpackungen und Schnittebenen (BUSCH & LUCKNER, 1974).....	9
Abb. 3.6: 3D-Porenraum eines Fontainebleau Sandsteines, gewonnen aus image-processing Daten (BISWAL et al., 1999).....	11
Abb. 3.7: Simulierter 3D-Porenraum mit gleicher Porosität wie Beispiel in Abb. 3.6 (BISWAL et al., 1999).....	11
Abb. 3.8: Boolesches Korn/Porenmodell.....	11
Abb. 3.9: Pigeon-Hole-Model - Fraktale Porenräume (PAPE et al. 1987).....	12
Abb. 3.10: Definition des DARCY-Gesetzes (aus HÖLTING, 1989).....	14
Abb. 3.11: Definition der Permeabilität und der Einheit DARCY (aus HÖLTING, 1989).....	14
Abb. 3.12: Gültigkeitsbereich des DARCY-Gesetzes (WALZENBACH, 1991).....	14
Abb. 3.13: Zusammenhang Abstands- und Bahngeschwindigkeiten (KINZELBACH, 1992).....	17
Abb. 3.14: Skalenabhängigkeit der Dispersion (KINZELBACH, 1992).....	18
Abb. 4.1: Generelles Ablaufschema zur Simulation eines Mediums.....	22
Abb. 4.2: Definition des Bezugssystems für Anlagerungs- und Fluidmodellierung.....	23
Abb. 4.3: Geometrische Darstellung einer Beispiellösung, Projektion in die Ebene.....	26
Abb. 4.4: 3D-Darstellung einer optimalen Lösung.....	26
Abb. 4.5: Geometrische Darstellung einer Beispiellösung, Projektion in die Ebene, Berechnung des Innenkreisdurchmessers.....	26
Abb. 4.6: Lagerung eines Kugelgemisches mit normal verteilten Kugelradien im Zylinder.....	28
Abb. 4.7: Geschichtete Lagerung unterschiedlicher Kugelradien im Zylinder.....	28
Abb. 4.8: Lagerung eines relativ gleichkörnigen Kugelgemisches als „Schüttkegel“.....	28
Abb. 4.9: Ausschnitt aus der Lagerung eines bimodalen Kugelgemisches.....	28
Abb. 4.10: Vergleich numerischer und analytischer Lösung im Geschwindigkeitsprofil eines Zylinders.....	39
Abb. 4.11: 3D- Diskretisierung des Raumes im Beispiel.....	46
Abb. 4.12: 3D- Fluidgeschwindigkeitsfeld mit Matrixzellen (Kugeln).....	47
Abb. 4.13: 3D- Fluidgeschwindigkeitsfeld.....	47
Abb. 4.14: Zusammenhang mittlere Porengeschwindigkeit und Porosität im Längsprofil des Zylinders.....	47
Abb. 4.15: Zusammenhang Porengeschwindigkeit/Porosität.....	48

Abb. 4.16: Zusammenhang Porengeschwindigkeit der x,z-Vektorkomponenten/Porosität	48
Abb. 4.17: Druckprofil im Zylinder	49
Abb. 4.18: Summenkurven der Porengeschwindigkeiten im Medium	50
Abb. 4.19: Darstellung des Raumwinkels Theta in Abhängigkeit der y-Geschwindigkeitskomponente	51
Abb. 4.20: Summenkurven der Porengeschwindigkeiten Beispiel 7	52
Abb. 4.21: Darstellung des Raumwinkels Theta in Abhängigkeit der y-Geschwindigkeitskomponente im Beispiel 7	52
Abb. 4.22: Partikelpositionen zum Zeitpunkt des Simulationendes	54
Abb. 4.23: x,z-Partikelpositionen und Laufzeit der Partikel	55
Abb. 4.24: Wegstrecke der Tracerpartikel als Funktion der Laufzeit.....	56
Abb. 4.25: Tracerdurchbruch als Summenkurve im Vergleich mit analytischer Lösung.....	57
Abb. 4.26: Tracerdurchbruch im Vergleich mit analytischer Lösung	58
Abb. 4.27: Verteilung der Poren- und Partikelgeschwindigkeiten	59
Abb. 5.1: Soll-Kugelverteilungen (blau-Anzahlverteilung, rot-Massenverteilung)	61
Abb. 5.2: Abhängigkeit Durchlässigkeitsbeiwert / hydraulischer Gradient	63
Abb. 5.3: Uranin-Tracerversuche am Kugelgemisch 2 (Meßwerte und analytische Lösung).....	64
Abb. 5.4: Uranin-Tracerversuche am Kugelgemisch 3 (Meßwerte und analytische Lösung).....	65
Abb. 5.5: Uranin-Tracerversuche am Kugelgemisch 4 (Meßwerte und analytische Lösung).....	65
Abb. 5.6: Uranin-Tracerversuche am Kugelgemisch 4a (Meßwerte und analytische Lösung).....	66
Abb. 5.7: Ist- Masse Verteilung der Kugelgemische	67
Abb. 5.8: Ist- Anzahl Verteilung der Kugelgemische	68
Abb. 5.9: Verteilung der theoretischen „Porendurchmesser“ der einzelnen Gemische.....	69
Abb. 5.10: Ausschnitt Kugelgemisch 1	70
Abb. 5.11: Ausschnitt Kugelgemisch 2	70
Abb. 5.12: Ausschnitt Kugelgemisch 3	70
Abb. 5.13: Ausschnitt Kugelgemisch 4	70
Abb. 6.1: Gegenüberstellung der ermittelten Durchlässigkeitsbeiwerte	73
Abb. 6.2: Direkter Vergleich der Durchlässigkeitsbeiwerte (Experiment/Modell)	74
Abb. 6.3: Gegenüberstellung der Porositäten	75
Abb. 6.4: Definition der Bezugssysteme zur Ermittlung der Porositäten in PoreFlow	76
Abb. 6.5: Gegenüberstellung der effektiven Porositäten	77
Abb. 6.6: Direkter Vergleich der effektiven Porositäten (Experiment/Modell)	78
Abb. 6.7: Gegenüberstellung der Dispersivitäten	79

Abb. A1.1: Algorithmus zur Wahrscheinlichkeitsauswahl eines Kugelradius	90
Abb. A2.1: Konfiguration des Tests mit Darstellungsebene.....	91
Abb. A2.2: 3D Netz Ansicht mit Kugel.....	91
Abb. A2.3: Geschwindigkeitsverteilung und Geschwindigkeitsvektorfeld im Vertikalprofil.....	91
Abb. A2.4: Druckverteilungsfeld im Vertikalprofil.....	91
Abb. A2.5: Geschwindigkeitsverteilung und Geschwindigkeitsvektorfeld im Vertikalprofil.....	92
Abb. A2.6: Druckverteilungsfeld im Vertikalprofil.....	92
Abb. A2.7: Geschwindigkeitsverteilung und Geschwindigkeitsvektorfeld im Vertikalprofil.....	92
Abb. A2.8: Druckverteilungsfeld im Vertikalprofil.....	92
Abb. A2.9: Geschwindigkeitsverteilung und Geschwindigkeitsvektorfeld im Vertikalprofil.....	93
Abb. A2.10: Druckverteilungsfeld im Vertikalprofil.....	93
Abb. A3.1: Zusammenhang Porengeschwindigkeit/Porosität im Profil des Zylinders.....	94
Abb. A3.2: Zusammenhang Porengeschwindigkeit/Porosität	94
Abb. A3.3: Zusammenhang Porengeschwindigkeit der x,z-Komponenten/Porosität.....	95
Abb. A3.4: Druckprofil im Zylinder und Porosität.....	95
Abb. A3.5: Darstellung des Raumwinkels Theta als Funktion der y-Komponente der Porengeschwindigkeit	96
Abb. A3.6: Häufigkeitsverteilung der Raumwinkel	96
Abb. A3.7: Tracerdurchbruch als Summenkurve im Vergleich mit analytischer Lösung.....	97
Abb. A3.8: Tracerdurchbruch im Vergleich mit analytischer Lösung.....	97
Abb. A3.9: Vergleich der Geschwindigkeitsverteilungen	98
Abb. A4.1: Zusammenhang Porengeschwindigkeit/Porosität im Profil des Zylinders.....	99
Abb. A4.2: Zusammenhang Porengeschwindigkeit/Porosität	99
Abb. A4.3: Zusammenhang Porengeschwindigkeit der x,z-Komponenten/Porosität.....	100
Abb. A4.4: Druckprofil im Zylinder und Porosität.....	100
Abb. A4.5: Darstellung des Raumwinkels Theta vs. y-Komponente der Porengeschwindigkeit.....	101
Abb. A4.6: Häufigkeitsverteilung der Raumwinkel	101
Abb. A4.7: Tracerdurchbruch als Summenkurve im Vergleich mit analytischer Lösung.....	102
Abb. A4.8: Tracerdurchbruch im Vergleich mit analytischer Lösung.....	102
Abb. A4.9: Vergleich der Geschwindigkeitsverteilungen	103
Abb. A5.1: Zusammenhang Porengeschwindigkeit/Porosität im Profil des Zylinders.....	104
Abb. A5.2: Zusammenhang Porengeschwindigkeit/Porosität	104
Abb. A5.3: Zusammenhang Porengeschwindigkeit der x,z-Komponenten/Porosität.....	105
Abb. A5.4: Druckprofil im Zylinder und Porosität.....	105
Abb. A5.5: Darstellung des Raumwinkels Theta vs. y-Komponente der Porengeschwindigkeit.....	106
Abb. A5.6: Häufigkeitsverteilung der Raumwinkel	106

Abb. A5.7: Tracerdurchbruch als Summenkurve im Vergleich mit analytischer Lösung	107
Abb. A5.8: Tracerdurchbruch im Vergleich mit analytischer Lösung.....	107
Abb. A5.9: Vergleich der Geschwindigkeitsverteilungen	108
Abb. A6.1: Ausschnitt aus Strömungsvektorfeld im Porenraum.....	109
Abb. A6.2: 3D-Ausschnitt aus Strömungsvektorfeld (blau) und advektiv unwirksame Zellen (rot) 109	
Abb. A6.3: 3D-Ausschnitt aus Strömungsvektorfeld (blau) und advektiv unwirksame Zellen (rot) und „Kugel“-Zellen (schwarz)	110
Abb. A6.4: Zusammenhang Porengeschwindigkeit/Porosität im Profil des Zylinders.....	110
Abb. A6.5: Zusammenhang Porengeschwindigkeit/Porosität	111
Abb. A6.6: Zusammenhang Porengeschwindigkeit der x,z-Komponenten/Porosität.....	111
Abb. A6.7: Druckprofil im Zylinder und Porosität.....	112
Abb. A6.8: Darstellung des Raumwinkels Theta vs. y-Komponente der Porengeschwindigkeit.....	112
Abb. A6.9: Häufigkeitsverteilung der Raumwinkel	113
Abb. A6.10: Tracerdurchbruch als Summenkurve im Vergleich mit analytischer Lösung	113
Abb. A6.11: Tracerdurchbruch im Vergleich mit analytischer Lösung.....	114
Abb. A6.12: Vergleich der Geschwindigkeitsverteilungen	114

Tabellenverzeichnis

Tab. 2.1:	Skalen und Modelltypen (aus DURNER, 1998).....	2
Tab. 2.2:	Qualitativer Einfluß von Eigenschaften auf Durchlässigkeit und Dispersivität (aus XU & ECKSTEIN (1997), nach CHEN (1991)).	4
Tab. 3.1:	Ableitbare Parameter aus einer Kornverteilungskurve	7
Tab. 3.2:	Statistische Momente einer Konzentrations/Zeit-Verteilung	19
Tab. 3.3:	Ableitbare Parameter aus statistischen Momenten einer Konzentrations/Zeit-Verteilung	19
Tab. 4.1:	Verfahren zur Bestimmung der Kugelradien, Kornverteilung.....	24
Tab. 4.2:	Ablauf der MAC-Diskretisierung.....	32
Tab. 4.3:	Fallbeispiele für die Simulation des Testproblems	38
Tab. 5.1:	Korngrößenklassen der verwendeten Glaskugeln, Durchmesserangaben in [mm]	60
Tab. 5.2:	Ermittelte Porositäten der Korngemische 1-4	62
Tab. 5.3:	Ermittelte Durchlässigkeiten der Korngemische 1-4	62
Tab. 5.4:	Mittlere Durchlässigkeiten der Korngemische 1-4	64
Tab. 5.5:	Gegenüberstellung Ungleichförmigkeitsgrad, Porenziffern und Porengrößen	69
Tab. 5.6:	Berechnungsergebnisse Fluidmodellierung PoreFlow	70
Tab. 5.7:	Gegenüberstellung der ermittelten Durchlässigkeitsbeiwerte	71
Tab. 5.8:	Gegenüberstellung der Dispersivitäten	71
Tab. 5.9:	Gegenüberstellung der Abstandsgeschwindigkeiten, Tortuosität und effektive Porositäten	72

Formelzeichen und Symbole

n	Porosität allgemein oder Gesamtporosität [%] oder [-]
n_e, n_{eff}	„effektive“ Porosität [%] oder [-]
ε	Porenziffer [-]
ε_{min}	minimale Porenziffer einer Lagerung [-]
ε_{max}	maximale Porenziffer einer Lagerung [-]
ε_{nat}	natürliche Porenziffer einer Lagerung [-]
S_{por}	spezifische Oberfläche [1/m]
K	Permeabilität allgemein [D] oder [m ²]
\underline{K}	Permeabilität als Tensor [D] oder [m ²]
k_f	Durchlässigkeitsbeiwert allgemein [m/s]
\underline{k}_f	Durchlässigkeitsbeiwert als Tensorgröße [m/s]
d	effektive Korngröße allgemein [m]
d_w	hydraulisch wirksame Korngröße [mm]
d_k	hydraulisch wirksame Porenäquivalenzdurchmesser [mm]
d_o	obere Korngrößengrenze in einer Korngrößenklasse [mm]
d_u	untere Korngrößengrenze in einer Korngrößenklasse [mm]
h_k	KOZENY-Konstante
U	Ungleichförmigkeitsgrad
R	Rundungsgrad, Abweichung von der Kugelform [-]
G	Kornrauhigkeit allgemein
T	absolute Temperatur [K]
η	dynamische Viskosität eines Fluids [Pa·s]
ν	kinematische Viskosität [m ² /s]
ρ	Dichte eines Fluids [kg/m ³]
p	Fluiddruck [Pa]
$\nabla\phi, \nabla h$	hydraulisches Potential [-]
i	Gradient [-]
α	allgemeine Dispersivität [m]
α_L	longitudinale Dispersivität [m]
α_T	transversale Dispersivität [m]
V_P	Gesamtvolumen des Porenraumes [m ³]
V_G	Gesamtvolumen des Bezugssystems [m ³]
V_H	Volumen des nicht entwässerbaren Fluids [m ³]
V_V	volume void = Porenraum
V_S	volume solid = Raum der Kornmatrix
d_x	Korndurchmesser bei x [%] Durchgang aus Kornsummenkurve [mm]
M	mittlere Korngröße
S	Maßzahl für Sortierung einer Kornverteilung
S_K	Maßzahl für die Schiefe einer Kornverteilung

I_D	Dichteindex für Lagerungsdichtebestimmung
\vec{v}, v	Fluidgeschwindigkeitsvektor [m/s] oder [-]
\bar{v}	mittlere Fluidgeschwindigkeit [m/s]
v_f	Filtergeschwindigkeit (DARCY-Geschwindigkeit) [m/s]
v_a	Abstandsgeschwindigkeit [m/s]
v_b	Bahngeschwindigkeit [m/s]
\vec{f}, f	Kraftvektor [N] oder [-]
t	Zeit in [s] oder [-]
l	Bezugslänge [m]
L	Länge, Abstand zwischen Start- und Beobachtungspunkt [m]
Re	Reynoldszahl [-]
Pe	Pecletzahl [-]
g	Erdbeschleunigung [m/s ²]
c	Konzentration [mg/l] oder [mol-eq/l] ...
D_H	hydromechanische Dispersion [m ² /s]
D_M	molekularer Diffusionskoeffizient [m ² /s] oder [cm ² /s]
D_L	longitudinale hydromechanische Dispersion [m ² /s]
D_T	transversale hydromechanische Dispersion [m ² /s]

spezifische Symbole und Zeichen im Modell PoreFlow

Z_h	Höhe des Bezugszylinders [m]
Z_d	Durchmesser des Bezugszylinders [m]
Z_r	Radius des Bezugszylinders [m]
r_i	Kugelradius der Kugel i
$z[a,b]$ ^{Verteilung}	Zufallszahl nach Verteilung
ak_{Si}	Anzahl der Kugeln der i -ten Kugelgrößenklasse
m_{ki}	Masse der Kugeln der i -ten Kugelgrößenklasse [kg]
r_{ki}	mittlere Kugelgröße der i -ten Kugelgrößenklasse [m]
n_{geo}	geometrische Porosität [%] oder [-]
n_{stat}	statistische Porosität [%] oder [-]
S_{geo}	geometrische Gesamtoberfläche im Medium [m ²]
i,j,k	Indizes der Matrizen
$S_{i,j,k}$	Statusmatrix der Zellen, i.g. Porennetzwerk
$m_{i,j,k}$	Mittelpunktvektoren der Zellen i,j,k
m_{Kug}	Mittelpunktvektor einer Kugel
u,v,w	Geschwindigkeitskomponenten des Vektors v

Formelzeichen Mathematik

M_0 bis 4	statistische Momente 0 bis 4 einer beliebigen Werteverteilung
μ	Mittelwert einer Verteilung
σ	Standardabweichung einer Verteilung
λ	Lambda = Korrelationslänge [m]
$h(x,t)$	Boolesche Funktion in Abhängigkeit einer Zeit t und eines Vektors x
P	Wahrscheinlichkeit
x, a	Ortsvektor
(x,y,z)	Komponenten eines Ortsvektors
$\langle \rangle$	Durchschnitt
$[A,B]$	im Intervall A,B
$[A,B]^{\text{Verteilung}}$	im Intervall A,B mit Verteilungsform bei Zufallszahlen
Δ	Delta, Differenzen
$\frac{\partial}{\partial t}$	Ableitung nach der Zeit
$\nabla = \left\{ \frac{\partial}{\partial x}, \frac{\partial}{\partial y}, \frac{\partial}{\partial z} \right\}$	1. Ableitung in Raumrichtungen
$\nabla^2 = \left\{ \frac{\partial^2}{\partial x^2}, \frac{\partial^2}{\partial y^2}, \frac{\partial^2}{\partial z^2} \right\}$	2. Ableitung in Raumrichtungen
$erf(x) = \frac{2}{\sqrt{\pi}} \int_0^x e^{-t^2} dt$	Gauss'sches Wahrscheinlichkeitsintegral (error-function)
$erfc(x) = 1 - erf(x)$	Komplementärfunktion error-function
$inc(i)$	Incrementel i, d.h. erhöhe den Index i um 1
$int(x)$	Integer von x, d.h. ganzzahliger Anteil von x (gerundet !)

1. Einleitung

1.1 Einleitung in die Problematik

Die DIN 4049 liefert für den Begriff „Grundwasser“ eine Definition: Danach ist Grundwasser unterirdisches Wasser, das die Hohlräume der Erdrinde zusammenhängend ausfüllt und dessen Bewegung ausschließlich durch die Schwerkraft bestimmt wird. Demnach spielen die „Hohlräume“ in der Erdrinde (bzw. Hydrosphäre), also im weitestem Sinne poröse Medien, eine entscheidende Rolle. In diesen porösen Medien laufen komplexe Prozesse ab. Solche Prozesse sind z.B. die Bewegung von fluiden Phasen (Grundwasser, Erdöl, Gase), der kolloidale- und partikuläre Transport von Stoffen, gelöster Transport von Stoffen, chemische Wechselwirkungen von Substanzen mit der Matrix des porösen Mediums (Diagenesevorgänge, Sorption/Desorption). In der Hydrogeologie spielen häufig korngestützte poröse Medien (Sande und Kiese), geklüftete Medien (Kluftaquifer) sowie Mischformen (Kluft-Poren-Aquifer) und die dort stattfindenden Prozesse die wesentliche Rolle.

Die strömungsmechanischen Verhältnisse und der Transport in porösen Medien werden direkt durch die Eigenschaften der Fluide (Viskosität, Geschwindigkeit, Druckverteilung) und der Geometrie der Porenräume selbst bestimmt (DAGAN (1989), HILFER (1996), SAHIMI (1993) und DULLIEN (1992)). Eine qualitative und v.a. quantitative Beschreibung des Einflusses der Porenräume ist Gegenstand intensiver Forschung verschiedenster Fachgebiete.

Um dem Dilemma einer genauen Quantifizierung auszuweichen, sind in der Vergangenheit eine Vielzahl von Modellvorstellungen entwickelt worden, die heute in der Praxis eine weite Verbreitung besitzen (KINZELBACH & RAUSCH (1995), LEGE, KOLDITZ & ZIELKE (1996)). Bei diesen Modellen handelt es sich um Kontinuumsmodelle, die die hydraulischen Eigenschaften des porösen Mediums, wie z.B. Permeabilität, Porosität, Speicherkoeffizienten und Dispersionskoeffizienten) in sog. repräsentativen Elementarvolumen wiedergeben.

1.2 Fragestellungen

Aus der Gesamtbetrachtung der Problematik ergeben sich folgende Fragen:

Wie groß ist der qualitative und v.a. quantitative Einfluß der Geometrie der Poren auf Transportphänomene insbesondere in der Dimension des Porenraumes?

Ist es möglich, den Einfluß direkt über die geometrischen Eigenschaften des Mediums zu bestimmen. Z.B.: Kann man aus der Kornverteilungskurve und Lagerungsdichte eines Sandes direkt die Permeabilität und die hydromechanische Dispersivität mit hinreichender Genauigkeit aus Modellsimulationen ableiten?.

Hieraus ergibt sich das Ziel dieser Arbeit, Modelle zu entwickeln, die aus den petrophysikalischen Eigenschaften poröser Medien die hydromechanischen Eigenschaften, also den qualitativen und quantitativen Einfluß auf Transportprozesse ableiten können. Die entwickelten Modelle sollen in einem Computermodell integriert und die Ergebnisse von Modellrechnungen mit Laborversuchen verifiziert werden. Weiterhin stellt sich die Frage nach der Anwendbarkeit der Modelle in der Praxis.

Aus der direkten Fragestellung ergibt sich folgende Arbeitsthese: Die Beschreibung und Modellierung der Strömungs- und Transportprozesse in der Dimension des Porenraums kann zur Herleitung der effektiven transportbestimmenden Parameter, wie Durchlässigkeit und Dispersivität, führen.

In dieser Arbeit wird versucht, die Strömung und den Transport in einem gesättigten porösen Modellmedium zu modellieren und dann Lösungsansätze zur Herleitung der effektiven Parameter aufzuzeigen.

2. Stand der Forschung

In der Praxis werden heute eine Vielzahl von makroskopischen Modellen zur Strömungs- und Transportmodellierung verwendet. Diese Modelle lösen die kontinuumsmechanische Strömungsgleichung (DARCY-Gesetz) und die allgemeine Transportgleichung mit Hilfe verschiedenster mathematischer Methoden (Zeit- und Raumdiskretisierung, verschiedene numerische Verfahren). Eine gute Übersicht über makroskopische Modelle ist bei KINZELBACH & RAUSCH (1995), LEGE, KOLDITZ & ZIELKE (1996) zu finden. In der Praxis weit verbreitete Strömungs- und Transportmodelle sind z.B. USGS ModFlow, ModPath, RockFlow und Spring.

Die Tabelle 2.1 gibt einen Überblick über die Skalenabhängigkeit der verschiedenen Modelltypen, wobei die Übergänge zwischen den Modelltypen fließend sein können.

Tab. 2.1: Skalen und Modelltypen (aus DURNER, 1998)

Maßstab	Modelltyp
Mikro	Lattice-Gas- und Lattice-Boltzmann- Modelle Navier-Stokess-Gleichung mikroskalige Porennetzwerke
Makro	statistische Porenbündelmodelle stochastische Advektionsmodelle Advektions-Dispersions-Modelle
Feld	Advektions-Dispersions-Modelle mit effektiven Parametern mehrdimensionale heterogene Advektions-Dispersions-Modelle Mediumeigenschaften als statistische Ensemble Mediumeigenschaften als deterministische Makrostrukturen „Black-Box“-Modelle

Das Ziel aller Modellierungen für Strömungs- und Transportprozesse liegt in der Hydrogeologie allgemein in der Skala des Feldmaßstabes (DURNER, 1998). Das Problem liegt in der Ermittlung und Modellumsetzung der effektiven Transportparameter.

Die theoretischen Grundlagen dieser Arbeit lassen sich in drei Themenkomplexe aufgliedern: der Theorie granularer Materialien, der Theorie poröser Medien und der Fluidodynamik, bzw. der CFD (*Computational Fluid Dynamic*). Ziel dieser Arbeit ist letztendlich eine Synthese der aus den Themenkomplexen relevanten Teilgebiete für die im Kapitel 1 formulierten Problem- und Fragestellungen.

Theorie granularer Materialien

Die Theorie granularer Materialien gewinnt in den letzten Jahren immer mehr an Bedeutung für die Materialwissenschaften allgemein. Die Theorie beschreibt die materielle Zusammensetzung, Materialeigenschaften und Prozesse innerhalb granular zusammengesetzter Medien. Beispiele für verschiedene Simulationmethoden, wie z.B. Molekulardynamik, Diskrete-Elemente-Methode liefern die Arbeiten von HERRMANN (1995, 1999), QUINTANILLA & TORQUATO (1997, 1999), WILLIAMS & O'CONNOR (1995), WILLIAMS & REGE (1999), SCHINNER (1999), RICHARD, OGER, LEMAÎTRE, SAMSON & MEDVEDEV (1999), POTAPOV & CAMPBELL (1998). Speziell die Arbeiten von STOJAN (1995) und LEPPMEIER (1997) beschäftigen sich mit der mathematischen Beschreibung von Kugelpackungen im Raum.

Theorie poröser Medien

Die Theorie poröser Medien setzt sich allgemein mit den Eigenschaften der Medien sowie in diesen Medien ablaufenden Prozesse auseinander. Granulare Materialien können dann als poröse Medien bezeichnet werden, wenn sie Hohlräume, d.h. eine Porosität aufweisen. Das Hauptinteresse der gegenwärtigen Forschung richtet sich auf Transportprozesse innerhalb

poröser Medien und deren mikro- und makroskopische Modellierung. Entscheidend für die Prozeßmodellierung ist die Implementierung der Porenstrukturen. Übersichten über die Thematik geben DAGAN (1989), HILFER (1996), SAHIMI (1993) und DULLIEN (1992). Die Kopplung einzelner Teiltransportprozesse und der Einsatz verschiedener Porenstrukturmodelle ist oft Gegenstand für spezialisierte Fragestellungen. So setzen z.B. RIECKMANN & KEIL (1997) Porennetzwerkmodelle für die Simulation von Diffusion für allgemeine Reaktionskinetiken ein. RAGE (1996) untersuchte das Transportverhalten und Dispersion von Partikeln in zweidimensionalen periodisch angeordneten Kugelpackungen. SCHWARZER (1995) u.a. beschäftigten sich mit den Sedimentations- und Transportverhalten von Kugeln in fluiden Phasen. BERRYMAN und Co-Autoren (1987-1992) untersuchten und parametrisierten die Eigenschaften poröser Medien in Hinblick auf Transportrelevanz und verglichen untereinander empirische Modellvorstellungen (KOZENY-CARMAN, ARCHIE, DARCY-Fluß). HILFER und Co-Autoren (1991-1999) entwickelten eine Lokale Porositätstheorie und untersuchten mit dieser Theorie die Strukturen statistisch-zufälliger Porensysteme und deren Transporteigenschaften. MANWART & HILFER (1999), BISWAL & HILFER (1999) rekonstruierten zufällige poröse Medien mit Monte-Carlo Simulationen und führten daran Mikrostrukturanalysen durch. Autoren wie VIDALES, RICCARDO & ZGRABLICH (1998), FLEKKOY & PRIDE (1999) nutzen modifizierte Porennetzwerk-Kapillarmodelle zur Modellierung von Mehrphasenflüssen in porösen Medien. TORQUATO, KIM & CULE (1999) berechneten effektive Transporteigenschaften digitalisierter poröser Medien mit Hilfe von „first-passage-time“ Gleichungen. ROBERTS & TORQUATO (1999) modellierten die Mikrostrukturen poröser Medien als statistische Gauß-Prozesse.

Fluiddynamik, CFD (Computational Fluid Dynamic)

Die Fluiddynamik ist ein Teilgebiet der Physik und beschreibt allgemein das Verhalten und die Prozesse innerhalb fluiden Phasen. Der Aufgabenbereich der CFD ist die Entwicklung effektiver mathematischer Simulationsverfahren.

Beispiele für effektive Lösungsverfahren der Navier-Stokes-Gleichung liefern die Arbeiten von RANNACHER & WITTUM (1998), TUREK (1998), SCHREIBER & TUREK (1999), SUH & KIM (1999), BECKER, BRAAK, RANNACHER & WAGUET (1999) und BOGHOSIAN (1999) und Arbeiten weiterer Autoren. Andere Autoren benutzen und vergleichen alternative Simulationsverfahren für Fluiddynamikphänomene, z.B. Monte-Carlo-Simulationen versus Molekulardynamik (FREZZOTTI, 1999) sowie Lattice-Boltzmann-Simulationen (KRAFCZYK, 1995).

Die mathematischen Lösungsmethoden aus dem Bereich der Fluiddynamik sind ein unerläßliches Werkzeug zur Simulation der Strömungs- und Transportprozesse in porösen Medien.

Bedeutung für die Praxisanwendung in der Hydrogeologie

In der Hydrogeologie haben die Theorien und Lösungsansätze aus o.g. Themenkomplexen bisher keine oder nur untergeordnet Anwendung gefunden. Auf die Probleme bei der Ermittlung und Behandlung der Parameter, die direkt Einfluß auf die Transporteigenschaften haben, wie Permeabilität, Porosität, Dispersivität u.s.w., die direkt von der Porenraumgeometrie abhängig sind, wird von mehreren Autoren (HILFER (1996), LEGE, KOLDITZ & ZIELKE (1996), BERRYMAN (1995), DURNER (1998)) immer wieder hingewiesen.

Die Tabelle 2.2 zeigt den qualitativen Einfluß verschiedener Eigenschaften eines porösen Mediums und Fluideigenschaften auf die hydraulische Durchlässigkeit und die Dispersivität:

Tab. 2.2: Qualitativer Einfluß von Eigenschaften auf Durchlässigkeit und Dispersivität (aus XU & ECKSTEIN (1997), nach CHEN (1991)).

Erhöhung des Parameters	Permeabilität	Dispersivität
1. Porosität	↑	↓
2. effektive Korngröße (Verteilung)	↑	↑
3. Ungleichförmigkeitsgrad	↓	↑
4. Abweichung von Kugelform	↓	↑
5. Kornrauhigkeit	↓	↑
6. Temperatur	↑	↓
7. Viskosität	↓	↑

↑ Erhöhung des Wertes
↓ Erniedrigung des Wertes

Die Eigenschaften 1 bis 5 sind Eigenschaften des porösen Mediums die direkt durch die Porenraumgeometrie beeinflussen.

Das mikroskopische Modellierungen im Porenraum relativ gute Ergebnisse makroskopischer Parameter liefern können, zeigten schon SCHOPPER (1982-1987) und Co-Autoren in einem fraktalem „Pigeon-Hole-Modell“ sowie BERRYMAN (1987) und HILFER (1996).

3. Theoretische Grundlagen

Im folgendem Kapitel werden die für die Fragestellung relevanten theoretischen Grundlagen dargestellt. Die Benennung der porösen Medien beschränkt sich auf korngestützte poröse Medien (z.B. Sande, Kiese, Sandsteine und künstliche Medien).

3.1 Charakterisierung poröser Medien

Ein poröses Medium stellt primär ein 2 Phasen-Stoffsystem dar. Es handelt sich dabei um eine Feststoffphase und eine Nicht-Feststoffphase. Dieses 2 Phasensystem beinhaltet einige entscheidende Parameter zur Charakterisierung, die im Folgenden kurz dargelegt werden.

Porosität

Einer der wichtigsten Parameter ist die Porosität eines Mediums. Sie ist gegeben durch:

$$n = \frac{V_P}{V_G} \quad (3.1)$$

$$n_{eff} = \frac{V_P - V_H}{V_G} \quad (3.2)$$

- V_P = Volumen des Porenraumes [m³]
- V_G = Volumen des Bezugssystems [m³]
- V_H = Volumen des Haftwasseranteils [m³]
- n = Porosität [-]
- n_{eff} = effektive Porosität [-]

Die geometrische Gesamtporosität n kann mit Hilfe der Lagerungsdichtebestimmung ermittelt werden. Für den Transport ist aber die effektive, bzw. frei entwässerbare oder drainbare Porosität n_{eff} von Bedeutung. Die Abbildung 3.1 zeigt die Beziehung zwischen der Gesamtporosität, der effektiven Porosität (nutzbares Porenvolumen) und des Anteils des Haftwasserraumes in Abhängigkeit der Korngröße.

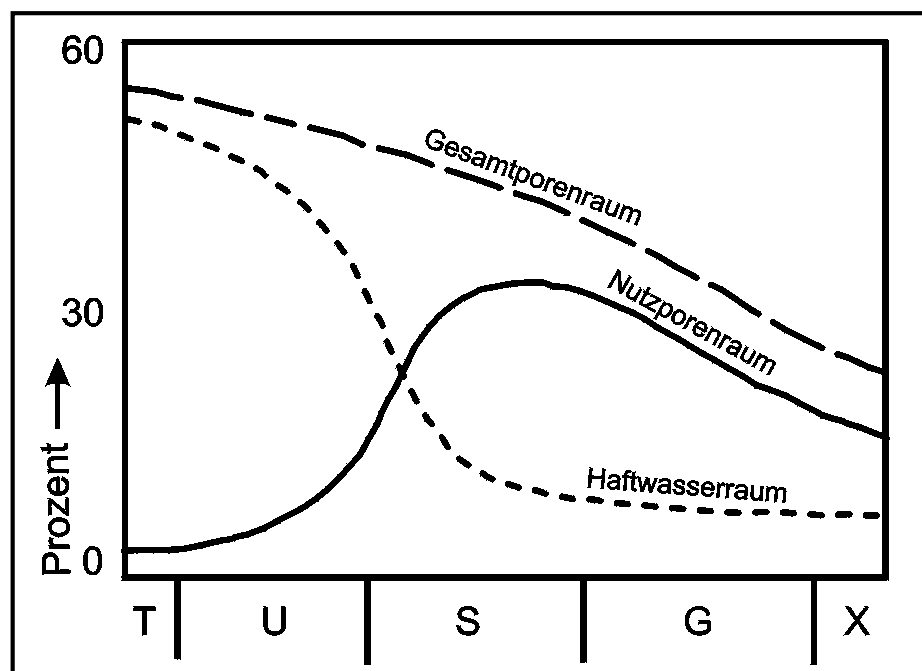


Abb. 3.1: Beziehungen zwischen Gesamtporen-, Nutzporen- und Haftwasserraum in Abhängigkeit der Korngröße (aus HÖLTING 1989)

Die Porosität ist von der Kornverteilung, der Lagerungsdichte und der Kornform und der Kornoberflächenbeschaffenheit abhängig.

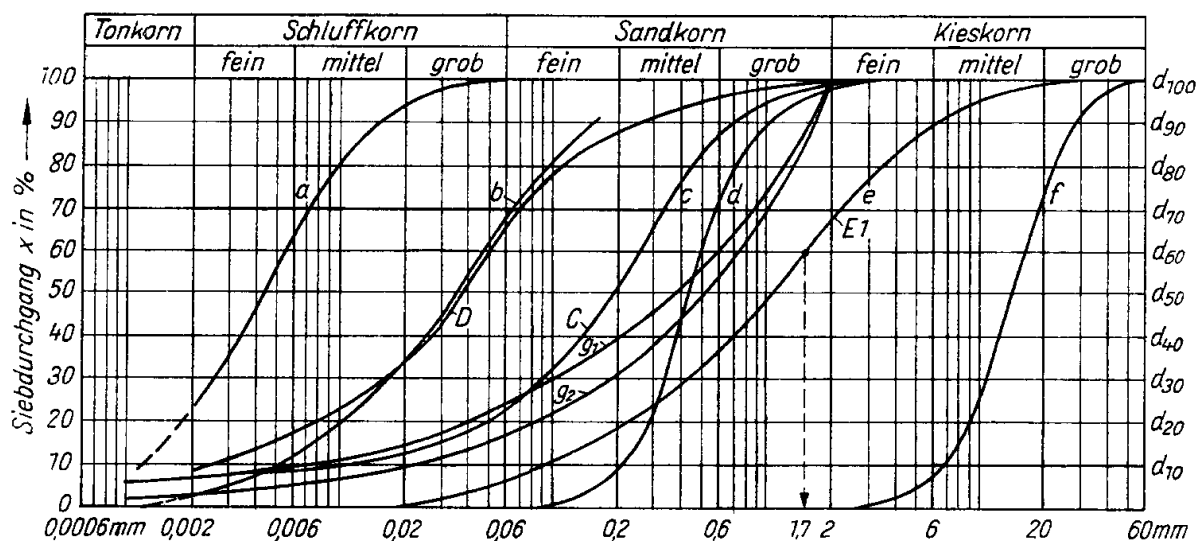
Die effektive Porosität wird i.d.R. durch Auslauf- oder Tracerversuche bestimmt. Desweiteren werden empirische Zusammenhänge zur Abschätzung der effektiven Porosität herangezogen (BEYER & SCHWEIGER, 1969, HÖLTING, 1989). MAROTZ (1968) gibt folgende Formel zur Abschätzung der effektiven Porosität aus dem Durchlässigkeitsbeiwert an:

$$n_{eff} = 46,2 + 4,5 \cdot \ln k_f \quad (3.3)$$

$\ln k_f$ = logarithmierter Durchlässigkeitsbeiwert [m/s]

Korngrößenverteilung

Die Korngrößenverteilung ist ein Merkmal der Größenzusammensetzung eines Korngemisches. Nach DIN 4022 sind die Einteilungen in verschiedene Korngrößenklassen normiert. Die Korngrößenverteilung wird durch eine Korngrößenanalyse im Labor (Sieb/Schlamm-analyse), durch statistische Auswertung von Kornauszählungen oder Bildanalyseverfahren bestimmt. Dargestellt wird eine Kornzusammensetzung i.d.R. als statistische Summenkurve. Aus dieser Kurve lassen sich für die Praxis relevante Kenngrößen ableiten. Die Abbildung 3.2 zeigt Beispiele typischer Kornsummenkurven verschiedener Bodenarten.



- | | | | | | |
|---|-------|----------------------------------------|----------------|-------------------------------------------------------------------------|-----------------------------------------|
| a | tSu | toniger Schluff | e | su'kiS | schwach schluffiger stark kiesiger Sand |
| b | t'sSu | schwach toniger stark sandiger Schluff | f | Ki | Kies, eventuell Mittelkies |
| c | t'suS | schwach toniger schluffiger Sand | g ₁ | Fuller-Kurve $x = 100 \% \cdot (d_i/d_{max})^\alpha$ mit $\alpha = 0,4$ | |
| d | S | Sand, eventuell Mittelsand | g ₂ | Fuller-Kurve mit $\alpha = 0,5$ und $d_{max} = 2 \text{ mm}$ | |

Abb. 3.2: Beispiele von Körnungslinien typischer Bodenarten (BUSCH & LUCKNER, 1974)

Die wichtigsten, auch hydraulisch bedeutsamen Parameter aus einer Kornsummenkurve sind in Tabelle 3.1 aufgeführt:

Tab. 3.1: Ableitbare Parameter aus einer Kornverteilungskurve

Ungleichförmigkeitsgrad (U)	$U = \frac{d_{60}}{d_{10}}$	(3.4)
Mediane Korngröße	d_{50}	
Mittlere Korngröße (M)	$M = \frac{d_{25} + d_{75}}{2}$	(3.5)
Sortierung (S)	$S = \sqrt{\frac{d_{75}}{d_{25}}}$	(3.6)
Schiefe (S_K)	$S_K = \frac{d_{25} + d_{75}}{d_{50}^2}$	(3.7)

d_x = Korngröße bei x [%] Durchgang aus der Summenkurve [mm]

Lagerungs- (Packungsdichte)

Die Lagerungsdichte bestimmt die Lage der Körner zueinander. Bei gleich großen idealen Kugeln ergeben sich folgende theoretische Porositäten und Lagerungsformen:

Vierpackung	66 %	
Sechserpackung	47,6 %	vgl. Abb. 3.4
Achterpackung	39,1 %	
Zehnerpackung	30,1 %	
Zwölferpackung	25,95 %	vgl. Abb. 3.5

Für die Beurteilung der Lagerungsdichte wird ein Dichteindex (I_D) eingeführt:

$$\varepsilon = \frac{n}{1-n} \quad (3.8)$$

$$I_D = \frac{\varepsilon_{\max} - \varepsilon_{\text{nat}}}{\varepsilon_{\max} - \varepsilon_{\min}} \quad (3.9)$$

ε	= Porenziffer [-] (aus der Porosität berechnet)
ε_{\max}	= maximale Porenziffer [-] (bei lockerster Lagerung)
ε_{\min}	= minimale Porenziffer [-] (bei dichtester Lagerung)
ε_{nat}	= natürliche Porenziffer [-] (bei natürlicher Lagerung)

Generell wird die Lagerung nach folgenden Kriterien bezeichnet:

$0 \leq I_D < 0,3$	locker
$0,3 \leq I_D < 0,6$	mitteldicht
$0,6 \leq I_D < 1,0$	dicht

Kornform

Ebenfalls hat die Kornform und Oberflächenbeschaffenheit der Körner Einfluß auf die Porosität. Je sperriger (d.h. abweichend von der Kugelform), desto größer wird die Porosität. KOZENY (1928) führte daraufhin einen Kornformfaktor (Abb. 3.3) ein, der in verschiedenen empirischen Modellgleichungen (z.B. Gl. 4.14, 4.17) als Korrekturfaktor Verwendung findet.

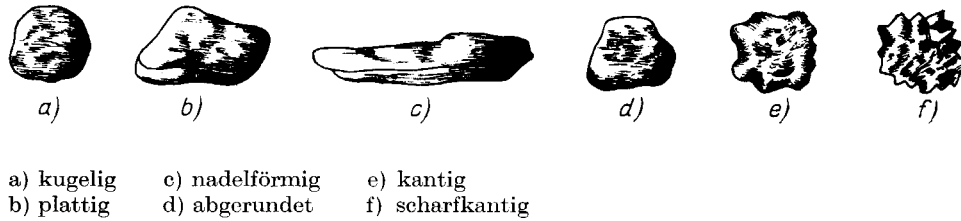


Abb. 3.3: Kornformen (nach BUSCH & LUCKNER, 1974)

Formfaktoren aus Abbildung 3.3:

a)	1,0	d)	1,0-1,1
b)	1,1	e)	1,2
c)	1,2	f)	1,3

Porenraumgeometrie

Die oben beschriebenen petrophysikalischen Kenngrößen sind für die Porenraumgeometrie entscheidend. Aufgrund der Komplexität der Porenraumgeometrien selbst in einfachen Kugelpackungen wird i.d.R. auf stark vereinfachende Parameter zurückgegriffen. Die wichtigsten Parameter sind dabei der wirksame Korndurchmesser und der hydraulisch wirksame Porenkanal(äquivalent)durchmesser.

Aus der Kornverteilungskurve kann der wirksame Korndurchmesser berechnet werden:

$$\frac{1}{d_w} = \int_0^{100} \frac{dx}{d} \approx \sum 2 \cdot \frac{\Delta x}{(d_o + d_u)} \quad (3.10)$$

x	= Siebdurchgang [%]
d_w	= wirksame Korndurchmesser [mm]
d_o	= obere Grenze einer Korngrößenklasse [mm]
d_u	= untere Grenze einer Korngrößenklasse [mm]

Die Abbildungen 3.4 und 3.5 zeigen die geometrische Ableitung des wirksamen Porenkanaldurchmessers aus einer regulären Sechserpackung (Abb. 3.4) und einer regulären Zwölferpackung (3.5). Dabei zeigt sich die räumliche Komplexität des Porenraumes in der Darstellung von Schnittebenen schon bei einfachen, d.h. regulären Kugelpackungen.

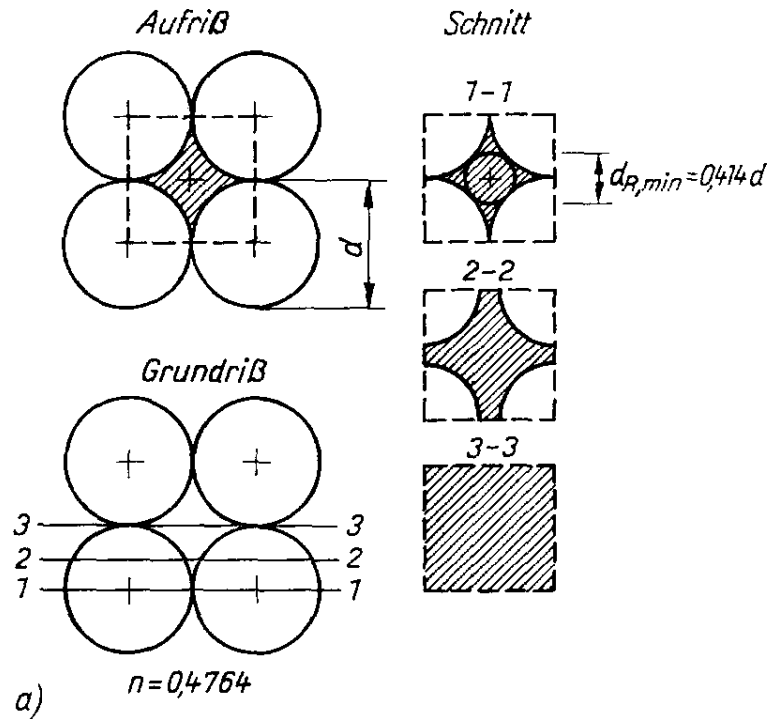


Abb. 3.4: Porenraumgeometrien aus regulären Sechserpackungen und Schnittebenen (BUSCH & LUCKNER, 1974)

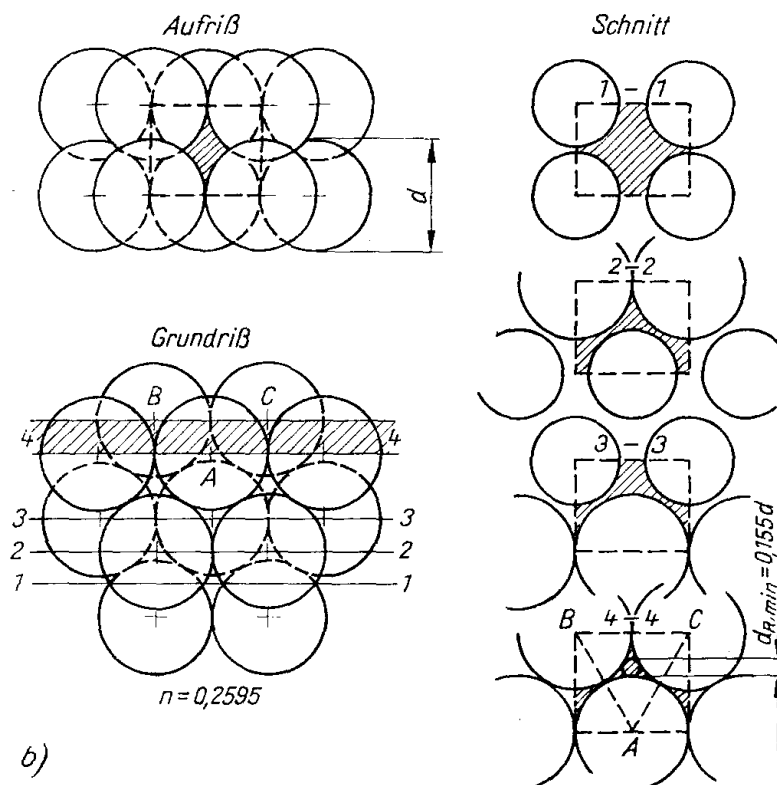


Abb. 3.5: Porenraumgeometrien aus regulären Zwölferpackungen und Schnittebenen (BUSCH & LUCKNER, 1974)

Die Porenraumgeometrie, insbesondere der hydraulisch wirksame Korn- und Porenäquivalentdurchmesser, sind für die Beurteilung von z.B. Kolmations- und Suffosionsprozessen von Be-

deutung. Dabei werden diese Parameter aus Proportionalitätsfaktoren, dem Rundungsgrad und der Kornverteilungskurve abgeleitet und in verschiedene Beziehungen eingesetzt.

Nach Abbildung 3.4 beträgt der minimale „Porendurchmesser“ in regulären Sechserpackungen das 0,414-fache des Kugeldurchmessers. In regulären Zwölferpackungen (Abb. 3.5) beträgt der minimale „Porendurchmesser“ das 0,155-fache, also deutlich geringer als in der Sechserpackung. Alle anderen Packungsformen oder Kugelpackungen mit unterschiedlichen Größenverteilungen liegen in den Verhältniswerten zwischen 0,414 und 0,155 oder niedriger.

Nach BUSCH & LUCKNER (1974) wird der hydraulisch wirksame Porenäquivalenzdurchmesser d_k nach folgender Beziehung errechnet:

$$d_k = 0,455 \cdot \sqrt[6]{U} \cdot \varepsilon \cdot d_{17} \quad (3.11)$$

Werden in diese Gleichungen die Werte für reguläre Sechser- und Zwölferpackungen eingesetzt (Ungleichförmigkeit=1, $d_{17}=d$ und die entsprechenden Porenziffern), erhält man die gleichen o.g. Verhältnisse (BUSCH & LUCKNER, 1974).

3.2 Strukturmodelle poröser Medien

Bei der Charakterisierung und Modellierung poröser Medien wird davon ausgegangen, daß das Modell des porösen Mediums alle Eigenschaften beinhalten soll, die Einfluß auf die zu betrachtenden Prozesse haben (RICKMANN, 1997, u.a.). Daher kann je nach Fragestellung auf eine Vielzahl von Modellvorstellungen poröser Medien zurückgegriffen werden (vgl. Tabelle 2.1). Die Skala reicht dabei von mikroskopischen Modellen, die den Porenraum beschreiben, bis zu makroskopischen Modellen, in denen die Eigenschaften des porösen Mediums in sog. repräsentativen Elementarvolumen zusammengefaßt sind.

HILFER (1996) unterteilt die Modellvorstellungen in deterministische und stochastische Geometrien (unendliche und diskrete Räume). Diese Einteilung ist bei der Modellgenerierung eines porösen Mediums von entscheidender Bedeutung. Eine umfangreiche Übersicht über die Modellierung poröser Medien liefert SAHIMI (1993). Die Einteilung der Modelle in dieser Übersicht lassen sich ebenfalls in deterministische und stochastische Geometrievorstellungen aufgliedern.

Bei einer Vielzahl von Fragestellungen werden mikroskopische Porenmodelle angewandt. Die wichtigsten dabei sind:

- Kapillarmodelle
- Kornmodelle
- Netzwerkmodelle
- Perkolationsmodelle
- Rekonstruktionsmodelle (image processing, autocorrelation)
- Fraktalmodelle

Der Realität der Mikrostrukturen poröser Medien kommen die sog. Rekonstruktionsmodelle relativ nahe. Durch Anwendung von Autokorrelationsfunktionen können die Mikrostrukturen poröser Medien sehr gut nachgebildet werden, welches die Abbildungen 3.6 und 3.7 veranschaulichen.

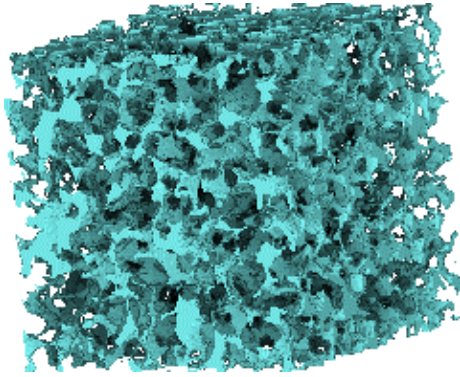


Abb. 3.6: 3D-Porenraum eines Fontainebleau Sandsteines, gewonnen aus image-processing Daten (BISWAL et al., 1999)

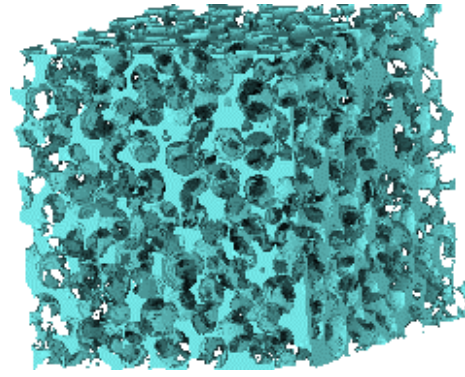


Abb. 3.7: Simulierter 3D-Porenraum mit gleicher Porosität wie Beispiel in Abb. 3.6 (BISWAL et al., 1999)

In dieser Arbeit wird auf ein klassisches Boolesches Porenmodell zurückgegriffen. Die allgemeine Definition des Modells lautet mathematisch formuliert (nach DAGAN, 1989):

$$h(x,t) = 0 \text{ für } x \in V_V \text{ und } h(x,t) = 1 \text{ für } x \in V_S \quad (3.12)$$

$h(x,t)$ = Funktion des Ortsvektors x und einer „Laufvariable“ t

$x \in V_V$: Ortsvektor x liegt im Porenraum V_V

$x \in V_S$: Ortsvektor x liegt in der Matrix (Festphase) V_S

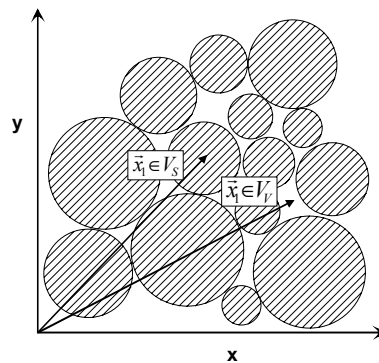
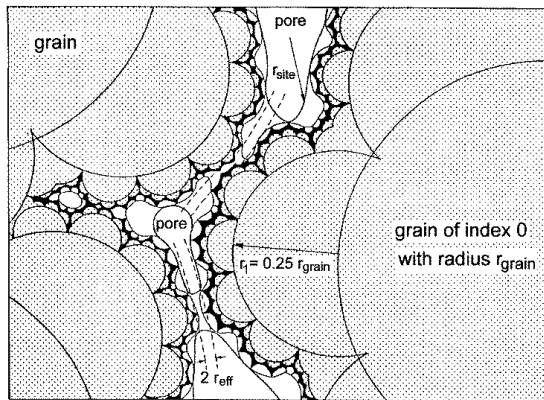


Abb. 3.8: Boolesches Korn/Porenmodell

Die Abbildung 3.8 veranschaulicht die Funktion $h(x,t)$.

$$P(x_1, x_2, \dots, x_n) = \langle h(x_1), h(x_2), \dots, h(x_n) \rangle \quad (3.13)$$

Die Gleichung beschreibt, daß die Verteilungswahrscheinlichkeit der Vektoren im Porenraum und in der Feststoffmatrix sich aus den mittleren Funktionsergebnissen der Funktion $h(x,t)$ ergeben. Diese Gleichung dient zugleich als stochastisches Boolesches Porenmodell. Auch die Rekonstruktionsmodelle, bzw. Autokorrelationsmodelle können als Boolesche Modelle aufgefaßt werden (Abb. 3.7 und Abb. 3.9).



Eine weitere Methode zur Charakterisierung der Porenräume und Ableitung der hydraulischen Parameter ist die fraktale Dimension der Porenräume (PAPE et al., 1987). In diesem Pigeon-Hole-Modell wird der effektive Porendurchmesser und die spezifischen Oberflächen aus der fraktalen Dimension errechnet und anschließend in die klassischen Beziehungen nach CARMAN (1937) und KOZENY (1928) eingesetzt (Kap. 4), um die hydraulischen Parameter abzuleiten.

Abb. 3.9: Pigeon-Hole-Model - Fraktale Porenräume (PAPE et al. 1987)

3.3 Strömungs- und Transportprozesse in porösen Medien und Modellierung

Wie erwähnt spielen die Eigenschaften des porösen Mediums die entscheidende Rolle bei Strömungs- und Transportprozessen. Die einzelnen Prozesse lassen sich wie folgt aufteilen:

Strömungsprozesse

Advektion, Konvektion	!!
Mehrphasenfluß (ungesättigte Strömung)	!!

Transportprozesse

molekulare Diffusion	
Matrixdiffusion	!!
mechanische Dispersion	!!
Verdünnung	
Verdampfung	
Gasaustausch	!
radioaktiver Zerfall	
Filtration (Partikeltransport)	!
Lösung und Fällung	
Adsorption, Desorption, Ionenaustausch (Retardierung)	!
Redoxreaktionen	
Komplexbildung	
mikrobiologische Prozesse	

Die mit „!“ gekennzeichneten Prozesse sind unmittelbar und entscheidend mit der Porenraumgeometrie verbunden. Entsprechend finden sich in den Modellgleichungen, welche den Transportprozeß beschreiben, Geometrieparameter des porösen Mediums.

Im Bereich des Grundwassers werden die Advektion, hydromechanische Dispersion, die Retardierung und der Abbau als Prozesse, repräsentiert in Modellgleichungen, beschrieben. Bei der Modellierung dieser Prozesse wird von der Beschreibung der Eigenschaften des porösen Mediums in repräsentativen Elementarvolumen ausgegangen.

Strömungsgleichung eines viskosen Fluids

Die Strömung eines inkompressiblen, viskosen Fluids wird durch die Navier-Stokes-Gleichung beschrieben. Diese Gleichung leitet sich aus der Newtonschen Bewegungsgleichung für Fluide und dem Kontinuitätsgesetz ab. Auf die Herleitung wird an dieser Stelle verzichtet und auf entsprechende Literatur verwiesen (z.B. bei RAGE, 1996, HILFER, 1996).

$$\underbrace{\frac{\partial \vec{v}}{\partial t}}_{\text{Fluidbeschleunigung}} + \underbrace{(\vec{v} \cdot \nabla) \vec{v}}_{\text{Druckgradient}} = - \underbrace{\frac{1}{\rho}}_{\text{Druckgradient}} \nabla p + \underbrace{\frac{\eta}{\rho}}_{\text{viskoser Reibungsterm}} \nabla^2 \vec{v} + \underbrace{\frac{\vec{f}}{\rho}}_{\text{äußere Beschleunigungskräfte}} \quad (3.14)$$

\vec{v}	= Fluidgeschwindigkeitsvektor [m/s]
\vec{f}	= äußerer Kraftvektor [N]
t	= Zeit [s]
p	= Fluiddruck [Pa]
ρ	= Dichte des Fluids [kg/m ³]
η	= dynamische Viskosität [Pa·s]

Die Gleichung (3.14) beschreibt die Beschleunigung eines inkompressiblen viskosen Fluides aufgrund von Druckunterschieden, der inneren und äußeren viskosen Reibung (Negativbeschleunigung) und äußeren Kräfteinflüssen im freiem Raum. Die bekannte Stokes-Gleichung und das Gesetz von Hagen-Poiseuille leiten sich aus der allgemeinen Navier-Stokes-Gleichung ab. Die Navier-Stokes-Gleichung gilt für laminare und turbulente Strömungen. Die in der Praxis angewandte Reynoldszahl ergibt sich aus der Entdimensionierung der Navier-Stokes-Gleichung und kann unter Umständen für die Charakterisierung der Strömung (laminar oder turbulent) herangezogen werden.

$$\text{Re} = \frac{\rho \cdot l \cdot \bar{v}}{\eta} \quad (3.15)$$

Re	= Reynoldszahl [-]
l	= Länge/Durchmesser des Bezugssystems [m]
\bar{v}	= mittlere Fluidgeschwindigkeit [m/s]

Makroskopische gesättigte Strömungsgleichung (DARCY-Fluß)

Das mit Gleichung (3.16) ausgedrückte DARCY-Gesetz leitet sich aus der Navier-Stokes-Gleichung (3.14) ab. Eine Herleitung ist u.a. bei HILFER, 1996 zu finden.

$$\underline{v_f} = -\underline{k_f} \cdot \nabla h \quad (3.16)$$

v_f	= Filter- oder DARCY-Geschwindigkeit [m/s]
$\underline{k_f}$	= Durchlässigkeitsbeiwert als Tensor [m/s]
∇h	= hydraulisches Potential [-]

Die Fließrate oder DARCY-Geschwindigkeit (Filtergeschwindigkeit) wird aufgrund eines hydraulischen Potentials (hydraulischer Gradient) und des Durchlässigkeitsbeiwertes, bzw. der Permeabilität des porösen Mediums hervorgerufen und beeinflusst (Abb. 3.10). Dabei muß der Durchlässigkeitsbeiwert als Tensor in mehrdimensionalen Strömungen aufgefaßt werden. Die vor allem in der Erdölgeologie gebräuchliche Permeabilität (Definition in Abb. 3.11) hängt mit dem Durchlässigkeitsbeiwert über folgende Beziehung zusammen:

$$\underline{k_f} = \underline{K} \cdot \frac{\rho \cdot g}{\eta} \quad (3.17)$$

\underline{K}	= Permeabilität als Tensor [m ²]
g	= Erdbeschleunigung [m/s ²]

Die in der Hydrogeologie häufig angewandte Abstandsgeschwindigkeit v_a wird folgendermaßen definiert (vgl. auch Abb. 3.13):

$$v_a = \frac{v_f}{n_{eff}} \quad (3.18)$$

In diesen Gleichungen finden sich 2 entscheidende Parameter, die direkt vom porösen Medium abhängig sind: der Proportionalitätsfaktor Durchlässigkeitsbeiwert und die effektive Porosität.

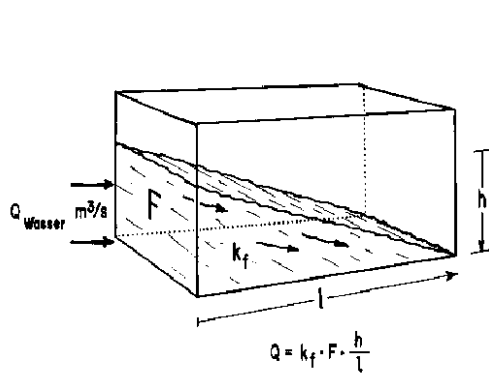


Abb. 3.10: Definition des DARCY-Gesetzes (aus HÖLTING, 1989)

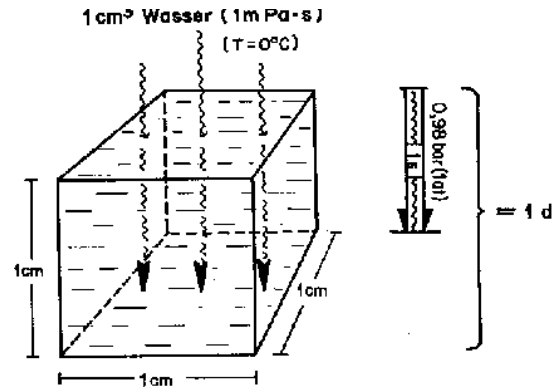


Abb. 3.11: Definition der Permeabilität und der Einheit DARCY (aus HÖLTING, 1989)

Das Gesetz von DARCY ist in dieser Form nur unter laminaren Strömungsverhältnissen im Porenraum gültig. Die Abbildung 3.12 zeigt den Zusammenhang zwischen Durchlässigkeitsbeiwert, dem hydraulischen Potential und dem Gültigkeitsbereich des DARCY-Gesetzes.

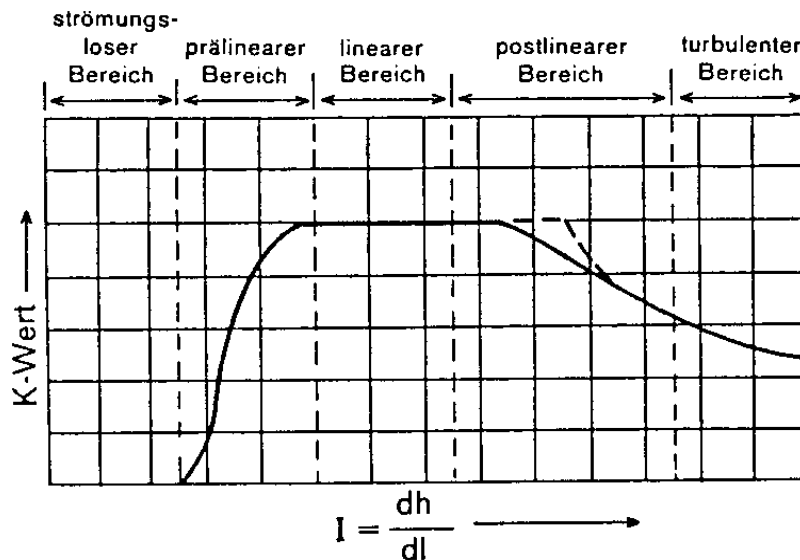


Abb. 3.12: Gültigkeitsbereich des DARCY-Gesetzes (WALZENBACH, 1991)

Hierbei zeigt sich, daß der Durchlässigkeitsbeiwert im prä- und postlinearen Strömungsbereich keine Konstante mehr darstellt. Die Ursache im prälinearen Bereich ist in den molekularen Anziehungskräften des Fluids und den Kornoberflächen zu suchen. Im turbulenten Bereich kommt es durch die Turbulenzen im Porenraum zu stark schwankenden

Druck- und Bahngeschwindigkeiten, die wechselnde Fließwiderstände erwarten lassen. Zur Abschätzung der Gültigkeit des DARCY-Gesetzes wird i.d.R. die Reynoldszahl herangezogen, die in Aquiferen anders definiert wird.

HANTUSH (1964) gibt für Aquifere die Reynoldszahl folgendermaßen an:

$$\text{Re} = \frac{\rho \cdot d_w \cdot v_f}{\eta} \quad (3.19)$$

In BROWN et al. (1972) wird eine weitere Definition für die Reynoldszahl angegeben:

$$\text{Re} = \frac{d_w \cdot v_B}{\nu} \cdot \frac{1}{0,75 \cdot n_{eff} + 0,23} \quad (3.20)$$

$$\begin{aligned} v_B &= \text{Bahngeschwindigkeit des Fluides [m/s]} \\ \nu &= \text{kinematische Viskosität [m}^2\text{/s]} \end{aligned}$$

Das Problem hierbei liegt in der ungenügenden Kenntnis der Bahngeschwindigkeiten und der effektiven Porosität.

Nach JAKOB (1950) und TODD (1960) gilt das Gesetz von DARCY bei einer Reynoldszahl kleiner 10. Darüber geht die laminare Strömung in eine turbulente Strömung über.

Makroskopische Modellierung der gesättigten Strömung in einem porösen Medium

Die Kopplung des Kontinuitätsgesetzes mit dem DARCY-Gesetz führt zur allgemeinen makroskopischen Strömungsgleichung, die häufig in der Hydrogeologie bei der Modellierung von Grundwasserströmung angewandt wird:

$$\underbrace{\nabla(\underbrace{m \cdot k_f}_{\text{Transmissivität}} \cdot \nabla h)}_{\text{Änderung des hydraulischen Potentials}} + \underbrace{q}_{\text{Quell- und Senkenterme}} = \underbrace{S \cdot \frac{\partial h}{\partial t}}_{\text{Speicherterm}} \quad (3.21)$$

$$m = \text{Mächtigkeit des wassererfüllten Grundwasserleiters [m]}$$

$$q = \text{Quelle und/oder Senke [m}^3\text{/s]}$$

In der Gleichung wird der Tensor des Durchlässigkeitsbeiwertes als Eigenschaft des porösen Mediums in Elementarvolumen repräsentiert.

Zur Lösung dieser Gleichung sind Randbedingungen erforderlich, auf die hier nicht eingegangen werden soll. Die Anwendung der Gleichung auf spezielle Systeme (Randbedingungen) erlaubt analytische- oder teilanalytische Lösungen, die in der Praxis weit verbreitet sind (KINZELBACH & RAUSCH (1995), LEGE, KOLDITZ & ZIELKE (1996) und KRUSEMAN & DE RIDDER (1994)).

Makroskopische Modellierung des Transports

Die wichtigsten Transportprozesse sind die Advektion, molekulare Diffusion, mechanische Dispersion, Sorption, chemische- und biochemische Reaktionen sowie der radioaktive Zerfall beim Transport radioaktiver Substanzen. Diese Transportprozesse finden sich in der allgemeinen Transportgleichung wieder.

$$\underbrace{-v_a \cdot \nabla c}_{\text{Advektion}} + \underbrace{D_H \cdot \nabla^2 c}_{\text{Dispersion und Diffusion}} - \underbrace{B \cdot \nabla c}_{\text{Abbau/Wachstum}} - \underbrace{F \cdot \nabla c(l)}_{\text{Filtration}} = \underbrace{(1 + A(c)) \cdot \frac{\partial c}{\partial t}}_{\text{Adsorption, Reaktion, Speicheränderung}} \quad (3.22)$$

Die Vernachlässigung der Reaktions- und Abbausterme führt zur allgemeinen advektiven-dispersiven Transportgleichung eines idealen Tracers:

$$\frac{\partial c}{\partial t} = \underbrace{-v_a \cdot \nabla c}_{\text{Advektion}} + \underbrace{D_H \cdot \nabla^2 c}_{\text{hydromech. Dispersion}} \quad (3.23)$$

$$D_H = \alpha \cdot v_a + D_M \quad (3.24)$$

c	= Konzentration (Menge/Volumen) [g/m ³]
D_M	= Molekularer Diffusionskoeffizient [m ² /s]
D_H	= Hydromechanische Dispersion [m ² /s]
α	= Dispersivität [m]

Der Transport eines idealen Tracers wird durch die Advektion und hydromechanische Dispersion beschrieben. Die hydromechanische Dispersion setzt sich aus der Dispersivität des porösen Mediums, der Abstandsgeschwindigkeit und der molekularen Diffusion zusammen (Gl. 3.24).

Die dahinterstehende Dispersionstheorie gilt seit Jahrzehnten als anerkannte mathematische Beschreibung des Transportes von idealen Tracern in gesättigten porösen Medien (SCHEIDEGGER, 1961, BEAR, 1972).

Analog zur Reynoldszahl (Gl. 3.15 und 3.19) kann auch aus der Transportgleichung ein dimensionsloser Parameter, die Peclet-Zahl (Pe) abgeleitet werden. Zwei Varianten sind folgendermaßen definiert:

$$Pe = \frac{l \cdot v_a}{D_M} \quad (3.25)$$

$$Pe = \frac{l \cdot v_a}{D_L} \quad (3.26)$$

l	= Länge/Durchmesser des Bezugssystems [m]
D_L	= Longitudinale Dispersion [m ² /s]

Bei Peclet-Zahlen (Gl. 3.25) größer 1 dominiert der advective-dispersive Transport, bei Pecletzahlen kleiner 1 der diffusiv gesteuerte Transport. Wird die Peclet-Zahl nach Gl. 3.26 definiert, überwiegt bei Peclet-Zahlen kleiner 1 der dispersive Transport, andernfalls der advective Transportanteil.

Für den eindimensionalen Fall mit der Randbedingung $c(0,t)=c_0$ und $c(x,t)=0$ existieren eine Reihe analytischer Lösungen. Eine eindimensionale Form kann durch Laplace-Transformation gewonnen werden:

$$\frac{c(x,t)}{c_0} = \frac{1}{2} \left[\operatorname{erfc} \left(\frac{x - v_a \cdot t}{2 \cdot \sqrt{D_L \cdot t}} \right) + \exp \left(\frac{v_a \cdot x}{D_L} \right) \cdot \operatorname{erfc} \left(\frac{x + v_a \cdot t}{2 \cdot \sqrt{D_L \cdot t}} \right) \right] \quad (3.27)$$

x = Entfernung vom Injektionspunkt [m]

Aus diesen analytischen Lösungen wird klassisch die Dispersivität aus Tracerversuchen in Säulen durch Kurvenanpassung hergeleitet. Es existieren eine Reihe weiterer auch mehrdimensionaler Lösungen, die bei der Auswertung von Tracerversuchen im Gelände (an Grundwassermeßstellen und Brunnen) angewandt werden.

Die Abbildung 3.13 veranschaulicht die Begriffe Abstands- und Bahngeschwindigkeit sowie den tatsächlichen Transport eines idealen Tracers aufgrund der korngestützten mechanischen Dispersion in einem repräsentativen Elementarvolumen (REV) eines porösen Mediums. Ursache der mechanischen (korngerüstbedingten) Dispersion sind die tatsächlichen Bahngeschwindigkeiten des Fluides im Porenraum. Die Bahngeschwindigkeiten sind also direkt von der Porenraumgeometrie und Porengrößen abhängig.

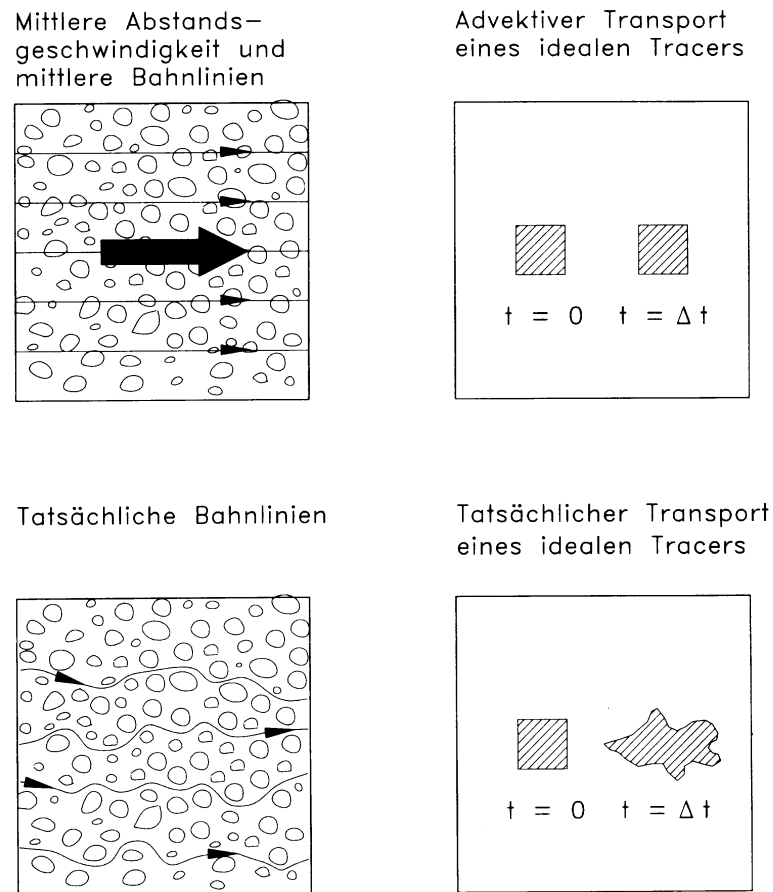


Abb. 3.13: Zusammenhang Abstands- und Bahngeschwindigkeiten (KINZELBACH, 1992)

Im Rahmen dieser Arbeit wird insbesondere die korngerüstbedingte Dispersion (Abb. 3.14), deren Ursache in den Porenraumgeometrien liegt, betrachtet. Allgemein muß aber die Dispersion als skalenabhängige Größe aufgefaßt werden. Die Abbildung (3.14) veranschaulicht die Skalenabhängigkeit der Dispersion.

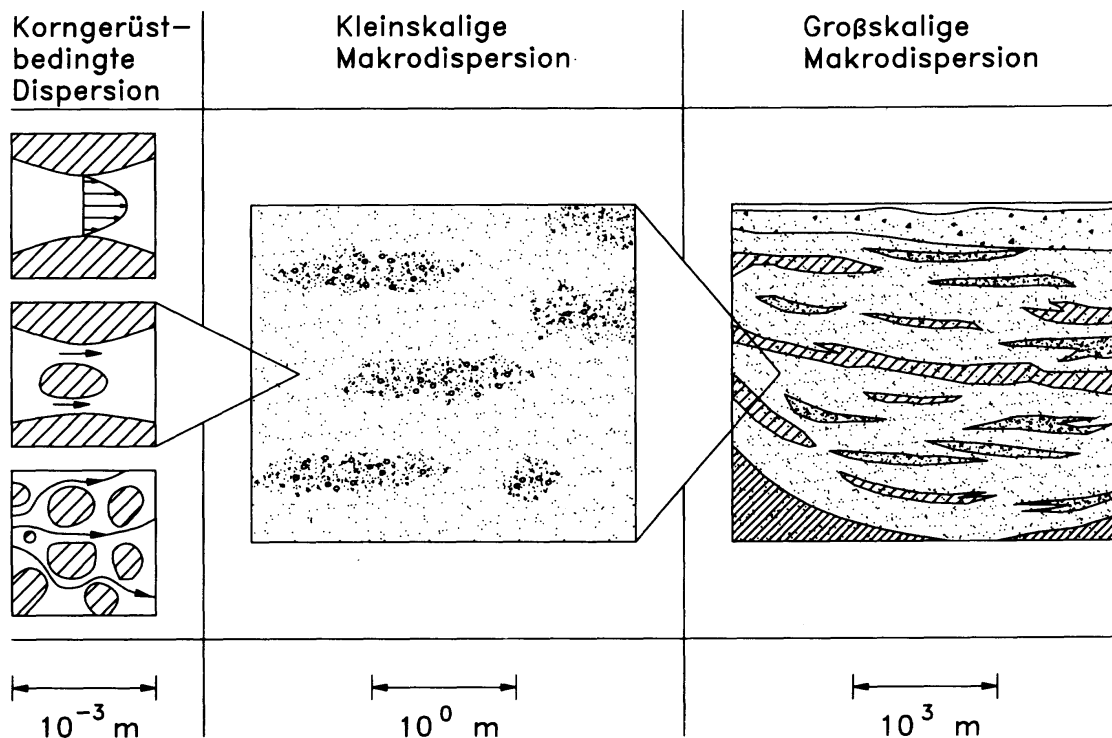


Abb. 3.14: Skalenabhängigkeit der Dispersion (KINZELBACH, 1992)

In der Praxis, d.h. bei der Auswertung von Tracerversuchen, werden verschiedene Methoden zur Ableitung der hydromechanischen Dispersivität angewandt.

Folgende Methoden werden in der Praxis zur Ermittlung der Dispersivität häufig eingesetzt (nach JAKOWSKI, 1995):

- *Verfahren der Parameteranpassung*

Bei dieser Methode werden die Parameter Dispersivität und effektive Porosität in die allgemeine Transportgleichung eingesetzt (numerische oder analytische Lösungen) und die Parameter entsprechend an einer gemessenen Konzentrationsverteilung angepaßt (*trial and error*).

- *Methode der kleinsten Quadrate*

Anpassungsparameter bei dieser Methode ist die Quadratsumme der Abweichungen vom Erwartungswert. Gestartet wird mit sinnvollen Anfangswerten. Es wird solange iteriert, bis eine gewünschte Genauigkeit (Abweichung erreicht ein Minimum), erreicht ist. Die Dispersionskoeffizienten können dann aus der Ergebniskurve abgeleitet werden.

- *statistische Momentenmethode*

Bei dieser Methode werden aus der Tracerdurchgangskurve statistische Momente ermittelt. Diese Momente liefern Größen zur Gestaltbeschreibung der Durchgangskurve. Unter bestimmten Annahmen können aus den Momenten die gesuchten Parameter berechnet werden. Auf die Momentenmethode soll hier etwas näher eingegangen werden: Die statistischen Momente einer Konzentrations-Zeitverteilung (c,t) werden wie folgt definiert (Tab. 3.2):

Tab. 3.2: Statistische Momente einer Konzentrations/Zeit-Verteilung

0. Moment	$M_0 = \int_0^{\infty} c \cdot dt$	(3.28)
1. Moment	$M_1 = \int_0^{\infty} t \cdot c \cdot dt$	(3.29)
2. Moment	$M_2 = \int_0^{\infty} (t - \mu)^2 \cdot c \cdot dt$	(3.30)
3. Moment	$M_3 = \int_0^{\infty} (t - \mu)^3 \cdot c \cdot dt$	(3.31)
4. Moment	$M_4 = \int_0^{\infty} (t - \mu)^4 \cdot c \cdot dt$	(3.32)

Die Verteilungsfunktion $F(t)$ berechnet sich aus dem Flächeninhalt unter der Dichtefunktion $f(t)$ und lässt sich ausdrücken als:

$$f(t) = \frac{1}{\sigma \cdot \sqrt{2 \cdot \pi}} e^{-\frac{1}{2} \left(\frac{t - \mu}{\sigma} \right)^2} \quad (3.33)$$

$$F(t) = \frac{1}{\sigma \cdot \sqrt{2 \cdot \pi}} \int_{-\infty}^t e^{-\frac{1}{2} \left(\frac{t - \mu}{\sigma} \right)^2} dt \quad (3.34)$$

Aus diesen statistischen Momenten lassen sich unter der Annahme einer Gaußschen Normalverteilung mit der Dichtefunktion (Gl. 3.33) die gesuchten Parameter berechnen (Tab. 3.3):

Tab. 3.3: Ableitbare Parameter aus statistischen Momenten einer Konzentrations/Zeit-Verteilung

mittlere Verweilzeit	$t_i = \mu = \frac{M_1}{M_0}$	(3.35)
mittlere Abstandsgeschwindigkeit	$\bar{v}_a = \frac{M_0 \cdot L}{M_1}$	(3.36)
Varianz der Konzentrations-Zeit-Verteilung	$\sigma^2 = \frac{M_2 \cdot M_0 - M_1^2}{M_0^2}$	(3.37)
Dispersivität	$\alpha_L = \frac{M_2 \cdot M_0 - M_1^2}{2 \cdot M_1^2} \cdot L$	(3.38)
Schiefe	$\alpha_3 = \frac{M_3}{\sigma^3 \cdot M_0}$	(3.39)
Kurtosis	$\alpha_4 = \frac{M_4}{\sigma^4 \cdot M_0}$	(3.40)

Generell lässt sich dieses Verfahren abgewandelt auch zur Berechnung und Beurteilung von Kornverteilungskurven heranziehen (GEBELEIN, 1956).

- *Summenkurvenmethode*

Diese Methode wird in der Praxis sehr häufig angewandt. Der longitudinale Dispersionskoeffizient (D_L) wird aus der Zeit/Konzentrations-Summenkurve folgendermaßen berechnet:

$$D_L = \frac{\bar{v}_a^2 \cdot (t_{84,1} - t_{15,9})^2}{8 \cdot t_{50}} \quad (3.41)$$

Dabei stellt die Geschwindigkeitsgröße die mediane Abstandsgeschwindigkeit dar und unter der Annahme einer Gaußschen Normalverteilung entsprechen die Zeitwerte $t_{84,1}$ und $t_{15,9}$ die Wendepunkte und t_{50} den Maximalwert der Glockenkurve.

- *numerische Methoden*

Für die Lösung der allgemeinen Transportgleichung stehen eine Reihe unterschiedlichster numerischer Verfahren zur Verfügung. Bei den Modellierungen im Bereich des Grundwassers werden sehr häufig Finite-Differenzen- und Finite-Elemente Verfahren angewandt. Dabei wird die numerische Lösung über Parameteranpassung an Meßwerte (Konzentrations-Zeit-Verteilungen) angepaßt. Weitere in der Praxis angewandte Verfahren sind das MOC (*Method of Characteristics*) und das Monte-Carlo (*Random-Walk*) Verfahren. Auf Finite-Differenzen und Random-Walk Verfahren wird in dieser Arbeit noch weiter eingegangen (Kap. 4).

Bei allen o.g. Methoden muß die Dispersivität eines porösen Mediums über Parameteranpassung (Dispersivität und Abstandsgeschwindigkeit) an Meßwerte (z.B. in einem Modellgebiet) verifiziert werden. Dies kann unter Umständen zu erheblichen Problemen führen und bedarf in aller Regel großer Erfahrung der Modellierer.

Bei der Betrachtung der Makrodispersivität kann die statistische Verteilung der Durchlässigkeitsbeiwerte zur Ermittlung der Dispersivität herangezogen werden. Die Streuung der Einzelwerte um den Mittelwert der Durchlässigkeit bestimmt das Anwachsen der Dispersivität (GELHAR & AXNESS, 1983, SCHÖPFER, 1989 u.a.). Demnach kann man folgende Beziehung aufstellen:

$$\alpha_L = \left(\frac{\sigma(\ln k_f)}{\overline{\ln k_f}} \right)^2 \cdot \lambda \quad (3.42)$$

α_L = longitudinale Dispersivität [m]
 λ = Korrelationslänge [m]

4. PoreFlow – ein Korn/Porenmodell zur Strömungs- und Transportmodellierung

Im Rahmen der Dissertation wurde das Computerprogramm **PoreFlow** entwickelt. Mit Hilfe dieses Programmes und den darin integrierten Teilmodulen, deren Grundlagen im Folgenden beschrieben werden, wird die im Kapitel 1 aufgestellte Fragestellung bearbeitet.

Grundidee zur Entwicklung des Modells

Im ersten Ansatz lassen sich korngestützte poröse Medien, wie Sande und Kiese, durch nicht überlappende Kugelpackungen bei variabler Kugelradienverteilung beschreiben. Mit einem solchen Modell lassen sich korngestützte poröse Medien mit verschiedenen Eigenschaften (Kornverteilung, Lagerungsdichte, Porosität) nachbilden. Entscheidend für die Geometrie der entstehenden Poren ist dabei die Kornverteilung im Raum, sowie die Art der Anordnung (Koordination) der Kugeln.

Bei der Modellierung eines solchen Mediums entsteht das Problem, daß Medien in realen Dimensionen (z.B. sandbefüllte Säulen bei Laborversuchen) aus mehreren 10^6 Körnern bestehen können. Dieses Problem wurde dadurch gelöst, daß das Modell nicht den physikalischen Anlagerungsprozeß nachbildet (z.B. Sandhaufenbildung über molekular-dynamische Teilchenmodellierung), welches bei entsprechenden Teilchenzahlen einen unverträglich hohen Rechenaufwand bedeutet (TUREK, 1996, 1998), sondern für jedes Korn (Kugel) den optimalen Anlagerungspunkt auf analytisch-geometrischer Basis (analytische Geometrie im 3D-Vektorraum) errechnet, so daß der Rechenaufwand zur Mediengenerierung drastisch reduziert wird.

Nach der Anlagerungsmodellierung können direkt grundlegende Eigenschaften des Mediums errechnet werden. Generell resultiert der Porenraum aus der Differenz zwischen dem Vektorraum des „Gefäßes“ und der Summe der Vektorräume der Körner (Kugeln). Der aus dieser Differenz resultierende Porenraum ist ein äußerst komplexes räumliches Gebilde (vgl. Abb. 3.4 bis 3.8).

Nach SIHAMI (1993) ist das hier vorgestellte Modell als geometrisches, nicht überlappendes Kugelmodell (Boolesches Modell, Abb. 3.8) einzustufen.

4.1 Realisation in einem PC-Anwendungsprogramm

Das Computerprogramm PoreFlow wurde in PASCAL (DELPHI) auf PC entwickelt. Zur Auswertung und Datenweiterverarbeitung dient MATLAB, welches über Schnittstellen angesteuert wird. Als Grafikschnittstelle für die 2D, 3D – Datenausgabe wurde OpenGL in das Gesamtprogramm integriert.

Sämtliche Simulationsläufe wurden auf Pentium III, größer 500 MHz und min. 256 MB Arbeitsspeicher durchgeführt.

Das Programmpaket ist in 5 Teile modular untergliedert, die entsprechend an die Reihenfolge von Simulationsläufen gekoppelt sind:

Systemdateneingabe

- Dimensionierung des Bezugssystems
- Definition der SOLL-Kornverteilung
- Auswahl der Strategicalgorithmen

Anlagerungsmodellierung

- Modellierung der Anlagerung entsprechend der Vorgaben
- Diskretisierung des Raumes

Fluidflußmodellierung

- Modellierung des Druck- und Geschwindigkeitsfeldes im diskretisiertem Raum
- Berechnung hydraulischer Eigenschaften aus Geschwindigkeits- und Druckdaten

Transportmodellierung

Lösung der konserativen Transportgleichung, Berechnung Konzentrationsverteilungen
Partikel-Tracking: Monte-Carlo-Simulation, Bahnwegberechnung

Auswertung der Daten

Grafische Darstellung (2D, 3D) der Modellierungsergebnisse und des Strukturmodells
Plotgenerierungen
statistische Auswertung der Modellierungsergebnisse
Berechnung, Ableitung der hydraulischen Parameter

Die folgende Abbildung veranschaulicht den generellen Ablauf der Simulation zur Ermittlung der Transportparameter und stellt gleichzeitig die Modelleingangsgrößen und Ausgabe-
größen/Ergebnisse der jeweiligen Schritte dar:

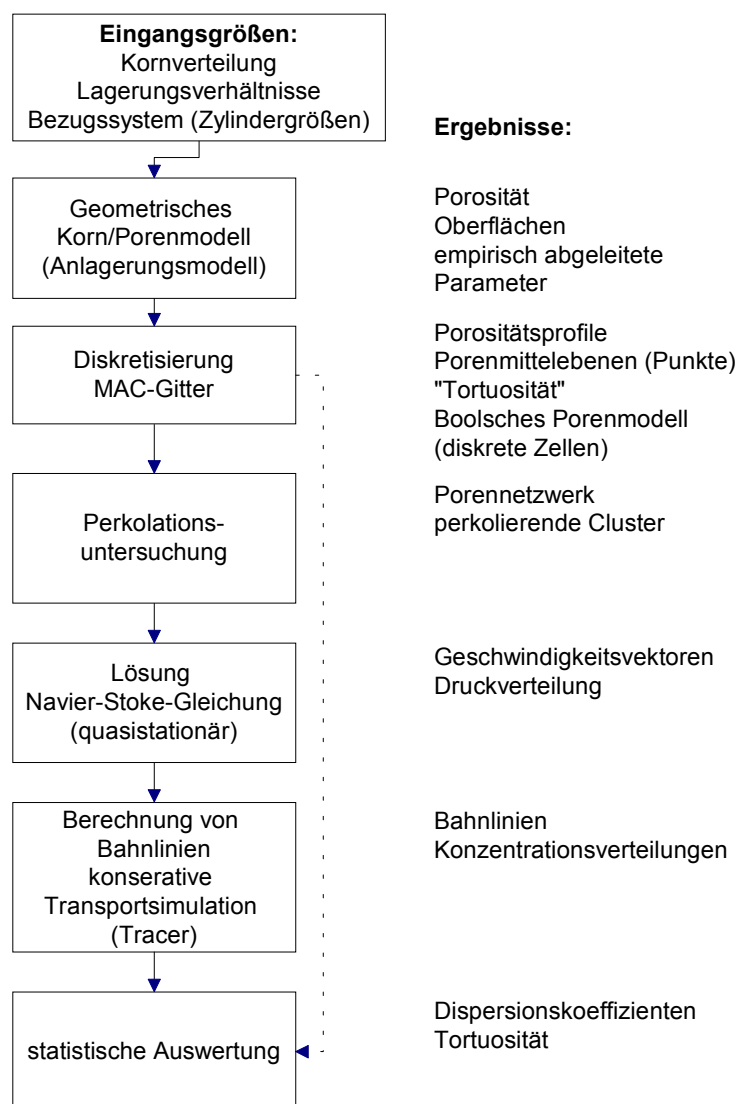


Abb. 4.1: Generelles Ablaufschema zur Simulation eines Mediums

4.2 Aufbau des Strukturmodells

4.2.1 Datengrundlage, Eingangsgrößen

Um ein korngestütztes poröses Medium nachzumodellieren, bedarf es zunächst der Definition eines Bezugssystems („Behälters“). In diesem Modell wurden Zylinder als Bezugssystem definiert, deren Dimensionen (Zylinderhöhe und Durchmesser) frei einstellbar sind (Abb. 4.2). Zylinder wurden als Bezugssystem ausgewählt, da das Modell an Säulenversuchen (Zylindern) verifiziert wurde. Denkbar ist der Einsatz verschiedener räumlicher Geometrien als Bezugssystem, je nach Fragestellungen.

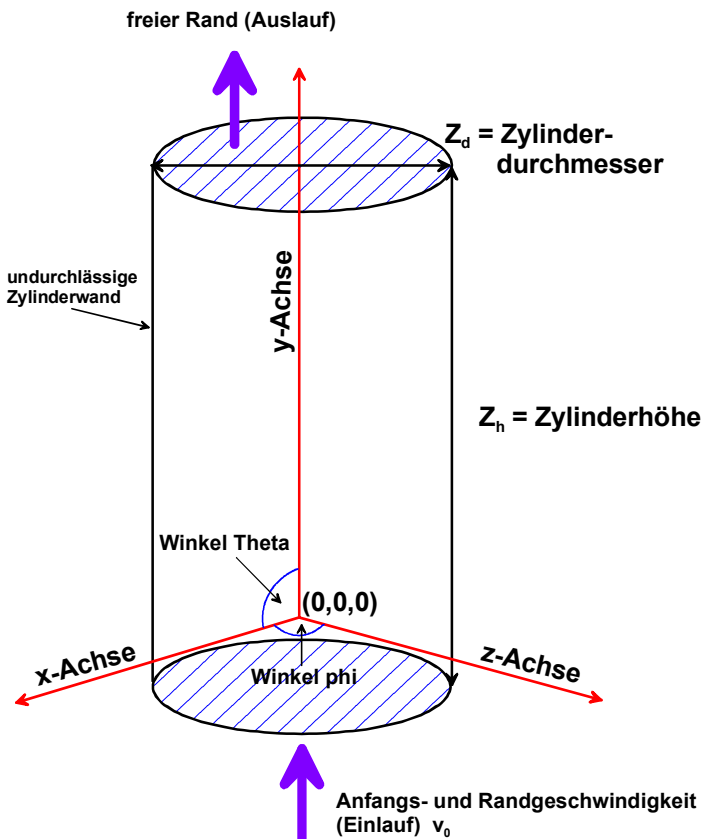


Abb. 4.2: Definition des Bezugssystems für Anlagerungs- und Fluidmodellierung

In der Abbildung 4.2 wird die Definition des Bezugssystems für die Anlagerungs- und Fluidmodellierung dargestellt. Grundlage ist ein kartesisches Koordinatensystem mit den Dimensionen x, y, z sowie die Abbildung von Vektoren in kartesischen- und sphärischen Koordinaten. Die Auswertung der Vektordaten aus den Fluidmodellierungen beziehen sich auf die genannten Koordinatensysteme.

Entscheidend für die resultierenden Porenstrukturen ist die Kornverteilung. Sie wird direkt als Input-Größenverteilung vorgegeben oder kann beliebig generiert werden.

Vorgabe des Bezugssystems:

Eingabe der Zylinderhöhe: Z_h
 Eingabe des Zylinderdurchmessers: Z_d

Vorgabe der Kornverteilung:

Die Kornverteilung kann in mehreren Verfahren (Tab. 4.1) vorgegeben werden:

Tab. 4.1: Verfahren zur Bestimmung der Kugelradien, Kornverteilung

1. Zufallsradien zwischen minimalem und maximalem Kugeldurchmesser	$r_i = z[r_{\min_i}, r_{\max_i}]$ "weißes Rauschen"
2. Zufallsradien gaußverteilt zwischen mittlerem Kugelradius und Standardabweichung	$r_i = z[r_{\text{mit}_i} - \sigma_{r_i}^2, r_{\text{mit}_i} + \sigma_{r_i}^2]$ gaußverteilt
3. Zufallsradien lognormal verteilt zwischen mittlerem Kugelradius und Standardabweichung	$r_i = z[r_{\text{mit}_i} - \sigma_{r_i}^2, r_{\text{mit}_i} + \sigma_{r_i}^2]$ lognormalverteilt
4. direkte Vorgabe einer Kugelverteilungskurve als Masse oder Anzahlverteilung	Summenkurve (Kornverteilung)

- r_i = Radius der i -ten Kugel [mm]
 r_{\min_i} = minimaler Radius einer Kugel der Klasse i [mm]
 r_{\max_i} = maximaler Radius einer Kugel der Klasse i [mm]
 r_{mit_i} = mittlerer Radius einer Kugel der Klasse i [mm]
 $\sigma_{r_i}^2$ = Standardabweichung des Radius einer Kugel der Klasse i [mm]

Die Vorgabe der Kornverteilung über eine Kornverteilungskurve kann nach mehreren Verfahren durchgeführt werden. Aufgelistet werden die Eigenschaften der Verfahren. Diese Eigenschaften können beliebig untereinander variiert werden:

1. Vorgabe einer Anzahl oder Masse pro Korngrößenklasse

Wird die Masse der einzelnen Korngrößenklassen angegeben (z.B. aus einer Siebanalyse), muß die Soll-Anzahl der Körner pro Kornklasse berechnet werden. Ein trivialer Zugang hierzu liefert:

$$ak_{S_i} = \text{int} \left(\frac{m_{k_i}}{\frac{4}{3} \cdot \pi \cdot rk_i^3 \cdot \rho_k} \right) \quad (4.1)$$

- ak_{S_i} = Soll-Anzahl der Kugeln der Klasse i
 m_{k_i} = Masse aller Kugeln der Klasse i [kg]
 rk_i = mittlerer Radius einer Kugel der Klasse i [m]
 ρ_k = Dichte des Kugelmaterials [kg/m³]

- Korngrößenklasse kann als zufalls-, gauß- oder lognormal verteilte Korngrößenklasse definiert werden (Varianten der Verfahren 1 bis 3, nach Tab. 4.1)
- die Auswahl eines Kornes zur Anlagerung erfolgt zufällig
- die Auswahl eines Kornes zur Anlagerung erfolgt nach einer bestimmten Reihenfolge (vorwärts oder rückwärts in den Kornklassen)
- die Auswahl eines Kornes erfolgt nach der Wahrscheinlichkeit des Auftretens im Gesamtkornmisch

Grundsätzlich erfolgt die Auswahl mit Hilfe von Zufallszahlen. Die Erzeugung der Zufallszahlen wird durch die Ist-Kornverteilung im Vergleich zur Soll-Kornverteilung gesteuert. Der ausformulierte Algorithmus befindet sich im Anhang 1 (Abb. A1.1). Die Zufallszahlen werden in PoreFlow mittels bestimmter Zufallszahlgeneratoren erzeugt. Eine Anleitung zur Generierung „guter“ Zufallszahlen und speziell verteilter Zufallszahlen ist u.a. bei HERRMANN (1997) zu finden.

Für die Simulation natürlich vorkommender Korngemische empfiehlt sich der Einsatz folgender Methode, die auch in den vorgestellten Simulationsläufen angewandt wurde:

- Vorgabe einer Kornverteilungskurve über Massen- oder Anzahlverteilung
- Kornverteilung innerhalb einer Klasse ist normalverteilt
- die Auswahl eines Kornes zur sequentiellen Anlagerung erfolgt nach der Wahrscheinlichkeit des Auftretens im Korngemisch, um eine möglichst homogene Verteilung im Raum zu erreichen

Die Variation der Verfahren innerhalb einer Anlagerungsmodellierung ermöglicht es, räumlich homogene- und inhomogene poröse Medien zu generieren. So lassen sich z.B. Schichtungen in ein gewähltes Bezugssystem (Abb. 4.7) oder räumlich homogen verteilte beliebige Kornverteilungen nachbilden (Abb. 4.6 und 4.8).

4.2.2 Anlagerungsmodellierung (Zusammensetzung) des Mediums

Die Anlagerung von Kugeln erfolgt im Modell sequentiell, d.h. für jede anzulagernde Kugel wird ein optimaler Anlagerungspunkt berechnet. Danach erfolgt die Anlagerung einer weiteren Kugel, u.s.w. bis das Bezugssystem gefüllt ist, oder die erforderlichen Kornanzahl(en) erreicht sind.

Der Anlagerungsvorgang läuft im Modell nach folgendem Schema ab:

1. Startkoordinaten für Lösungsvektoren festlegen

- Variante 1: Startkoordinaten (x,y,z) der vorher angelagerten Kugel
- Variante 2: Zufallskordinaten (x,y,z) im Bereich Z_d (Zylinderdurchmesser)
- Variante 3: Mittelpunkt des Zylinders $(Z_d/2,y,Z_d/2)$

2. Berechnung aller möglichen Lösungsvektoren

Auflösung der Gleichungssysteme
(Gl. 4.2 bis 4.7, Abb. 4.3, 4.5)

3. Filterung der möglichen Lösungsvektoren

Als Lösungsvektoren kommen nur Vektoren in Frage, die nicht zu einer Überlappung mit anderen Kugeln führen (Gl. 4.8).

4. Auswahl einer stabilen Lösung

5. möglicher Optimierungsablauf für Lösungssuche

- 6. von Punkt 1 (Ende der Anlagerung, wenn Kugelanzahlen Ist=Soll oder das Bezugssystem gefüllt ist)

Die Abbildungen 4.3 und 4.4 zeigen schematisch die Lösung zur Berechnung des Mittelpunktes (Lösungsvektor) der neu anzulagernden Kugel in geometrischer Form. Die Abbildungen 4.3 und 4.5 sind aus Darstellungsgründen in eine Ebene projiziert.

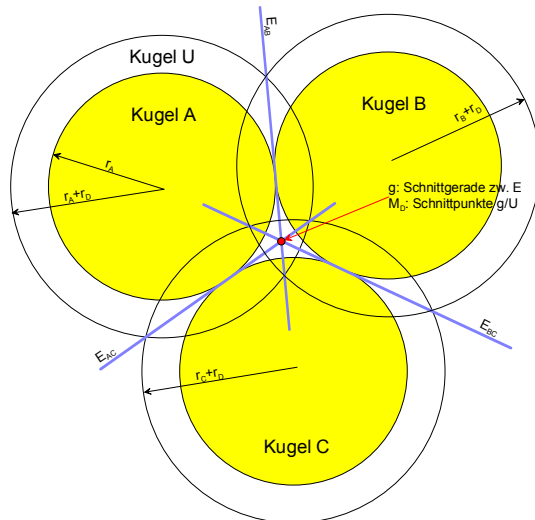


Abb. 4.3: Geometrische Darstellung einer Beispiellösung, Projektion in die Ebene

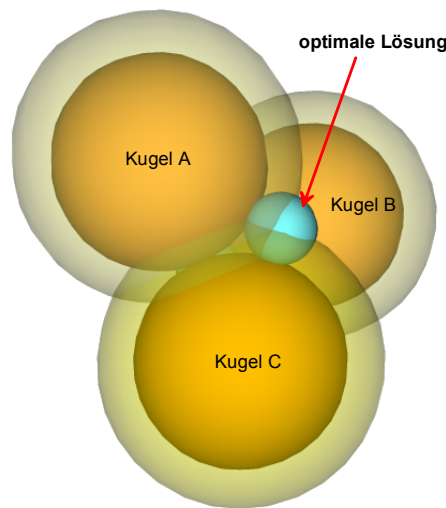


Abb. 4.4: 3D-Darstellung einer optimalen Lösung

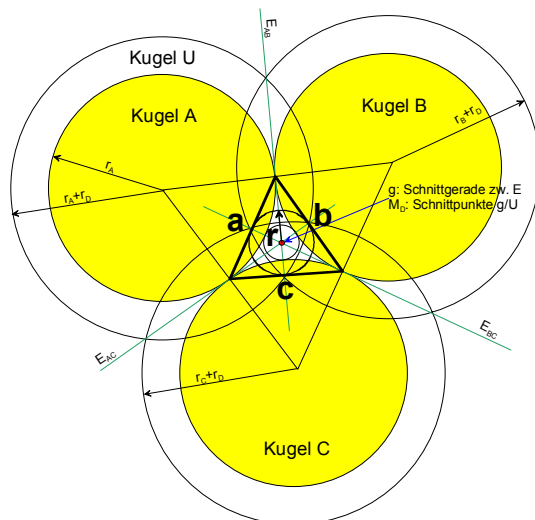


Abb. 4.5: Geometrische Darstellung einer Beispiellösung, Projektion in die Ebene, Berechnung des Innenkreisdurchmessers

Die Kugeln A bis C mit den entsprechenden Radien (r_A bis r_C) sind definiert. Die Kugel D mit dem Radius r_D soll angelagert werden. Der Algorithmus geht bei der Berechnung des gesuchten Lösungsvektors (M_D) wie folgt vor:

- Addition von r_D zu jeweils r_A bis r_C , dabei ergibt sich die Kugel U
- Aufstellung der Ebenengleichungen E_{AB} , E_{AC} und E_{BC}
- Aufstellung der Gleichung der Schnittgeraden g zwischen E_{AB} , E_{AC} und E_{BC} , wobei die Ebene E_{BC} als Kontrollrechnung mitgeführt wird
- Berechnung der Koordinaten (Lösungspunkte) zwischen g und der Kugelgleichung für Kugel U (gibt generell 2 Lösungen)

Die Abbildung 4.4 zeigt die optimale Lösung angelehnt an die Darstellung der Lösung in Abb. 4.3 in 3D-Darstellung. Das vorgestellte geometrisch/analytische Verfahren ist im Raum (3D) generell gültig.

Es existieren immer mögliche Lösungen, wenn die Schnittebenen zwischen den Kugeln U_A , U_B und U_C (Gl. 4.2 bis 4.4) existieren. Dabei können die Mittelpunktevektoren der Kugeln beliebig im Raum liegen und unterschiedliche Radien aufweisen.

Aus geometrischen Überlegungen kann pro angelagerter Kugel ein zugehöriger „Porendurchmesser“ berechnet werden. Dieser ergibt sich aus dem Innenkreisdurchmesser des berechenbaren Dreiecks, welches sich auf der Tangentialebene bezüglich der Lösungsebene befindet (Abb. 4.3, 3.4 und 3.5). Die Strecken a , b und c berechnen sich aus den Abständen zwischen den Schnittpunkten der Geraden und den zugehörigen Ebenen (Abb. 4.5).

Der Innenkreisdurchmesser des Dreiecks berechnet sich dann aus:

$$r = \frac{1}{s} \cdot \sqrt{s \cdot (s - a) \cdot (s - b) \cdot (s - c)}$$

$$s = \frac{1}{2} (a + b + c)$$

Zusätzlich versucht der Algorithmus, Lösungen mit dem Zylinderboden oder der Zylinderwand zu finden. Treten dort Lösungen auf, werden diese in der Lösungsauswahl mit einbezogen.

Analytische Berechnung der möglichen Lösungsvektoren

Die Gleichung der Ebenen ergeben sich durch Gleichsetzung der entsprechenden Kugelgleichungen:

Kugelgleichungen:

$$\begin{aligned} U_A &:= (\bar{x}_A - \bar{x})^2 - (r_A + r_D)^2 = 0 \\ U_B &:= (\bar{x}_B - \bar{x})^2 - (r_B + r_D)^2 = 0 \\ U_C &:= (\bar{x}_C - \bar{x})^2 - (r_C + r_D)^2 = 0 \end{aligned} \quad (4.2)$$

Ebenengleichungen (der Form $A \cdot x + B \cdot y + C \cdot z + D = 0$):

$$\begin{aligned} E_{AB} &:= 2 \cdot ((x_B - x_A) \cdot x + (y_B - y_A) \cdot y + (z_B - z_A) \cdot z) \\ &\quad + (-x_B^2 + x_A^2 - (r_A + r_D)^2 + y_A^2 - y_B^2 - z_B^2 + z_A^2 + (r_B + r_D)^2) = 0 \\ E_{AC} &:= 2 \cdot ((x_C - x_A) \cdot x + (y_C - y_A) \cdot y + (z_C - z_A) \cdot z) \\ &\quad + (-x_C^2 + x_A^2 - (r_A + r_D)^2 + y_A^2 - y_C^2 - z_C^2 + z_A^2 + (r_C + r_D)^2) = 0 \\ E_{BC} &:= 2 \cdot ((x_C - x_B) \cdot x + (y_C - y_B) \cdot y + (z_C - z_B) \cdot z) \\ &\quad + (-x_C^2 + x_B^2 - (r_B + r_D)^2 + y_B^2 - y_C^2 - z_C^2 + z_B^2 + (r_C + r_D)^2) = 0 \end{aligned} \quad (4.3)$$

Eine Lösung existiert, wenn die Ebenen E_{AB} und E_{AC} (oder E_{BC}) und eine Schnittgerade zwischen den Ebenen besteht (durch Umformung in die Koordinatenformen der Ebenengleichung):

$$N = 4 \cdot ((x_B - x_A) \cdot (y_A - y_C) - (y_B - y_A) \cdot (x_A - x_C)) \neq 0 \quad (4.4)$$

Durch Lösung des in Gl. 4.3 aufgestellten Gleichungssystems erhält man eine Parameterform der Schnittgeradengleichung (Parameter t):

$$g := \bar{a} + t \cdot \bar{u} \quad (4.5)$$

Das Einsetzen der Schnittgeradengleichung (g) mit der Kugelgleichung (U_A) führt zu 2 möglichen Lösungen des Parameters t :

$$M_D := (\bar{x}_A - (\bar{a} + t \cdot \bar{u}))^2 - (r_A + r_D)^2 = 0 \quad (4.6)$$

$$t_1 = \frac{1}{\bar{u}^2} \cdot (\bar{x}_A^2 \cdot \bar{u} - \bar{a} \cdot \bar{u} + \bar{u} \cdot (r_A + r_D)) \quad (4.7)$$

$$t_2 = \frac{1}{\bar{u}^2} \cdot (\bar{x}_A^2 \cdot \bar{u} - \bar{a} \cdot \bar{u} - \bar{u} \cdot (r_A + r_D)) \quad (4.8)$$

Das Einsetzen von t_1 und t_2 in Gleichung 4.5 führt zu den gesuchten Mittelpunkten der neu anzulagernden Kugel (Abb. 4.4).

Die folgenden Abbildungen (4.6 bis 4.9) zeigen vier unterschiedliche Beispiele der Anlagerungsmodellierung, die die Möglichkeiten des Anlagerungsalgorithmus demonstrieren.

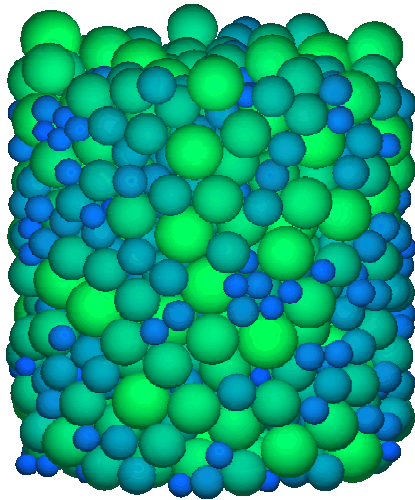


Abb. 4.6: Lagerung eines Kugelgemisches mit normal verteilten Kugelradien im Zylinder

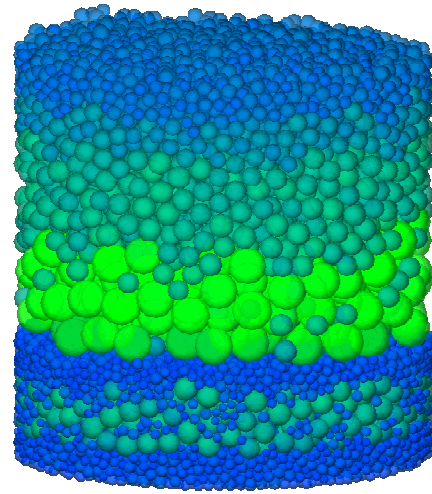


Abb. 4.7: Geschichtete Lagerung unterschiedlicher Kugelradien im Zylinder

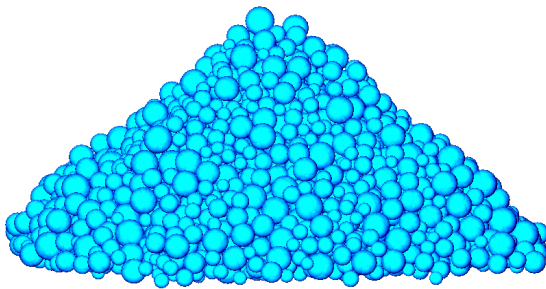


Abb. 4.8: Lagerung eines relativ gleichkörnigen Kugelgemisches als „Schüttkegel“

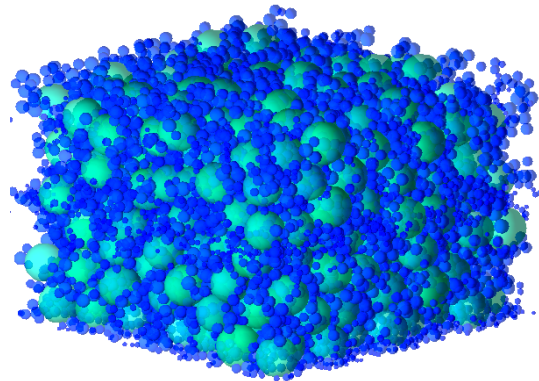


Abb. 4.9: Ausschnitt aus der Lagerung eines bimodalen Kugelgemisches

Modifikationsmöglichkeiten des modellierten Mediums

Nach der Anlagerungsmodellierung (Abb. 4.6 bis 4.9) besteht die Möglichkeit, vor der Diskretisierung das Modellmedium zu verändern. Es ist z.B. möglich, die Radien der Kugeln nachträglich zu vergrößern oder zu verkleinern. In der derzeitigen Implementierung des Programms ist ein vorgegebener konstanter Wert möglich. Es ist denkbar, eine Funktion des Radiuszuwachses mit dem Radius der Kugel zu bilden und zu integrieren. Es steht somit ein Werkzeug zur Verfügung, um z.B. Porenzemente durch Radiusvergrößerung zu berücksichtigen. Wird dies im Modell durchgeführt, muß das bei der Diskretisierung entstehende Porennetzwerk mit der Perkolations-theorie analysiert werden.

4.2.3 Parameterableitung aus dem Modellmedium

Nach erfolgreicher Berechnung der Anlagerung können grundlegende hydraulische Parameter abgeleitet werden. Einige lassen sich direkt aus der entstehenden Geometrie ableiten, andere werden über bekannte empirische Zusammenhänge berechnet.

Kornverteilung

Die Berechnung der Kornverteilung ist von Bedeutung, um die Ist-Verteilung mit der Soll-Verteilung zu vergleichen. Bei der Berechnung der Ist-Verteilung wird jede einzelne Kugel mit berücksichtigt (was nicht von Nachteil ist, da keine Intervallklassen definiert werden müs-

sen). Bei der Berechnung der Ist-Kornverteilung wird gleichzeitig der hydraulisch-wirksame Korndurchmesser nach KOZENY-KÖHLER (Gl. 4.17) ermittelt.

Porosität

Die Porosität ist eine der wichtigsten charakteristischen Größen eines porösen Mediums, da sie das Verhältnis des Volumens des Porenraumes zum Volumen des Bezugssystems darstellt und letztendlich den potentiellen Raum für den Fluidfluß und Transport repräsentiert.

Die geometrische Gesamtporosität n_{geo} im Modell ist das Verhältnis der Summe aller Kugelvolumen zum Volumen des Zylinders (Bezugssystems) und wird nach folgender Gleichung ermittelt:

$$n_{geo} = \frac{\left(\sum_{i=1}^a \frac{4}{3} \pi \cdot (r_i + d_h)^3 \right) - \pi \cdot Z_r^2 \cdot Z_h}{\pi \cdot Z_r^2 \cdot Z_h} \quad (4.9)$$

n_{geo}	= geometrische Gesamtporosität [-]
r_i	= Radius der Kugel i [mm]
d_h	= Dicke der Haftwasserschicht [mm]
Z_r	= Zylinderradius [mm]
Z_h	= Zylinderhöhe [mm]

Die Dicke der Haftwasserschicht d_h kann dabei berücksichtigt werden. Wird die Dicke der Haftwasserschicht berücksichtigt, werden dabei die entstehenden Überlappungsvolumina vernachlässigt.

Die Porosität eines Ausschnittes im Medium kann effektiv mit der *random-point* Methode ermittelt werden. Diese liefert die sog. statistische Porosität, die mit einer entsprechend großen Anzahl von zufälligen Testvektoren (Abb. 3.8) entsprechend genau werden kann (Gl. 3.12 und 3.13). Der Testausschnitt (Raum) wird dabei durch die zulässigen Bereiche der Zufallsvektoren definiert.

$$z(x, t) = 1 \text{ für } x \in V_s \text{ und } z(x, t) = 0 \text{ für } x \in V_v \quad (4.12)$$

x	= Zufallsvektor
t	= Index

$$\langle n_{stat} \rangle = \frac{1 - \sum_{x \in V_v} z(x, t)}{t} \quad (4.13)$$

n_{stat}	= statistische Porosität [-] im Raumausschnitt
------------	------------------------------------------------

Porositätsprofile

Porositätsprofile in bestimmten Raumrichtungen können Aufschluß über den Zusammenhang zwischen Fließgeschwindigkeiten und den zur Verfügung stehendem Raum gegeben. Sie dienen zudem als Element zur Volumenmittelung von Berechnungsergebnissen.

Die Profile werden bei der Diskretisierung mit „Slice“-Operationen und bei der MAC-Diskretisierung gewonnen. Bei den „Slice“-Operationen wird die Porosität als „Fläche“ rein geometrisch aus den Kreisschnittgleichungen berechnet, wogegen bei der MAC-Diskretisierung das Verhältnis zwischen Zellen im Porenraum und im Korn (analog statistischer Porosität, Gl. 4.13) repräsentiert wird.

Spezifische innere Oberflächen

Analog zur geometrischen Gesamtporosität kann auch die spezifische Oberfläche S_{por} des Modellmediums geometrisch errechnet werden:

$$S_{geo} = \sum_{i=1}^a 4\pi \cdot r_i^2 \quad [\text{m}^2] \quad (4.12)$$

S_{geo} = gesamte innere Oberfläche [m²]

$$S_{por} = \frac{S_{geo}}{\pi \cdot Z_r^2 \cdot Z_h} \quad [1/\text{m}] \quad (4.13)$$

Die Berechnung einer „statistischen“ Oberfläche, analog zur statistischen Porosität wäre denkbar, ist aber aufgrund aufwendiger mathematischer Operationen im Vergleich zur statistischen Porosität nicht sinnvoll.

Porenstrukturen

Die Entwicklung des Anlagerungsalgorithmus hatte zum Ziel, möglichst dichte Kugelpackungsdichten zu erreichen, um möglichst nahe an natürliche Lagerungsverhältnisse heranzukommen.

Bei der Modellierung entsteht meist eine kombinierte Tetraeder- oder offene Tetraeder Lagerung (Beispiel Abb. 4.11). Die Abweichungen von der Idealporenform ist auf Randstörungen des Bezugssystems und auf die Varianz der Kornverteilung selbst zurückzuführen. D.h., bei Kornverteilungen kann man nicht mehr von z.B. „Tetraederlagerung“ an sich sprechen, sondern muß als Maß die Lagerungsdichte und Porosität annehmen.

Permeabilität, Durchlässigkeitsbeiwert

Aus der Ist-Kornverteilung kann man nach den bekannten Beziehungen von Hazen und Beyer den Durchlässigkeitsbeiwert abschätzen. Allerdings ist hier diese Methode wenig praktikabel, da die Werte für d_{10} , d_{60} , d_{20} , e.t.c. aus der Kornverteilungskurve abgelesen werden müssen.

Für eine definierte Ist-Verteilung, in der direkt die Anzahl aller Körner repräsentiert ist, bietet sich die Methode nach KOZENY-KÖHLER an, die auch in der Literatur bessere Werte liefert (LANGGUTH & VOIGT, 1980 u.a.). Der Proportionalitätsfaktor C ist bei dieser Methode von dem Verhältnis der Viskositäten bei verschiedenen Temperaturen und dem Rundungsgrad der Körner abhängig. Der Vorteil ist, daß der hydraulisch-wirksame Korndurchmesser direkt aus der Kornverteilungskurve mathematisch ermittelt wird und nicht über d_{10} , d_{60} , d_{20} , e.t.c. abgeleitet werden muß. Auf die Herleitung wird hier verzichtet und auf die entsprechende Literatur verwiesen (LANGGUTH & VOIGT, 1980 u.a.).

Der Durchlässigkeitsbeiwert (k_f in [m/s]) berechnet sich nach KOZENY-KÖHLER:

$$k_f = C \cdot d_w^2 = \frac{\tau}{R} \cdot 4,05 \cdot 10^{-6} \cdot \frac{\varepsilon^3}{1 + \varepsilon} \cdot d_w^2 \quad (4.14)$$

$$\varepsilon = \frac{n}{1 - n}, \quad \text{im Modell } n = n_{geo} \quad (4.15)$$

Da im Modell jede Kugel mit Mittelpunkt, Radius und Masse bekannt ist, wird die wirksame Korngröße (d_w) wie folgt direkt berechnet:

$$\frac{1}{d_w} = \frac{\sum \frac{1}{d_i} G_i}{\sum G_i} \quad [1/\text{m}] \quad (4.16)$$

G_i = Masse der i-ten Kugel [kg]

Für die Porosität wird die geometrische Gesamtporosität eingesetzt. Für R als Rundungsfaktor gilt für Kugeln der Wert 1 (Abb. 3.3). Der Parameter τ beschreibt das Verhältnis der kinematischen Viskosität für Wasser bei 10 [°C] zur tatsächlichen Fluidtemperatur. Im Modell wird mit 20 [°C] Fluidtemperatur gerechnet.

Nach KOZENY-CARMAN wird die Permeabilität K nach folgender Gleichung zusätzlich abgeschätzt:

$$K = \frac{n_{geo}^3}{((1 - n_{geo}) \cdot S_{por} \cdot h_k)^2} \quad [\text{m}^2] \quad (4.17)$$

Bei der Durchströmung eines granularen Mediums mit sphärischen Einzelkörnern wird für die KOZENY-Konstante h_k der Wert 5 angesetzt (CARMAN, 1937).

Die aus der Fluidmodellierung gewonnene Permeabilität wird direkt mit der „geometrisch“ abgeleiteten Durchlässigkeit nach KOZENY-KÖHLER (Gl. 4.14) und KOZENY-CARMAN (Gl. 4.17) verglichen.

4.3 Strömungs- und Transportmodellierung im Modellmedium

Grundlage der Strömungsmodellierung ist eine Lösung der zeitabhängigen Navier-Stokes-Gleichung für inkompressible Fluide in einem fluidesättigten Medium (Gl. 3.14).

Durch Einführung der dimensionslosen Reynoldszahl Re kann die Navier-Stokes-Gleichung in eine dimensionslose Darstellung umgeformt werden, wobei folgende Normierungsrechnungen erfolgen (Dimensionsanalyse):

$$\begin{aligned} \vec{x} &\rightarrow \frac{\vec{x}}{Z_d} && \left[\frac{\text{m}}{\text{m}} \right] [-] \\ \vec{v} &\rightarrow \frac{\vec{v}}{v_0} && \left[\frac{\text{m/s}}{\text{m/s}} \right] [-] \\ t &\rightarrow \frac{t}{Z_d} \cdot v_0 && \left[\frac{\text{s}}{\text{m}} \cdot \frac{\text{m}}{\text{s}} \right] [-] \\ p &\rightarrow \frac{p}{\rho \cdot v_0^2} && \left[\frac{\text{Pa}}{\text{kg}} \cdot \frac{\text{m}^3 \cdot \text{s} \cdot \text{s}}{\text{m}^2} \right] = \left[\frac{\text{kg} \cdot \text{m}^3 \cdot \text{s}}{\text{kg} \cdot \text{m} \cdot \text{m}^2 \cdot \text{s}} \right] \left(\text{Pa} \cdot \text{s} = \frac{\text{kg}}{\text{s} \cdot \text{m}} \right) [-] \end{aligned}$$

Die Reynoldszahl Re wird folgendermaßen definiert:

$$Re = \frac{\rho \cdot Z_d \cdot v_0}{\eta} \quad \left[\frac{\text{kg} \cdot \text{m} \cdot \text{m} \cdot \text{m} \cdot \text{s}}{\text{m}^3 \cdot \text{kg} \cdot \text{s}} \right] \quad [-] \quad (4.18)$$

Das Strömungsverhalten in einem Zylinder (mit und ohne porösem Medium) ist nicht abhängig von der Zylinderhöhe, sondern nur vom Durchmesser des Zylinders.

Die Umformung führt zur dimensionslosen Darstellung der Navier-Stokes-Gleichung:

$$\frac{\partial \vec{v}}{\partial t} + (\vec{v} \cdot \nabla) \vec{v} = -\nabla p + \frac{1}{Re} \nabla^2 \vec{v} + \vec{f} \quad (4.19)$$

4.3.1 Diskretisierung des Raumes

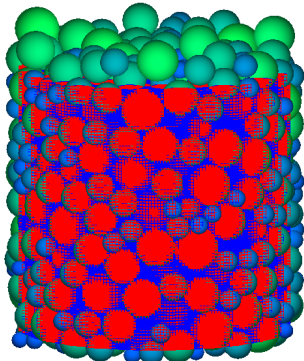
Zur Lösung dieser partiellen Differentialgleichung wurde die MAC (*Marker and Cell*)-Diskretisierungsmethode (*fully-staggered-finite-difference-scheme*) ausgewählt, da diese modelltechnisch relativ unkompliziert zu handhaben ist (RAGE, 1996, HÖFLER 1997, TUREK, 1998, HERRMANN, 1997).

Diskretisierung im MAC-Gitter

Bei der MAC-Diskretisierung liegen die Geschwindigkeitskomponenten auf den Zellrändern und die Zustandsgröße Druck im Zentrum der Zelle. Diese Methode hat den Vorteil, daß die Ableitung der Geschwindigkeiten auf den Druckpunkt (Druck als Zustandsgröße) im Zentrum der Zelle durchgeführt wird.

Die Statusmatrix der Zellen ermittelt sich nach folgendem Ablauf (Tab. 4.2):

Tab. 4.2: Ablauf der MAC-Diskretisierung

1. Ermittlung maximale Anzahl Zellen	$i_{\max} = \frac{Z_r}{\Delta x}, j_{\max} = \frac{Z_r}{\Delta x}, k_{\max} = \frac{Z_h}{\Delta x}$ <p style="text-align: right;">(4.20)</p>
2. Berechnung der Mittelpunktvektoren $m_{i,j,k}$ der Zellen i,j,k	$m_{i,j,k} = (i \cdot \Delta x - \frac{\Delta x}{2}, j \cdot \Delta x - \frac{\Delta x}{2}, k \cdot \Delta x - \frac{\Delta x}{2})$ <p style="text-align: right;">(4.21)</p>
3. Ermittlung der Statusmatrix (vgl. Boolesches Porenmodell) Werte der Statusmatrix $S_{i,j,k}$: 0 = Zelle liegt außerhalb des Zylinders 1 = Zelle liegt in einer Kugel 2 = Zelle liegt im Porenraum	$S_{i,j,k} := \begin{cases} {}^{xy}m_{i,j,k} > Z_r & \rightarrow 0 \\ m_{i,j,k} - m_{Kugl} \leq r_{Kugl} & \rightarrow 1 \\ m_{i,j,k} - m_{Kugl} > r_{Kugl} & \rightarrow 2 \end{cases}$ <p style="text-align: right;">(4.22)</p> <p> $m_{i,j,k}$ = Mittelpunkt der Zelle i,j,k m_{Kugl} = Mittelpunkt der Kugel l r_{Kugl} = Radius der Kugel l </p>
Beispiel eines Diskretisierungsablaufes in einem Modellmedium rot: Zelle liegt in einer Kugel (Solid) blau: Zelle liegt im Porenraum (Void)	

Die zeitabhängige Gleichung 4.19 wird nun wie folgt räumlich und zeitlich diskretisiert:

x – Richtung (4.23):

$$\frac{u_{i,j,k}^{(n+1)} - u_{i,j,k}^{(n)}}{\Delta t} = -\Delta_x (u^2)_{i,j,k}^{(n)} - \Delta_y (uv)_{i,j,k}^{(n)} - \Delta_z (uw)_{i,j,k}^{(n)} - \Delta_x p_{i,j,k}^{(n+1)} + \frac{1}{\text{Re}} \nabla_h^2 u_{i,j,k}^{(n)}$$

y – Richtung (4.24):

$$\frac{v_{i,j,k}^{(n+1)} - v_{i,j,k}^{(n)}}{\Delta t} = -\Delta_x (uv)_{i,j,k}^{(n)} - \Delta_y (v^2)_{i,j,k}^{(n)} - \Delta_z (vw)_{i,j,k}^{(n)} - \Delta_y p_{i,j,k}^{(n+1)} + \frac{1}{\text{Re}} \nabla_h^2 v_{i,j,k}^{(n)}$$

z – Richtung (4.25):

$$\frac{w_{i,j,k}^{(n+1)} - w_{i,j,k}^{(n)}}{\Delta t} = -\Delta_x (wu)_{i,j,k}^{(n)} - \Delta_y (wv)_{i,j,k}^{(n)} - \Delta_z (w^2)_{i,j,k}^{(n)} - \Delta_z p_{i,j,k}^{(n+1)} + \frac{1}{\text{Re}} \nabla_h^2 w_{i,j,k}^{(n)}$$

Die zeitliche Iteration wird mit dem Index (n) gekennzeichnet, wobei (n) den aktuellen und $(n+1)$ den nächsten Zeitpunkt kennzeichnet. Bei dieser Diskretisierung werden folgende Differentialoperatoren verwandt:

$$\Delta_x a_{i,j,k} = \frac{(2 \cdot a_{i,j,k} + a_{i+1,j,k} - a_{i-1,j,k})}{\Delta_x} \quad (4.26)$$

$$\Delta_y a_{i,j,k} = \frac{(2 \cdot a_{i,j,k} + a_{i,j+1,k} - a_{i,j-1,k})}{\Delta_y} \quad (4.27)$$

$$\Delta_z a_{i,j,k} = \frac{(2 \cdot a_{i,j,k} + a_{i,j,k+1} - a_{i,j,k-1})}{\Delta_z} \quad (4.28)$$

$$\nabla_h^2 a_{i,j,k} = \Delta_x \Delta_x a_{i,j,k} + \Delta_y \Delta_y a_{i,j,k} + \Delta_z \Delta_z a_{i,j,k} \quad (4.29)$$

$$\Delta_x \Delta_x a_{i,j,k} = \frac{a_{i+1,j,k} - 2 \cdot a_{i,j,k} + a_{i-1,j,k}}{h^2} \quad (4.30)$$

$$\Delta_y \Delta_y a_{i,j,k} = \frac{a_{i,j+1,k} - 2 \cdot a_{i,j,k} + a_{i,j-1,k}}{h^2} \quad (4.31)$$

$$\Delta_z \Delta_z a_{i,j,k} = \frac{a_{i,j,k+1} - 2 \cdot a_{i,j,k} + a_{i,j,k-1}}{h^2} \quad (4.32)$$

$$(uv)_{i+1/2,j+1/2,k} = \frac{1}{2} (u_{i,k+1,k} + u_{i,j,k}) \cdot \frac{1}{2} (v_{i,j,k} + v_{i+1,k,k}) \quad (4.33)$$

4.3.2 Modellierung des Fluidflusses im Modellmedium

Explizite stationäre Lösung der Navier-Stokes-Gleichung

Die zeitliche Iteration in diesen Gleichungen stellt ein explizites numerisches Verfahren dar, welches numerisch nur unter bestimmten Bedingungen stabil läuft. Das Ergebnis der numerischen Stabilitätsanalyse ergibt folgende Bedingungen für den Zeitschritt:

$$\Delta t \leq \frac{4}{\text{Re}(|u_0| + |v_0| + |w_0|)^2} \quad (4.34)$$

$$\Delta t \leq \frac{1}{6} \text{Re} \Delta x^2 \quad (4.35)$$

Die zeitlich-diskretisierte Navier-Stokes-Gleichung kann man wie folgt kompakter darstellen:

$$\frac{\mathbf{v}^{(n+1)} - \mathbf{v}^{(n)}}{\Delta t} = -\nabla p^{(n+1)} - \underbrace{(\mathbf{v}^{(n)} \cdot \nabla) \mathbf{v}^{(n)}}_{\text{term}^{(n)}} + \frac{1}{\text{Re}} \nabla^2 \mathbf{v}^{(n)} \quad (4.36)$$

Die Inkompressibilitätsannahme für das Fluid führt zur folgenden Gleichung:

$$\nabla \cdot \mathbf{v}^{(n+1)} = 0 \quad (4.37)$$

Nach der *fractional step method* kann man nunmehr folgende Größe für den Zeitschritt n ermitteln:

$$\mathbf{v}^* = \mathbf{v}^{(n)} + \Delta t \cdot \text{term}^{(n)} \quad (4.38)$$

Das Druck-Feld zum Zeitschritt $n+1$ muß durch die Lösung der folgenden Poissongleichung berechnet werden:

$$\nabla^2 p^{(n+1)} = \frac{1}{\Delta t} \cdot \nabla \cdot \mathbf{v}^* \quad (4.39)$$

Durch Einsetzen der Gleichungen (4.38 - 4.39) erhält man für den Zeitschritt $n+1$:

$$\mathbf{v}^{(n+1)} = \mathbf{v}^* - \Delta t \cdot \nabla p^{(n+1)} \quad (4.40)$$

Die Gleichung 4.39 (Poisson-Gleichung) wird im Modell nach der SOR (*successive overrelaxation*) – Methode gelöst. Das SOR-Schema sieht dabei folgendermaßen aus:

$$\frac{p^{(n,m+1)} - p^{(n,m)}}{\xi} = \nabla^2 p^{(n,m)} - \frac{1}{\Delta t} \nabla \cdot \mathbf{v}^* \quad (4.41)$$

$$\xi = \frac{\varpi (\Delta x)^2 (\Delta y)^2 (\Delta z)^2}{2 \cdot [(\Delta x)^2 + (\Delta y)^2 + (\Delta z)^2]} \quad (4.42)$$

Der SOR-Parameter ϖ kann definiert werden als: $1 < \varpi < 2$. Dieser Wert hat entscheidend Einfluß auf das Konvergenzverhalten der Poisson-Gleichung. In den berechneten typischen Modellmedien hat sich ein Wert von 1.8 als brauchbar herausgestellt.

Die Iteration des Druckfeldes kann nach folgendem Kriterium abgebrochen werden, wobei für das Abbruchkriterium ε ein entsprechend kleiner Wert gewählt werden sollte:

$$\max \left(\frac{|p^{(n,m+1)} - p^{(n,m)}|}{\xi} \right) \leq \varepsilon \quad (4.43)$$

Randbedingungen

Für die Lösung der Navier-Stokes-Gleichung und der Poisson-Gleichung für den Druck sind Randbedingungen erforderlich.

Eine detaillierte Herleitung der Randbedingungen ist z.B. bei HÖFLER (1997) zu finden.

Für die Grenzschicht zwischen Fluid und einem undurchdringlichem Medium (Feststoffrand) muß infolge der Haftbedingung gelten:

$$\begin{aligned}\vec{v} \cdot \vec{n} &= \vec{v}_\Gamma \cdot \vec{n} \quad \text{und} \\ \vec{v} \times \vec{n} &= \vec{v}_\Gamma \times \vec{n}\end{aligned}\quad (4.44)$$

$$\begin{aligned}\vec{n} &= \text{Normalenvektor der Oberfläche} \\ \vec{v}_\Gamma &= \text{Geschwindigkeit am Rand}\end{aligned}$$

An unbeweglichen Rändern (Kugeloberflächen, Zylinderwandung) ist die Fluidgeschwindigkeit gleich null.

In der MAC-Diskretisierung im 2D Fall ergibt sich für die Definition der Geschwindigkeit am Rand (Anfangsgeschwindigkeit) durch die Vorgabe von u_Γ (Zellindizes im 2D Fall):

$$u_{i,-1} = 2 \cdot u_\Gamma - u_{i,0} \quad (4.45)$$

Die Randbedingung für den Druck gewinnt man aus der Randgeschwindigkeit und der temporären Geschwindigkeit v^* (Gl. 4.38). Im 2D Fall sehen die diskreten Gleichungen für den Druck folgendermaßen aus:

$$\frac{1}{\Delta x^2} (p_{1,j} - 2p_{0,j} + p_{-1,j}) + \frac{1}{\Delta y^2} (p_{0,j+1} - 2p_{0,j} + p_{0,j-1}) = \frac{1}{\Delta t} \left(\frac{u_{0,j}^* - u_\Gamma^*}{\Delta x} + \frac{v_{0,j}^* - v_{0,j-1}^*}{\Delta y} \right) \quad (4.46)$$

$$\frac{1}{\Delta x} (p_{1,j} - p_{-1,j}) = -\frac{1}{\Delta t} (u_\Gamma - u_\Gamma^*) \quad (4.47)$$

Konsequenterweise folgt daraus, daß der Druck als Randbedingung variabel von der Randgeschwindigkeit abhängt, d.h. als Druckrandbedingung erhält man für die zu lösende Poisson-Gleichung eine Normalableitung nach der Randgeschwindigkeit.

Zusammenfassung zur expliziten Lösung der Navier-Stokes-Gleichung

Zusammenfassend kann der Ablauf der Berechnung des Geschwindigkeitsfeldes zum Zeitpunkt $n+1$ folgendermaßen skizziert werden:

- Berechnung eines imaginären Geschwindigkeitsfeldes (v^*) aus der vorhandenen Verteilung zum Zeitpunkt n
- Lösung der Poisson-Gleichung für das Druckverteilungsfeld für den Zeitpunkt $n+1$ (bis zur Konvergenz des Druckfeldes)
- Berechnung des Geschwindigkeitsfeldes zum Zeitpunkt $n+1$ aus dem imaginären Geschwindigkeitsfeld und dem Druckverteilungsfeld ($n+1$)

Die Gesamtberechnungen des Geschwindigkeitsfeldes werden solange fortgesetzt, bis quasistationäre Verhältnisse eintreten. Dies muß nach einer bestimmten Anzahl von Gesamtiterationsschritten (für Δt) geschehen, da die Anfangsgeschwindigkeit über die Zeit als Randbedingung konstant gehalten wird. In diesem Modell wird als quasistationärer Zustand die Konstanz der resultierenden Permeabilität (Ermittlung nach Gl. 4.52) angenommen, d.h. das Modellmedium setzt den momentanen Geschwindigkeitsverhältnissen einen konstanten Widerstand entgegen. Die Konstanz der Permeabilität stellt sich nur dann ein, wenn die Änderung der mittleren Geschwindigkeit im Modellsystem gegenüber der Druckänderung am unteren Modellrand sich proportional oder nicht mehr verändert (Gl. 4.51). Das heißt nicht zwangsweise, daß sich eine Konstanz im Geschwindigkeitsfeld eingestellt hat. Als zusätzliches Abbruchkriterium wird angenommen, daß die Änderung der mittleren resultierenden Geschwindigkeit im Längsprofil (in Hauptströmungsrichtung) gleich null ist (Abb. 4.14). Diese mittlere resultierende Geschwindigkeit multipliziert mit der Zellporosität

ist äquivalent der Filtergeschwindigkeit im Modellmedium zum Zeitpunkt des Simulationsendes.

Die Abbildungen (Abb. 4.14 und 4.15) veranschaulichen diese Zusammenhänge. Deutlich ist zu erkennen, daß bei niedriger Porosität die Porengeschwindigkeit zunimmt und bei höherer Porosität abnimmt. Bei quasistationären Verhältnissen stellt sich im Zylinder im Profil ein konstantes lineares Druckgefälle ein (Abb. 4.17). Dies zeigt, daß das angewandte Lösungsverfahren der Kontinuitätsbeziehung gerecht wird.

Auswertung und Darstellung der Lösung

Als Ergebnis der Iteration der Navier-Stokes-Gleichung liegen folgende Matrizen vor:

- Geschwindigkeitskomponente in x – Richtung
- Geschwindigkeitskomponente in y – Richtung
- Geschwindigkeitskomponente in z – Richtung
- Fluiddruck als Zustandsgröße
- Zellinformation (s.o. MAC-Diskretisierung, Randbedingungsinformationen)

Die Ergebnisse stellen dabei den Zustand des Systems zum Simulationsendzeitpunkt dar. Die Möglichkeiten der Darstellung und Auswertung der Lösung werden an Hand der Testbeispiele im Folgenden erläutert.

Ableitung der Permeabilität aus der Fluidberechnung

Die Einstellung eines linearen Druckprofils im Modellmedium ermöglicht die Ableitung der Permeabilität aus den Druck- und Geschwindigkeitsverhältnissen über das DARCY - Gesetz. Dabei wird das DARCY - Gesetz in folgender Form dargestellt:

$$v_f = \frac{k}{\eta} \cdot (-\nabla p) \quad [\text{m/s}] \quad (4.48)$$

$$k = -\frac{\eta}{\nabla p} \cdot v_f \quad [\text{m}^2] \quad (4.49)$$

$$\begin{aligned} \eta &= \text{dynamische Viskosität [Pa}\cdot\text{s]} \\ p &= \text{Fluiddruck [Pa]} \\ k &= \text{Permeabilität [m}^2\text{]} \end{aligned}$$

Im Modell wird die mittlere Filtergeschwindigkeit v_f aus dem Mittelwert der Geschwindigkeitsbeträge aller aktiven Porenzellen berechnet (Gl. 4.50). Der Gradient ergibt sich bei dieser Volumenmittelung über den Zylinder (Abb. 4.2) aus dem mittleren Druck in der ersten Zellschicht (Zylinderhöhe 0) und der Höhe des Zylinders (Gl. 4.51).

$$v_f = \frac{1}{a} \cdot \sum_{l=1}^a \left(|\vec{u}_l + \vec{v}_l + \vec{w}_l| \right) \cdot n_{zell} \quad (4.50)$$

$$\Delta p_z = \frac{\frac{1}{a_1} \cdot \sum_{l=1}^{a_1} p_l}{Z_h} \quad (4.51)$$

$$\begin{aligned} a &= \text{Anzahl der aktiven Porenzellen} \\ a_1 &= \text{Anzahl der aktiven Porenzellen in der ersten Zellschicht} \end{aligned}$$

Hieraus ergibt sich die Bestimmungsgleichung für die mittlere Permeabilität $[\text{m}^2]$ im Modell:

$$k = - \frac{Z_h \cdot \eta \cdot \frac{1}{a} \cdot \sum_{l=1}^a \left(|\vec{u}_l + \vec{v}_l + \vec{w}_l| \right) \cdot n_{zell}}{\frac{1}{a_1} \cdot \sum_{l=1}^{a_1} p_l} \quad (4.52)$$

Die Umrechnung in den Durchlässigkeitsbeiwert erfolgt dann über den Zusammenhang analog Gl. 3.17.

Simulation von Testproblemen

In der Fluidodynamik werden häufig Benchmark-Tests (Leistungstests) eingesetzt, die zur Überprüfung der Zuverlässigkeit und Leistungsfähigkeit von Gleichungslösern dienen. Für die Überprüfung dieses Modells bietet sich ein Benchmark-Test an, bei dem eine Kugel oder ein Zylinder von einem Fluid bei unterschiedlichen Randbedingungen umströmt wird (TUREK, 1998, SANO & MAKIZONO, 1998, KARIADAKIS, 1999, TATSUMI, 1999). Meist wird dieser Test bei zweidimensionalen Problemen angewendet, ist aber durchaus verwendbar für dreidimensionale Strömungsprobleme.

Bei diesen Testsimulationen wird das Standardproblem in der folgenden Konfiguration durchgeführt:

Testkonfiguration:

- Zylinder mit einem Durchmesser von 10 [mm] und der Höhe von 20 [mm] als Bezugssystem
- eine Kugel vom Durchmesser 3,33 [mm] befindet sich im Mittelpunkt des Zylinders (geometrische Porosität beträgt 90,4 %)
- Zellweite (Diskretisierung MAC-Gitter) beträgt 0,5 [mm]
- Durchströmung des Zylinders von „unten“ nach „oben“
- Fluid ist Wasser bei 20 °C
- dynamische Viskosität $1,0087 \cdot 10^{-3}$ [Pa·s]
- Dichte 998,2 [kg/m³]
- Variation der Anfangs- und Startgeschwindigkeiten (Folge: Durchströmung bei unterschiedlichen Reynoldszahlen)
- Simulation bis zum quasistationären Zustand

Die geometrische Testkonfiguration ist der Abbildung im Anhang 2 (Abb. A2.1 und A2.2) dargestellt. In der Tabelle sind die durchgeführten Testrechnungen mit ihren Randbedingungen und die relevanten Berechnungsergebnissen aufgeführt:

Tab. 4.3: Fallbeispiele für die Simulation des Testproblems

Parameter	Beispiel 1	Beispiel 2	Beispiel 3	Beispiel 4	Beispiel 5	Beispiel 6	Beispiel 7
v_0 [m/s]	$1,00 \cdot 10^{-6}$	$1,00 \cdot 10^{-5}$	$1,00 \cdot 10^{-4}$	$1,00 \cdot 10^{-3}$	$5,00 \cdot 10^{-3}$	$1,00 \cdot 10^{-2}$	$1,00 \cdot 10^{-1}$
Re_0 [-]	$\sim 0,01$	$\sim 0,1$	~ 1	~ 10	~ 50	~ 100	~ 1000
v_m [m/s]	$9,58 \cdot 10^{-7}$	$9,58 \cdot 10^{-6}$	$9,58 \cdot 10^{-5}$	$9,60 \cdot 10^{-4}$	$5,56 \cdot 10^{-3}$	$1,13 \cdot 10^{-2}$	$1,11 \cdot 10^{-1}$
Re_m [-]	0,0095	0,095	0,95	9,5	55,5	111,5	1105
v_{max} [m/s]	$2,11 \cdot 10^{-6}$	$2,11 \cdot 10^{-5}$	$2,10 \cdot 10^{-4}$	$2,10 \cdot 10^{-3}$	$1,22 \cdot 10^{-2}$	$2,44 \cdot 10^{-2}$	$2,25 \cdot 10^{-1}$
Re_{max} [-]	0,021	0,21	2,08	20,38	120,7	241,5	2228
Simul. t [s]	3,5	2,1	3,7	1,4	0,9	0,07	0,04
p_u [Pa]	$1,16 \cdot 10^{-4}$	$1,16 \cdot 10^{-3}$	0,012	0,1471	0,5101	0,92	72,94
i [Pa/m]	0,0058	0,06	0,6	7,4	25,5	1503,5	3647
i [mWS/m]	$5,91 \cdot 10^{-7}$	$5,91 \cdot 10^{-6}$	$6,12 \cdot 10^{-5}$	$7,50 \cdot 10^{-4}$	$2,60 \cdot 10^{-3}$	$4,69 \cdot 10^{-3}$	$3,72 \cdot 10^{-1}$
k_f [m/s]	1,61	1,61	1,58	1,28	2,14	2,41	0,3
Turbulenz	keine	keine	keine	keine	beginnend	ausgeprägt	ausgeprägt
Numerik	stabil	stabil	stabil	stabil	stabil	instabil	stabil
DARCY	gültig	gültig	gültig	\sim Grenze	ungültig	ungültig	ungültig
Abb.	A2.3, A2.4			A2.5, A2.6	A2.7, A2.8		A2.9, A2.10

Im Anhang 2 sind jeweils die Strömungsbilder (Geschwindigkeitsbeträge und Strömungsvektoren) und die Druckverteilungen der jeweiligen Fallbeispiele dargestellt.

Konfiguration Beispiel 8

Das Beispiel 8 wird mit den Anfangs- und Randbedingungen entsprechend Beispiel 3 durchgeführt. Hierbei wird ein leerer Zylinder ohne Kugel durchströmt. Bei diesem Fall gilt das Gesetz von Hagen-Poiseuille, einer analytischen Lösung der Navier-Stokes-Gleichung für diesen speziellen Fall. In diesem Beispiel wird die analytische Lösung mit der numerischen verglichen.

Beim Gesetz von Hagen-Poiseuille ergibt sich ein parabolisches Geschwindigkeitsprofil mit maximaler Geschwindigkeit in der Zylinderachse:

$$v = \frac{Z_r^2 - a^2}{4\eta} \cdot \frac{\Delta p}{Z_h} \quad (4.53)$$

$$v_{max} = \frac{Z_r^2}{4\eta} \cdot \frac{\Delta p}{Z_h} \quad (4.54)$$

$$\bar{v} = \frac{Z_r^2}{8\eta} \cdot \frac{\Delta p}{Z_h} = \frac{Q}{\pi \cdot Z_r^2} \quad (4.55)$$

a = Abstand von der Zylinderachse

Als mittlere Geschwindigkeit wurde $1,00 \cdot 10^{-4}$ [m/s] angesetzt, und dann über die abgeleitete Druckdifferenz (Gl. 4.55) das Geschwindigkeitsprofil (Gl. 4.53) errechnet.

Die Abbildung 4.10 zeigt den Vergleich der numerischen mit der analytischen Lösung. Die Werte aus dem Modell wurden in der mittleren Höhe des Zylinders aus den einzelnen, dem Abstand von der Zylinderachse entsprechenden MAC-Zellen abgerufen.

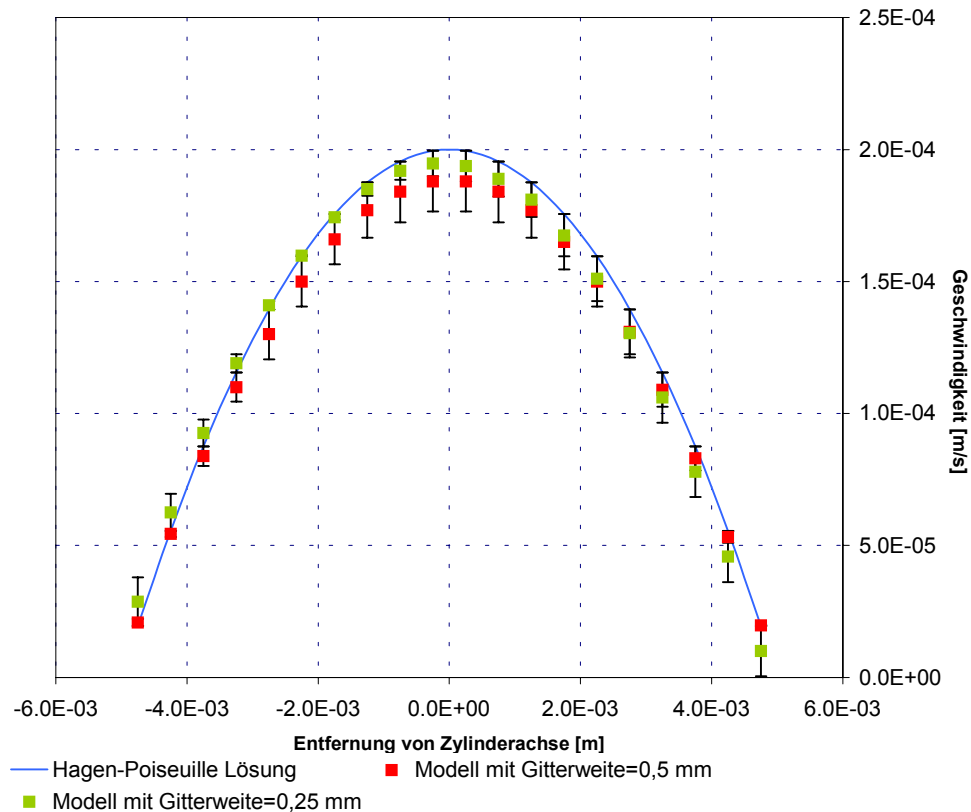


Abb. 4.10: Vergleich numerischer und analytischer Lösung im Geschwindigkeitsprofil eines Zylinders

Ergebnisse und Interpretation

Beispiele 1 bis 7: Die mittlere Geschwindigkeit im System entspricht nahezu der vorgegebenen Anfangsgeschwindigkeit, entsprechend liegen auch die mittleren Reynoldszahlen bei den Vorgabewerten. Die mittlere Geschwindigkeit liegt in den Beispielen 1 bis 5 leicht unter der Anfangsgeschwindigkeit und in den Beispielen 6 und 7 leicht darüber. Die maximale im System auftretende Geschwindigkeit ist etwa doppelt so hoch wie die Anfangsgeschwindigkeit (siehe auch Beispiel 8). Der berechnete Fluiddruck am Zylinderboden steigt bis zur einer Reynoldszahl von 50 (Beispiel 1 bis 5) \pm linear an, bei höheren Anfangsgeschwindigkeiten nicht mehr, entsprechend verhält sich der resultierende Druckgradient im Zylinder. Signifikant sind die Unterschiede in den aus den berechneten Daten abgeleiteten Durchlässigkeitsbeiwerten (als Strömungswiderstand). Dabei zeigt sich, daß bis zu einer Reynoldszahl von etwa 1 der Wert konstant bleibt, um dann abzunehmen, was bedeutet, daß bei einsetzenden turbulenten Strömungsverhältnissen der Strömungswiderstand größer wird. Im Beispiel 7 zeigen sich deutlich die turbulenten Strömungsverhältnisse (Abb. A2.9). Auffallend dabei sind die sich bildenden kleinen Gegenwirbel unterhalb der Hauptwirbel. Bei turbulenten Verhältnissen liegen im simuliertem Zeitraum keine quasistationären Verhältnisse vor, da die auftretenden Wirbel dynamisch reagieren (sich bewegen, Gegenwirbel bilden sich und verschwinden). Entsprechend variieren die Druckverhältnisse und Durchströmungsmengen. Die Abbildungen im Anhang für die Beispiele 1, 4, 5 und 7 zeigen jeweils den relativen Betrag der Strömungsgeschwindigkeit (von dunkel nach hellgrün), die Geschwindigkeitsvektoren und die Druckverteilung im Vertikalschnitt der Mittelebene des Zylinders. Eine komplette dreidimensionale Darstellung wäre zu unübersichtlich. Auf die Darstellung der Beispiele 2 und 3 wurde verzichtet, da diese den Verhältnissen im Beispiel 1 sehr ähnlich sind.

In der Abbildung A2.3 (Beispiel 1) erkennt man deutlich, daß der Fluidstrom laminar um die Kugel herumfließt, ohne Wirbelbildung und ohne deutlichen „Druckschattenbereich“ auf der strömungsabgewandten Seite der Kugel („Leeseite“). Die Fließverhältnisse um die Kugel herum sind symmetrisch. Die schnellsten Fluidbewegungen finden zwischen der Äquator-

ebene der Kugel und der Zylinderwand statt (Kontinuitätsgesetz). Gleiche Verhältnisse liegen in den Beispielen 2 und 3 vor.

Im Beispiel 4 deutet sich eine Asymmetrie des Strömungsfeldes an. An der „Leeseite“ der Kugel bildet sich ein Druckschattenbereich aus, der sich bei höheren Anfangsgeschwindigkeiten deutlich verstärkt (Beispiele 5 bis 7). In dieser Druckschattenzone kommt es zur Wirbelbildung, die extrem im Beispiel 7 ausgebildet ist.

Beispiel 8: Der Vergleich der numerischen und analytischen Lösung zeigt eine weitgehende Übereinstimmung der Geschwindigkeit mit der Entfernung von der Zylinderachse (Abb. 4.10). Die Fehlerbalken zeigen die absoluten Abweichungen von der analytischen Lösung. Die Lösung mit der 0,25 [mm] Gitterweite liegt näher an der analytischen Lösung. Auffallend ist eine leichte Asymmetrie der numerischen Lösungen. Die Ursache ist in der Diskretisierung des Zylinders zu suchen, da die Rundung des Zylinders mit dem MAC-Gitter nicht exakt nachgebildet werden kann und keine Netzverfeinerung am Zylinderrand vorgenommen wurde.

4.3.3 Transportmodellierung

Einsatz der Perkolationstheorie in der Transportmodellierung

Der Fluidfluß und Transport im Modellmedium ist auch von der Vernetzung, bzw. der Verbindung der Zellen (und Poren) untereinander abhängig.

Als Cluster werden in der Perkolationstheorie alle Zellen (Gitterplätze) bezeichnet, die untereinander durch einen Pfad zusammenhängen und 2 Systemränder (Zylinder- Ober- und Unterkante) untereinander verbinden. Ein Cluster perkoliert, wenn die Verbindung zwischen den Systemrändern hergestellt ist.

Diese Eigenschaft perkolierender Cluster kann im Modell im Zusammenhang mit der Transportmodellierung genutzt werden. Bei Medien, die genügend fein diskretisiert sind und bei denen keine Veränderungen an den Kugelradien vorgenommen wurden, ergibt sich immer ein vollständiges perkolierendes Cluster im Bezugssystem (Zylinder). Das heißt nichts anderes, als daß alle Poren miteinander verbunden sind. Werden die Radien der Kugeln vergrößert, ist das Porensystem nicht mehr vollständig untereinander verbunden. Es kann zur Ausbildung von Sackporen, abgeschnittenen Poren u.s.w. kommen. Mit dem sogenannten „Verbrennungsalgorithmus“ wird die Vernetzung des Porensystems ermittelt und es werden die Porenbereiche identifiziert, die nicht mit den Systemrändern verbunden sind. Die Veränderung im Porenraum kann soweit betrieben werden, bis die kritische Perkolationsschranke unterschritten wurde und das System damit undurchlässig wird (TUREK, 1998, HILFER, 1996).

Umsetzung des „Verbrennungsalgorithmus“

Im Modell bestehen die Gitterplätze des Perkolationssystems aus den MAC-Zellen der Mediumdiskretisierung (kubisches Gitter). Als Systemränder sind der Zylinderboden als „Einlauf“ und das andere Ende als „Auslauf“ definiert.

Nach TUREK (1998) wird der Algorithmus folgendermaßen einfach formuliert:

1. gegeben ist das Gitter (x,y,z) aus der MAC-Diskretisierung
2. $N(x,y,z)=0$ wenn unbesetzt und $N(x,y,z)=-1$ wenn die Zelle in einer Kugel liegt (diese Gitterplätze werden nie besetzt)
3. $N(x,0,z)=0$ auf Startseite des Zylinders, auf der anderen Seite $N(x,\max,z)=\max$
4. zur „Laufzeit“ $t=0$ werden alle $N(x,0,z)=2$, wenn unbesetzt und $N(x,0,z)$ ungleich -1; die Anzahl B und deren Positionen (x,y,z) werden gespeichert
5. alle Nachbarn der Zellen im Raum in B werden untersucht, ist der Nachbar $N(x,y,z)=0$, dann wird $N(x,y,z)=2$ (also „verbrannt“)
6. die „Laufzeit“ t wird um eins erhöht, die Positionen und die Anzahl der „neuverbrannten“ Plätze gespeichert und mitgezählt
7. Wiederholung ab Punkt 5 bis $y=\max$ erreicht oder bis $B=0$

Ist $y=\max$, so perkoliert das Cluster und die „Laufzeit“ t gibt den kürzesten Weg zwischen den Systemrändern an. Im anderen Fall, wenn $B=0$, perkoliert das Cluster nicht, das Medium ist trotz eventueller Porosität undurchlässig. Alle „verbrannten“ und „unverbrannten“ Gitterplätze sind nach Durchlaufen des Algorithmus bekannt, d.h. auftretende Poren, die nicht verbunden sind (fließ- und transportunwirksam), sind dem System bekannt.

Simulation des Transportes eines idealen Tracers

Der Transport von idealen Tracern in einem Strömungsfeld kann durch die allgemeine makroskopische advektiv-dispersive Transportgleichung beschrieben werden:

$$\frac{\partial c}{\partial t} = -v_a \cdot \nabla c + D_H \cdot \nabla^2 c \quad (4.56)$$

$$D_H = \alpha \cdot v_a + D_M$$

Für den eindimensionalen Fall mit der Randbedingung $c(0,t)=c_0$ und $c(x,t)=0$ existieren eine Reihe analytischer Lösungen. Eine einfache, eindimensionale Form kann durch Laplace-Transformation gewonnen werden (Gl. 3.27). Aus diesen analytischen Lösungen wird klassisch die Dispersivität aus Tracerversuchen in Säulen durch Kurvenanpassung hergeleitet. Es existieren eine Reihe weiterer auch mehrdimensionaler Lösungen, die bei der Auswertung von Tracerversuchen im Gelände (an Grundwassermeßstellen und Brunnen) angewandt werden. Für den Transport nichtidealer Tracer (Stoffe) wird die Gleichung um Retardations- und Abbauterme sowie Quell- und Senkenterme erweitert (Gl. 3.22).

Die Konzentrationsverteilungen über die Zeit kann im Modell durch die mikroskopische Advective-diffusive Gleichung dargestellt werden. Diese leitet sich direkt aus der makroskopischen Advektion-Dispersion-Gleichung ab, da die hydromechanische Dispersion letztendlich aus der Variation der Geschwindigkeitsvektoren in den Poren und der Diffusionskonstanten folgt:

$$\frac{\partial c}{\partial t} = -(\vec{v} \cdot \nabla c) + (D_M \cdot \nabla^2 c) \quad (4.57)$$

\vec{v} = Porengeschwindigkeit

Diese Transportgleichung wird analog der Navier-Stokes-Gleichung im MAC-Gitter diskretisiert und explizit über die Zeit iteriert. Bei dieser Methode besteht aufgrund des Finiten-Differenzen-Gitters die Gefahr der numerischen Dispersion. Desweiteren bedarf es in diese Iterationsmethode in einem max. 100x100x200 Zellen-Gitter extrem viel Rechenzeit, so daß diese Methode ineffektiv ist.

Simulation von Tracerpartikeln

Die sog. *particle-tracking* Methoden sind bei der Stofftransportmodellierung weit verbreitet. Diese Methoden werden auch in makroskopischen Grundwassertransportmodellen angewandt. Bei diesen Methoden werden die Bewegungstrajektoren der Tracerteilchen (Partikel), die nicht untereinander interagieren, berechnet. Durch Volumenmittelung und der Verknüpfung der Tracerteilchen mit Massen kann auf die Konzentrationsverteilung zurückgerechnet werden. Der Vorteil dieser Methoden liegt in der relativ einfachen Handhabbarkeit, der Vermeidung numerischer Dispersion und des deutlich geringeren Rechenaufwandes gegenüber den deterministischen Lösungsansätzen der allgemeinen Transportgleichung.

Die advective Bewegungsgleichung eines Tracerteilchens kann folgendermaßen einfach geschrieben werden:

$$\frac{\partial}{\partial t} \vec{x} = \vec{v}_p(\vec{x}, t) \quad (4.58)$$

\vec{v}_p = Geschwindigkeit eines Tracerteilchens am Ort x zur Zeit t

Eine einfache zeitliche Integration und zeitliche Diskretisierung liefert in einem Geschwindigkeitsfeld folgende Bewegungsgleichung:

$$\vec{x}(t + \Delta t) = \vec{x}(t) + \Delta t \cdot \vec{v}_p \quad (4.59)$$

Der diffusive Transportschritt wird im Modell mit einer *random-walk* Methode realisiert. Dafür wird ein symmetrischer random-walker folgender Form (dreidimensional) eingeführt (TUREK, 1998):

$$\langle \vec{x}^2(t) \rangle = 6D_M t \quad (4.60)$$

$$\langle \vec{x}_n^2 \rangle = n \cdot \langle z_i \rangle \quad (4.61)$$

Die Diffusionsschrittweite des random-walkers muß folgende Bedingung erfüllen:

$$\begin{aligned} \Delta x &= z_i \\ \langle z_i \rangle &= 6 \cdot D_M \end{aligned} \quad (4.62)$$

Für einen advektiv-diffusiven Transportschritt ergibt sich also mit dem random-walker:

$$\vec{x}(t + \Delta t) = \vec{x}(t) + \Delta t \cdot \vec{v}_p + \Delta t \cdot \langle z_i \rangle \quad (4.63)$$

\vec{x} = Ortsvektor eines Tracerteilchens
 \vec{v}_p = Fluidgeschwindigkeit am Ort des Tracerteilchens
 $\langle z_i \rangle$ = Mittelwert der Zufallszahlen gekoppelt mit der Diffusionskonstanten

Umsetzung im Modell PoreFlow

Mit Hilfe dieser *particle-tracking* Methode, die aufgrund des zufallsgesteuerten diffusiven Transportschrittes als Monte-Carlo-Methode bezeichnet werden kann, wird nun die advective-diffusive allgemeine Transportgleichung (Gl. 4.57) gelöst.

Die Fluidgeschwindigkeit am Ort des Partikels wird nach folgender Gleichung berechnet:

$$\vec{v}_p = (\vec{x} - \vec{x}_M) \cdot \nabla \vec{v}_M + \vec{v}_M \quad (4.64)$$

\vec{v}_p = Fluidgeschwindigkeit am Ort x des Partikels
 \vec{x} = momentaner Ortsvektor des Partikels
 \vec{x}_M = Ortsvektor des Mittelpunktes einer Zelle
 \vec{v}_M = zugeordnete Fluidgeschwindigkeiten der Zelle

Dabei werden die in der MAC-Diskretisierung verwendeten Differentialoperatoren (Gl. 4.26 bis 4.28) verwendet.

Der Diffusionsschritt wird nun folgendermaßen definiert:

$$\bar{x}_d = \begin{pmatrix} z[0,1]^{gauss} \cdot \sqrt{2 \cdot D_M \cdot \Delta t} \\ z[0,1]^{gauss} \cdot \sqrt{2 \cdot D_M \cdot \Delta t} \\ z[0,1]^{gauss} \cdot \sqrt{2 \cdot D_M \cdot \Delta t} \end{pmatrix} \quad (4.65)$$

Zusammengefaßt läßt sich ein Zeitschritt für ein Tracerpartikel folgendermaßen ausdrücken:

$$x_p^{(n+1)} = x_p^{(n)} + \Delta t \cdot (\vec{v}_p + \bar{x}_d) \quad (4.66)$$

Für eine stabile numerische Berechnung der Partikelbewegung müssen folgende Bedingungen eingehalten werden:

$$\Delta t \leq \frac{\Delta x}{6 \cdot \max|\vec{v}_p|} \quad (4.67)$$

$$\Delta t \leq \frac{\Delta x^2}{6 \cdot D_M}$$

Randkollisionen der Tracerpartikel können durch den diffusiven Transportschritt oder durch nicht korrekte Geschwindigkeitsvektoren in den Zellen auftreten. Diese werden bei der Transportberechnung dahingehend korrigiert, daß die Transportvektorkomponente, die zur Kollision führt, auf null gesetzt wird. D.h. Kollisionen sind möglich, ein Eintritt in den Rand wird aber verhindert.

Die Monte-Carlo-Simulation wird im Modell nach folgendem Schema durchgeführt:

1. Vorgabe der Anzahl der Tracerpartikel (bis zu 200000)
2. Vorgabe des Diffusionskoeffizienten
3. Berechnung des 1. Zeitschrittes aus der maximalen im System auftretenden Fluidgeschwindigkeit und des Diffusionskoeffizienten
4. zufällige Verteilung der Startpositionen in den Porenzellen am Boden des Bezugssystems (Zylinders)
5. Berechnung der Fluidgeschwindigkeit an der Partikelposition
6. Berechnung der neuen Partikelpositionen aus Fluidgeschwindigkeit und Diffusion
7. Berechnung des neuen Zeitschrittintervalls (dynamische Zeitschrittanpassung)
8. Registrierung des zurückgelegten Weges eines jeden Partikels zur Berechnung der Bahntortuositäten
9. Detektion der Partikel am Ende des Zylinders und Entfernung aus dem System
10. Detektion von Randkollisionen und Registrierung (wirksame Erhöhung des diffusiven Transportanteils durch Fluidhafrandbedingung)
11. ab Punkt 5 bis Abbruch oder keine Partikel mehr im System

Ableitung von Parametern

Aus den Bahnwegen der Partikel lassen sich die mittlere Tortuosität und die Dispersivität des Modellmediums ableiten.

Tortuosität

Die Tortuosität τ eines einzelnen Partikels läßt sich folgendermaßen ausdrücken:

$$\tau_i = \frac{\int \vec{v}_p dt}{Z_h} \quad (4.68)$$

Die Tortuosität ergibt sich damit aus dem zurückgelegten Gesamtweg des Partikels im Verhältnis zum kürzesten Weg in Strömungsrichtung durch den Zylinder. Die Geschwindigkeit des Partikels enthält den advektiven- und diffusiven Anteil. Die mittlere Tortuosität des Modellmediums entspricht dann dem Mittelwert aller Einzeltortuositäten.

$$\bar{\tau} = \frac{1}{i} \sum_1^i \tau_i \quad (4.69)$$

Dispersivität

Die Dispersivität im Modell PoreFlow kann mit zwei verschiedenen Methoden abgeleitet werden. Zum einen wird die statistische Momentenmethode und die Methode der Kurvenanpassung (Gl. 3.28 bis 3.40) bei der Auswertung der simulierten Durchbruchkurve aus der Monte-Carlo-Simulation angewandt.

Zum anderen wird die Dispersivität aus der Varianz des Porengeschwindigkeitsfeldes und analog zur Tortuosität aus den tatsächlichen Fließstrecken abgeleitet. In Anlehnung an Gl. 3.42 wird folgendes definiert:

$$\alpha_L = \frac{\frac{1}{a} \sum_{a=1}^a \left(\bar{v}_y - \frac{1}{a} \sum_{a=1}^a \bar{v}_y \right)^2}{\left(\frac{1}{a} \sum_{a=1}^a \bar{v}_y \right)^2} \cdot Z_h \quad (4.70)$$

$$\alpha_T = \frac{\frac{1}{a} \sum_{a=1}^a \left(\bar{v}_t - \frac{1}{a} \sum_{a=1}^a \bar{v}_t \right)^2}{\left(\frac{1}{a} \sum_{a=1}^a \bar{v}_t \right)^2} \cdot Z_d \quad (4.71)$$

$$\bar{v}_t = \bar{v}_x + \bar{v}_z \quad (4.72)$$

Die Ermittlung aus der Varianz der Transportstrecken (Fließwege) steht mit der analytischen Lösung der Transportgleichung in folgender Beziehung:

$$\sigma^2 \left(\int \bar{v}_p dt \right) = 2 \cdot \alpha_L \cdot Z_h \quad (4.73)$$

Hierbei wird die Varianz der tatsächlichen Fließwege in Beziehung zur Dispersivität gesetzt.

Die hydromechanische Dispersivität ergibt sich dann aus:

$$D_L = \alpha_L \cdot \frac{1}{a} \sum_{a=1}^a |\bar{v}_y| + D_M \quad (4.74)$$

$$D_T = \alpha_T \cdot \frac{1}{a} \sum_{a=1}^a |\bar{v}_t| + D_M \quad (4.75)$$

Die Ergebnisse der verschiedenen Methoden zur Ermittlung der Dispersivität werden in Beispielsimulationen gegenübergestellt und diskutiert.

Ableitung der effektiven und advektiv wirksamen Porosität

Die Gesamtporosität des Modellmediums wird analog der statistischen Porosität, aus dem Verhältnis der Porenzellen zu den Gesamtzellen im Bezugssystem ermittelt. Dabei gilt folgende Beziehung:

$$n_{\text{zell}} = \frac{a_p}{a_p + a_s} \quad (4.76)$$

$$n_{\text{zell,eff}} = \frac{a_p - a_{p_v}}{a_p + a_s} \quad (4.77)$$

a_p = Anzahl der Zellen des Porenraumes (für alle $S_{i,j,k} = 2$)

a_s = Anzahl der Zellen der Festphase (Kugeln) (für alle $S_{i,j,k} = 1$)

a_{p_v} = Anzahl der Zellen des Porenraumes für die gilt:

$$\left| \bar{v}_{i,j,k} \right| \leq \frac{Pe \cdot D_M}{\Delta x} \quad (4.78)$$

$$Pe = 1$$

Zur Bestimmung der advektiv wirksamen Porosität im System wird die dimensionslose Peclet-Zahl herangezogen. Per Definition bedeuten Peclet-Zahlen kleiner 1 den überwiegend diffusiven Transport (Gl. 3.25, 4.78). Entsprechend kann nach der Definition eine Grenzgeschwindigkeit in einer Porenzelle ermittelt werden, in der der diffusive Transport in dieser Zelle überwiegt. Die Zellen, die nach diesem Kriterium der Grenzgeschwindigkeit ermittelt werden, haben keinen oder untergeordnet Einfluß auf den advektiven Transport im Modellmedium.

Als Ergebnis dieses Ansatzes ist beispielhaft in der Abbildung A6.2 und A6.3 im Anhang 6 für das Kugelgemisch 4 dargestellt.

Aus den Tracerversuchen und Simulationen kann nach den klassischen Methoden (Kap. 3) die effektive Porosität bestimmt werden. Dabei gilt folgende Beziehung (nach Gl. 3.18):

$$n_{\text{eff}} = \frac{v_f}{\bar{v}_a} \quad (4.79)$$

Die Filtergeschwindigkeit wird im Durchströmungsversuch (Gl. 3.15) und die mittlere Abstandsgeschwindigkeit aus der Auswertung der Tracerversuche (Gl. 3.35) gewonnen.

Demonstration der Fließpfade und Dispersion

An diesem Beispiel werden die Möglichkeiten der Darstellung und Auswertung der bei der Fluid- und Transportmodellierung gewonnenen Daten dokumentiert und die Ergebnisparameter abgeleitet.

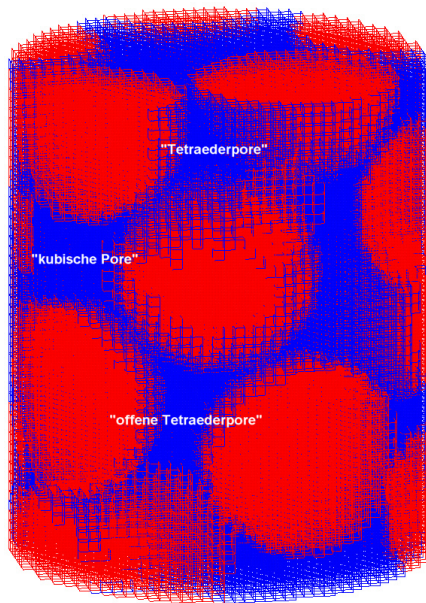
Folgende Parameter wurden bei der Modellierung des Mediums angesetzt:

Eingangsgrößen zur Mediumgenerierung (Beispiel 9)

- konstanter Kugeldurchmesser: 10 [mm]
- Gesamtzylinder: 140 [mm] Höhe, 140 [mm] Durchmesser
- Teilgebiet (Zylinder): 25 [mm] Höhe, 20 [mm] Durchmesser
- Rasterabstand der MAC-Diskretisierung $\Delta x = 0,5$ [mm]

Ergebnisse und Charakteristik des Mediums und des Porennetzwerkes

- 40 x 40 x 50 Anzahl aller Zellen (80000)
- 63200 aktive Zellen im Teilgebiet, 100 % Perkolations des Porennetzwerkes
- $n_{geo} = 42,3 \%$, $n_{zell} = 40,9 \%$
- $S_{geo} = 0,75 \text{ [m}^2\text{]}$, $S_{por} = 346,4 \text{ [1/m]}$, $d_k = 10 \text{ [mm]}$
- $k_f = 1,0 \text{ [m/s]}$ (KOZENY-KÖHLER), $k_f = 0,7 \text{ [m/s]}$ (KOZENY-CARMAN) bei 20 [°C]



Die Abb. 4.11 zeigt den diskretisierten Raum. Die Farbe Rot zeigt die Zellen der Festphase, Blau repräsentiert den Porenraum. Deutlich zu erkennen sind die unterschiedlichen Porenformen, die sich durch Störungen bei der Anlagerungsmodellierung und durch die Teildiskretisierung (Anschnitte) des Gesamtraumes ergeben. Das Porensystem ist nach der Perkolationsanalyse zu 100 % untereinander vernetzt.

Gut zu erkennen sind die aus der Anlagerungsmodellierung sich ergebenden Poren, die als „Tetraederporen“, „offene Tetraederporen“ und als „kubische Poren“ bezeichnet werden können.

Abb. 4.11: 3D- Diskretisierung des Raumes im Beispiel

Eingangsgrößen zur Fluid- und Transportmodellierung

- Eigenschaften des Fluides (Wasser) bei 20 [°C]:
Dichte: $\rho = 998,2 \text{ [kg/m}^3\text{]}$, dynamische Viskosität: $\eta = 1,0087 \cdot 10^{-3} \text{ [Pa}\cdot\text{s]}$
- Anfangsbedingung (konstante Randbedingung):
Anfangsgeschwindigkeit: $v_0 = 1 \cdot 10^{-4} \text{ [m/s]}$
Reynoldszahl zu Beginn der Simulation: $Re = 1,98$
- Fluidgeschwindigkeit am Zylinderrand und an den Kornrändern gleich null
- 10000 Tracerpartikel, Startpositionen zufällig am Zylinderboden verteilt
- Diffusionskonstante: $D_M = 1,1 \cdot 10^{-9} \text{ [m}^2\text{/s]}$

Ergebnisse der Fluidmodellierung

In den Abbildungen (4.12 und 4.13) wird das resultierende Strömungsfeld im Zylinder in einer 3D-Ansicht gezeigt. Dabei geben die blauen Linien die Richtung und den relativen Betrag der Strömungsgeschwindigkeit in der jeweiligen Porenraumzelle an. Deutlich zu erkennen ist die Ausbildung der parabolischen Geschwindigkeitsprofile innerhalb der „Poren“ sowie die niedrigen Fließgeschwindigkeiten an den Phasenrändern (Kugel- und Zylinderwände) und eine deutliche „Gewundenheit“ der Strömungswege (Abb. 4.13).

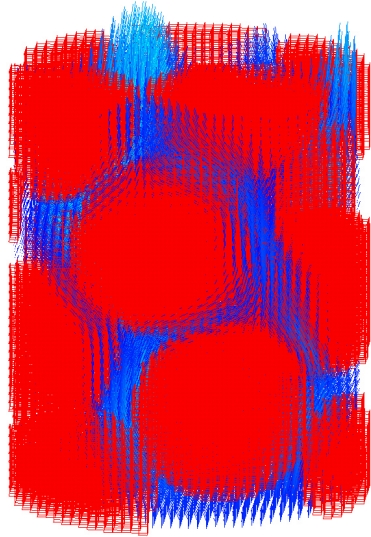


Abb. 4.12: 3D- Fluidgeschwindigkeitsfeld mit Matrixzellen (Kugeln)

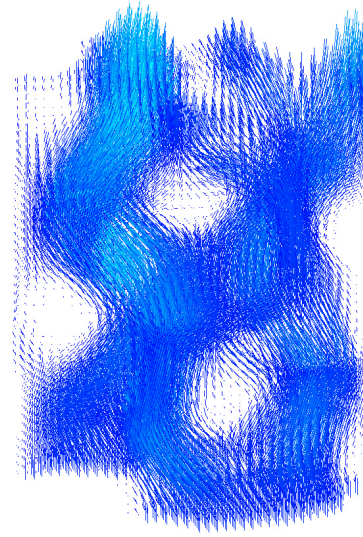


Abb. 4.13: 3D- Fluidgeschwindigkeitsfeld

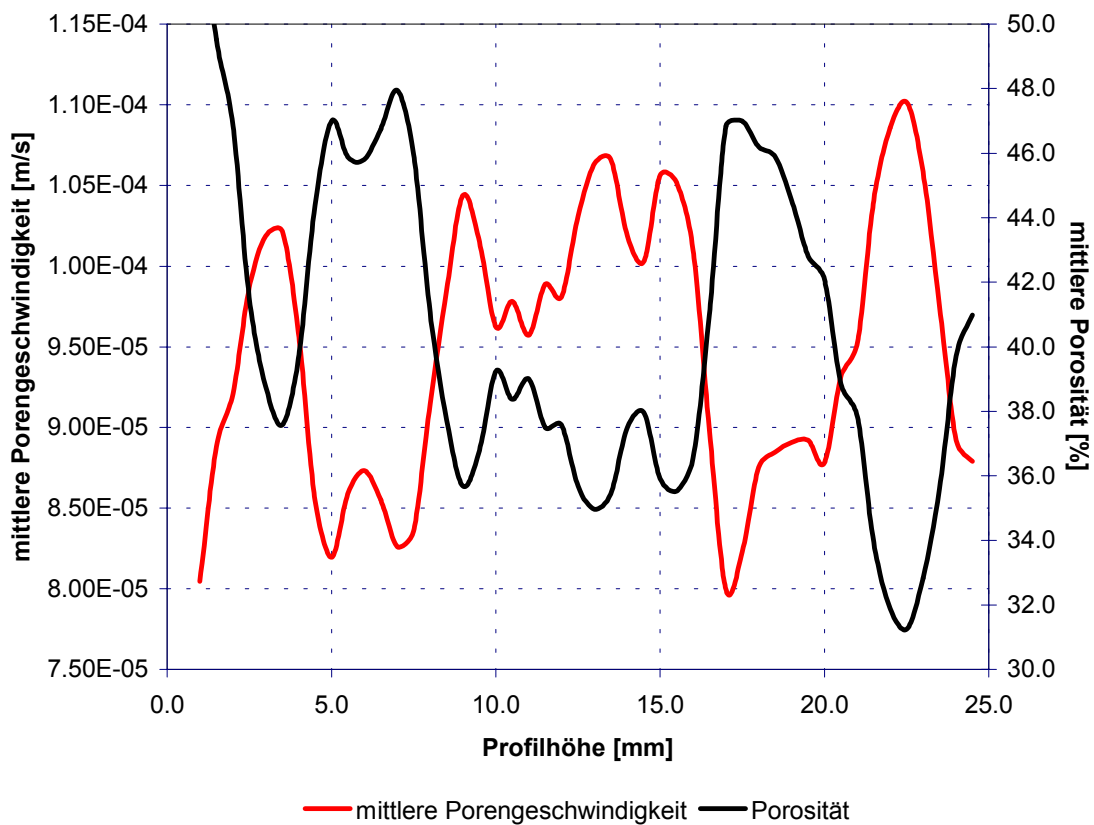


Abb. 4.14: Zusammenhang mittlere Porengeschwindigkeit und Porosität im Längsprofil des Zylinders

Die Abbildungen 4.14 und 4.15 veranschaulichen den Zusammenhang zwischen Porengeschwindigkeitsbetrag und Porosität im Längsprofil des Zylinders. Deutlich ist der Anstieg der Porengeschwindigkeit bei Abnahme der lokalen Porosität zu erkennen und umgekehrt (vgl. Gesetz von Hagen-Poiseuille, Abb. 4.10).

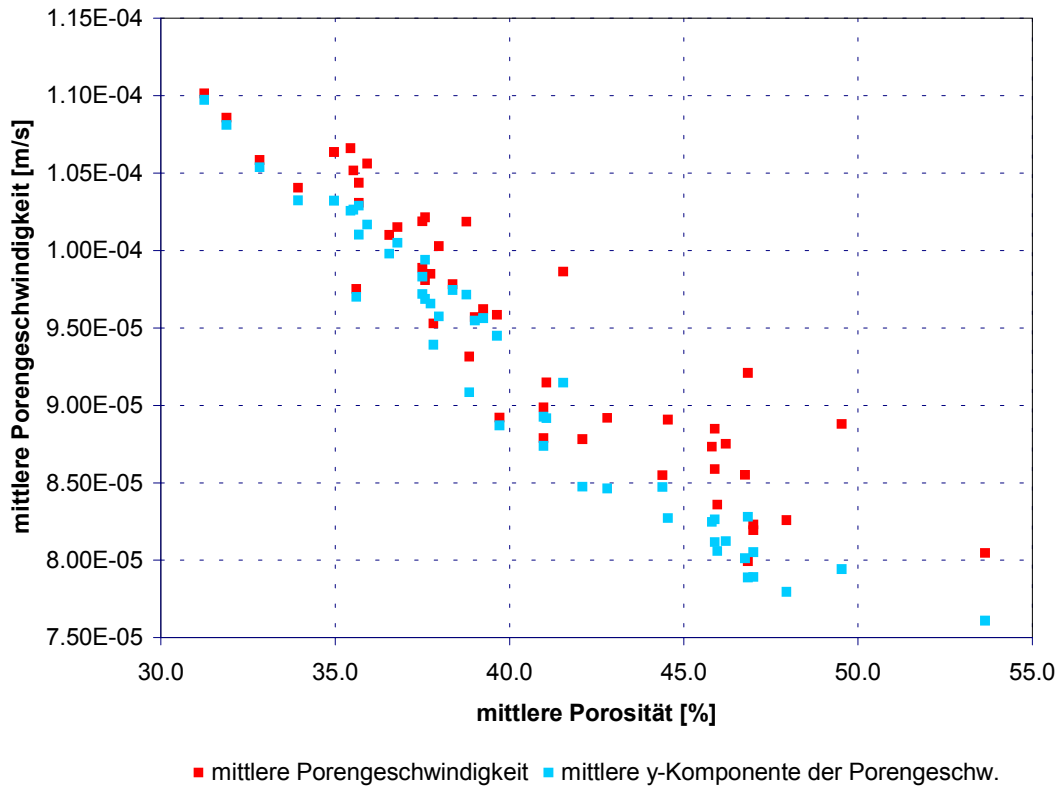


Abb. 4.15: Zusammenhang Porengeschwindigkeit/Porosität

In Abb. 4.15 (Porengeschwindigkeit vs. Porosität) ist ein nahezu linearer Zusammenhang des Porengeschwindigkeitsbetrages und der y-Komponente der Geschwindigkeitsvektoren erkennbar. Der Geschwindigkeitsbetrag ist um so höher, je niedriger die Porosität ist.

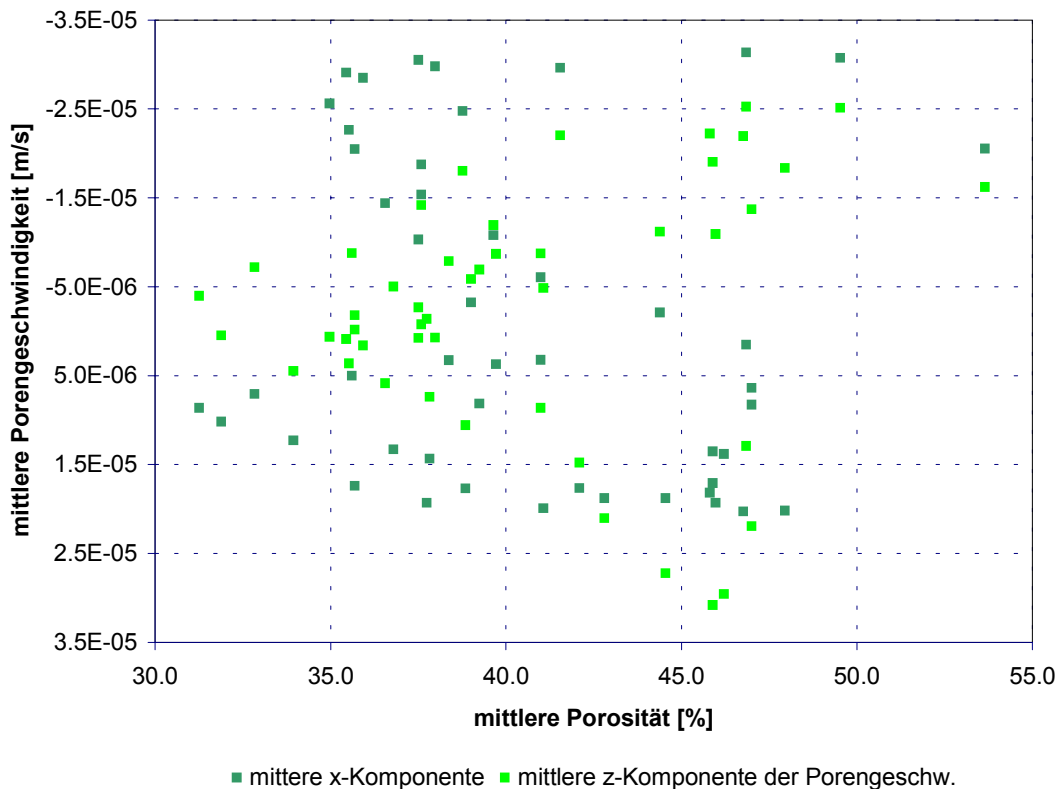


Abb. 4.16: Zusammenhang Porengeschwindigkeit der x,z-Vektorkomponenten/Porosität

Zwischen den x,z -Geschwindigkeitskomponenten und der Porosität ist kein direkter Zusammenhang erkennbar. Auffallend ist die zunehmende Streuung der Geschwindigkeitsbeträge mit zunehmender Porosität (Abb. 4.16). Dies wird dadurch erklärt, daß die Porosität quer zur Profilrichtung den relativen Porenraum als „Flächenporosität“ widerspiegelt und damit zwangsweise eine Auslenkung der Strömungsvektoren in diese „Flächen“ erfolgen muß (vgl. Abb. 3.4 und 3.5).

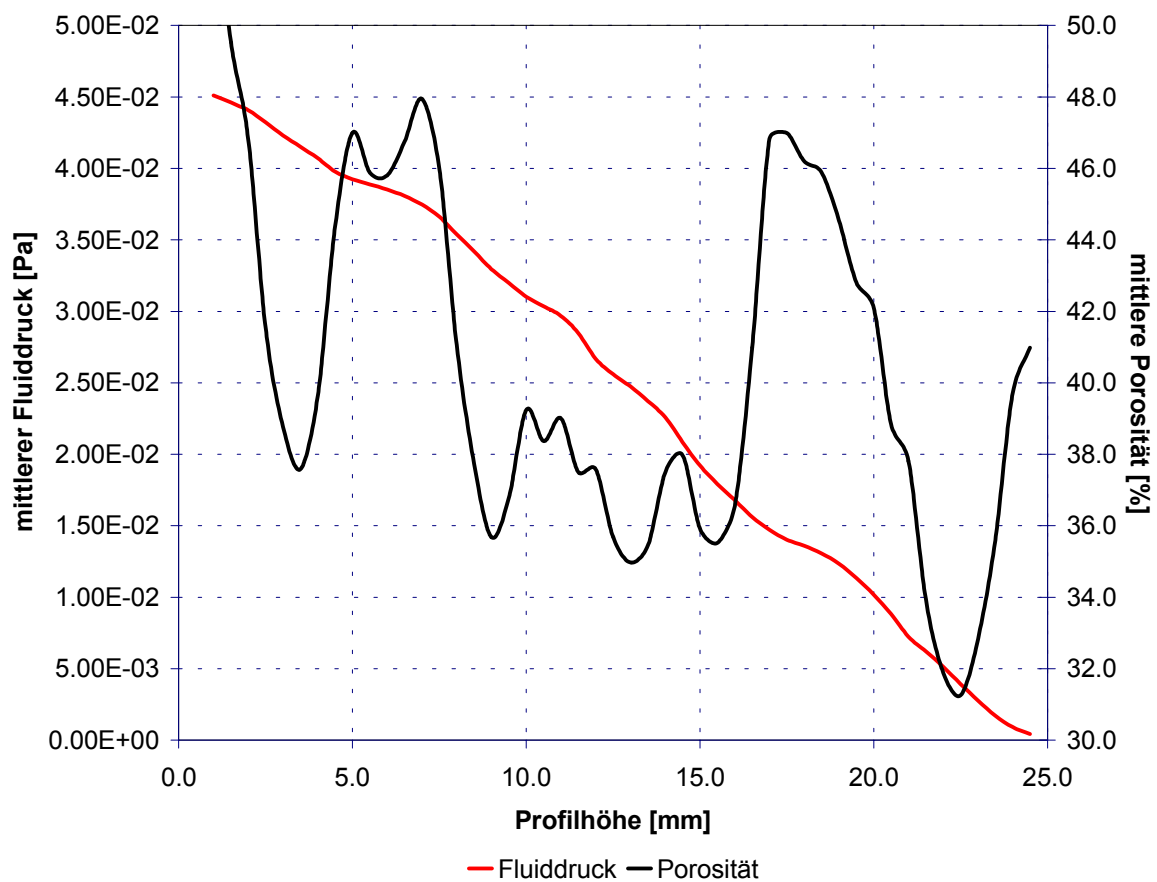


Abb. 4.17: Druckprofil im Zylinder

In der Abb. 4.17 wird der mittlere Fluiddruck im Profil zusammen mit der Porosität dargestellt. Wie zu erwarten ist, stellt sich ein nahezu lineares Druckgefälle im Modellmedium ein (Druckdifferenz mit Gl. 4.51). Der mittlere Fluiddruck korreliert nicht mit der Porosität, was zu erwarten war (vgl. auch Abbildungen im Anhang: A3.4, A4.4, A5.4, A6.8).

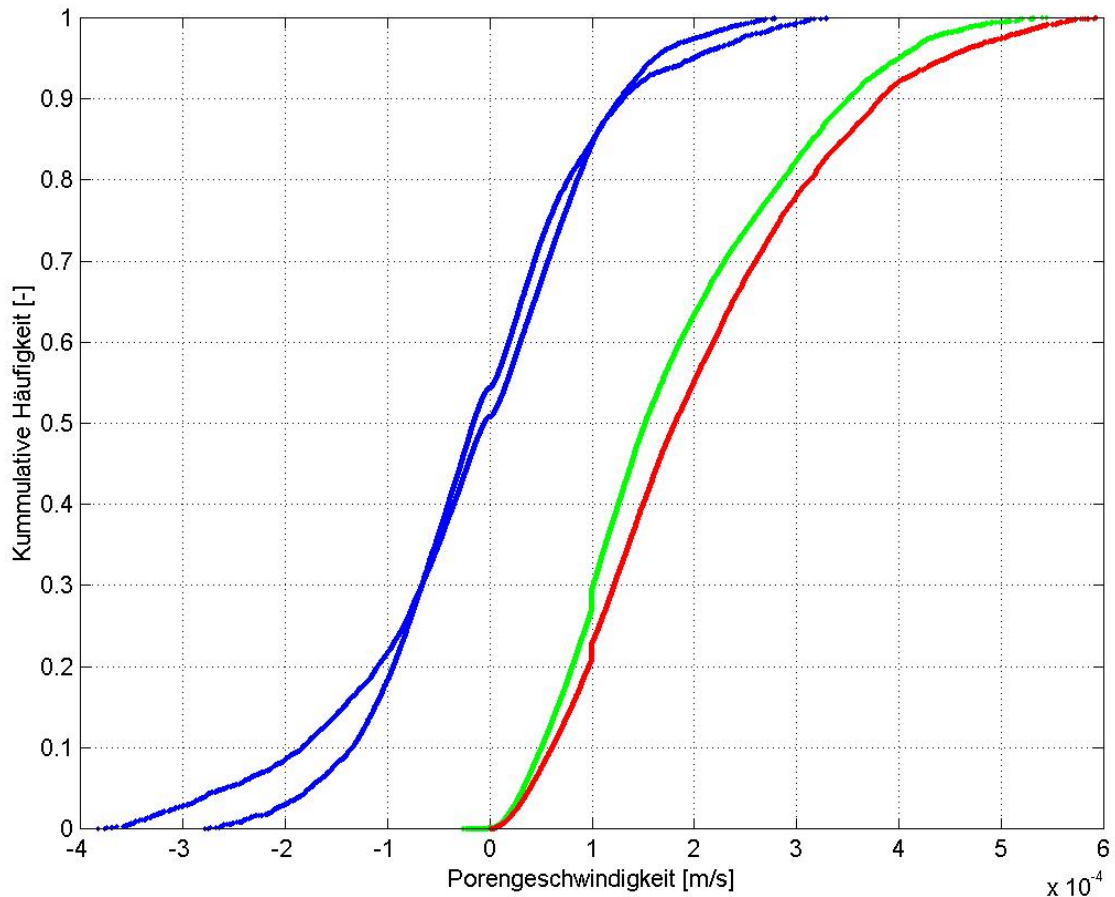


Abb. 4.18: Summenkurven der Poregeschwindigkeiten im Medium

In Abbildung 4.18 sind die Summenkurven der Poregeschwindigkeitskomponenten (x, z : Blau, y : Grün und Gesamtbetrag: Rot) dargestellt. In der Verteilung der Geschwindigkeitskomponenten ist die Information zur Dispersivität des Mediums enthalten (Kap. 3 und 4). D.h., je flacher die Verteilungskurve der y -Geschwindigkeitskomponente verläuft (stärkere Diversität der Verteilung), um so größer ist qualitativ die longitudinale Dispersivität, wenn die y -Vektorkomponente mit der Hauptstromrichtung zusammenfällt. Analog, wenn die x - und z -Vektorkomponenten quer zur Hauptströmungsrichtung liegen, und die Verteilungskurven flacher werden, erhöht sich qualitativ die transversale Dispersivität. Der vorhandene geringe negative y -Geschwindigkeitsanteil (grüne Kurve) weist auf beginnende Wirbelbildung hin.

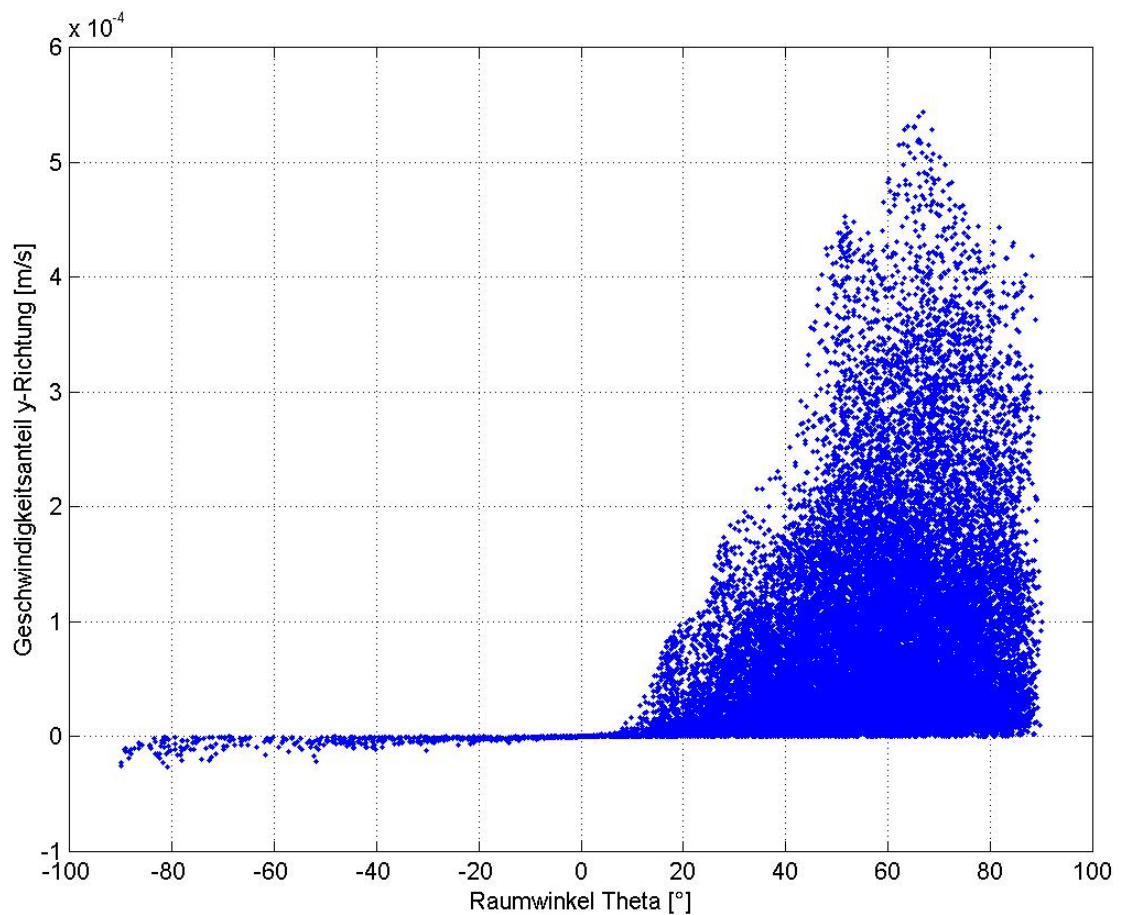


Abb. 4.19: Darstellung des Raumwinkels Theta in Abhängigkeit der y-Geschwindigkeitskomponente

Die Ausbildung kleiner Wirbel in diesem Beispiel ist deutlicher in der Abbildung 4.19 zu erkennen. Hierbei wurden die kartesischen Geschwindigkeitsvektoren in sphärische Koordinaten umgewandelt und der Raumwinkel Theta gegen den Anteil der y-Geschwindigkeitskomponente (Abb. 4.19) aufgetragen. Der Bereich der negativen Theta-Werte repräsentiert den Anteil der Strömungsvektoren, die etwa entgegengesetzt der Hauptströmungsrichtung (positive y-Achse) zeigen.

Vergleichend wird das Beispiel 7 herangezogen. Dort ist eine deutlich ausgeprägte Wirbelbildung zu erkennen (Abb. 4.20 und 4.21).

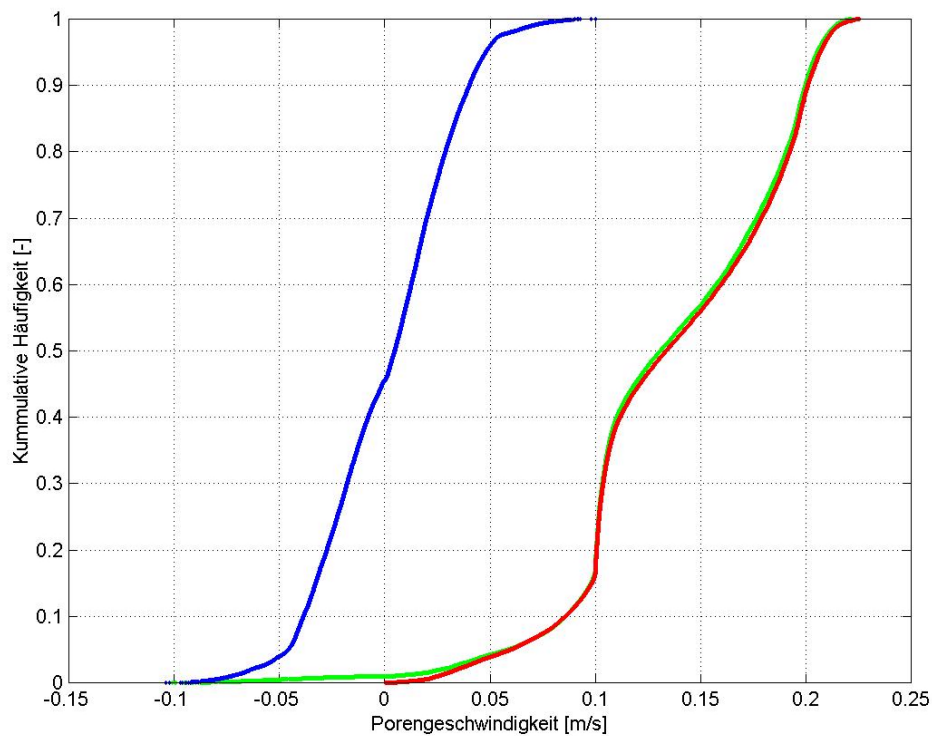


Abb. 4.20: Summenkurven der Poregeschwindigkeiten Beispiel 7

Das Beispiel 7 zeigt deutlich ausgeprägte Wirbelbildung. Dies zeigt sich im negativen Geschwindigkeitsanteil der y-Komponente (grüne Kurve) und in der Darstellung des Raumwinkels Theta gegen die Geschwindigkeit (Abb. 4.21).

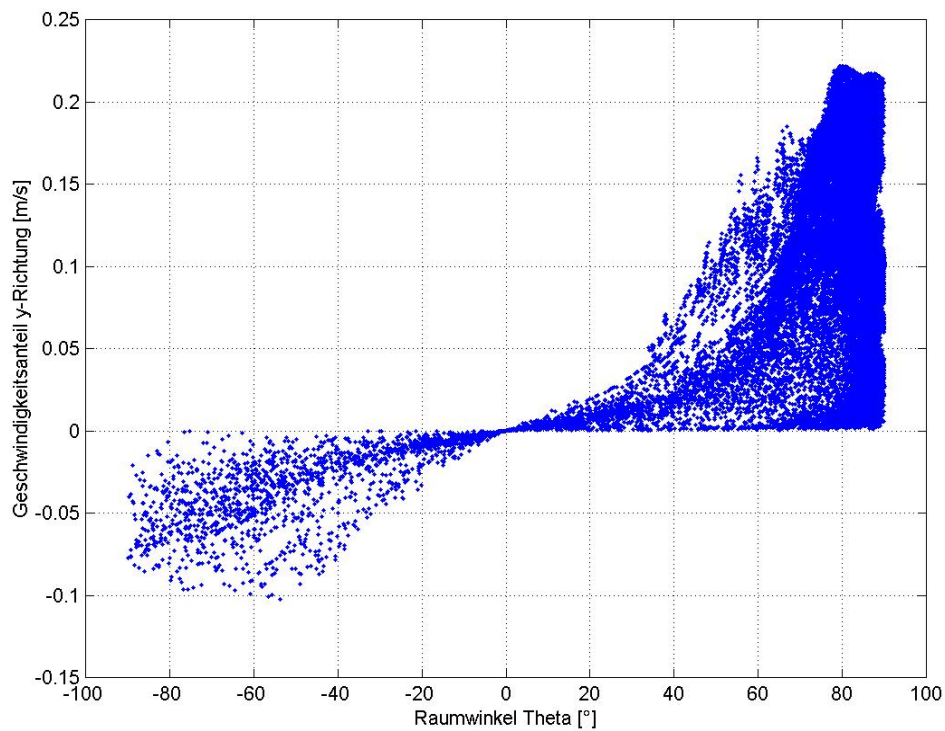


Abb. 4.21: Darstellung des Raumwinkels Theta in Abhängigkeit der y-Geschwindigkeitskomponente im Beispiel 7

In dieser Abbildung (4.21) werden die negativen Geschwindigkeitsanteile (entgegengesetzt der Hauptstromrichtung) deutlich stärker erkennbar. In Abb. A2.9 (Anhang 2) sind die Strömungsvektoren des Beispiels 7 in der Mittelebene des Zylinders dargestellt. Die Ausbildung der Wirbel ist asymmetrisch, was auch in der Abbildung 4.21 zu beobachten ist. Eine symmetrische Wirbelbildung würde sich in der Darstellungsart der Abb. 4.21 in einer Gleichverteilung der positiven- und negativen Winkel- und Geschwindigkeitsanteile repräsentieren.

Zusammenfassend ergeben sich aus der Fluidmodellierung folgende Parameter für das Beispiel 9:

- mittlere Porengeschwindigkeit: $\bar{v}_p = 1,09 \cdot 10^{-4}$ [m/s]
- Filtergeschwindigkeit: $v_f = 4,45 \cdot 10^{-5}$ [m/s]
- Druckgefälle: $\Delta p = 1,61$ [Pa/m], bzw. hydraulischer Gradient: $i = 1,61 \cdot 10^{-4}$ [-]
- Durchlässigkeitsbeiwert: $k_f = 0,27$ [m/s]

Bei der statistischen Auswertung der Porengeschwindigkeit als kumulative Häufigkeitsverteilung (Abb. 4.18) zeigt sich, daß die mediane effektive Porengeschwindigkeit (50 % Durchgang der Kurve) deutlich über dem arithmetischen Mittel der Porengeschwindigkeit liegt. Ursache ist die Nichtverwertung von Merkmalen (hier Porengeschwindigkeit), die den Betrag 0 besitzen.

Daraus ergibt sich die Möglichkeit, eine erweiterte Methode zur Definition und Berechnung der effektiven Porosität einzuführen.

Diese wird in Anlehnung an Gl. 3.18 und 4.79 folgendermaßen definiert:

$$n_{eff_v} = \frac{\bar{v}_p \cdot n_{zell}}{v_{p50}} \quad (4.80)$$

\bar{v}_p = mittlere Porengeschwindigkeit [m/s]

\bar{v}_{p50} = mediane Porengeschwindigkeit aus der Häufigkeitsverteilung [m/s]

n_{zell} = Zellporosität im Modellmedium [-]

Die Gegenüberstellung der Berechnungsergebnisse der verschiedenen Methoden wird im weiteren gegenübergestellt und diskutiert.

Ergebnisse der Monte-Carlo Transportmodellierung

Die Transportsimulation startete mit 10000 Tracerpartikeln, die statistisch im Porenraum am Zylinderboden verteilt wurden. Nach einer Modellzeit von 4465 [s] endete die Simulation mit einer Rückgewinnungsquote von 74 [%] der eingegebenen Partikel.

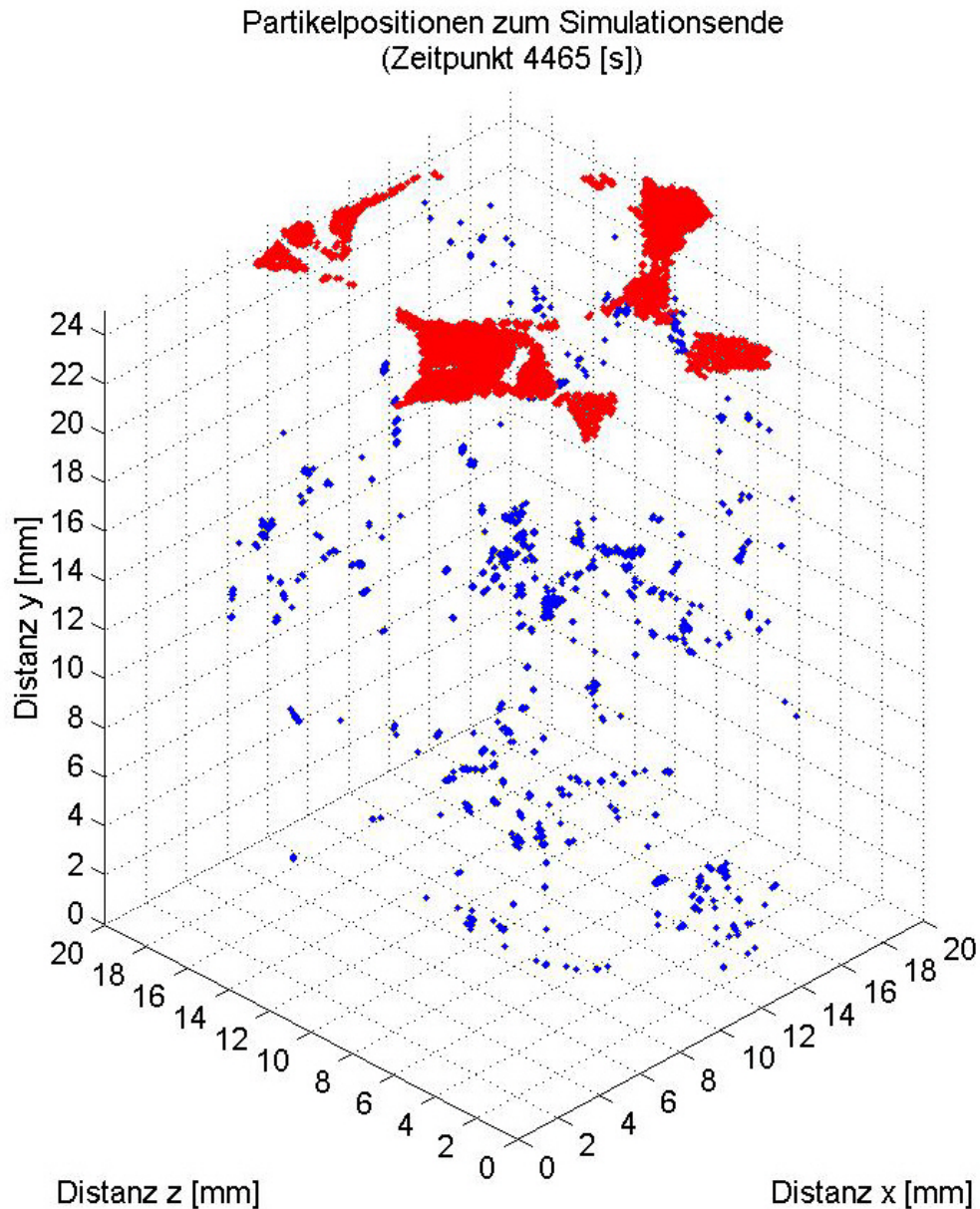


Abb. 4.22: Partikelpositionen zum Zeitpunkt des Simulationendes

In der Abb. 4.22 sind die Positionen (x,y,z) der einzelnen Tracerpartikel dargestellt. Die rot dargestellten Partikel sind die Positionen, an denen die Partikel registriert und aus dem System entfernt wurden. An den rot dargestellten Positionen ist die Abbildung der Geometrie des Porenraums in der obersten Schicht der Porennetzwerkes deutlich zu erkennen. Weiterhin ist es möglich, an diesen Positionen bis zu acht verschiedene zusammenhängende Austrittsgebiete der Partikel zu identifizieren.

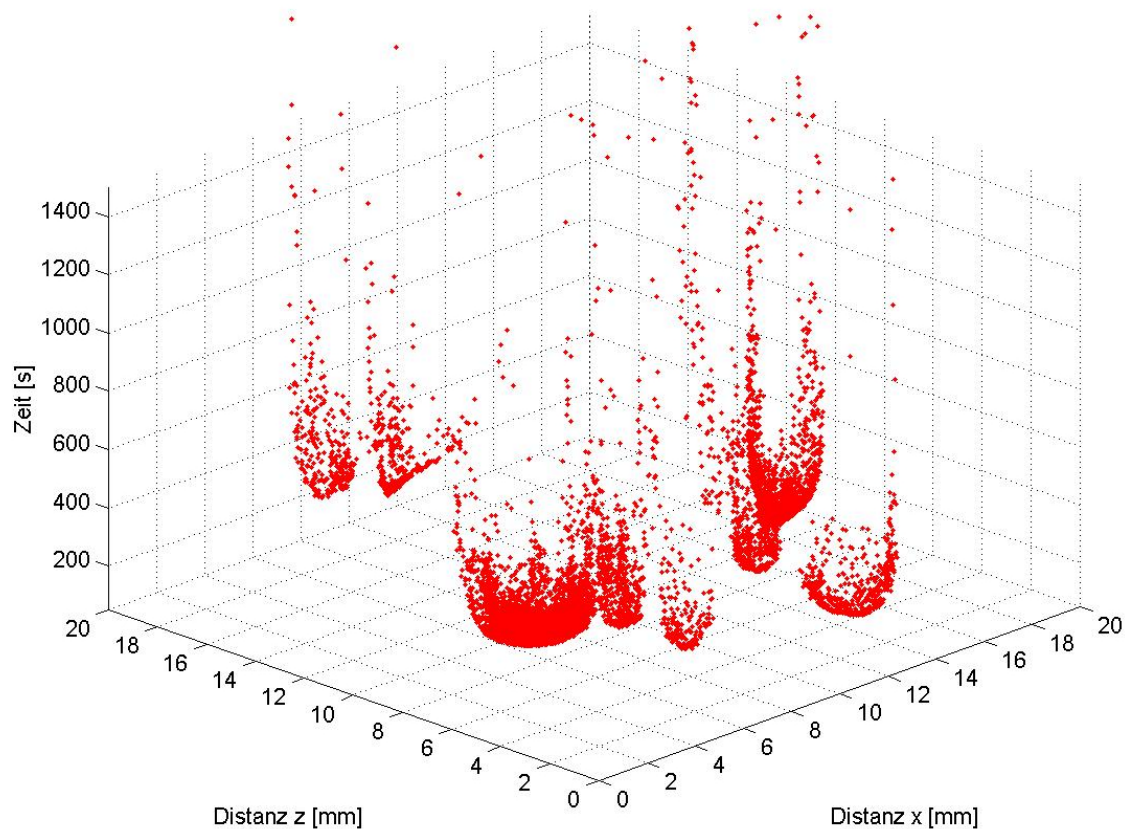


Abb. 4.23: x,z-Partikelpositionen und Laufzeit der Partikel

Der Vergleich der Partikelpositionen an der Zylinderoberkante mit der benötigten Laufzeit (Abb. 4.23) zeigt deutlich die Ausbildung der parabolischen Geschwindigkeitsprofile in den Porensystemen. Die Laufzeit an den Systemrändern ist wesentlich höher, als in den Porenzentren. Ebenfalls deutlich zu erkennen sind die unterschiedlichen „Durchbruchzeiten“ der einzelnen Austrittsgebiete (vgl. Abb. 4.22). Analog verhält sich der Vergleich der Partikelpositionen mit den jeweils zurückgelegten Wegstrecken (Abb. 4.24).

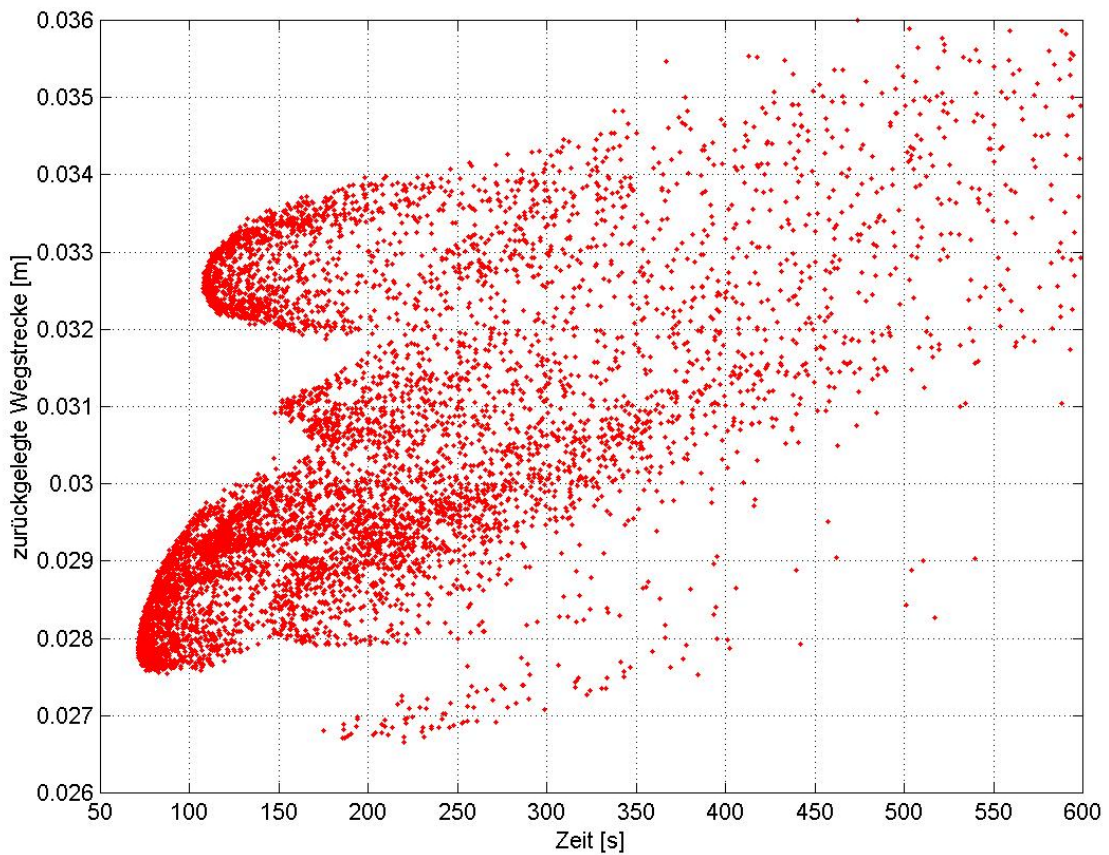


Abb. 4.24: Wegstrecke der Tracerpartikel als Funktion der Laufzeit

Der Quotient aus zurückgelegter Wegstrecke und Laufzeit ergibt die effektive Partikelgeschwindigkeit (Abb. 4.27). Die hier ausgewählte Darstellung in Abb. 4.24 zeigt deutlich die zeitlich versetzten Durchbrüche der identifizierten Austrittsgebiete. Die Summe der ausgetretenen Partikel über die Zeit ergibt die Dichtefunktion (Summenkurve) der Tracerdurchbrüche (Abb. 4.25).

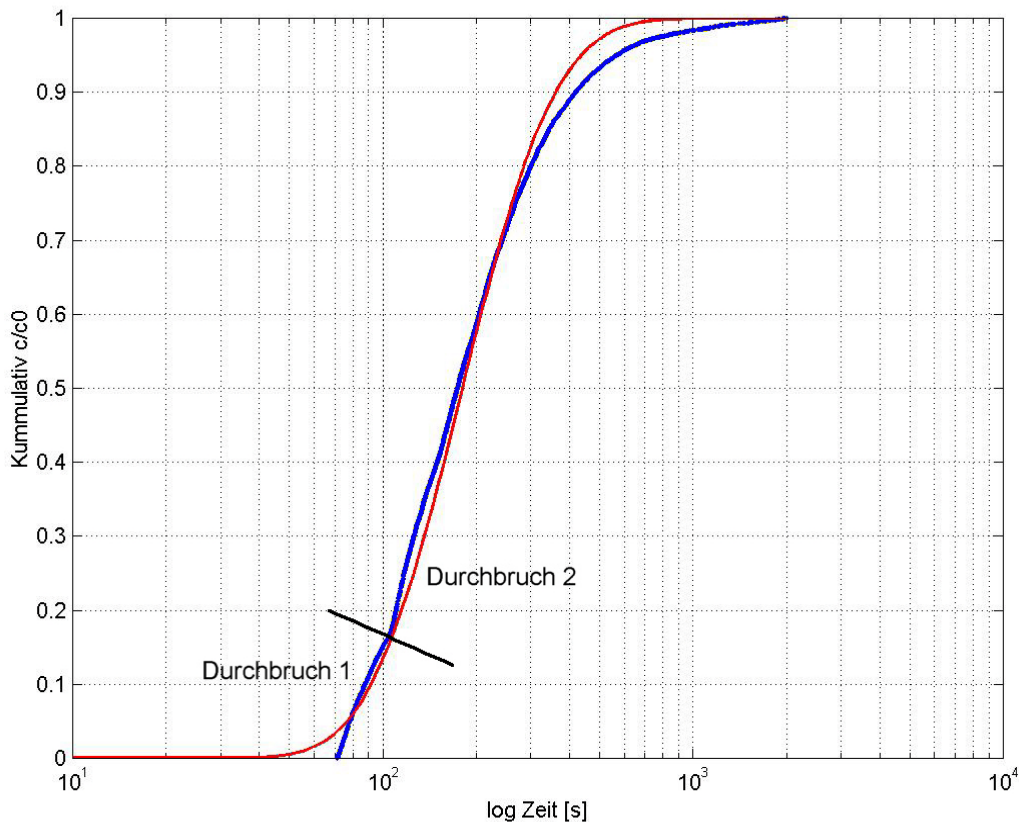


Abb. 4.25: Tracerdurchbruch als Summenkurve im Vergleich mit analytischer Lösung

Die analytische Lösung basiert auf Gl. 3.26 der advektiv-dispersiven Transportgleichung und wurde durch Parameteranpassung (Methode 1 in Kap. 3) gewonnen. Näherungswerte für die Dispersivität und mittlere Abstandsgeschwindigkeit wurden nach der Momentenmethode durch Auswertung der simulierten Tracerdurchgangskurve ermittelt.

In der Darstellung des Tracerdurchbruches als Summenkurve ist der 2. Durchbruch als „Knick“ in der Summenkurve (blau) zu erkennen. Deutlicher zu erkennen ist der 2. Durchbruch in der normalen Durchbruchskurve. Insgesamt werden aber die Informationen mehrerer Durchbrüche in der Summen- und Durchgangskurve verwischt. Wesentlich deutlicher erkennt man die Zusammenhänge in der Weg/Zeit-Darstellung (Abb. 4.24).

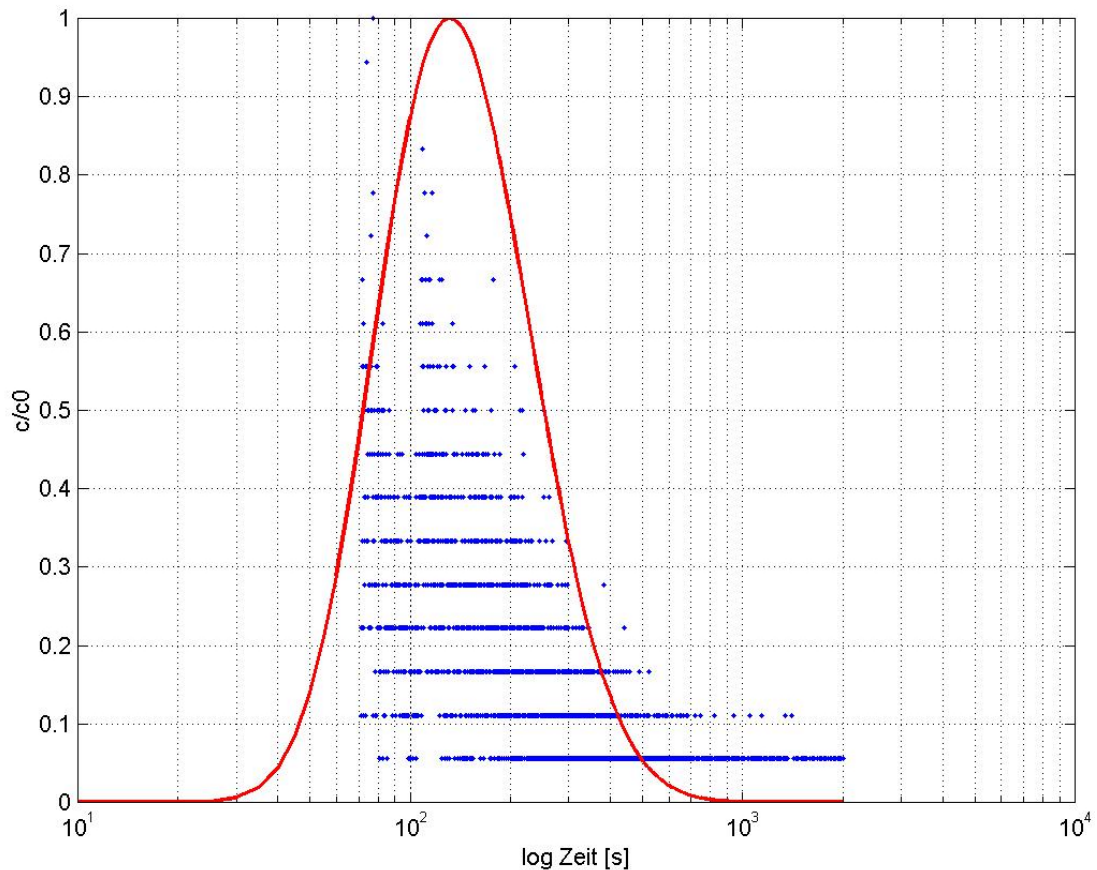


Abb. 4.26: Tracerdurchbruch im Vergleich mit analytischer Lösung

Die folgende Abbildung 4.27 zeigt den Vergleich der kumulativen Häufigkeit der auftretenden absoluten Beträge der Porengeschwindigkeiten (rot), der Partikelgeschwindigkeiten, berechnet aus der benötigten Transportzeit und dem kürzesten Weg (Zylinderhöhe) (grün) und der tatsächlichen Partikelgeschwindigkeit aus der Transportzeit und dem tatsächlich zurückgelegten Weg.

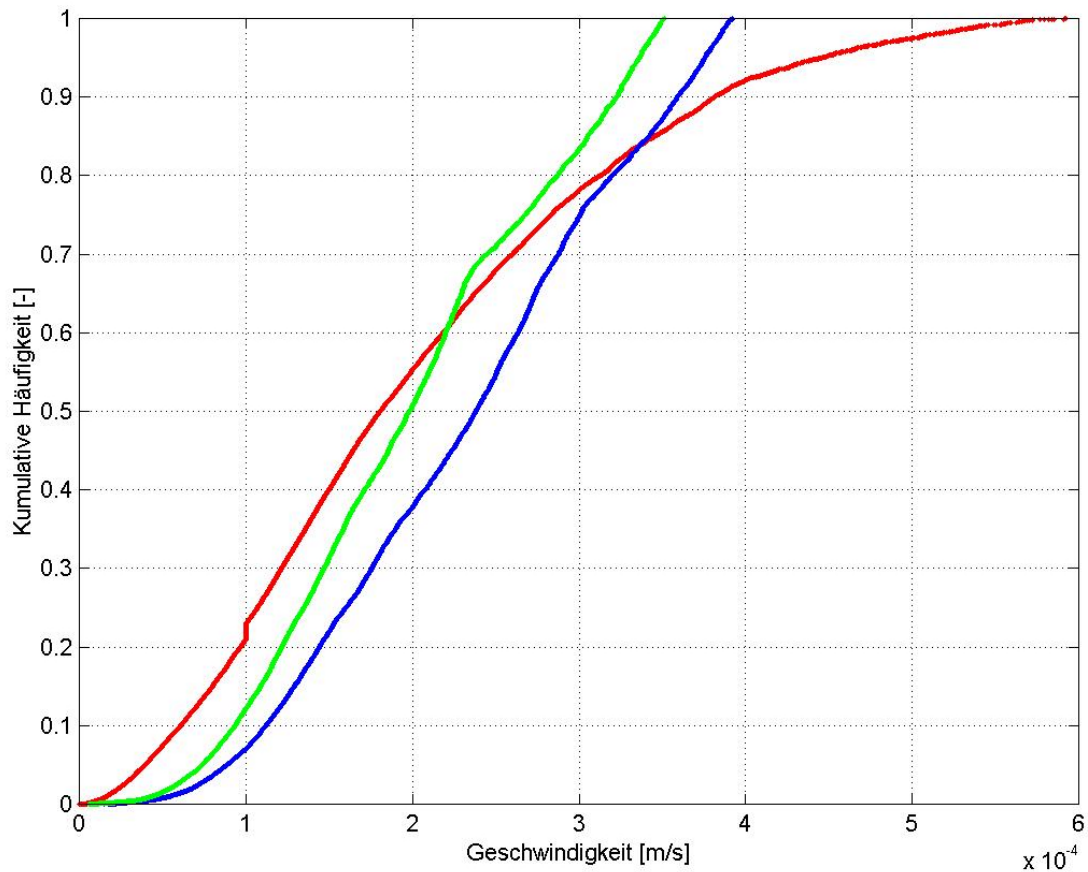


Abb. 4.27: Verteilung der Poren- und Partikelgeschwindigkeiten

Dabei fällt auf, daß die Verteilung der Porengeschwindigkeiten (rote Kurve, Abb. 4.27) im Vergleich zu den Partikelgeschwindigkeiten, eine diversere, d.h. flachere Verteilungskurve aufweist. Dies kann damit begründet werden, daß nicht alle Tracerpartikel von den Geschwindigkeitsvektoren im System erfaßt werden.

5. Verifikation des Modells PoreFlow

Um das Modell PoreFlow zu verifizieren wurden Säulenversuche an definierten Korngemischen durchgeführt. Die Korngemische bestehen aus Glasperlen mit definierten Korngrößenverteilungen. Stationäre Durchströmungsversuche lieferten den Durchlässigkeitsbeiwert der Korngemische. Zur Ermittlung der Dispersivität wurden Tracerversuche mit Uranin als idealem Tracer durchgeführt. Die effektive Porosität wurde aus Auslaufversuchen und den Tracerversuchen gewonnen.

5.1 Versuchsmaterialien und Methoden

Glasperlen als Versuchsmaterial

Die untersuchten Korngemische wurden mit SiLibeads® Glaskugeln (Typ S, Artikel 4500) der Firma SiLi® (SIGMUND LINDNER, Warmensteinach) hergestellt. Die Glasperlen bestehen aus Kalknatronglas.

Für die Gemischherstellung standen 17 verschiedene Korngrößenklassen zur Verfügung:

Tab. 5.1: Korngrößenklassen der verwendeten Glaskugeln, Durchmesserangaben in [mm]

1. 0,01 – 0,05	8. 1,00 – 1,25	15. 2,85 – 3,30
2. 0,04 – 0,07	9. 1,25 – 1,55	16. 3,30 – 3,60
3. 0,07 – 0,11	10. 1,55 – 1,85	17. 3,70 – 4,10
4. 0,10 – 0,20	11. 1,70 – 2,00	
5. 0,25 – 0,50	12. 2,00 – 2,30	
6. 0,50 – 0,75	13. 2,30 – 2,60	
7. 0,75 – 1,00	14. 2,50 – 2,85	

Die Korngrößenklassen von 0,01 mm – 0,50 mm weisen eine Rundheit von > 80 % auf und die Korngrößenklassen von 0,50 mm – 4,10 mm eine Rundheit von > 95 %. Innerhalb der Kornklassen sind die Korngrößen normalverteilt.

Folgende Gemische (Angaben in Gew. [%]) wurden hergestellt:

- Gemisch 1: 50 % Klasse 8, 50 % Klasse 9
- Gemisch 2: 50 % Klasse 7, 50 % Klasse 8
- Gemisch 3: je 10 % der Klassen 6 bis 15
- Gemisch 4: je 8,33 % der Klassen 4 bis 15

In Abbildung 5.1 sind die Soll-Massen- und Soll-Anzahlverteilungen als Summenkurven dargestellt:

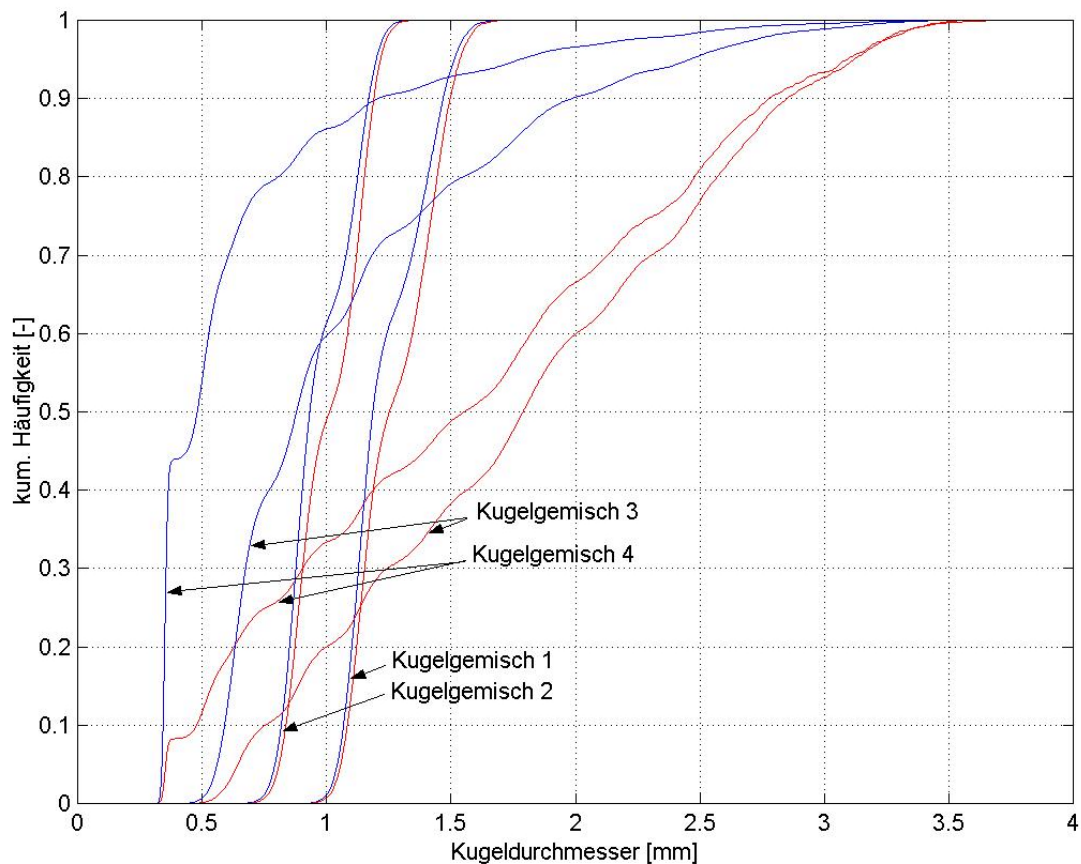


Abb. 5.1: Soll-Kugelverteilungen (blau-Anzahlverteilung, rot-Massenverteilung)

Versuchsaufbau Durchströmung und Tracertransport

In Anlehnung an die DIN 18 130 „Bestimmung des Wasserdurchlässigkeitsbeiwertes“ wurden Durchströmungs- und Tracerversuche unter stationären Bedingungen bei unterschiedlichen hydraulischen Gradienten (Drücken) durchgeführt. Die Versuchssäulen besitzen eine Höhe von 74 [cm] und einen Innendurchmesser von 14 [cm]. Der Einbau der Versuchsgemische erfolgte unter wassergesättigten Bedingungen und unter ständiger Bewegung des Materials, um möglichst homogene Verteilungen der Korngrößen in den Säulen zu erhalten und um Entmischungen zu vermeiden. Als Versuchswasser diente filtriertes und destilliertes Wasser. Vor den eigentlichen Durchströmungs- und Tracerversuchen muß eine nahezu 100 %-ige Wassersättigung erreicht werden. Durch Flutung der Säulen mit CO₂ unter Wasserrestsättigung wird die Restluft (Luftblasen) durch das CO₂ ausgetauscht und es erfolgt eine Lösung des CO₂. Nach Beendigung des Verfahrens sind optisch keine Gasblasen mehr erkennbar.

Hinter dem Auslauf erfolgte online die Aufzeichnung der Fluoreszenz des Tracers (Uranin) sowie die Messungen der Standardparameter, wie Temperatur, Leitfähigkeit etc..

5.2 Versuchsergebnisse

Bestimmung der Porositäten

Die folgende Tabelle enthält die für die Korngemische bestimmten Porositäten. Die Berechnung der effektiven Porosität erfolgte nach Gl. 3.3. Die Bestimmung der effektiven Porosität aus den Tracerversuchen basiert auf dem Zusammenhang nach Gl. 3.17.

Tab. 5.2: Ermittelte Porositäten der Korngemische 1-4

Gem.	n_{min} [%]	n_{max} [%]	n_{eff} berechnet [%]	n_{eff} Auslauf [%]	n_{min}	= minimale Porosität aus Bestimmung der Lagerungsdichte
1	37,0	41,0	22,2	30,4	n_{max}	= maximale Porosität
2	38,0	41,0	21,2	25,8	n_{eff}	= effektive Porosität
3	32,0	37,0	20,2	19,7		
4	28,0	34,0	15,6	10,7		

Durchströmungsversuche (Bestimmung der Durchlässigkeit)

Die Durchlässigkeiten (k_f -Wert) der Korngemische wurden anhand von Durchströmungsversuchen mit konstantem hydraulischen Gradienten nach dem DARCY-Gesetz (Gl. 3.15) bestimmt.

Tab. 5.3: Ermittelte Durchlässigkeiten der Korngemische 1-4

Korngemisch	Tracerversuch	hydr. Gradient [-] bzw. [mWS/m]	k_f -Wert [m/s]	Reynoldszahl nach Gl. 3.18
1		0,017	$5,60 \cdot 10^{-3}$	34,3
		0,065	$3,93 \cdot 10^{-3}$	92,1
2		0,017	$5,10 \cdot 10^{-3}$	23,9
	x	0,021	$3,66 \cdot 10^{-3}$	21,2
	x	0,039	$3,26 \cdot 10^{-3}$	35,0
	x	0,061	$3,28 \cdot 10^{-3}$	55,1
3		0,065	$3,92 \cdot 10^{-3}$	70,2
		0,017	$5,75 \cdot 10^{-3}$	20,5
	x	0,020	$2,59 \cdot 10^{-3}$	10,9
	x	0,040	$2,51 \cdot 10^{-3}$	21,1
	x	0,060	$2,54 \cdot 10^{-3}$	32,0
4		0,065	$2,24 \cdot 10^{-3}$	30,6
		0,017	$1,48 \cdot 10^{-3}$	2,8
	x	0,023	$6,58 \cdot 10^{-4}$	1,7
	x	0,040	$8,47 \cdot 10^{-4}$	3,8
	x	0,062	$1,18 \cdot 10^{-3}$	8,2
4 a		0,065	$1,43 \cdot 10^{-3}$	10,4
		0,022	$2,70 \cdot 10^{-3}$	6,6
		0,038	$1,73 \cdot 10^{-3}$	7,3
	x	0,059	$1,89 \cdot 10^{-3}$	12,5
	x	0,081	$1,49 \cdot 10^{-3}$	13,5

Die ermittelten Durchlässigkeitsbeiwerte sind in Abhängigkeit von dem jeweiligen Gradienten nicht konstant, wie es zu erwarten sein sollte. Die statistische Auswertung (Tab. 5.4) zeigt die mittleren Durchlässigkeitsbeiwerte und deren Abweichung vom Mittelwert.

Die in Tab. 5.3 aufgeführten Reynoldszahlen für Aquifere (Gl. 3.18), berechnet für die Säulenfüllungen und Filtergeschwindigkeiten, zeigt, daß fast alle Durchströmungsversuche über einer Reynoldszahl von 10 liegen (vgl. Kap. 3). Dabei muß berücksichtigt werden, daß die Reynoldszahl nur eine Abschätzung über das Strömungsregime wiedergibt.

Die Versuche bewegen sich also im oberen Grenzbereich des DARCY-Gesetzes. Eine Versuchsdurchführung mit niedrigeren Filtergeschwindigkeiten ist aufgrund der hohen zu erwartenden Durchlässigkeit des Versuchsmaterials und des damit verbundenen niedrigen hydraulischen Gradienten nur sehr schwer durchführbar. Eine exakte Gradienteneinstellung und Kontrolle ist kaum möglich.

In Abbildung 5.2 sind die ermittelten Durchlässigkeitsbeiwerte gegen den anliegenden Gradienten aufgetragen (Daten aus Tab. 5.3):

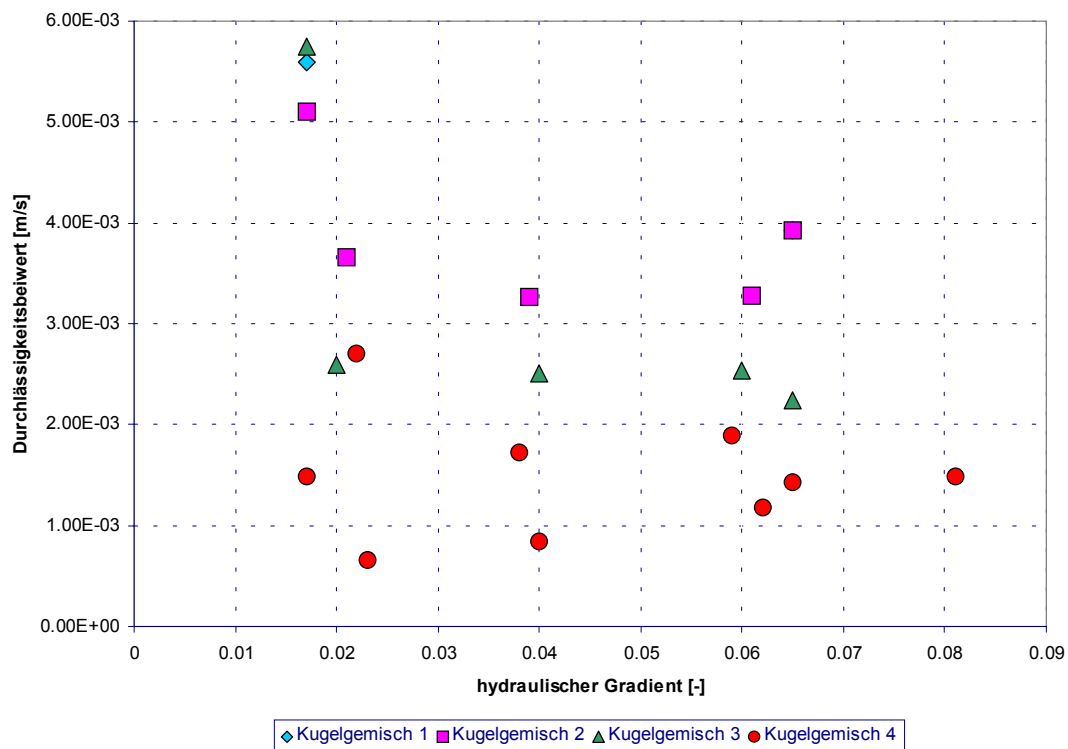


Abb. 5.2: Abhängigkeit Durchlässigkeitsbeiwert / hydraulischer Gradient

Wie in Abb. 5.2 zu erkennen ist, streuen die Durchlässigkeitsbeiwerte in Abhängigkeit des Gradienten relativ stark. In den Gemischen 1 bis 3 ist der Trend zu erkennen, daß der Durchlässigkeitsbeiwert mit steigendem Gradienten abnimmt (vgl. Abb. 3.12, postlinearer Bereich).

Zusammenfassung zur Versuchsdurchführung (Durchlässigkeitsbeiwerte)

Die hier durchgeführten Versuche bewegen sich an der Grenze des Gültigkeitsbereiches, eine exakte Kontrolle der Gradienten (mit Steigröhrchen an den Versuchszylindern) war aufgrund der höher angesetzten Gradienten möglich. Dadurch in Kauf genommen werden die Streubreiten der ermittelten Durchlässigkeitsbeiwerte.

Die Streuung der experimentell ermittelten Werte ist zum einen in der Grenze des Gültigkeitsbereiches des DARCY-Gesetzes und zum anderen in Meßfehlern bei der Volumenermittlung (Volumenstrom) und der Gradientenmessung, begründet.

In Tabelle 5.4 sind die experimentell ermittelten Durchlässigkeiten (Mittelwert und Abweichung) aufgeführt:

Tab. 5.4: Mittlere Durchlässigkeiten der Korngemische 1-4

	\bar{k}_f [m/s]
Korngemisch 1	$4,77 \cdot 10^{-3} \pm 8,35 \cdot 10^{-4}$
Korngemisch 2	$3,85 \cdot 10^{-3} \pm 6,74 \cdot 10^{-4}$
Korngemisch 3	$3,13 \cdot 10^{-3} \pm 1,31 \cdot 10^{-3}$
Korngemisch 4	$1,49 \cdot 10^{-3} \pm 5,66 \cdot 10^{-4}$

Aufgrund der Streuung der Werte in Abhängigkeit des hydraulischen Gradienten (Abb. 5.2) sind die absoluten Abweichungen vom arithmetischen Mittelwert der Durchlässigkeiten relativ hoch (Abb. 6.1).

Tracerversuche

Als Tracer wurde Uranin verwendet, und für jeden Versuch wurden 10 [µg] in die Säule injiziert. Die Distanz zwischen Detektionspunkt und Injektionspunkt beträgt 1,15 [m] (im Versuch 4a: 0,75 [m]). Die Versuche wurden jeweils mit unterschiedlichen Gradienten, unter ständiger Gradientenkontrolle durchgeführt (Gradienten in Tab. 5.3).

Im Folgenden werden die Ergebnisse der Tracerversuche dargestellt. In den Abbildungen sind Blau die Meßwerte (Symbol „x“) und Rot die analytischen Lösungen der Transportgleichung nach Gl. 3.26 dargestellt. Zur Auswertung wurden die Methode der Parameteranpassung und die statistische Momentenmethode herangezogen.

In jedem Versuch nimmt von Kurve 1 bis 3 jeweils der Gradient wie in Tab. 5.3 angegeben, zu. Entsprechend verhalten sich die Durchgangskurven.

in den Abb. 5.3 bis 5.6 gilt: „x“ (blau) = Meßwert (online - Fluorimeter)

rote durchgezogene Linie = Parameteranpassung an Transportgleichung

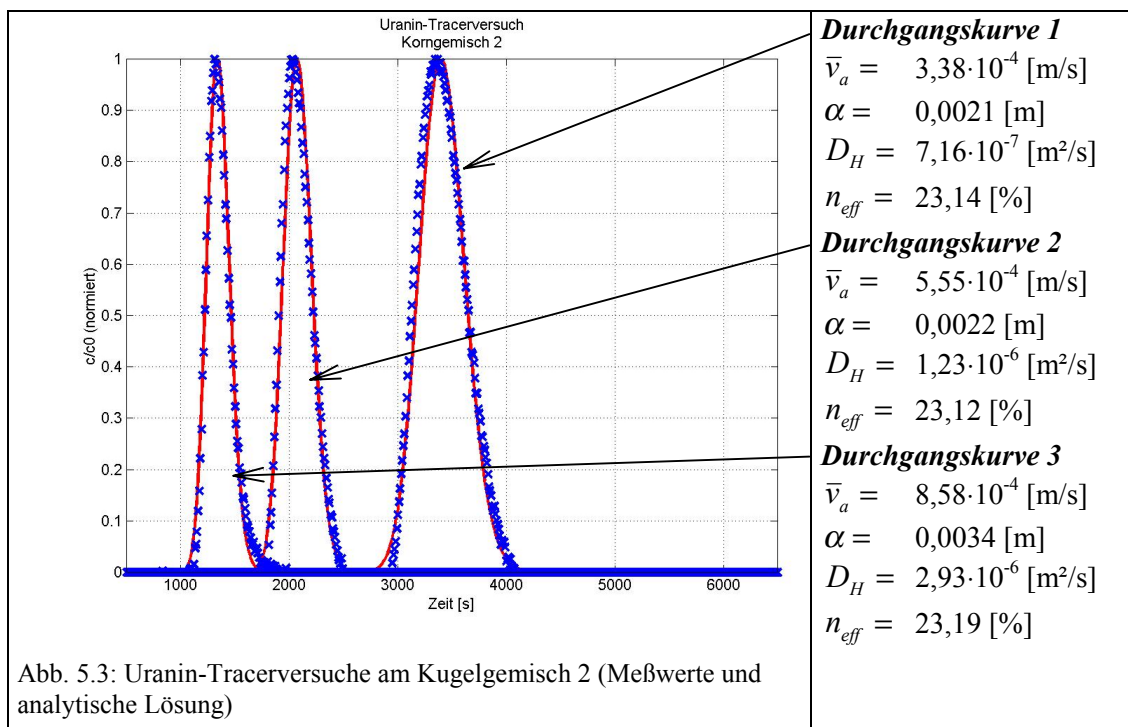
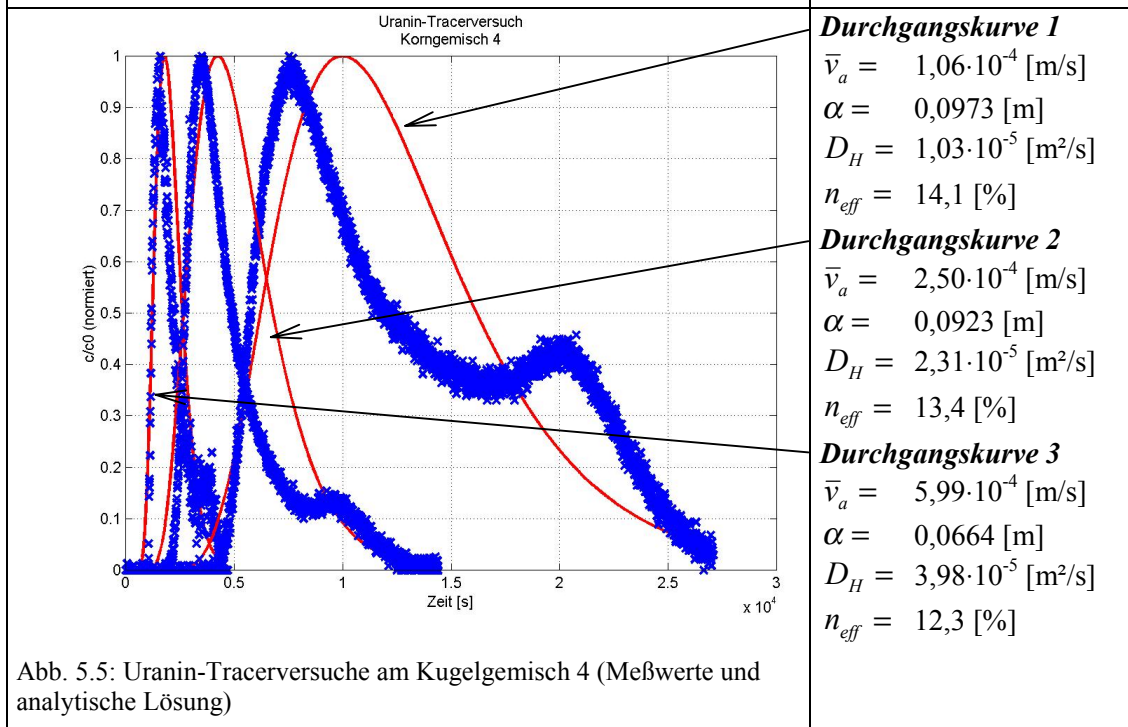
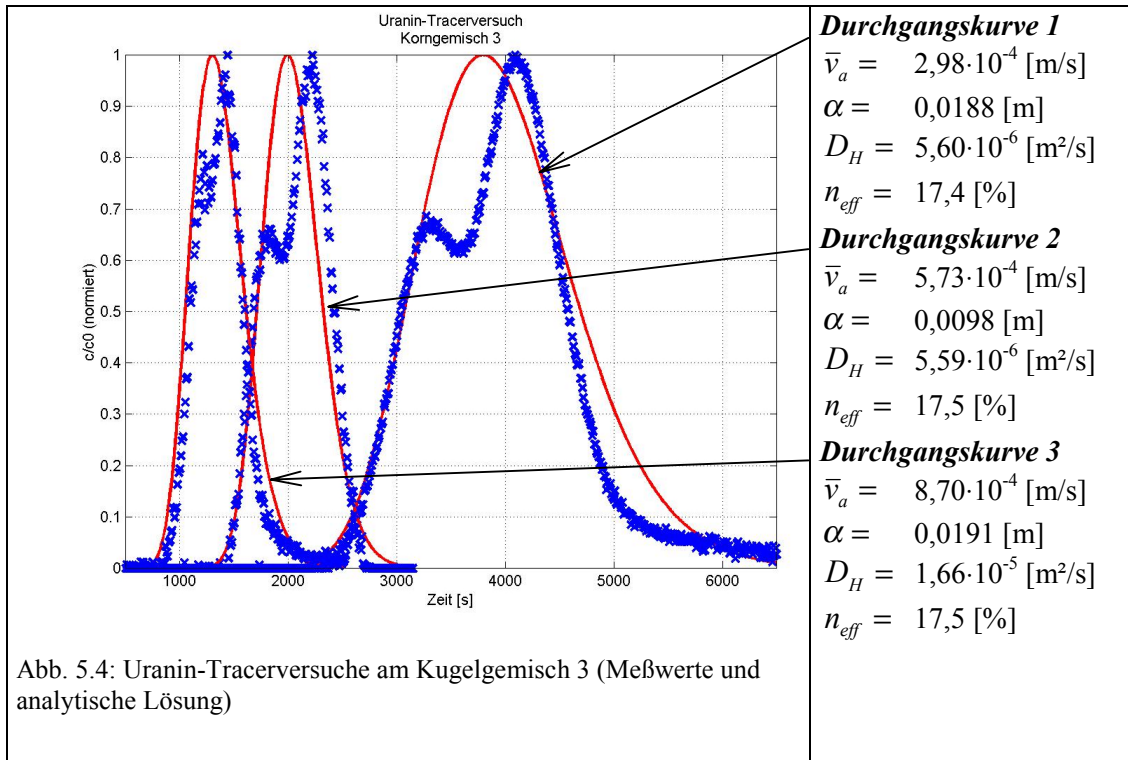
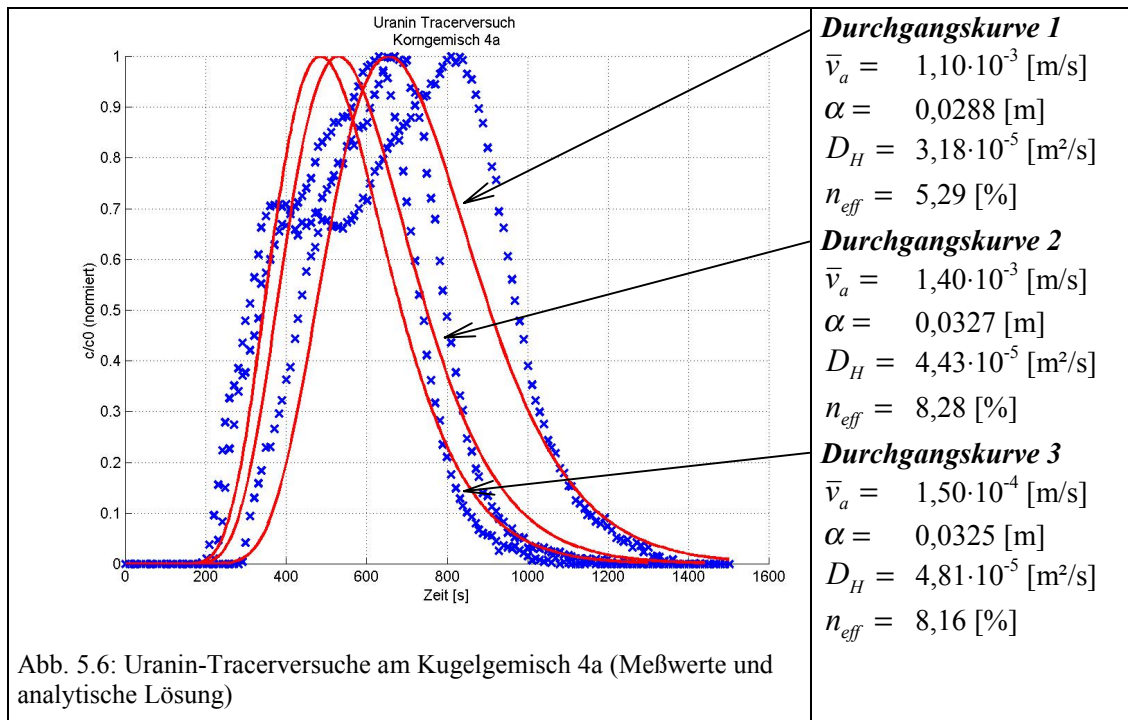


Abb. 5.3: Uranin-Tracerversuche am Kugelgemisch 2 (Meßwerte und analytische Lösung)





Diskussion der Tracer-Versuchsergebnisse (Durchbruchkurven)

Die experimentellen Durchbruchkurven im Kugelgemisch 2 (Abb. 5.3) entsprechen nahezu den idealen Kurven der analytischen Lösung. Die daraus abgeleiteten Parameter können mit hoher Genauigkeit wiedergegeben werden. Die Streuung der abgeleiteten effektiven Porosität ist gering. Die Dispersivität dagegen nimmt leicht, mit zunehmender Abstandsgeschwindigkeit, zu.

An den Tracerdurchbruchkurven des Kugelgemisches 3 (Abb. 5.4) deuten sich Mehrfachdurchbrüche in allen 3 Kurven an. Die analytische Lösung kann Mehrfachdurchbrüche nicht berücksichtigen, entsprechend unsicherer werden die daraus abgeleiteten Parameter. Auffallend ist die Gleichgestaltigkeit der Mehrfachdurchbrüche in allen 3 Kurven. Diese Mehrfachdurchbrüche werden vermutlich durch bevorzugte Fließbahnen verursacht. Wodurch diese entstehen, ist unklar. Wie im Kugelgemisch 2 streuen die effektiven Porositäten relativ gering, die Dispersivität dagegen etwas stärker. Generell ist die Dispersivität bei der höchsten Abstandsgeschwindigkeit (wie im Kugelgemisch 2) am größten.

In den Durchbruchkurven des Kugelgemisches 4 (Abb. 5.5) treten die Mehrfachdurchbrüche (2-fach) sehr deutlich auf. Die Ursache sind vermutlich bevorzugte Fließpfade. Die Streuung der abgeleiteten Parameter nimmt zu. Interessanterweise nimmt hier die Dispersivität mit zunehmender Abstandsgeschwindigkeit ab (im Gegensatz zu den Gemischen 2 und 3).

Aufgrund des stark ausgeprägten Doppeldurchbruches wurde der Versuch mit einer kleineren Säule und dem gleichen Material wiederholt (Abb. 5.6, Gemisch 4a). Dort sind ebenfalls Mehrfachdurchbrüche zu beobachten, die etwa den Kurvengestalten im Kugelgemisch 3 entsprechen. Die hier abgeleiteten Dispersivitäten streuen nicht mehr so stark, sind im Vergleich zum Gemisch 4 aber nur etwa halb so groß. Auch die effektive Porosität liegt deutlich niedriger als im Gemisch 4.

Zusammenfassung und Fazit

Generell zeigt sich eine Abnahme der effektiven Porositäten und eine Zunahme der Dispersivitäten von Kugelgemisch 1 bis 4, wie zu erwarten sein dürfte. Allerdings nehmen die Unsicherheiten in der Auswertung auf Basis der analytischen Lösung bis zum Versuch 4 deutlich zu. Dies ist auf bevorzugte Fließbahnen zurückzuführen, deren Ursache nicht exakt identifiziert werden konnte. Möglicherweise handelt es sich dabei um Randumläufigkeiten in der Säule sowie um bevorzugte Fließbahnen aufgrund von Inhomogenitäten in den Säulenfüllungen.

5.3 Modellierungsergebnisse mit PoreFlow

Die Diskretisierung und die Eingangsgrößen für die Simulation der Modellkugelmische sind in allen 4 vorgestellten Modellmedien gleich (außer Gemisch 4, feinere Diskretisierung), lediglich die Kugelgrößenverteilungen wurden orientierend an der Vorgabe der Experimentalzusammensetzung variiert.

Es wurden folgende Eingangsgrößen verwendet:

Eingangsgrößen zur Mediumgenerierung- und Diskretisierung

- *Kugelmische 1 bis 3:*
 - Gesamtzylinder: 30 [mm] Höhe, 30 [mm] Durchmesser
 - Teilgebiet (Zylinder): 10 [mm] Höhe, 5 [mm] Durchmesser
 - Rasterabstand der MAC-Diskretisierung $\Delta x = 0,05$ [mm]
 - 100 x 100 x 200 Anzahl aller Zellen (2000000)
- *Kugelmisch 4:*
 - Teilgebiet (Zylinder): 5 [mm] Höhe, 5 [mm] Durchmesser
 - Rasterabstand der MAC-Diskretisierung $\Delta x = 0,04$ [mm]
 - 125 x 125 x 125 Gesamtanzahl der Zellen

Im Vergleich zu den Volumina der Säulenexperimente wird im Modell PoreFlow das etwa 12000-fach geringere Volumen modelliert.

In den folgenden Abbildungen (5.7 und 5.8) werden die nach der Anlagerungsmodellierung resultierenden Ist-Zusammensetzungsverhältnisse als Massen- und Anzahlverteilungen dargestellt.

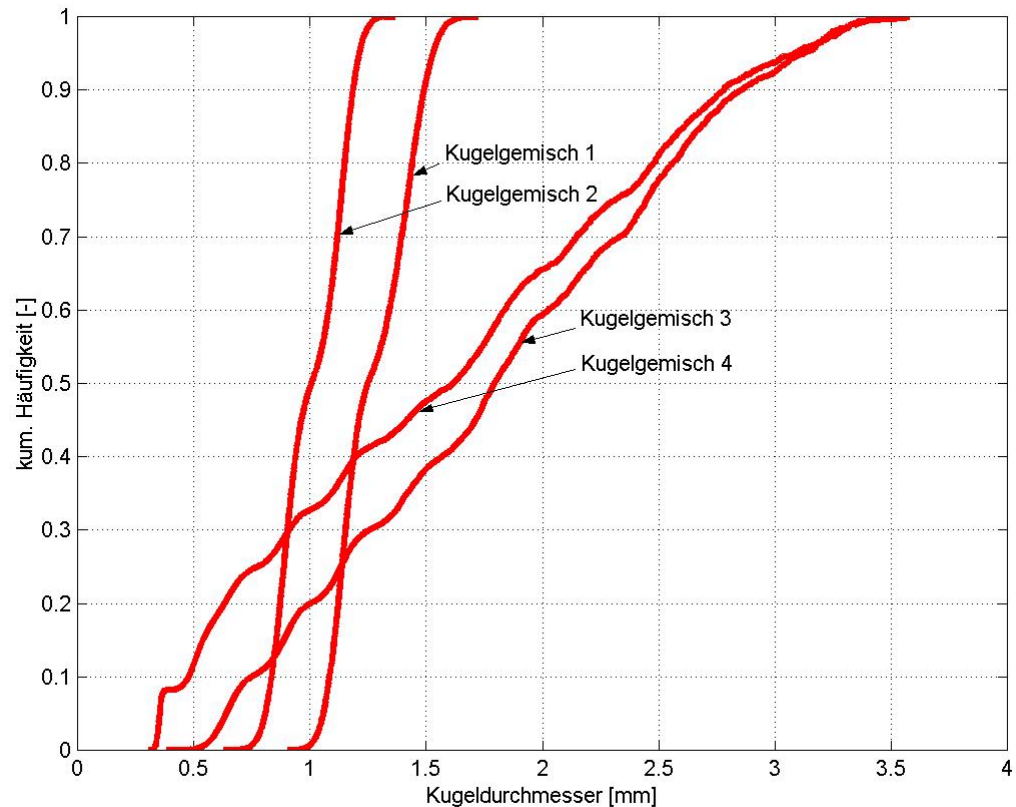


Abb. 5.7: Ist- Masse Verteilung der Kugelmische

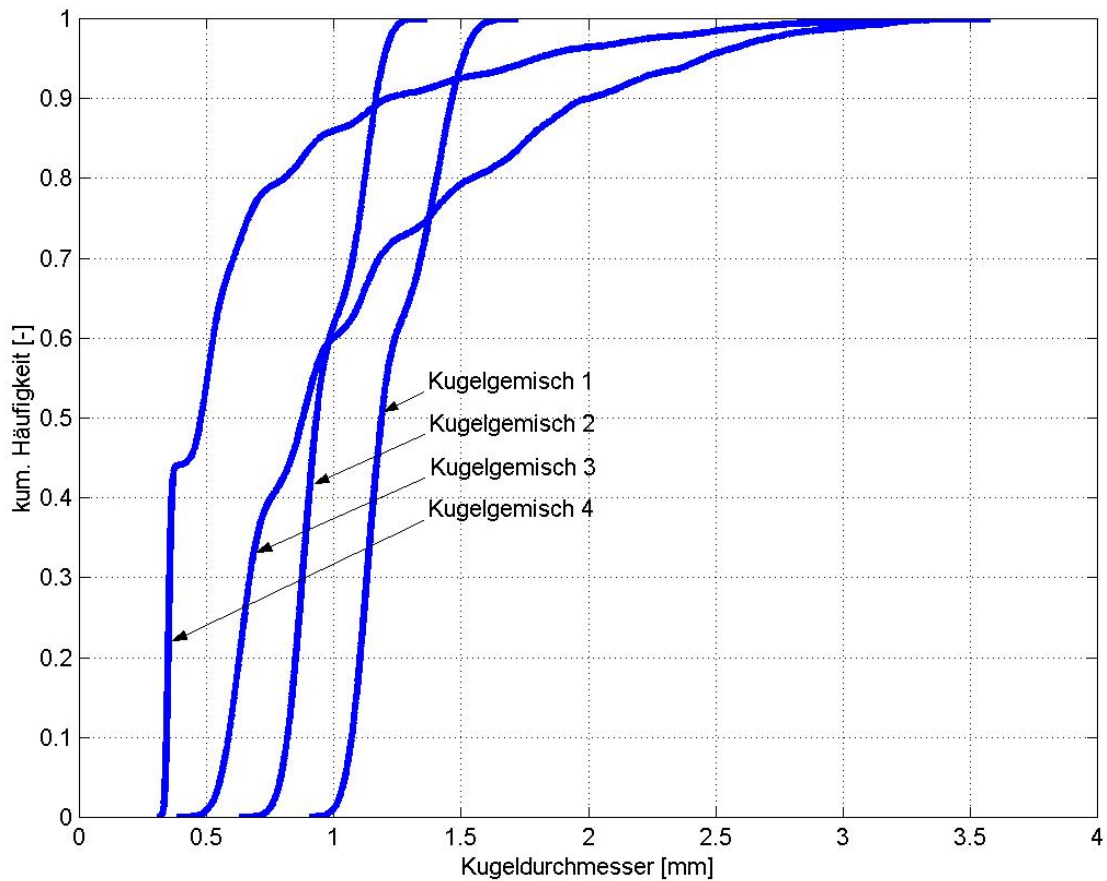


Abb. 5.8: Ist- Anzahl Verteilung der Kugelgemische

Der Ungleichförmigkeitsgrad der Kugelgemische nimmt von Gemisch 1 bis 4 zu. Entsprechend verhalten sich die Massen- und Anzahlverteilungskurven (Abb. 5.7 und 5.8). Bei der Anlagerungsmodellierung von Kugelgemischen kann aus rein geometrischen Überlegungen (Abb. 4.5) pro anzulagernder Kugel ein zugehöriger „Porendurchmesser“ berechnet werden. Die folgende Abbildung (5.9) zeigt die Verteilung der theoretischen „Porendurchmesser“ als Summenkurve für die jeweiligen Gemische.

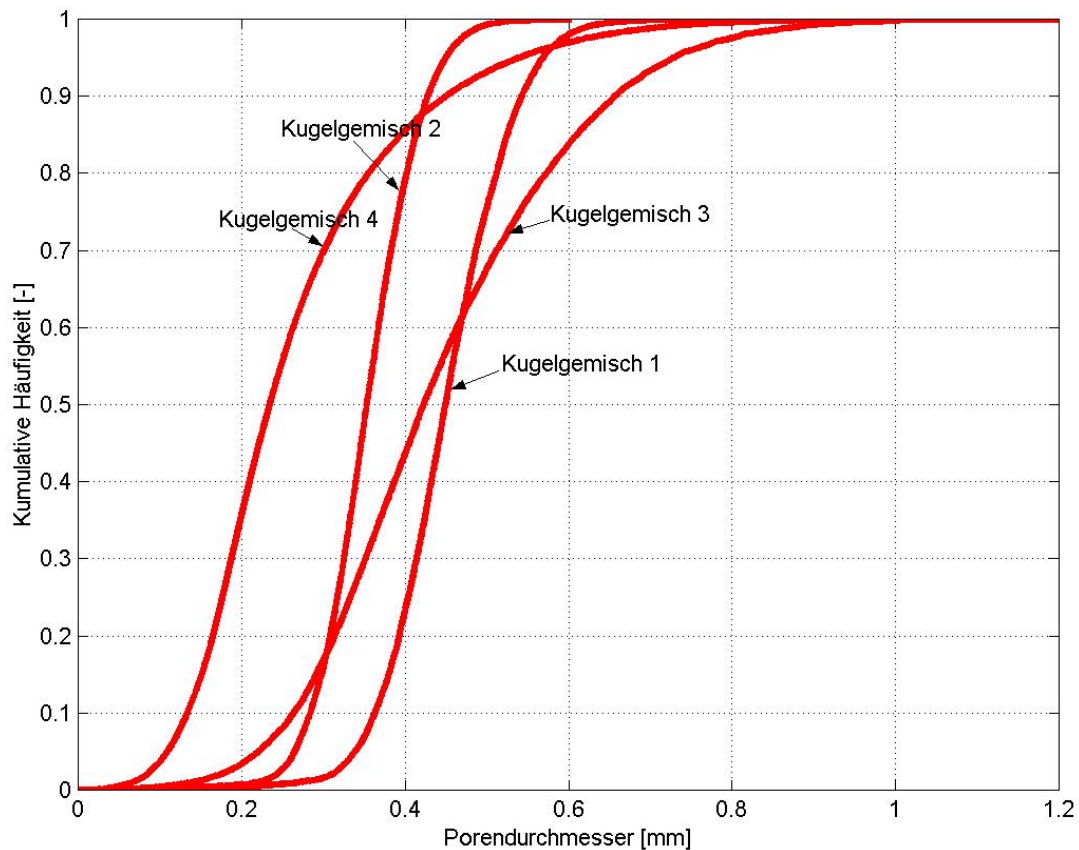


Abb. 5.9: Verteilung der theoretischen „Porendurchmesser“ der einzelnen Gemische

Aus dem Verlauf und der Gestalt der Summenkurven kann entnommen werden, daß der mittlere „Porendurchmesser“ von Gemisch 1 bis 4 kontinuierlich abnimmt (außer Gemisch 3), da der Anteil von kleineren Kugeln (bis Gemisch 4) immer mehr zunimmt (siehe Anzahlverteilung der Gemische, Abb. 5.8). Weiterhin ist eine Zunahme der Diversität (Abflachung der Summenkurven) bis zum Gemisch 4 festzustellen.

Aus dem medianen Kugeldurchmesser der Massenverteilung und aus dem medianen „Porendurchmesser“ der Porendurchmesserverteilung kann das Verhältnis berechnet werden. Demgegenüber wird der hydraulisch wirksame Porendurchmesser aus Gl. 3.11 gestellt (Tab. 5.5):

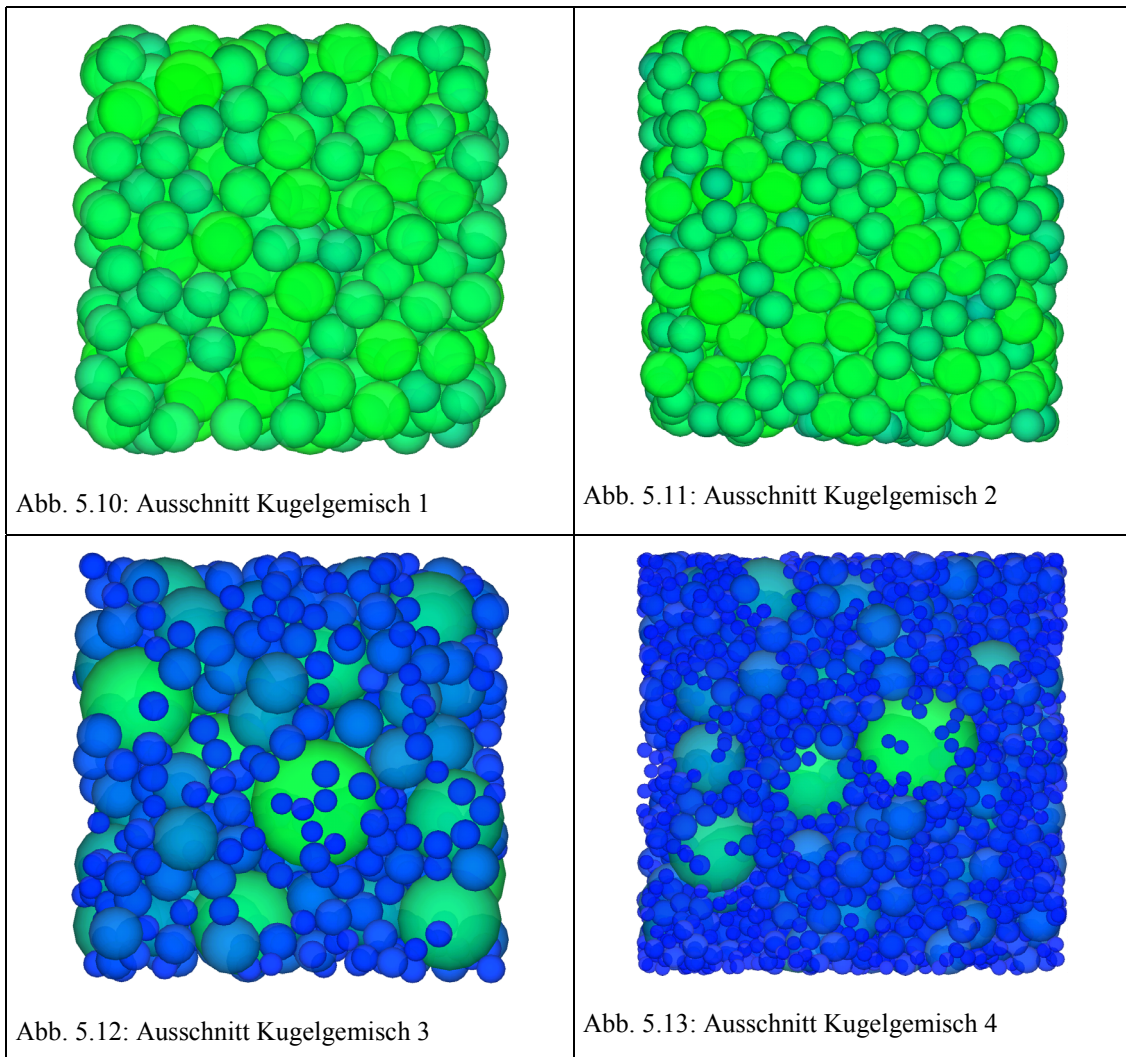
Tab. 5.5: Gegenüberstellung Ungleichförmigkeitsgrad, Porenziffern und Porengrößen

Kugelgemisch	U	d_{50} [mm]	$P d_{50}$ [mm]	Verhältnis	Porenziffer	d_k [mm]
1	1,24	1,25	0,45	0,36	0,67	0,37
2	1,29	1,01	0,35	0,35	0,68	0,28
3	2,71	1,79	0,42	0,24	0,43	0,21
4	3,85	1,62	0,23	0,14	0,35	0,11

Im Vergleich zu den Verhältnisangaben für lockerste- und dichteste Lagerung (Abb. 3.4 und 3.5) liegen die Verhältnisse in den simulierten Kugelgemischen zu hoch. Erwartet werden würde, aufgrund der Größenverteilung und Lagerung der Kugeln, Verhältniswerte unterhalb von 0,155 (in Gemisch 4 erreicht). Dies ist darauf zurückzuführen, daß nicht der minimale „Porendurchmesser“ ermittelt wird, sondern ein „geometrischer Innenkreisdurchmesser“ der Pore (Kap. 3). Es ist festzustellen, daß der hydraulisch wirksame Porenäquivalenzdurchmesser

(Gl. 3.11) von Gemisch 1 bis 4 deutlich abnimmt. Analog verhält sich das Verhältnis zwischen medianen Kugeldurchmesser und dem medianen „Porendurchmesser“ der einzelnen Gemische. Auffallend ist die Ähnlichkeit der Beträge des Verhältnisses und des äquivalenten hydraulisch wirksamen Porenkanaldurchmessers.

In den Abbildungen 5.10 bis 5.13 wird jeweils ein $10 \times 10 \times 10$ [mm] großer Ausschnitt aus den Ergebnissen der Anlagerungsmodellierung (Kugelpackungen) dargestellt. Dabei sind die Farben von 0 bis zur maximalen Kugelgröße skaliert (von blau nach grün). Deutlich zu erkennen ist die Zunahme der Ungleichförmigkeit der Radienverteilung sowie eine Zunahme der Diversität der entstehenden Porenräume.



In der Tabelle 5.6 sind die Ergebnisse der Fluidmodellierung der jeweiligen Kugelgemische zusammengefasst. Die in Kap. 4 vorgestellten Diagramme sind für die Kugelgemische in den jeweiligen Anhangnummern dargestellt:

Tab. 5.6: Berechnungsergebnisse Fluidmodellierung PoreFlow

	Anhang Nr.	\bar{v}_p	v_f	Δp	i	k_f
		[m/s]	[m/s]	[Pa/m]	[-]	[m/s]
1	A 3	$9,81 \cdot 10^{-5}$	$3,80 \cdot 10^{-5}$	97,19	$9,91 \cdot 10^{-3}$	$3,80 \cdot 10^{-3}$
2	A 4	$6,83 \cdot 10^{-5}$	$2,64 \cdot 10^{-5}$	81,80	$8,34 \cdot 10^{-3}$	$3,17 \cdot 10^{-3}$
3	A 5	$3,20 \cdot 10^{-5}$	$9,09 \cdot 10^{-6}$	59,92	$6,11 \cdot 10^{-3}$	$1,46 \cdot 10^{-3}$
4	A 6	$5,19 \cdot 10^{-5}$	$1,54 \cdot 10^{-5}$	204,33	$2,08 \cdot 10^{-2}$	$7,39 \cdot 10^{-4}$

Die Tabelle 5.7 zeigt den Vergleich der modellierten Durchlässigkeiten und den abgeschätzten Durchlässigkeiten nach KOZENY-CARMAN (1) und KOZENY-KÖHLER (2) sowie den in den Säulenversuchen ermittelten Durchlässigkeiten. Aufgeführt sind auch die benötigten Parameter zur Abschätzung der Durchlässigkeit nach KOZENY-CARMAN (1) und KOZENY-KÖHLER (2). Die ermittelten und berechneten Durchlässigkeitsbeiwerte beziehen sich auf eine Wassertemperatur von 20 [°C].

Zur Auswertung und Gegenüberstellung der Durchlässigkeitsbeiwerte wurden alle bestimmten experimentellen Werte herangezogen.

Tab. 5.7: Gegenüberstellung der ermittelten Durchlässigkeitsbeiwerte

	k_f	n_{geo}	$S_{por\ geo}$	k_f	d_k	k_f	k_f
	Experiment	(1), (2)	(1)	(1)	(2)	(2)	PoreFlow
	[m/s]	[%]	[1/m]	[m/s]	[mm]	[m/s]	[m/s]
1	$4,77 \cdot 10^{-3} \pm 8,35 \cdot 10^{-4}$	41,07	2814	$9,78 \cdot 10^{-3}$	1,2574	$1,43 \cdot 10^{-2}$	$3,80 \cdot 10^{-3}$
2	$3,85 \cdot 10^{-3} \pm 6,74 \cdot 10^{-4}$	40,48	3606	$5,59 \cdot 10^{-3}$	0,9909	$8,32 \cdot 10^{-3}$	$3,17 \cdot 10^{-3}$
3	$3,13 \cdot 10^{-3} \pm 1,31 \cdot 10^{-3}$	30,60	2927	$2,70 \cdot 10^{-3}$	1,4303	$5,51 \cdot 10^{-3}$	$1,46 \cdot 10^{-3}$
4	$1,49 \cdot 10^{-3} \pm 5,66 \cdot 10^{-4}$	25,70	4398	$6,17 \cdot 10^{-4}$	1,0239	$1,46 \cdot 10^{-3}$	$7,39 \cdot 10^{-4}$

Im Kapitel 6 werden die Durchlässigkeitsbeiwerte gegenübergestellt (Abb. 6.1 und 6.2) und diskutiert.

In Tabelle 5.8 sind die Dispersivitäten der Labor- und Modellierungsergebnisse gegenübergestellt.

- (1) abgeleitet aus Varianz der Porengeschwindigkeiten (Gl. 4.70-4.72)
- (2) abgeleitet aus Partikelweglängen (Gl. 4.69, Gl. 4.73)
- (3) abgeleitet aus Parameteranpassung an analytische Lösung

Tab. 5.8: Gegenüberstellung der Dispersivitäten

	$\bar{\alpha}_L$	α_L	α_T	α_L	α_{Bahn}	α_L
	Experiment	PoreFlow	PoreFlow	PoreFlow	PoreFlow	PoreFlow
	(3)	(1)	(1)	(2)	(2)	(3)
	[m]	[m]	[m]	[m]	[m]	[m]
1	n.b.	$9,07 \cdot 10^{-3}$	$4,72 \cdot 10^{-3}$	$1,40 \cdot 10^{-3}$	$8,54 \cdot 10^{-4}$	$2,00 \cdot 10^{-3}$
2	$2,57 \cdot 10^{-3} \pm 5,91 \cdot 10^{-4}$	$7,80 \cdot 10^{-3}$	$3,95 \cdot 10^{-3}$	$4,50 \cdot 10^{-3}$	$2,80 \cdot 10^{-3}$	$6,30 \cdot 10^{-4}$
3	$1,59 \cdot 10^{-2} \pm 4,31 \cdot 10^{-3}$	$1,11 \cdot 10^{-2}$	$6,05 \cdot 10^{-3}$	$8,80 \cdot 10^{-3}$	$3,10 \cdot 10^{-3}$	$5,50 \cdot 10^{-3}$
4	$5,83 \cdot 10^{-2} \pm 2,87 \cdot 10^{-2}$	$5,32 \cdot 10^{-3}$	$5,51 \cdot 10^{-3}$	$2,22 \cdot 10^{-4}$	$1,22 \cdot 10^{-4}$	$4,80 \cdot 10^{-4}$

Aus Analogieschlüssen lassen sich aus den mittleren Partikelgeschwindigkeiten (Bahngeschwindigkeiten, abgeleitet aus den Summenkurven) und der Filtergeschwindigkeit im Modellmedium die effektiven Porositäten und die Tortuositäten berechnen:

Tab. 5.9: Gegenüberstellung der Abstandsgeschwindigkeiten, Tortuosität und effektive Porositäten

	\bar{n}_{eff}	n_{zell}	$n_{zell,eff}$	$\bar{\tau}$	\bar{v}_a	n_{eff}	\bar{v}_a	n_{eff}
	Experiment	Pore-Flow	Pore-Flow	Pore-Flow	Pore-Flow	Pore-Flow	Pore-Flow	Pore-Flow
	(3)			(2)	(2)	(2)	(3)	(3)
	[%]	[%]	[%]	[-]	[m/s]	[%]	[m/s]	[%]
1	n.b.	38,79	31,40	1,69	$1,28 \cdot 10^{-4}$	29,99	$1,10 \cdot 10^{-4}$	34,55
2	$23,2 \pm 0,029$	38,71	30,60	1,59	$9,94 \cdot 10^{-5}$	26,56	$9,30 \cdot 10^{-5}$	28,39
3	$17,5 \pm 0,071$	28,41	14,61	2,86	$4,88 \cdot 10^{-5}$	18,63	$4,70 \cdot 10^{-5}$	19,34
4	$10,2 \pm 3,19$	29,70	17,99	1,82	$8,81 \cdot 10^{-5}$	17,48	$8,50 \cdot 10^{-5}$	18,12

Im nachfolgendem Kapitel 6 werden die Werte gegenübergestellt, diskutiert und interpretiert.

6. Interpretation

Im folgenden Kapitel werden die Ergebnisse der Versuchsdaten mit den numerischen Simulationsergebnissen verglichen und interpretiert.

Ein direkter Vergleich numerischer und experimenteller Ergebnisse ist nur mit ableitbaren Hilfsgrößen wie der Durchlässigkeit, der Porosität und der Dispersivität möglich. Ein direkter Vergleich der auftretenden Filter-, Bahn- und Abstandsgeschwindigkeiten ist aufgrund der unterschiedlichen Systemgrößen zwischen Modell und Experiment sowie der Nichtbestimmbarkeit von Bahngeschwindigkeiten in den Säulenexperimenten nicht möglich.

Durchlässigkeitsbeiwerte

In Tabelle 5.7 (Kapitel 5) sind die im Experiment ermittelten Durchlässigkeitsbeiwerte, die mit empirischen Methoden berechnet und die mit PoreFlow ermittelten Werte gegenübergestellt. In Abbildung 6.1 sind die jeweiligen Werte gegenübergestellt.

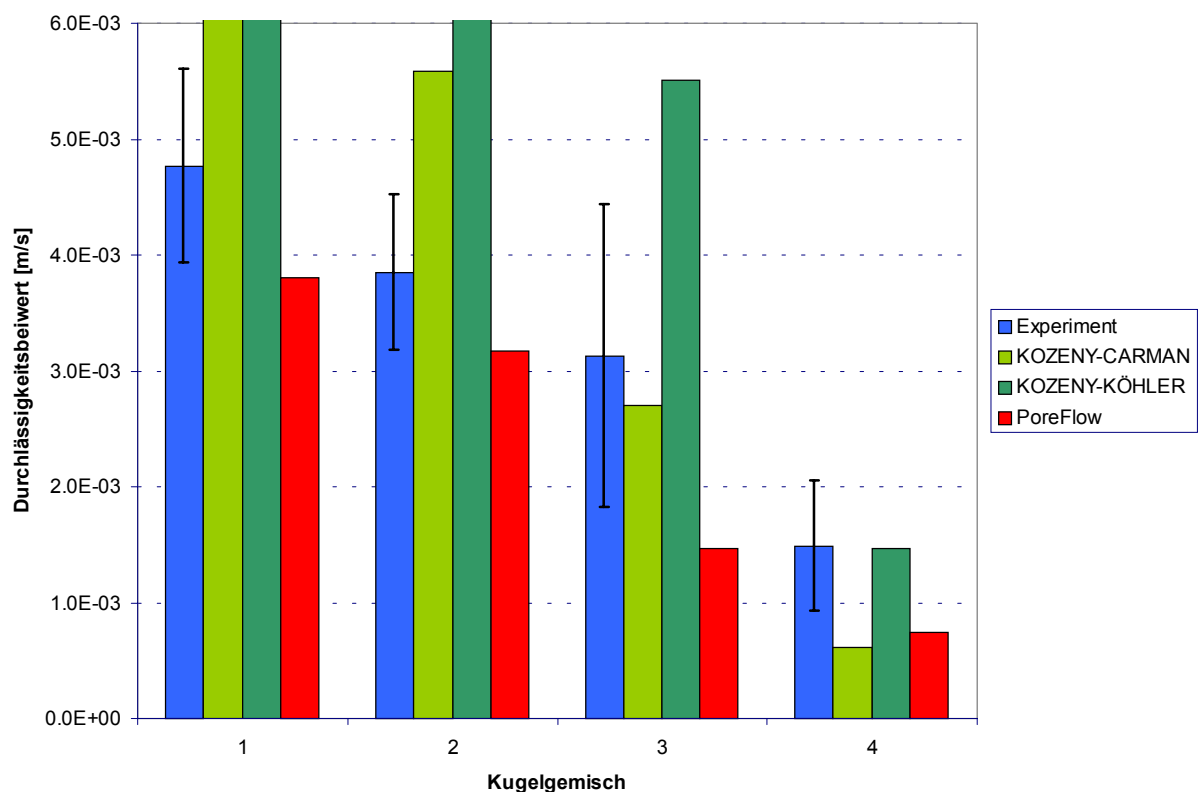


Abb. 6.1: Gegenüberstellung der ermittelten Durchlässigkeitsbeiwerte

Erwartungsgemäß nimmt die Durchlässigkeit von Kugelgemisch 1 bis 4 ab. Dies zeigen sowohl die in den Durchströmungsversuchen gewonnenen Werte, als auch die abgeschätzten und modellierten Durchlässigkeitsbeiwerte.

Die größten Abweichungen vom Experiment liegen bei den abgeschätzten Durchlässigkeiten von KOZENY-CARMAN und KOZENY-KÖHLER, wobei die Werte nach KOZENY-CARMAN am nächsten an den experimentell bestimmten Werten liegen. Besser liegen die Werte beim Kugelgemisch 4. Die mit PoreFlow ermittelten Durchlässigkeiten liegen bei allen 4 Kugelgemischen knapp unterhalb der absoluten Abweichung vom Mittelwert (Fehlerbalken) der experimentell ermittelten Durchlässigkeiten.

Die Abbildung 6.2 stellt den direkten Vergleich zwischen den experimentell ermittelten und den berechneten Durchlässigkeitsbeiwerten her.

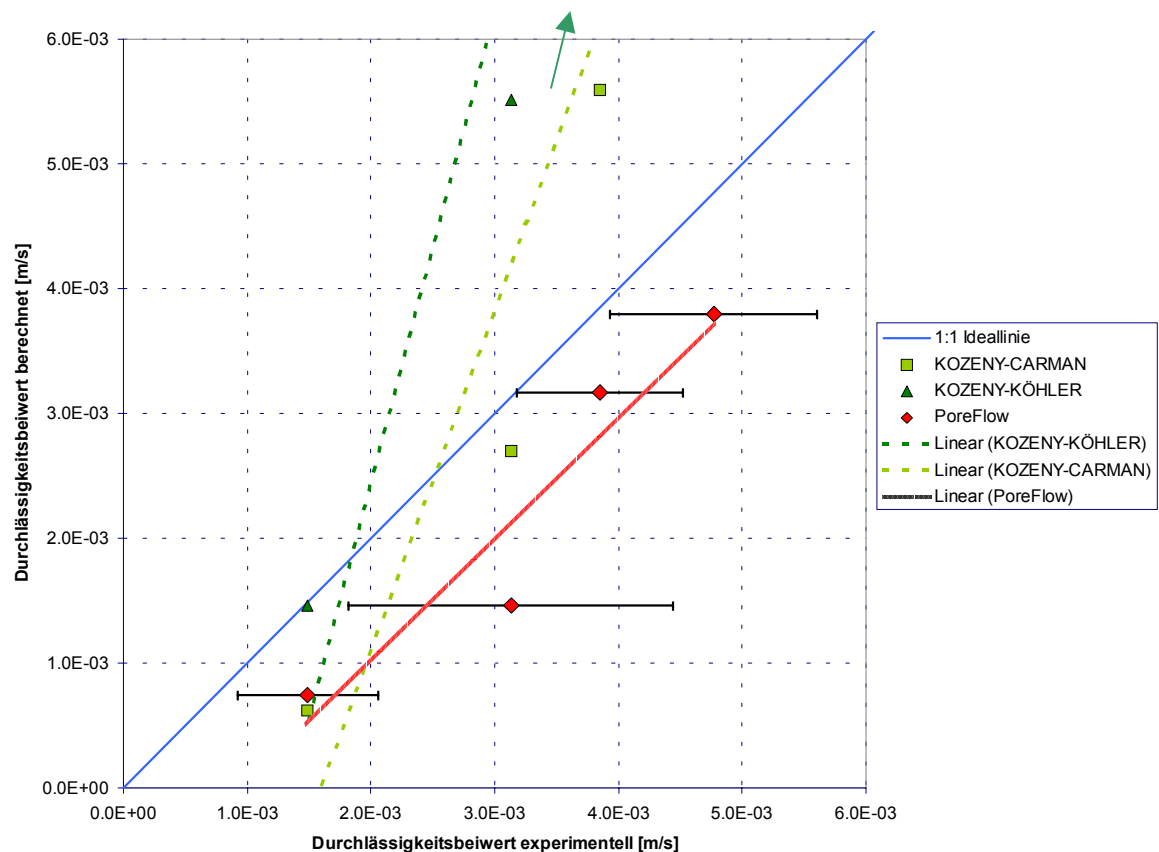


Abb. 6.2: Direkter Vergleich der Durchlässigkeitsbeiwerte (Experiment/Modell)

Die in Abb. 6.2 dargestellte 1:1 Ideallinie (blau) beschreibt die Ideallinie zwischen Experiment und Modell. Je näher die Datenpunkte an dieser Linie liegen, um so größer ist die Übereinstimmung zwischen Modell und Experiment. Die Steigung dieser Ideallinie beträgt zwangsläufig eins und die Ordinate muß die Abszisse bei exakt null schneiden. Eine lineare Regression zwischen Modell- und Experimentdaten und dem Vergleich mit dieser Ideallinie kann also als Maß für die Übereinstimmung zwischen Modell und Experiment herangezogen werden.

Die linearen Regressionsgeraden der Abschätzmethoden nach KOZENY-CARMAN und KOZENY-KÖHLER (grüne Regressionsgeraden) besitzen eine Steigung von deutlich über 2 und liegen weit von der Ideallinie entfernt. Von einer Übereinstimmung der Durchlässigkeitsbeiwerte kann also nicht gesprochen werden. Diese Methoden scheinen für Materialien mit zu erwartenden hohen Durchlässigkeitsbeiwerten ungeeignet zu sein.

Der Vergleich mit den aus PoreFlow gewonnenen Durchlässigkeitsbeiwerten zeigt eine Regressionsgerade (rot) mit einer Steigung von 0,98. Die Regressionsgerade verläuft somit etwa parallel zur Ideallinie. Die mit PoreFlow ermittelten Durchlässigkeiten liegen im Vergleich mit den anderen Methoden deutlich näher an der Ideallinie, aber im Schnitt mit $4,5 \cdot 10^{-4}$ [m/s] im Vergleich mit den experimentell bestimmten Werten zu niedrig. Dies stellt sich als Parallelverschiebung der Regressionsgerade in bezug zur Ideallinie dar.

Der im Modell PoreFlow verwendete Ansatz zur Ableitung der Durchlässigkeit beschreibt die Durchlässigkeit als Funktion der Fluidgeschwindigkeit im Porenraum (Porosität) und des dabei entstehenden Fluidruckgefälles im Bezugssystem. Die Ergebnisse dieses Ansatzes zur Ableitung des Strömungswiderstandes als „Durchlässigkeitsbeiwert“ stützt die im Kapitel 1 aufgestellte Arbeitsthese im bezug zur Frage- und Problemstellung.

Porositäten

Analog zum Vergleich der Durchlässigkeiten werden die verschiedenen ermittelten Porositäten gegenübergestellt und diskutiert. Die Grunddaten der Abbildungen 6.3 und 6.5 finden sich im Kapitel 5, Tab. 5.7 und 5.9.

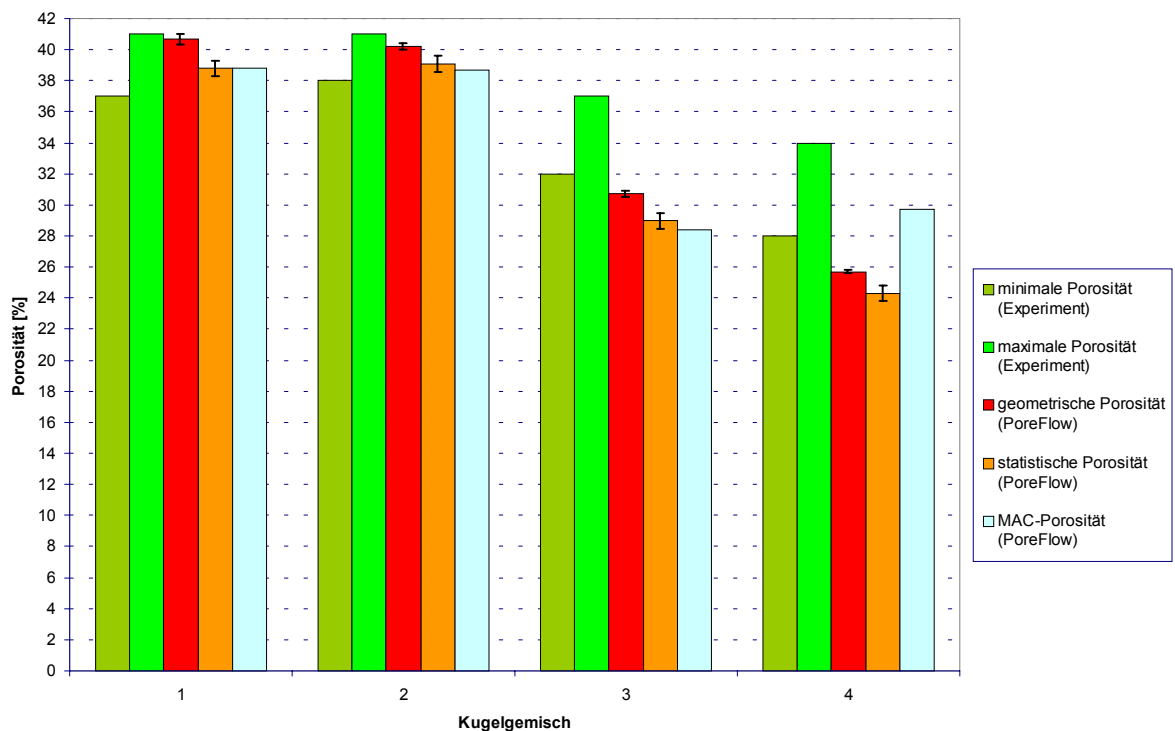


Abb. 6.3: Gegenüberstellung der Porositäten

Die Werte der minimalen und maximalen angegebenen Porosität stammen aus der experimentellen Bestimmung der Lagerungsdichte. Sie geben die minimale und maximale Gesamtporosität bei lockerster und dichtester Lagerung an.

Mit steigendem Ungleichförmigkeitsgrad (von Kugelgemisch 1 bis 4) ist zu erkennen, daß die Differenz zwischen der minimalen und maximalen Porosität von 3 bis 6 Prozent (Kugelgemisch 1 bis 4) zunimmt. Dies ist darauf zurückzuführen, daß der Anteil kleinerer Kugeln mit steigendem Ungleichförmigkeitsgrad zunimmt (Abb. 5.8) und die kleineren Kugeln die Zwischenräume zwischen den größeren Kugeln ausfüllen (vgl. Abb. 5.10 bis 5.13).

Generell scheinen die Werte der minimalen Porosität aus den Versuchen zur Bestimmung der Lagerungsdichte, insbesondere in den Gemischen 3 und 4, zu hoch. Dies ist mit dem „Paranuß“-Effekt (HERRMANN, 1995), zu erklären. Dieser Effekt beschreibt folgendes Phänomen: Man mische unterschiedlich große Teilchen gleicher Dichte in einem Gefäß. Schüttelt man dieses Gefäß, so scheiden sich die größeren Teilchen an der Oberfläche ab (HERRMANN, 1995). Dies führt zur räumlichen Entmischung der Teilchen im Gefäß. Diese Erscheinung ist sowohl bei den Versuchen zur Bestimmung der Lagerungsdichte, als auch bei Befüllung der Versuchssäulen zu beobachten. Diese Entmischung hat zur Folge, daß sich die Kugelgemische nicht optimal verdichten lassen, also die minimal mögliche Porosität nicht erreicht wird. Diese Aussage wird dadurch gestützt, daß die modellierte Gesamtporosität (Abb. 6.3) in den Gemischen 3 bis 4 deutlich unterhalb (etwa 2 Prozent) der experimentell ermittelten minimalen Porosität liegt. Die Ursache liegt darin, daß der Anlagerungsalgorithmus (PoreFlow, Kap. 4) versucht, möglichst dichte Lagerungsverhältnisse und eine möglichst homogene räumliche Verteilung der Kugeln unterschiedlicher Radien, herzustellen.

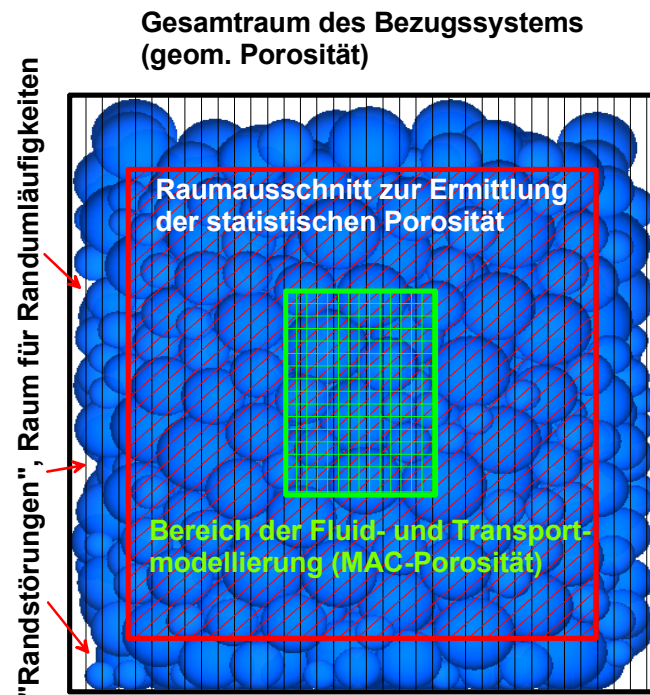


Abb. 6.4: Definition der Bezugssysteme zur Ermittlung der Porositäten in PoreFlow

Die Abbildung 6.4 veranschaulicht schematisch die räumliche Beziehung zur Ermittlung der geometrischen-, statistischen- und MAC – Porosität im Modell PoreFlow.

Die im Diagramm 6.3 angegebene geometrische Porosität ist die Gesamtporosität resultierend aus der Anlagerungsmodellierung (PoreFlow, Gl. 4.9). Die dargestellten Werte sind Mittelwerte aus verschiedenen Anlagerungsrealisationen, durchgeführt in unterschiedlichen Bezugssystemgrößen. Die Fehlerbalken geben die absoluten Abweichungen vom Mittelwert verschiedener Modellrealisationen an. Die relativen Fehler innerhalb der Anlagerungsmodellierung (Schwankungen um den Mittelwert bei unterschiedlichen Systemgrößen) liegen im Bereich von 0,4 bis 0,8 Prozent. Diese Schwankungen in der modellierten Porosität sind auf die im Kapitel 4 beschriebenen Randstörungen durch das Bezugssystem zurückzuführen (Abb. 6.4). Konsequenterweise folgt daraus, daß der Porenraum als statistisches Ensemble (vgl. Kap. 3: Boolesches Modell) aufgefaßt werden muß.

Die im Diagramm 6.3 dargestellte statistische Porosität wurde nach Gl. 4.13 ermittelt. Die Mittelung der Porosität erfolgte iterativ solange, bis eine Genauigkeit von 0,5 Prozent erreicht wurde. Der Wertebereich der Testvektoren wurde so ausgewählt, daß Randbereiche des Bezugssystems nicht berücksichtigt wurden, d.h. es wurde die Porosität in einem Ausschnitt des porösen Mediums ermittelt (Abb. 6.4). Der Anteil des Raumes der rein rechnerisch aus der Differenz der geometrischen Porosität und der statistischen Porosität resultiert, repräsentiert den Raum zwischen dem Rand des Bezugssystems und dem porösen Medium. Übertragen auf die Durchführung von Säulenversuchen ist das der potentielle Raum für Randumläufigkeiten. Die Differenz zwischen geometrischer- und statistischer Porosität (vgl. Abb. 6.3) nimmt von Kugelgemisch 1 bis 4 ab. Ursache ist die Zunahme des Anteils kleinerer Kugeln (Abb. 5.8) und die damit verbundene Erhöhung des Ungleichförmigkeitsgrades.

Die in Abb. 6.3 dargestellte MAC-Porosität der jeweiligen Gemische sollte im Bereich der statistischen Porosität liegen. Ist das der Fall, so kann die Darstellung des porösen Mediums im MAC-Gitters als repräsentativer Ausschnitt des Mediums aufgefaßt werden. Die Größe des MAC-Bereiches ist durch die Computerkapazität (Speicherplatz und Iterationsgeschwindigkeit) begrenzt (Kap. 4). In den Gemischen 1 bis 3 kann der MAC-Ausschnitt als repräsentativ angesehen werden, da die MAC-Porosität etwa der statistischen Porosität (absolute Abweichung kleiner 0,5 Prozent) entspricht. Im Kugelgemisch 4 ist das nicht der Fall, da aufgrund des hohen Anteils kleiner Kugeln (Abb. 5.8) mit einer feineren Diskretisierung gerechnet werden mußte, die zwangsläufig eine Verkleinerung des MAC-Raumes zur Folge hatte. Dennoch kann die in Abb. 6.1 und 6.2 dargestellte hydraulische Durchlässigkeit des

Kugelmisches 4 angenommen werden, da die „lokale“ Porosität im Längsprofil des Zylinders (Abb. A6.4 und A6.7) im Gesamtmittel bei 29,7 Prozent, aber bis zu einer Höhe von 4 Millimetern im Mittel etwa 25 Prozent beträgt. Bis zu einer Höhe von 4 Millimetern kann der Raum als angenähert repräsentativ angesehen werden, da die statistische Porosität etwa 24,5 Prozent beträgt.

In der Abbildung 6.5 werden die im Experiment ermittelten und mit verschiedenen Methoden berechneten effektiven Porositäten gegenübergestellt.

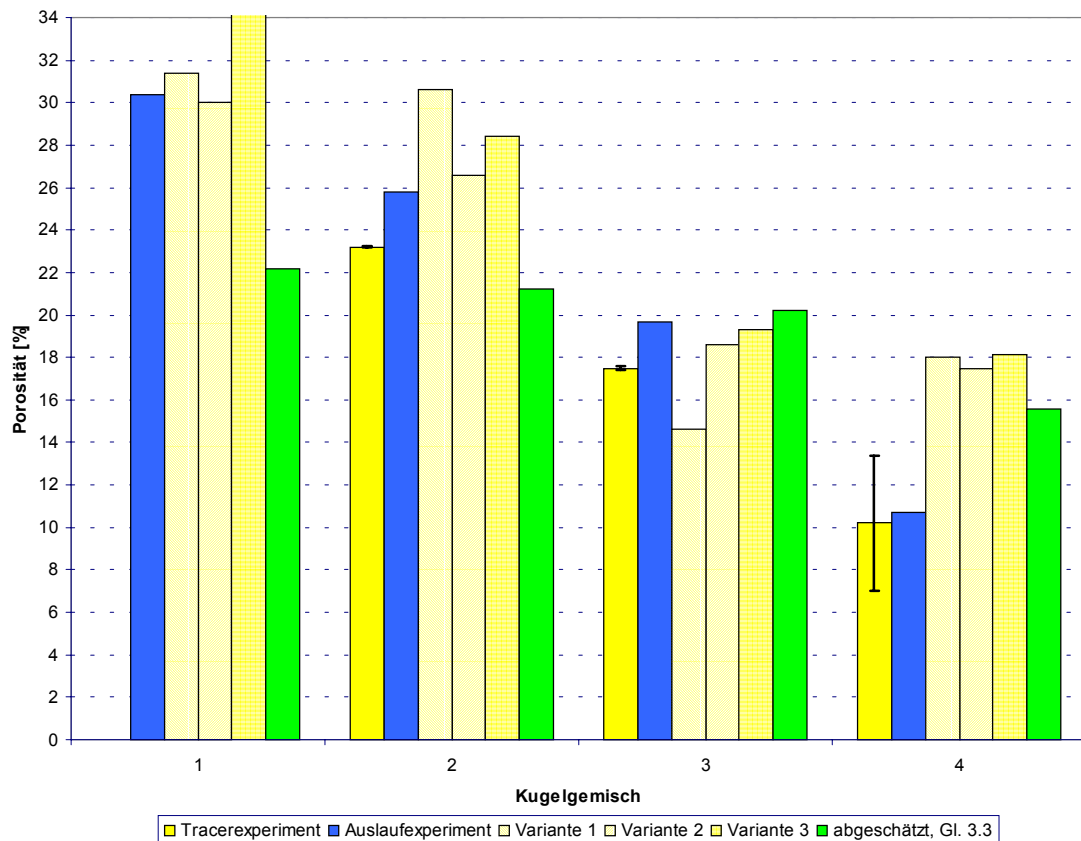


Abb. 6.5: Gegenüberstellung der effektiven Porositäten

Experimentell wurde die effektive Porosität aus den Tracerexperimenten über die Beziehung Gl. 3.18 und aus Auslaufexperimenten (d.h. frei entwässerbare Porosität) bestimmt. Die berechnete effektive Porosität wurde nach Gl. 3.3 bestimmt. Die in Abb. 6.5 dargestellten Porositäten der Varianten 1 bis 3 (aus Kap. 4, PoreFlow) wurden folgendermaßen hergeleitet:

- Variante 1: Fluidmodellierung, Grenz-Pecletzahl, Gl. 4.76 – 4.78
- Variante 2: Partikeltransportmodellierung, orientiert nach Gl. 4.80
- Variante 3: Partikeltransportmodellierung, Parameteranpassung an Transportgleichung und Gl. 4.79

Generell ist ein Trend zur Abnahme der „effektiven“ Porositäten von Kugelmisch 1 bis 4 erwartungsgemäß zu beobachten.

Zwischen den experimentell bestimmten Porositäten (frei entwässerbare Porosität aus den Auslaufversuchen (blau) und durchflußwirksame Porosität aus den Tracerexperimenten (gelb)) liegen bis zu 3,5 Prozent Differenz im Kugelmisch 4 vor. Generell liegen die Werte der frei entwässerbaren Porosität höher als die Werte der durchflußwirksamen Porosität.

Die Werte nach der Abschätzmethode Gl. 3.3 (Abschätzung nach experimentell ermittelten Durchlässigkeiten) weichen in allen Kugelmischungen (außer im Gemisch 3) erheblich von den experimentell bestimmten Werten ab. Der Anteil des frei entwässerbaren Porenraumes an der

minimalen Gesamtporosität (Abb. 6.3 und Abb. 6.5) nimmt vom Kugelgemisch 1 bis 4 von 82 Prozent auf 38 Prozent ab. Der dargestellte Zusammenhang in Kapitel 3, Abb. 3.1 wird damit bestätigt.

Von den PoreFlow-Varianten liegt die Variante 2 am nächsten an den experimentellen Befunden (Auslaufexperiment). Die erheblichen Abweichung im Kugelgemisch 4 sind auf die unterschiedliche modellierte Systemgröße (Abweichung zwischen geometrischer- und MAC-Porosität) zurückzuführen. Analog dem prozentualen Vergleich zwischen frei entwässerbarer- und Gesamtporosität wird hier die MAC-Porosität mit der effektiven Porosität nach Variante 2 verglichen. Dabei nimmt der effektive Anteil des Porenraumes von der MAC-Porosität von 77 Prozent auf 58 Prozent ab.

In der Abbildung 6.6 wird der direkte Vergleich der modellierten effektiven Porositäten und der frei entwässerbaren Porosität (Auslaufexperiment) analog Abb. 6.2, dargestellt. Aufgrund der abweichenden MAC-Porosität von der statistischen- und geometrischen Porosität des Gemisches 4 wird dieses Gemisch in die Auswertung (Abb. 6.6, lineare Regressionsgeraden) nicht mit einbezogen.

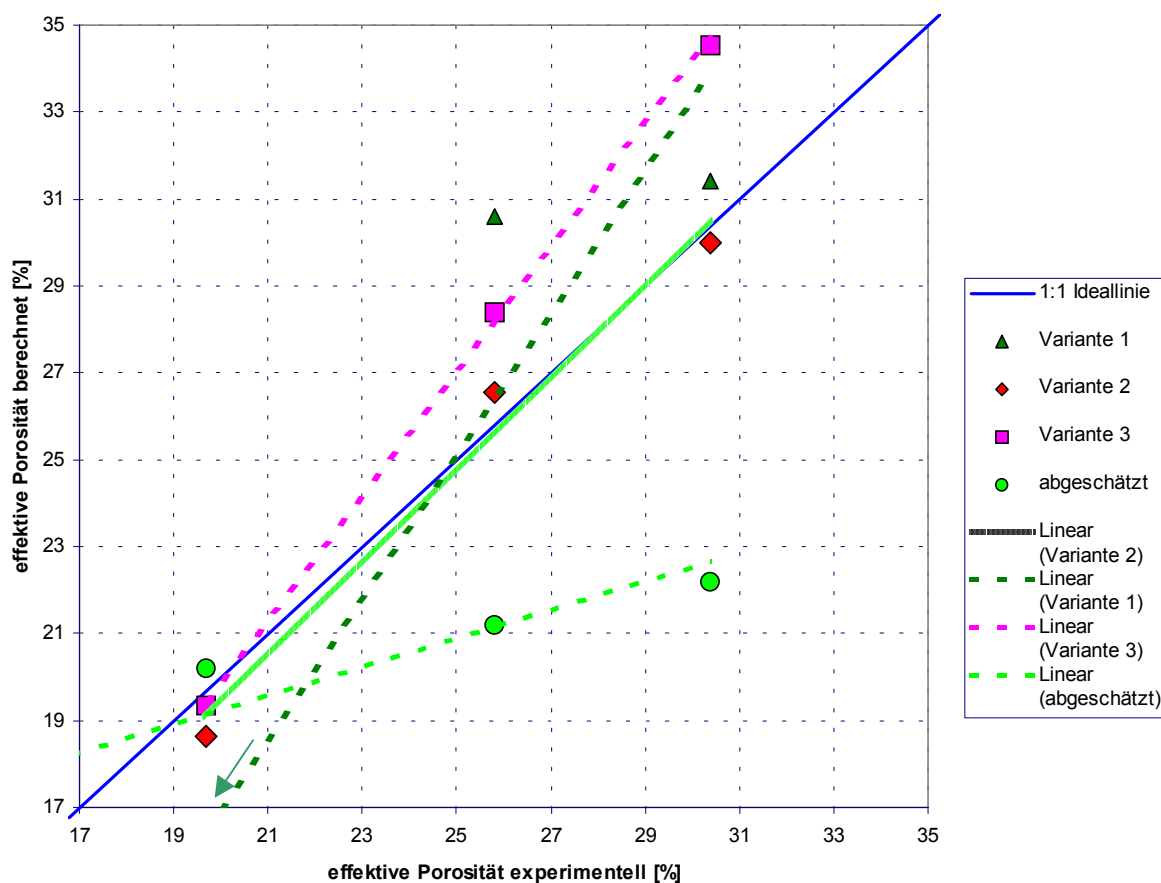


Abb. 6.6: Direkter Vergleich der effektiven Porositäten (Experiment/Modell)

Die Steigung der Regressionsgerade der Abschätzmethode (Gl. 3.3) im Vergleich zur Ideallinie zeigt die deutliche Abweichung. Diese Methode scheint für die Ermittlung effektiver Porositäten für Kugelgemische ungeeignet zu sein.

Deutlich besser liegen die Regressionsgeraden der Varianten 1 bis 3, wobei die Gerade der Variante 2 am nächsten an der Ideallinie liegt. Diese Methode, basierend auf dem Verhältnis der Filtergeschwindigkeit (Gl. 4.50) und der medianen Tracerpartikelgeschwindigkeit der Partikelgeschwindigkeitsverteilung (orientiert nach Gl. 4.80) liefert die größte Übereinstimmung mit den experimentellen Befunden.

Dispersivitäten

Analog den obigen Darstellungen werden die Dispersivitäten gegenübergestellt (Abb. 6.7).

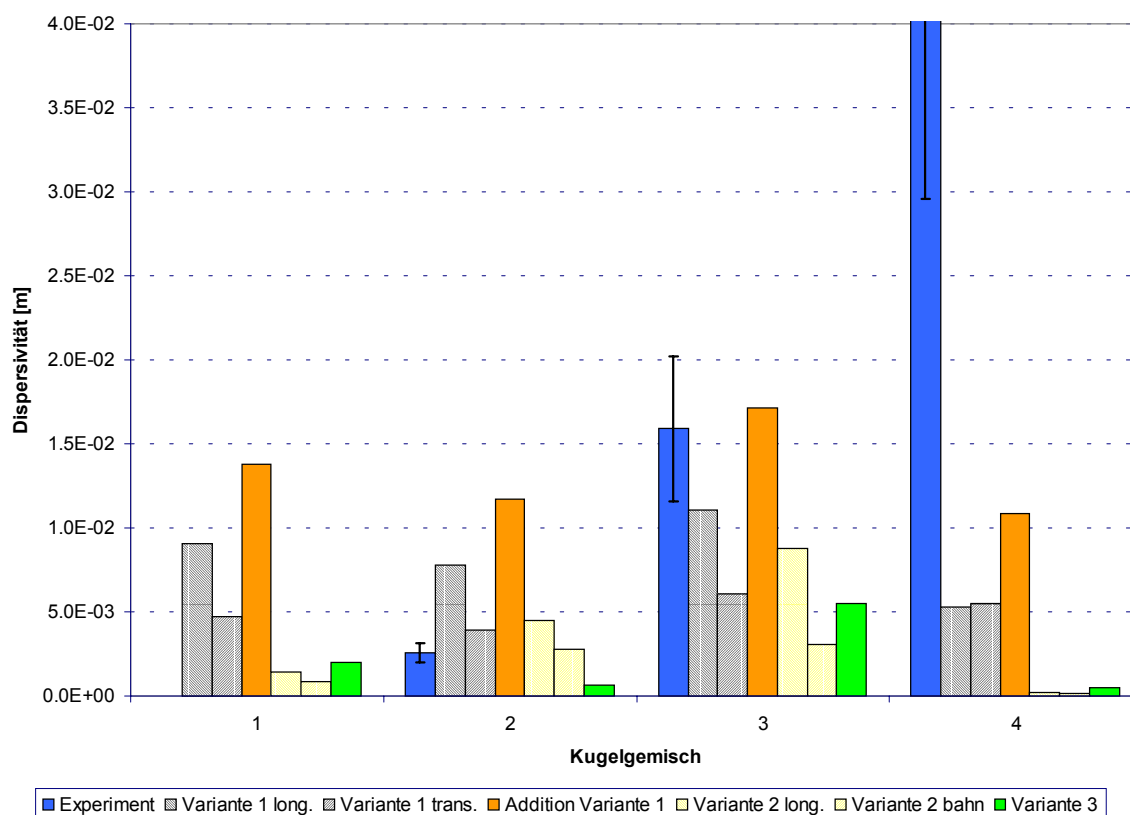


Abb. 6.7: Gegenüberstellung der Dispersivitäten

Die in der Abbildung 6.7 dargestellten Varianten zur Ermittlung der Dispersivität entsprechen den Werten aus Tab. 5.8. Den experimentell ermittelten Dispersivitäten werden die Modellvarianten (PoreFlow, Kap. 4) gegenübergestellt:

- Variante 1: abgeleitet aus Varianz der Poregeschwindigkeiten (Gl. 4.70-4.72)
- Variante 2: abgeleitet aus Partikelweglängen (Gl. 4.69, Gl. 4.73)
- Variante 3: abgeleitet aus Parameteranpassung an analytische Lösung

Im Experiment zeigt sich ein deutliches Anwachsen der aus Parameteranpassung und statistischer Momentenmethode abgeleiteten Dispersivität von Kugelgemisch 2 bis 4, wie es qualitativ aufgrund der Zusammensetzung (Kugelgrößenverteilung) der Kugelgemische zu erwarten ist.

Generell weichen die mit PoreFlow abgeleiteten Dispersivitäten deutlich von den experimentell ermittelten Dispersivitäten ab. Sie bewegen sich jedoch innerhalb der Größenordnung vom Millimeter- bis zum Zentimeterbereich (Abb. 6.7). Aufgrund der großen Abweichungen zwischen Modell und Experiment ist ein Vergleich der Werte analog Abb. 6.2 und 6.6 nicht sinnvoll.

Dennoch können die Modellierungsergebnisse aller Varianten im Sinne der Problem- und Fragestellung (Kap. 1) diskutiert werden:

Variante 1

Nach Variante 1 kann eine longitudinale (mit der Hauptstromrichtung) und eine transversale (quer zur Hauptstromrichtung) Dispersivität abgeleitet werden. Dabei geht nach Gl. 3.42 eine Korrelationslänge ein, für die als Wert die Zylinderhöhe (longitudinal) und der Zylinderdurchmesser (transversal) eingesetzt wird. Die modellierte Zylinderhöhe ist 2 mal so groß wie

der Zylinderdurchmesser im Gemisch 1 bis 3. Daraus ergibt sich der etwa doppelt so hohe Betrag für die longitudinale Dispersivität im Vergleich zur transversalen Dispersivität. Das bedeutet, daß das Verhältnis zwischen der Varianz der Porengeschwindigkeiten in y-Richtung und in der Querebene zur y-Richtung zum jeweiligen Mittelwert der Geschwindigkeit im jeweiligen Gemisch nahezu gleich ist. Für das Kugelgemisch 4 sind die Beträge nahezu gleich, weil die Zylinderhöhe gleich dem Zylinderdurchmesser ist.

Variante 2

Die Dispersivität nach Variante 2 orientiert sich an den Gleichungen 4.68, 4.69 und 4.73. Für die in Abb. 6.7 dargestellte longitudinale Dispersivität wird die Zylinderhöhe als Korrelationslänge eingesetzt. Für die als „Bahndispersivität“ dargestellten Werte wird statt der Zylinderhöhe die mittlere Wegstrecke der jeweiligen Einzelpartikel angesetzt (analog Gl. 4.69). Aus Abb. 6.7 kann entnommen werden, daß die Differenz zwischen beiden Werten von Kugelgemisch 1 bis 3 zunimmt. Dies ist darauf zurückzuführen, daß die mittleren Wegstrecken der Tracerpartikel vom Gemisch 1 bis 3 zunehmen und dieser Wert in das Verhältnis (Gl. 4.73) einfließt. Im Gegensatz dazu bleibt die Bezugshöhe der Gemische 1 bis 3 konstant.

Variante 3

Die Ableitung der Dispersivität in Variante 3 erfolgt über Parameteranpassung des Dispersionskoeffizienten an die eindimensionale Form der analytischen Lösung der advektiv-dispersiven Transportgleichung (Gl. 3.27). Zur Parameterableitung wurden die simulierten Tracerpartikeldurchgangskurven herangezogen.

Diskussion und Vergleiche der Modellvarianten

Generell können zwischen den vorgestellten Varianten der Gemische 1 bis 3 folgende Aussagen getroffen werden:

Die Dispersivität des Kugelgemisches 1 ist etwas höher als im Kugelgemisch 2. Dies ist damit zu begründen, daß der mittlere Kugeldurchmesser größer als im Kugelgemisch 2 ist (Tab. 5.5). Das bedeutet, die Varianz im Porengeschwindigkeitsfeld (Kugelgemisch 1) muß größer sein und die Tracerpartikel müssen längere Wegstrecken zurücklegen. Dies zeigen auch die Werte für die Tortuosität (als Wegstreckenverhältnisse) in Tab. 5.9. Die Zunahme der Dispersivität im Kugelgemisch 3 im Vergleich zum Gemisch 1 und 2 ist auf die Zunahme des Ungleichförmigkeitsgrades der Kugelradienverteilung und der Zunahme des mittleren Kugeldurchmessers zurückzuführen. Die Dispersivitäten des Kugelgemisches 4 im Vergleich zu den Gemischen 1 bis 3 fallen deutlich geringer aus. Dies ist auf die schon oben beschriebene unterschiedliche Systemgröße zurückzuführen. Dies zeigt die deutliche Abhängigkeit des Dispersionskoeffizienten von der Größe des Bezugssystems (Korrelationslängen).

Die Werte der Variante 2 (Ableitung der longitudinalen Dispersivität) aus den Partikeltransportsimulationen kommen den experimentell ermittelten Dispersivitäten am nächsten. Dennoch liegen die Werte im Gemisch 2 im Vergleich zu hoch und im Gemisch 3 und 4 deutlich zu niedrig.

Zusammenfassend kann festgestellt werden, daß die Modellierung der Dispersivität qualitativ die in Tab. 2.2 dargestellten Zusammenhänge (Punkte 1 bis 3) widerspiegeln, eine exakte Angabe der Dispersivität aus den Modellierungen sich aber nicht ableiten läßt. Es deutet sich an, daß die hydrodynamische Dispersion, wie in Gl. 3.23 und 3.24 angegeben, nicht linear mit der Abstandsgeschwindigkeit zusammenhängt, sondern wie SCHEIDEGGER (1961) schon hinwies, einen nichtlinearen Zusammenhang, verbunden mit der Bahn- oder Porengeschwindigkeit, aufweist. Dieser nichtlineare Zusammenhang ist nicht nur bei der Makrodispersivität zu beobachten, sondern deutet sich auch bei der Mikrodispersivität an. Dieser Zusammenhang konnte nicht quantifiziert werden, wird aber qualitativ deutlich bei der Betrachtung der Verteilung der Partikelgeschwindigkeiten und der auftretenden Porengeschwindigkeitsvektoren (Abb. 4.23 und im Anhang 3 bis 5).

7. Diskussion und Ausblick

Anlagerungsmodellierung

Wie sich bei vielen simulierten Kugelpackungen unterschiedlicher Größenverteilungen gezeigt hat, ist das in dieser Arbeit vorgestellte mathematische Verfahren gut geeignet, Kugelpackungen zu generieren. Dieses Verfahren besitzt den Vorteil, daß die Anlagerung teilanalytisch gelöst wird und damit die Berechnung von Trajekturen während der Anlagerung überflüssig wird. Der Nachteil besteht allerdings darin, daß die Kugeln nur einzeln, d.h. sequentiell angelagert werden können und danach der Anlagerungspunkt fixiert bleibt. Dies kann unter Umständen zu Instabilitäten der Kräfteverteilung in der Kugelpackung führen, die z.B. bei Anlagerungsmodellierungen auf Basis molekulardynamischer Methoden (Berechnung der Bewegungstrajektoren) nicht oder nur wenig auftreten würden.

Bei der Analyse der bei der Anlagerungsmodellierung entstehenden Porensysteme ist festzustellen, daß alle Arten von „Porentypen“ auftreten können, obwohl der Anlagerungsalgorithmus versucht, die Kugeln in die dichtest mögliche Lagerung zu packen. Das Auftreten aller „Porentypen“ ist zum einen auf die Ausbildung von Randstörungen durch das Bezugssystem und zum anderen auf die diskutierten Instabilitäten in der Kräfteverteilung und der daraus resultierenden Lage der Kugeln zurückzuführen. Allerdings wird in natürlich vorkommenden Sanden, Kiesen und Sandsteinen, die in dichtester Lagerung vorliegen, eine hohe Diversität der auftretenden „Porentypen“ und Porengeometrien beschrieben (Abb. 3.6). Generell läßt sich feststellen, daß die Porengeometrien auch bei Kugelpackungen unterschiedlicher Korngrößenverteilungen äußerst komplexe räumliche Gebilde darstellen (Abb. 3.7). Die Variabilität der Porengeometrien wird durch die Kornform (abweichend von der Kugelform) und durch die Oberflächeneigenschaften (Oberflächenrauigkeit) nochmals deutlich erhöht. Diese Aspekte werden in dem vorgestellten Modell PoreFlow nicht berücksichtigt.

Die Einführung von Ellipsoiden bei der Anlagerungsmodellierung, unter Beibehaltung der mathematischen Lösungswege, nur durch Austausch der Kugel- mit Ellipsengleichungen, würde die Variabilität des künstlichen Mediums und damit auch der resultierenden Porenraumgeometrien deutlich erhöhen. Die Einführung eines Kräftevergleiches an den potentiellen Anlagerungspunkten würden die auftretenden Kräfteverteilungsinstabilitäten minimieren, so daß das Modell in der Lage wäre, Kräfteverteilungen an Gefäßwänden (Systemgrenzen) und im System selbst zu simulieren (Problematik Schüttgütermodellierung).

Fluidflußmodellierung

Die Bewegungsgleichung von Fluiden im Raum, die Navier-Stokes-Gleichung ist gut geeignet, den Fluidfluß im Maßstab des Porenraumes zu berechnen. Allerdings ist die numerische Lösung dieser deterministischen Gleichung in komplexen Geometrien schwierig und stellt hohe Anforderungen an die Gleichungslöser. Viele Autoren aus dem Fachgebiet der CFD sind damit beschäftigt, effektive numerische Lösungsverfahren oder alternative Verfahren (z.B. Gittergasmodelle, Zellulare Automaten u.s.w) zur Lösung der Navier-Stokes-Gleichung zu entwickeln. Das im Modell PoreFlow angewandte explizite numerische Verfahren (Iteration über die Zeit im MAC-Gitter) arbeitet an der Grenze der Effektivität. Die Einführung impliziter- oder teilimplizierter numerischer Verfahren (z.B. Mehrgitter-Verfahren) und die computertechnische Parallelisierung der Lösungsalgorithmen würden zur deutlichen Effizienzerhöhung beitragen.

Dennoch konnte in den vorgestellten Simulationen gezeigt werden, daß das angewandte numerische Verfahren in der Lage ist, den mikroskopischen Fluidfluß im Porenraum zu berechnen. Aus den resultierenden Geschwindigkeitsvektoren (Bahngeschwindigkeiten) im Porenraum können theoretische Bahnlinien sowie die Tortuosität abgeleitet werden. Mit Hilfe von Mittelungsverfahren der auftretenden Geschwindigkeiten und der resultierenden Druckverteilungen gelingt es, auf die Durchlässigkeiten (DARCY-Gesetz) des modellierten

Mediums zurückzurechnen. Dabei konnte in den Testbeispielen die Grenzen des Gültigkeitsbereiches des DARCY-Gesetzes (zur Turbulenz) gezeigt werden. Weiterhin zeigen sich bei der Fluidberechnung die Ausbildung der charakteristischen parabolischen Geschwindigkeitsprofile sowie die Ausbildung von Mikroturbulenzen auch in nicht kritischen (nicht turbulenten) Strömungsbereichen.

Es konnte gezeigt werden, daß sich die Dispersivität direkt aus der Varianz der Geschwindigkeitsvektoren im System ableiten läßt aber im Vergleich zu experimentell bestimmten Dispersivitäten zu ungenaue Werte liefert.

Ein wesentlicher Nachteil des angewandten Lösungsverfahrens ist es, das nur relativ kleine Systeme (Zylinder im Millimeterbereich) „nachmodelliert“ werden können. Dadurch bereitet die Ableitung der effektiven Transportparameter, wie Durchlässigkeit, Dispersivität, Tortuosität und effektive Porosität einige Schwierigkeiten im Vergleich mit Labordaten. Generell konnte aber nachgewiesen werden, daß die Fluid- und Transportmodellierung im Maßstab des Porenraumes zur Ableitung der effektiven Parameter führt.

Transportmodellierung

Im Rahmen dieser Arbeit wurde die allgemeine advektiv-dispersive, bzw. advektiv-diffusive Transportgleichung behandelt. Diese Gleichung ist letztendlich die Integration des Geschwindigkeitsfeldes über die Zeit, um Konzentrations-Zeit-Verteilungen in porösen Medien zu erhalten. Der advektive Anteil des Transportes wird direkt durch die Geschwindigkeitsverteilung im Porenraum bestimmt. Der diffusive Anteil wird durch den Diffusionskoeffizienten einer zu transportierenden Spezies gesteuert.

Der Einsatz der im MAC-Gitter diskretisierten Transportgleichung scheiterte an numerischen Problemen, insbesondere der numerischen Dispersion. Dies ist darauf zurückzuführen, daß die Strömungsvektoren meist nicht in der Richtung des Gitters liegen und damit numerische Dispersion vorprogrammiert ist. Eine andere Lösungsvariante des Transportproblems sind *particle-tracking* Methoden, wie z.B. MOC (*Methods of Characteristics*) oder *Random-Walk*-Verfahren. Im Modell PoreFlow wird der Transport über ein Random-Walk-Verfahren realisiert. Dieses Verfahren besitzt den Vorteil, daß gleichzeitig die Bahnlinien sowie die daraus ableitbaren Parameter (Tortuosität) berechnet werden können.

Mit der *particle-tracking* Methode wird in dieser Arbeit versucht, aus den Partikeldaten und den theoretischen Durchbruchkurven auf die Dispersivität zurückzurechnen.

Vergleich Modellierungen und Experimentergebnisse

Grundsätzlich konnte gezeigt werden, daß die Größenordnungen der Experimentdaten, mit den Daten aus den Modellierungen vergleichbar sind. Schwierigkeiten bereiten allerdings direkte Vergleiche, da deutlich unterschiedliche Systemgrößen zwischen Experiment und Modell vorliegen. Am deutlichsten äußert sich das im Vergleich skalenabhängiger Größen, wie der Dispersivität eines Mediums. Es konnte aber gezeigt werden, daß die Dispersivität eines Mediums, abgeleitet aus der Varianz des Porengeschwindigkeitsfeldes keine Konstante darstellt, sondern direkt den Schwankungen des Geschwindigkeitsfeldes unterliegt. Im Gegensatz dazu sind die ermittelten Dispersivitäten aus den Laborversuchen in gewissen Schwankungsbreiten konstant. Dies ist ebenfalls wiederum auf die Skalenabhängigkeit der Dispersivität zurückzuführen.

Dennoch konnten qualitativ die Zusammenhänge der effektiven Parameter eines porösen Mediums, dargestellt in Tabelle 2.2 (Punkte 1 bis 3), durch die Ergebnisse der Modellierungen aufgezeigt werden. Quantitativ können mit den verwendeten Modellansätzen die hydraulische Durchlässigkeit und die effektive Porosität relativ übereinstimmend mit experimentellen Daten abgeleitet werden. Die in Kapitel 1 aufgestellte Arbeitsthese kann also mit Einschränkungen bestätigt werden.

Ausblick

In dieser Arbeit konnte gezeigt werden, daß die mikroskopische Modellierung des Fluidflusses und des Transportes in der Dimension des Porenraumes grundsätzlich möglich ist. Aus diesen Modellierungen lassen sich empirische Parameter ableiten, um diese Daten mit Laborergebnissen vergleichen zu können. Dabei gelten die zuvor genannten Einschränkungen, aber auch die Möglichkeit der aufgeführten Erweiterungen des vorgestellten Modells PoreFlow. Grundsätzlich zeigen die Modellierungsergebnisse des in dieser Arbeit vorgestellten Modells PoreFlow und der Vergleich mit experimentellen Befunden die deutliche Abhängigkeit aller effektiven transportwirksamen Parameter (Durchlässigkeit, Porosität, Dispersivität und Tortuosität) von der Porenraumgeometrie und der Größenverteilung der Porensysteme (Dimensionen).

Um die im Modell PoreFlow verwendeten Modellvorstellungen näher an die Realität der Eigenschaften poröser Medien heranzubringen sind zusammenfassend zwei wichtige Punkte zu nennen:

- Erhöhung der Variabilität der Porenraumgeometrie (z.B. durch Einsetzen von Ellipsoidengleichungen, Diskrete-Elemente-Methode)
- Fluid- und Transportmodellierung in größeren Systemen (komplette Säulenversuche, Einsetzen effektiver numerischer- oder alternativer Lösungsverfahren)

Die Lösung der Navier-Stokes-Gleichung in einem solchen porösen Modellmedium, enthält als Ergebnis die Druckverteilung und die Verteilung der Geschwindigkeitsvektoren im Porenraum. Die modellierten Fluidgeschwindigkeitsfelder im Porenraum und die Kopplung mit spezifischen Oberflächeneigenschaften des porösen Mediums, ermöglicht die Modellierung von Sorptions/Desorptionsprozessen unter Berücksichtigung von Ungleichgewichten dieser Reaktionsprozesse durch lokale variable Verweilzeiten der Spezies in der Matrix.

Die Kopplung des Modells PoreFlow mit einem geeigneten geochemischen Modellierungsprogramm würde zu einem Werkzeug führen, in dem das Verhalten von Nichtgleichgewichtsreaktionen im Zusammenhang mit Fluidgeschwindigkeiten im Porenraum und Oberflächeneigenschaften, untersucht werden könnte. Die dynamische Modellierung aller im Porenraum stattfindenden Prozesse (Strömung und Transport, Reaktionen (Sorption, Desorption), Zementationen (Diagenese, Porenzementbildung, dynamische Veränderung des Porenraumes)) wäre ein geeignetes Werkzeug um Abhängigkeiten der Prozesse untereinander zu beschreiben sowie effektive Transportparameter poröser Medien abzuleiten und das Transportverhalten von Substanzen in einer spezifizierten Matrix oder auch das Verhalten der Matrixoberflächen selber, vorherzusagen.

Eine Modellierung von Fluid-Feststoff-Wechselwirkungen würden mit einem solchen Modell auf eine physikalische Basis gestellt.

8. Zusammenfassung

In dieser Arbeit wurde gezeigt, daß die Strömungs- und Transportprozesse im Maßstab des Porenraumes komplexe Prozesse darstellen, die mit Hilfe von deterministischen Gleichungen, wie der Navier-Stokes-Gleichung und der advektiv-diffusiven Transportgleichung beschrieben werden können.

Die Lösung dieser Gleichungen in Systemen mit komplexen Geometrien, wie porösen Medien, bedürfen nach wie vor eines erheblichen numerischen Rechenaufwandes und stellen hohe Anforderungen an die Gleichungslöser. Größere Systeme, wie z.B. Säulenversuche im Labormaßstab können noch nicht direkt simuliert werden, sondern nur repräsentative Ausschnitte aus den Säulenfüllungen. Mit der Weiterentwicklung numerischer- oder alternativer Lösungsverfahren und der Hardware (Supercomputer) wird in absehbarer Zukunft die Simulation größerer Systeme durchaus möglich sein. Die Simulation von gekoppelten Prozessen (siehe Kap. 7, *Ausblick*) ist dann mit vertretbarem Aufwand möglich.

Die in der Praxis eingesetzten Parameter und Hilfsgrößen zur Beschreibung der Eigenschaften eines porösen Mediums, wie z.B. Durchlässigkeit, effektive Porosität, Dispersivität sind durchaus mit zufriedenstellenden Ergebnissen einsetzbar. Sie müssen aber, z.B. bei Modellierung von Grundwasserströmung und Transport mit Vorsicht behandelt werden, da sie Modellierungsergebnisse sehr stark beeinflussen und in der Praxis häufig falsch eingesetzt und interpretiert werden. Die in der Literatur angegebenen empirischen Beziehungen zur Abschätzung der genannten Parameter sind unter strikter Berücksichtigung ihrer Einschränkungen durchaus einsetzbar.

Diese Parameter beschreiben in keiner Weise die Prozesse im Maßstab des Porenraumes und können dafür auch nicht eingesetzt werden. Eingeschränkt lassen sich diese Parameter aus der Modellierung der Strömungs- und Transportprozesse im Maßstab des Porenraumes ableiten, wie in dieser Arbeit gezeigt wurde. Schwierigkeiten bereiten dabei allerdings die skalenabhängigen Größen, wie die Dispersivität. Bei der Transportmodellierung im Porenraum muß die Dispersivität nicht berücksichtigt werden, da sie durch das Geschwindigkeitsfeld im Porenraum und durch die Diffusivität der zu transportierenden Spezies bedingt wird.

Die Matriceigenschaften, insbesondere die Eigenschaften des Porenraumes, bestimmen entscheidend die Strömungs- und Transportprozesse in porösen Medien. Dies wird in den experimentellen Befunden bei Durchströmungs- und Tracerversuchen im Labormaßstab deutlich, selbst bei den in dieser Arbeit verwendeten idealen Versuchsmaterialien (Glaskugeln), bei denen nur die Korngrößenzusammensetzung variiert wurde. Der Einfluß der Änderungen des Porenraumes, durch Variation der Kornverteilung führt auch bei den Modellsimulationen zu deutlichen Änderungen der makroskopisch beschreibenden Transportparameter aufgrund der Änderungen der Strömungsvektoren im Porenraum.

Literaturverzeichnis

- ADLER, P. (1992): Porous media – geometry and transport. Boston (Butterworth-Heinemann).
- AL-LAWATIA, M., SHARPLEY, R., WANG, H. (1999): Second-order characteristic methods for advection-diffusion equations and comparison to other schemes. *Adv. i. Water Res.*, Vol. 22; Nr. 7:741-768.
- AYAZ, F., PEDLEY T.J. (1999): Flow through and particle interception by an infinite array of closely-spaced circular cylinders. *Eur. J. Mech. B/Fluids*, 18, Nr.2; 173-196.
- BEAR, J. (1972): Dynamics of fluids in porous media. (Elsevier).
- BEAR, J., BACHMAT, Y. (1990): Introduction to modeling of transport phenomena in porous media. Dordrecht (Kluwer).
- BERRYMAN, J.G (1987): Relationship between specific surface area and spatial correlation functions for anisotropic porous media. *J. Math. Phys.* 28; 244-245.
- BERRYMAN, J.G, BLAIR, S.C. (1987): Kozeny-Carman relations and image processing methods for estimation darcy's constant. *H. Appl. Phys.* 62; 2221-2228.
- BERRYMAN, J.G, MILTON, G.W. (1988): Microgeometry of random composites and porous media. *J. Phys. D: Appl. Phys.*, 21; 87-94.
- BERRYMAN, J.G. (1992): Effective stress for transport properties of inhomogeneous porous rock. *J. Geophys. Res.* 97; 17409-17424.
- BEYER, W., SCHWEIGER, K.H. (1969): Zur Bestimmung des entwässerbaren Porenanteils der Grundwasserleiter.- *WWT* 19: 57-60, Berlin.
- BISWAL, B., HILFER, R. (1999): Microstructure analysis of reconstructed porous media. *Physica A* 266; 307 ff.
- BISWAL, B., MANWART, C., HILFER, R., BAKKE, S., OREN, P.E. (1999): Quantitative analysis of experimental and synthetic microstructures for sedimentary rock. *Physica A* 273; 452-475.
- BOER, R. (1991): Theorie poröser Medien : historische Entwicklung und gegenwärtiger Stand. Forschungsberichte aus dem Fachbereich Bauwesen / Universität, Gesamthochschule Essen; Bd. 53.
- BUSCH, K.-F. & LUCKNER, L.(1974): Geohydraulik für Studium und Praxis, 2. Aufl.- Stuttgart (Enke).
- BUSCH, K.-F.(1993): Geohydraulik, 3. Aufl.- Berlin (Bornträger).
- CARMAN, P.C. (1937): Fluid flow through granular beds.- *Trans. Inst. Chem. Eng.* 15; 150-166. London.
- CHILAKAPATI, A. (1999): A characteristic-conservative model for Darcian advection. *Adv. i. Water Res.*, Vol. 22, (6); 597-609.
- DAGAN, G. (1989): Flow and Transport in Porous Formations. – 461 S.; Berlin-Heidelberg (Springer).
- DAVIS, C.J. (1973): Statistics and data analysis in geology. New York (Wiley).
- DIN 18123 (1983): Baugrund: Untersuchung von Bodenproben: Bestimmung der Korngrößenverteilung, in: DIN-Taschenbuch 113: Erkundung und Untersuchung des Baugrunds, 4. Aufl. 1988.- Berlin (Beuth-Verlag).
- DIN 18130, Teil 1 (1983): Baugrund: Untersuchung von Bodenproben: Bestimmung des Wasserdurchlässigkeitsbeiwertes, Laborversuche, in: DIN-Taschenbuch 113: Erkundung und Untersuchung des Baugrunds, 4. Aufl. 1988.- Berlin (Beuth-Verlag).
- DULLIEN, F. (1992): Porous media – fluid transport and pore structure. San Diego (Academic Press).

- DURNER, W. (1998): Experimentelle Charakterisierung, Parameteridentifikation und Modellierung von Fließ- und Transportprozessen in strukturierten Böden. Universität Bayreuth, Habilitationsschrift, Universität Bayreuth.
- DURNER, W., SCHULTZE, B., ZURMÜHL, T. (1999): State-of-the-Art in Inverse Modeling of Inflow/Outflow Experiments. Reprint from: VAN GENUCHTEN, TH., LEIJ, F.J., WU, L.: Proc. Int. Workshop on Characterization and Measurement of the Hydraulic Properties of Unsaturated Porous Media, Oct. 22-24, 1997, University of California, Riverside, CA., 1999.
- FREZZOTTI, A. (1999): Monte-Carlo simulation of the heat flow in a dense hard sphere gas. Eur. J. Mech. B/Fluids; 18 (1); 103-119.
- GEBELEIN, H. (1956): Beiträge zum Problem der Kornverteilungen. -Chemie-Ing.-Techn. Nr. 12, S. 773-783.
- GELHAR, L.W., AXNESS, C.L. (1983): Three- dimensional stochastic analysis of macrodispersion in aquifers.- Water Resources Res., 19 (1); 161-180.
- HANTUSH, M.S. (1964): Hydraulics of wells. –Advances on Hydrosience, Vol. 1; 281-332, New York.
- HEINRICH, W. (1994): Defect correction for the advectin-diffusion equation. J. Comp. Meth. Appl. Mech. Eng. 119; 191-197.
- HEINRICH, W. (1996): Defect correction for convection-dominated flow. SIAM, J. Scu. Comp. 17; 1082-1091.
- HERRMANN, H.J. (1995): Die wunderbare Welt der Schüttgüter. Phys. Blätter 51, 1083 ff.
- HERRMANN, H.J. (1997): Script zur Vorlesung „Simulationsmethoden in der Physik“, Universität Stuttgart. Online im Internet: URL: http://www.ica1.uniStuttgart.de/Courses_and_Lectures/index.html [Stand 23.02.2000].
- HERRMANN, H.J. (1999): Statistical models for granular materials. Physica A 270; 82-88.
- HILFER, R. (1991): Geometric and dielectric characterization of porous media, Phys. Rev. B, Vol. 44; 60 ff.
- HILFER, R. (1992): Local porosity theory for flow in porous media. Phys. Rev. B, Vol. 45; 7115 ff.
- HILFER, R.. (1996): Transport and Relaxation Phenomena in Porous Media. Adv. Chem.- Phys., Vol. 92.
- HILFER, R.. (1998): Macroscopic equations of motion for two phase flow in porous media. Physical Rev. E, 58; 2090.
- HÖFLER, K. (1997): Räumliche Simulation von Zweiphasenflüssen. Diplomarbeit, Universität Stuttgart, unveröffentlicht.
- HOFMANN, T. (1998): Kolloidale und suspendierte Partikel: Herkunft, Transport und Relevanz von mobilen Festphasen im Hinblick auf die künstliche Grundwasseranreicherung, in: Dortmunder Beiträge zur Wasserforschung. – Veröffentlichungen des Inst. für Wasserforschung GmbH Dortmund und der Dortmunder Energie- und Wasserversorgung GmbH, Nr. 56. – Dortmund, 226 S.
- HÖLTING, B. (1989): Hydrogeologie, 3. Aufl.- Stuttgart (Enke).
- HOLZBECHER, E. (1996): Modellierung dynamischer Prozesse in der Hydrogeologie: Grundwasser und ungesättigte Zone; eine Einführung. – Berlin (Springer).
- HORNUNG, U. (1997): Homogenization and porous media. New York (Springer).
- HORSTMANN, B. (1999). Experimentelle Untersuchungen und modellhafte Umsetzung zu Permeabilitätsänderungen in porösen Gesteinen. Düsseldorf, VDI. Reihe 7; 1-180.
- JACOB, C.E. (1950): Flow of Groundwater.- In: H. ROUSE: Engineering hydraulics. 321-386. New York (Wiley).

- JAKOWSKI, A.E. (1995): Ermittlung der Dispersion und anderer geohydraulischer Parameter aus Markierungsversuchen in Karst- und Kluftgrundwasserleitern Baden-Württembergs.- Diss. Techn. Hochschule Darmstadt, Inst. f. Geowiss. und Geographie; Darmstadt.
- JURY, W. & GARDNER, W.-H. et al. (1991): Soil physics, 5th Edition.- New York (John Wiley & Sons, Inc.).
- KEIL, J. F., RIECKMANN, C. (1994): Optimization of three-dimensional catalyst pore structure. Chem. Eng. Sci. 49; 4811-4822.
- KINZELBACH, W. & RAUSCH, R. (1995): Grundwassermodellierung: Eine Einführung mit Übungen. – Berlin (Bornträger).
- KNOKE, H. (1992): Gesteinsphysikalische Eigenschaften von Fest- und Lockergesteinen und ihre Umsetzung als Regelwerk in ein Expertensystem. –Berichte Geol.-Pal. Inst. Univ. Kiel. Nr. 54, 122 S., Kiel.
- KNOKE, H., ENZMANN, F., THOMAS, L., HORSTMANN, B. PEKDEGER, A., SCHENK, D. (1997): XPS-FROCKI - Bedienungsanleitung und Referenzhandbuch.- 250 S., DGMK-Ber. 436-2; Hamburg.
- KOZENY, J.A. (1928): Die Durchlässigkeit des Bodens. –Kulturtechniker, 35: 478-486, Breslau.
- KRAFczyk, M. (1995): Simulation von Strömungen mit Gittergasmethode. – Berichte aus dem Bauwesen. Aachen (Shaker).
- KRUSEMAN, G.P., DE RIDDER, N.A. (1994): Analysis and evaluation of pumping test data. ILRI publ. 47, sec. ed., Netherland, Wageningen.
- LANGGUTH, H.-R. & VOIGT, R. (1980): Hydrogeologische Methoden.- Berlin (Springer).
- LEGE, T., KOLDITZ, O. & ZIELKE, W. (1996): Handbuch zur Erkundung des Untergrundes von Deponien und Altlasten, Band 2: Strömungs- und Transportmodellierung. Berlin, Heidelberg, New York (Springer).
- LEPPMEIER, M. (1997): Kugelpackungen von Kepler bis heute. Wiesbaden (Vieweg).
- MANWART, C., HILFER, R. (1999): Reconstruction of random media using Monte-Carlo methods. Physical Rev. E, 59; 5596.
- MAROTZ, G. (1968): Technische Grundlagen einer Wasserspeicherung im natürlichen Untergrund.- Mitt. Inst. Wasserwirtschaft, Grund- und Wasserbau, 9, Stuttgart.
- MARTYS, N.S., GARBOCZI E.J. (1992): Length scales relating the fluid permeability and electrical conductivity in random two-dimensional model porous media. Phys. Rev. B 46; 6080-6090.
- NÜTZMANN, G., THIELE, M., MACIEJEWSKI, S., JOSWIG, K. (1998): Inverse modelling techniques for determining hydraulic properties of coarse-textured porous media by transient outflow methods. Adv. i. Water Res., Vol. 22 (3); 274-284.
- PAPE, H., RIEPE, L., SCHOPPER, J.R. (1982): A pigeon-hole model for relating permeability to specific surface: The Log Analyst, 23 (1); 5-13; Errata: The Log Analyst, 23(2); 50.
- PAPE, H., RIEPE, L., SCHOPPER, J.R. (1984): The role of fractal quantities, as specific surface and tortuosities, for physical properties of porous media: Particle Characterization, 1; 66-73.
- PAPE, H., RIEPE, L., SCHOPPER, J.R. (1987): Theory of self-similar network structures in sedimentary and igneous rocks and their investigation with microscopical methods: J. Microscopy, 148; 121-147.
- PFINGSTEN, W. (1995): Efficient modeling of reactive transport phenomena by a multispecies random walk coupled to chemical equilibrium. Nuclear Technology 116 (Nov); 208-221.
- PFINGSTEN, W., SHIOTSUKI, M. (1998): Modelling cement degradation experiment by a hydraulic transport and chemical equilibrium coupled code. Mat. Res. Soc. Symp. Proc., 506; 805-812.
- POTAPOV, A.V., CAMPBELL, C.S. (1998): A fast model for the simulation of non-round particles. Granular Matter, 1; 9-14; Berlin-Heidelberg (Springer).

- PRESS, W. H. e. a. (1992): Numerical Recipes in FORTRAN (part II). The Art of Scientific Computing. Cambridge, Cambridge University Press.
- PRESS, W. H., TEUKOLSKY, S.A., et al. (1992): Numerical Recipes in FORTRAN (part I). The Art of Scientific Computing. Cambridge, Cambridge University Press.
- QUINTANILLA, J., TORQUATO, S. (1997): Local volume fraction fluctuations in random media. J. of Chem. Phys.; Vol. 106 (7).
- QUINTANILLA, J., TORQUATO, S. (1999): Percolation for a model of statistically inhomogeneous random media. J. of Chem. Phys.; Vol. 111 (13).
- RAGE, T. (1996): Studies of Tracer Dispersion and Fluid Flow in Porous Media. Dep. of Physics. Oslo, Norway, University of Oslo.
- RIAHI, D.N. (1999): Effect of Surface Corrugation on Convection in a Three-Dimensional Finite Box of Fluid Saturated Porous Material. Theoret. Comput. Fluid Dynamics; 13; 189-208; Berlin-Heidelberg (Springer).
- RICHARD, P., OGER, L., LEMAÎTRE, J., SAMSON, L., MEDVEDEV, N. (1999): Application of the Voronoï tessellation to study transport and segregation of grains inside 2D and 3D packings of spheres. Granular Matter 1; 203-211; Berlin-Heidelberg (Springer).
- RICKMANN, C. (1997): Lösung des Problems der Diffusion und Reaktion in dreidimensionalen Porennetzwerken für allgemeine Kinetiken. Technische Universität Hamburg-Harburg, Dissertation, Universität Hamburg.
- ROBERTS, A.P., TORQUATO, S. (1999): Chord-distribution functions of three-dimensional random media: Approximate first-passage times of Gaussian processes. Phys. Rev. E, Vol. 59 (5).
- SAHIMI, M. (1993): Flow phenomena in rocks: from continuum models to fractals, percolation, cellular automata, and simulated annealing. Rev. Mod. Phys., Vol. 65 (4).
- SANO, T., MAKIZONO, K. (1998): Unsteady mixed convection around a sphere in a porous medium at low Peclet numbers. Fluid Dyn. Res. 23; 45-61.
- SCHÄFER, T. (1998): Mobiler Feststofftransport bei der Uferfiltration und der künstlichen Grundwasseranreicherung - Laborversuche und Feldstudien. Dissertation Mainz 1998.- Göttingen (Cuvillier Verlag).
- SCHEIDEGGER, A.E. (1961): General theory of dispersion in porous media. J. of Geophys. Res., Vol. 66 (10); 3273-3278.
- SCHINNER, A (1999): Fast algorithms for the simulation of polygonal particles. Granular Matter 2; 35-43; Berlin-Heidelberg (Springer).
- SCHÖPFER, C. (1989): Vergleich numerischer Modelle zur Simulation des Stofftransportes in Porengrundwasserleitern. Institut für Geophysik. Clausthal, Technische Universität Clausthal: 133.
- SCHOTTING, R.J., MOSER, H., HASSANIZADEH, S.M. (1999): High-concentration-gradient dispersion in porous media: experiments, analyses and approximations. Adv. i. Water Res., Vol. 22 (7); 665-680.
- SCHWARZER, S. (1995): Sedimentation and flow through porous media: simulating dynamically coupled discrete and continuum phases. Phy. Rev. E, 52 (6); 6461-6475.
- SKJETNE, E., AURIAULT, J.L. (1999): New insights on steady, non-linear flow in porous media. Eur. J. Mech. B/Fluids, 18 (1); 131-145.
- STALLING, D. (1998): Fast texture-based algorithms for vector field visualization. Dissertation, Konrad-Zuse-Zentrum f. Informationstechnik, FU Berlin.
- STOYAN, D. (1993): Stochastik für Ingenieure und Naturwissenschaftler. Eine Einführung in die Wahrscheinlichkeitstheorie und die mathematische Statistik. Berlin (Akademie Verlag).

- STOYAN, D., KENDALL, W.S., MECKE, J. (1995): Stochastic geometry and its applications. Chichester (Wiley).
- SUH, J.-C., KIM, K.-S. (1999): A vorticity-velocity formulation for solving the two-dimensional Navier-Stokes equation. Fluid Dyn. Res. 25; 195-216.
- TODD, D.K. (1960): Ground water hydrology. New York (Wiley).
- TORQUATO, S., KIM, I.C., CULE, D. (1999): Effective conductivity, dielectric constant, and diffusion coefficient of digitized composite media via first-passage-time equations. J. of Appl. Phys., Vol. 85 (3).
- TORQUATO, S., TRUSKETT, T.M., DEBENEDETTI, P.G. (2000): Is random close packing of spheres well defined?. Phys. Rev. Letters, 84 (10).
- TUREK, S. (1996): Numerik in der Strömungsmechanik: Numerische Effizienz versus Gigaflops. Phy. Bl. 52 (11); 1137-1139.
- TUREK, S. (1998): Efficient solvers for incompressible flow problems: An algorithmic approach in view of computational aspects. Inst. f. Angewandte Mathematik, Universität Heidelberg. Online im Internet: URL: <http://gaia.iwr.uni-heidelberg.de/~ture> [Stand 15.02.1999].
- TUREK, S. (1998): Konsequenzen eines numerischen „Elch Tests“ für Computersimulationen. Discussion paper. Online im Internet: URL: <http://gaia.iwr.uni-heidelberg.de/~ture> [Stand 15.02.1999].
- VIDALES, A.M., RICCARDO, J.L., ZGRABLICH, G. (1998): Pore-level modelling of wetting on correlated porous media. J. Phys. D: Appl. Phys. 31; 2861-2868.
- WALZENBACH, J. (1991): Mineralöle in Locker- und Festgesteinen. Untersuchungen zur Durchlässigkeit, Saugspannung und Kapillarität.- Schr. Angew. Geol. Karlsruhe. 12; 1-152. Karlsruhe.
- WIDJAJAKUSUMA, J., MANWART, C., BISWAL B, HILFER, R. (1999): Exact and approximate calculations for the conductivity of sandstones. Physica A 270; 325-331.
- WILLIAMS, J. R., O'CONNOR, R. M. (1995): A linear complexity intersection algorithm for diskrete element simulation of arbitrary geometries, Eng. Computations, 12; 185-201.
- XU, M., ECKSTEIN, Y. (1997): Statistical Analysis of the Relationships Between Dispersivity and Other Physical Properties of Porous Media. Hydrogeology Journal, Vol. 5 (4); 4-20.

Algorithmus zur Wahrscheinlichkeitsauswahl einer Kugel

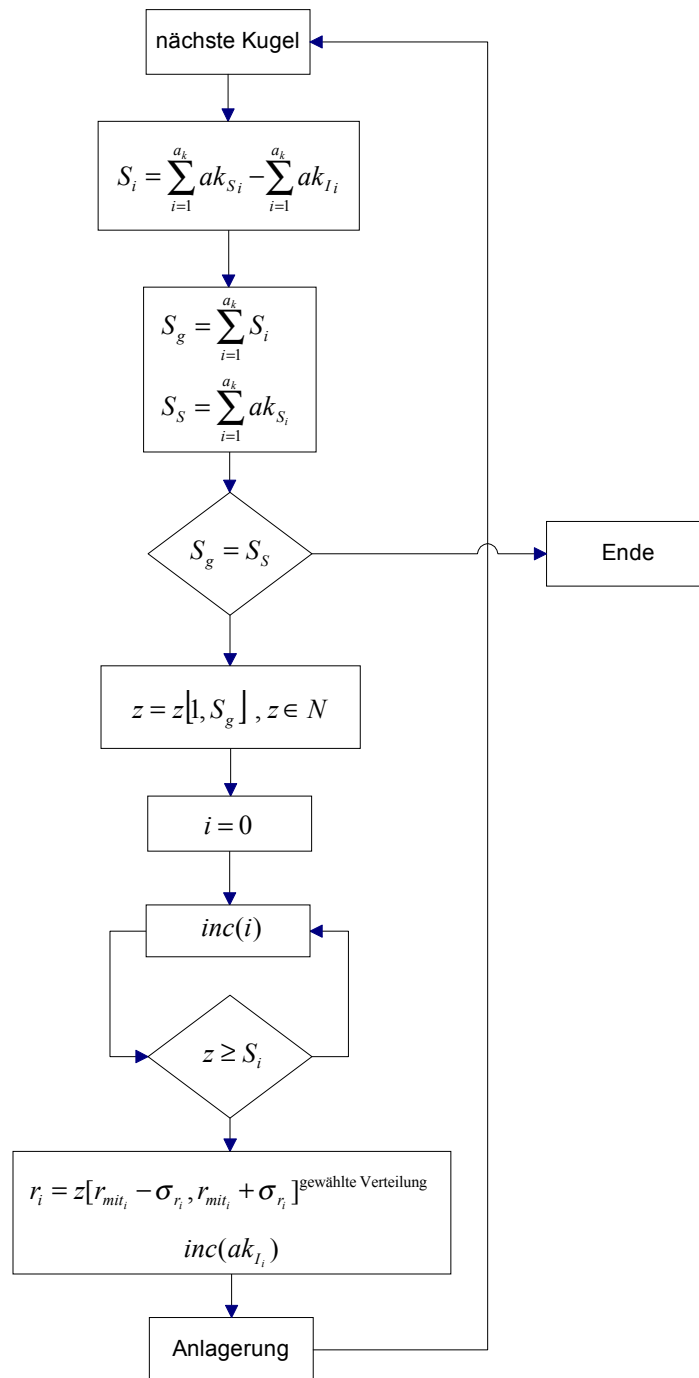


Abb. A1.1: Algorithmus zur Wahrscheinlichkeitsauswahl eines Kugelradius

Abbildungen Konfiguration des Testproblems

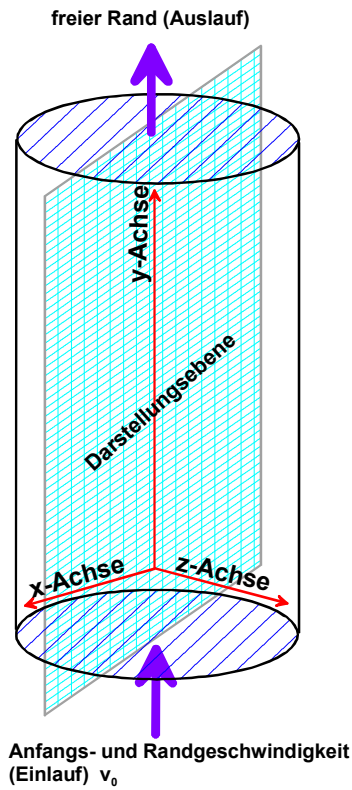


Abb. A2.1: Konfiguration des Tests mit Darstellungsebene

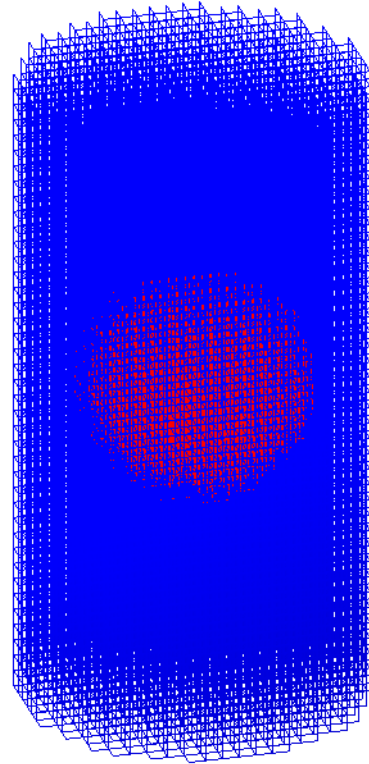


Abb. A2.2: 3D Netz Ansicht mit Kugel

Darstellung Ergebnisse Beispielrechnung 1

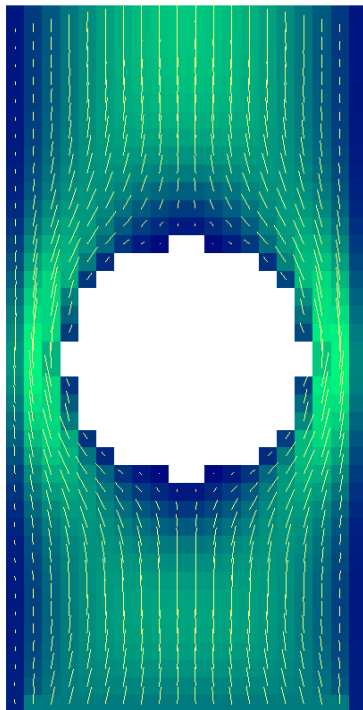


Abb. A2.3: Geschwindigkeitsverteilung und Geschwindigkeitsvektorfeld im Vertikalprofil

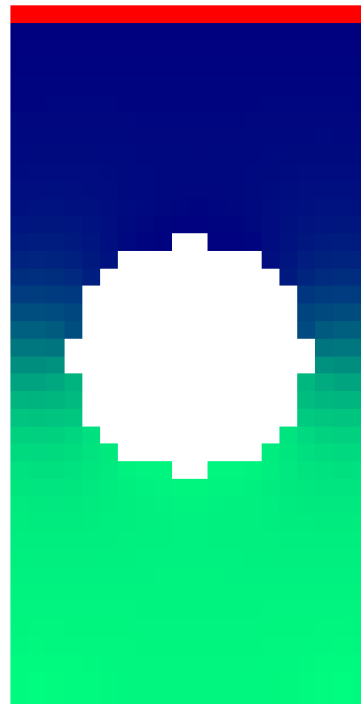


Abb. A2.4: Druckverteilungsfeld im Vertikalprofil

Darstellung Ergebnisse Beispielrechnung 4

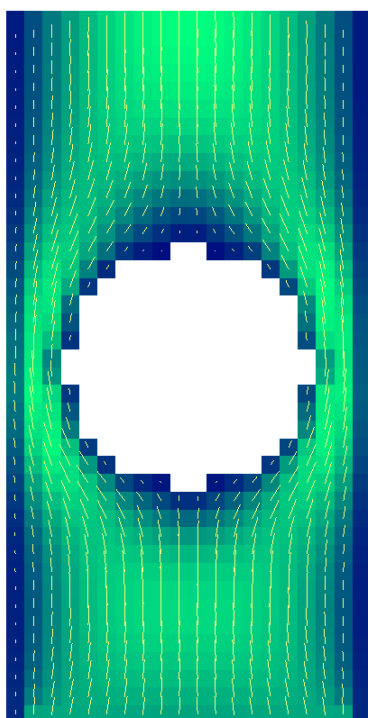


Abb. A2.5: Geschwindigkeitsverteilung und Geschwindigkeitsvektorfeld im Vertikalprofil

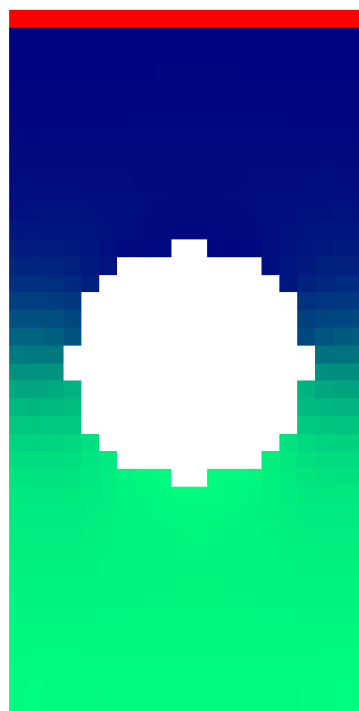


Abb. A2.6: Druckverteilungsfeld im Vertikalprofil

Darstellung Ergebnisse Beispielrechnung 5

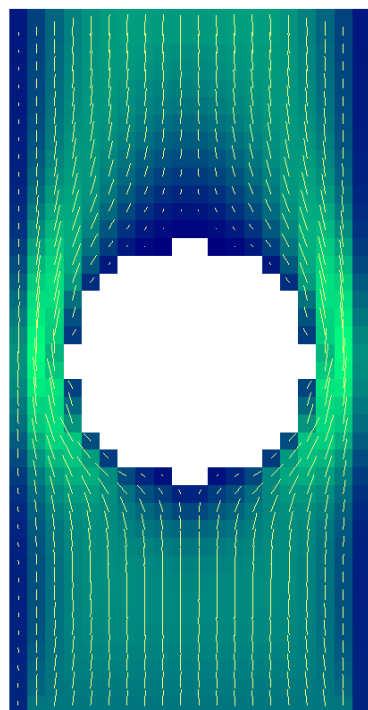


Abb. A2.7: Geschwindigkeitsverteilung und Geschwindigkeitsvektorfeld im Vertikalprofil

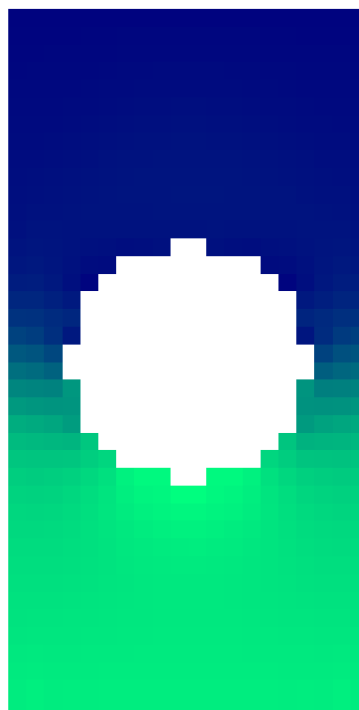


Abb. A2.8: Druckverteilungsfeld im Vertikalprofil

Darstellung Ergebnisse Beispielrechnung 7

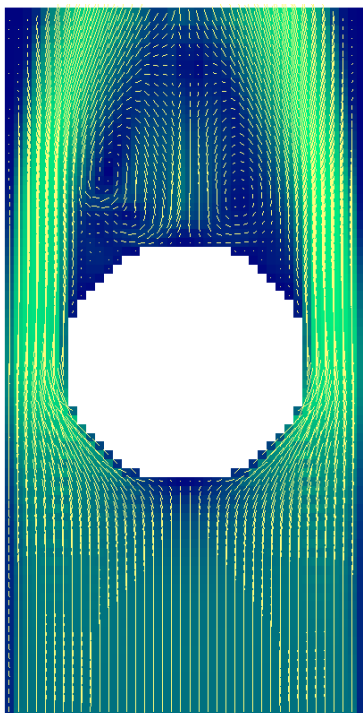


Abb. A2.9: Geschwindigkeitsverteilung und Geschwindigkeitsvektorfeld im Vertikalprofil

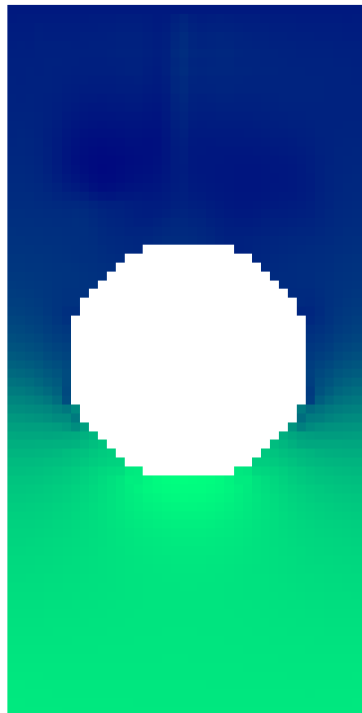


Abb. A2.10: Druckverteilungsfeld im Vertikalprofil

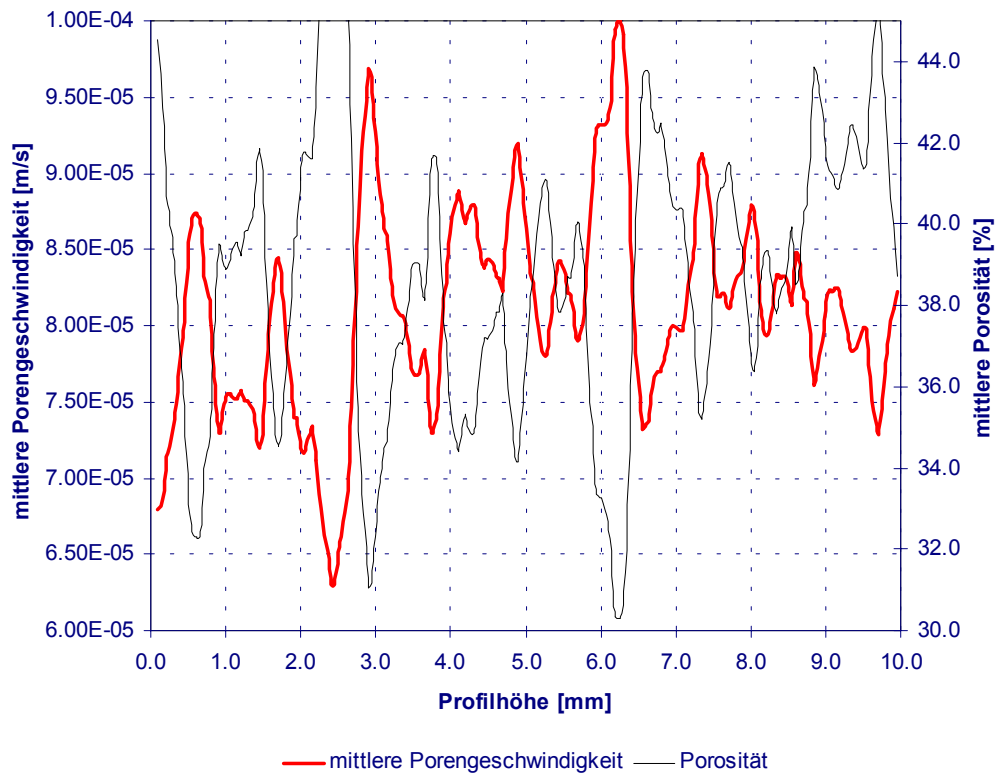
Darstellung Ergebnisse Kugelgemisch 1

Abb. A3.1: Zusammenhang Porengeschwindigkeit/Porosität im Profil des Zylinders

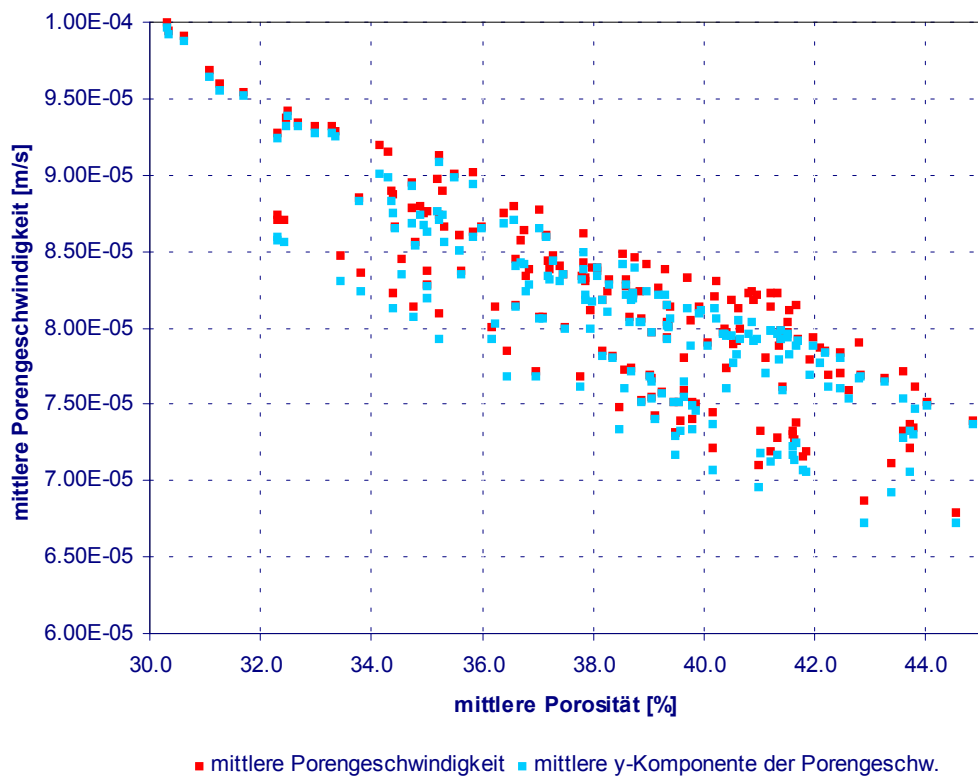


Abb. A3.2: Zusammenhang Porengeschwindigkeit/Porosität

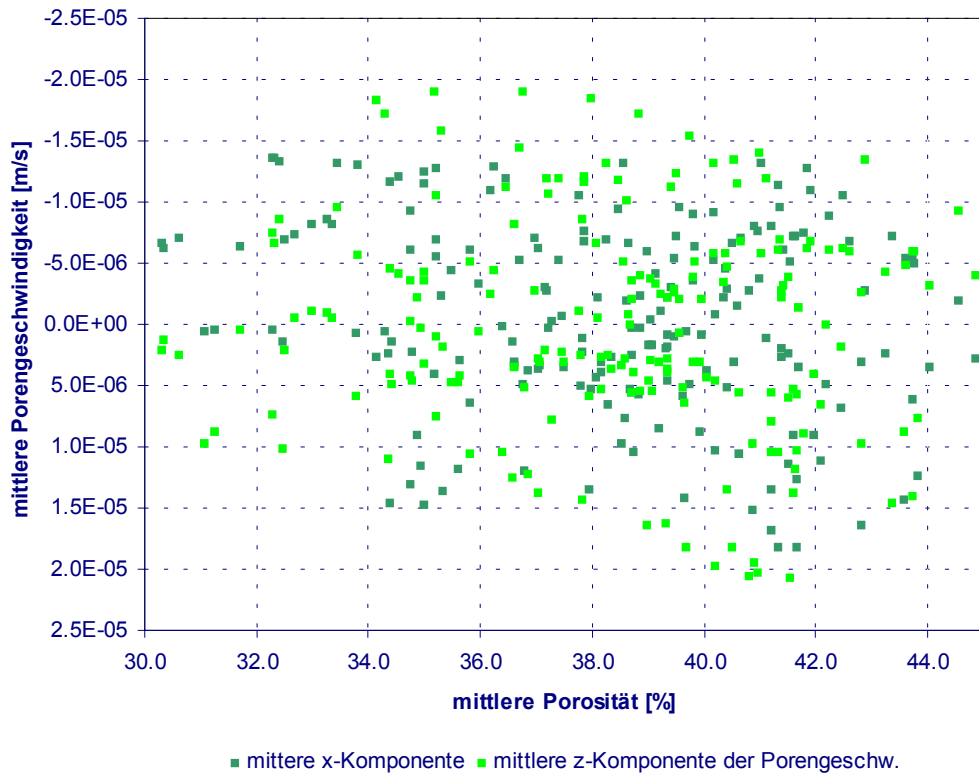


Abb. A3.3: Zusammenhang Poregeschwindigkeit der x,z-Komponenten/Porosität

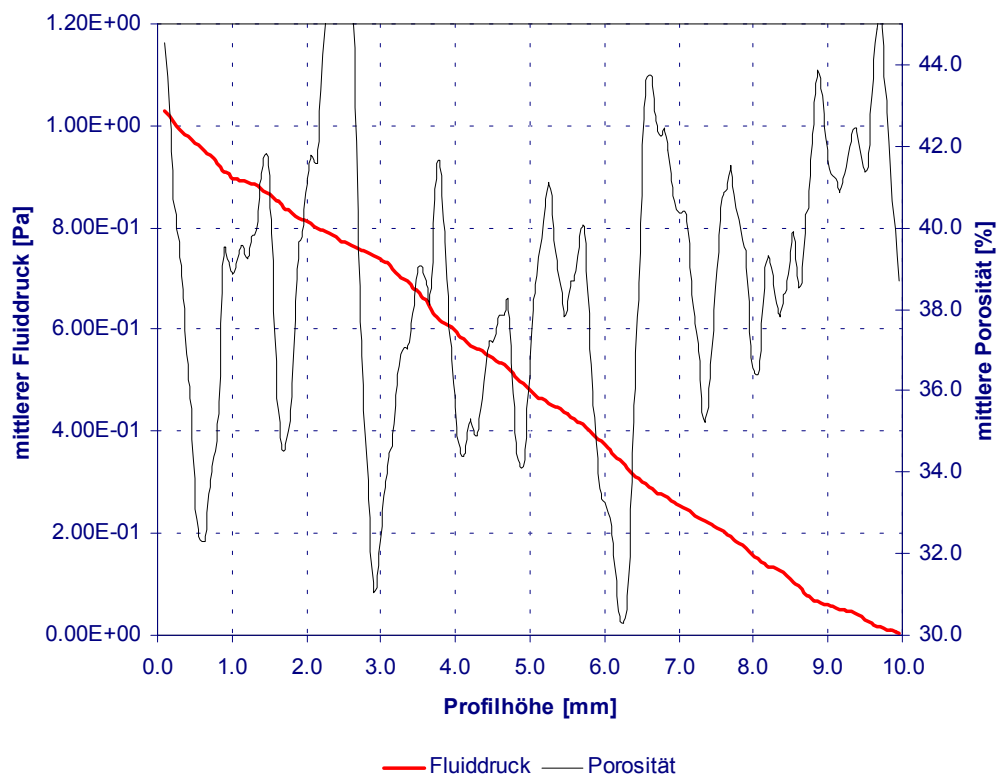


Abb. A3.4: Druckprofil im Zylinder und Porosität

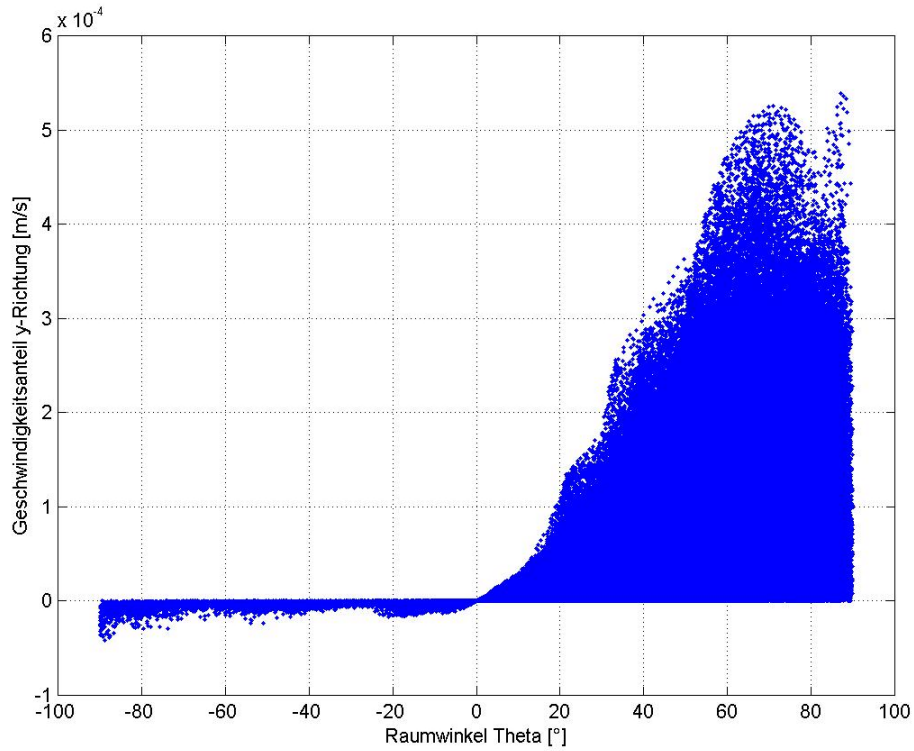


Abb. A3.5: Darstellung des Raumwinkels Theta als Funktion der y-Komponente der Porengeschwindigkeit

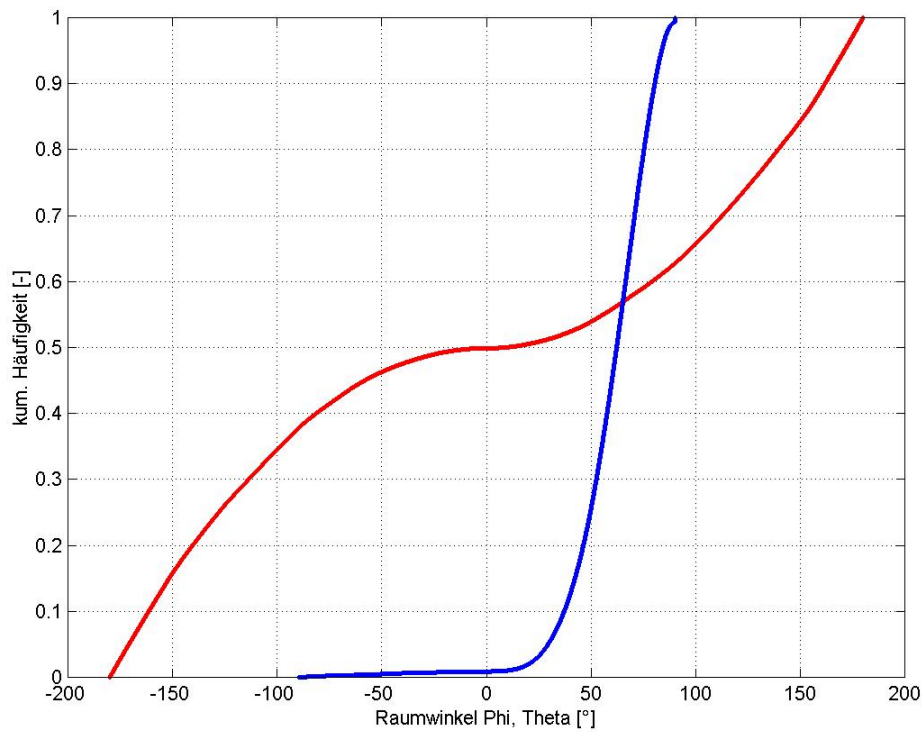


Abb. A3.6: Häufigkeitsverteilung der Raumwinkel

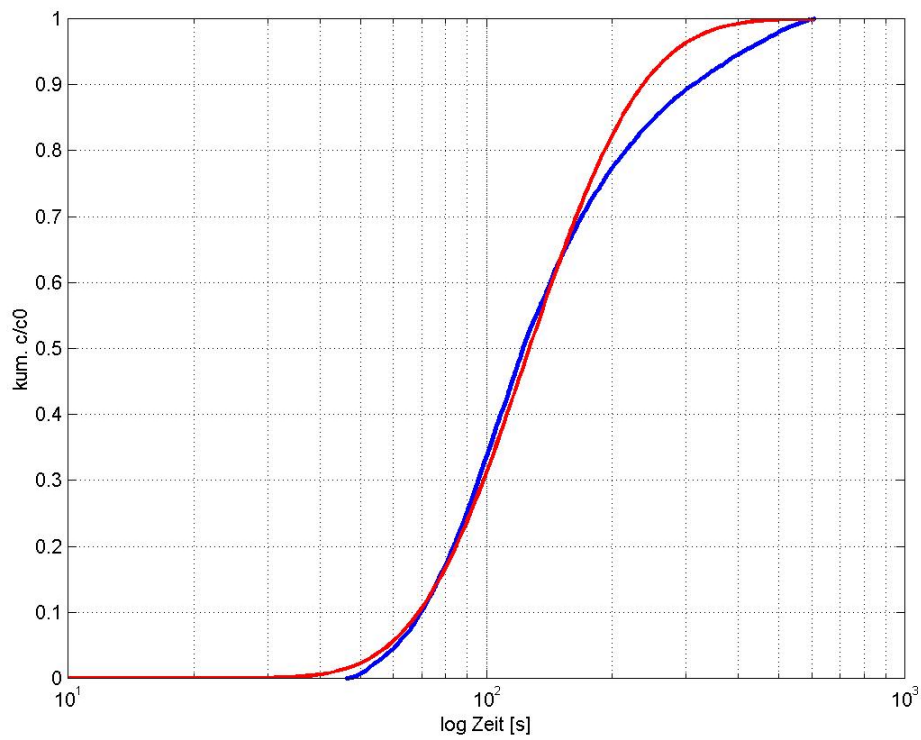


Abb. A3.7: Tracerdurchbruch als Summenkurve im Vergleich mit analytischer Lösung

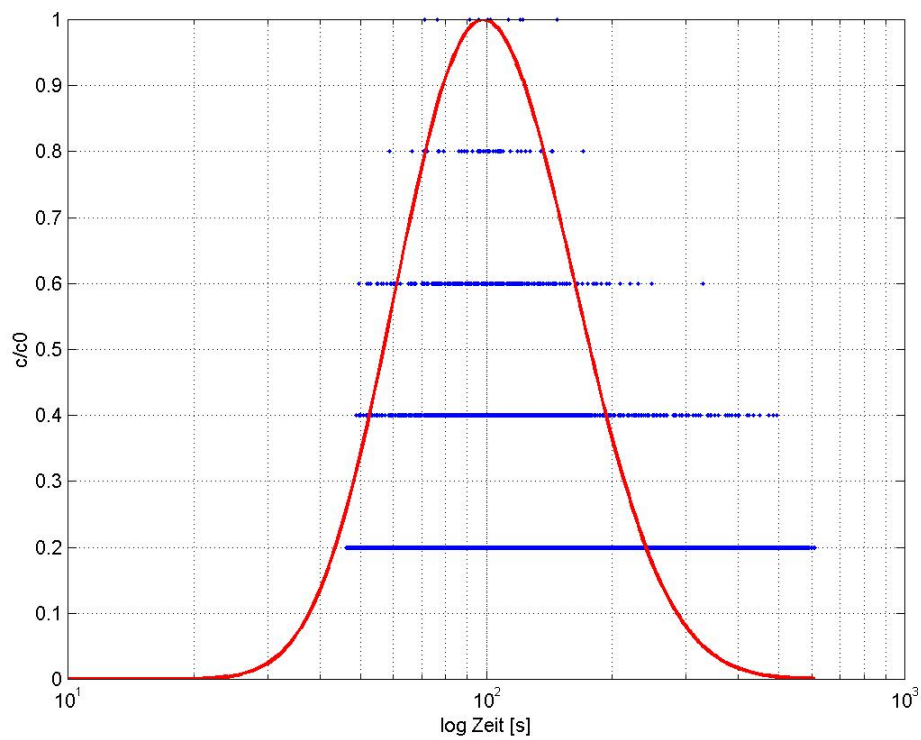


Abb. A3.8: Tracerdurchbruch im Vergleich mit analytischer Lösung

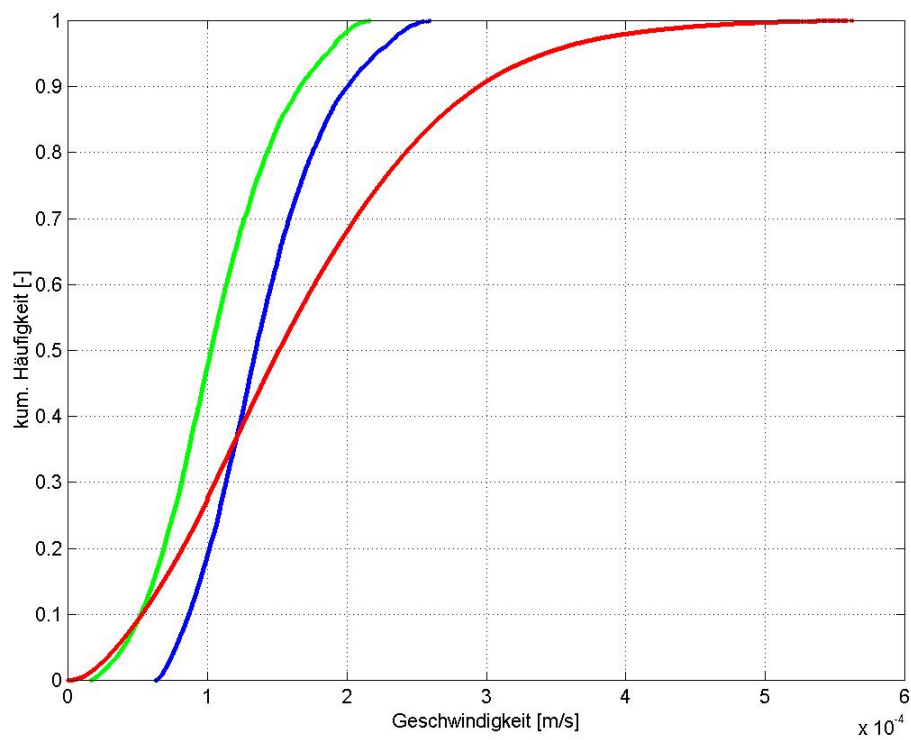


Abb. A3.9: Vergleich der Geschwindigkeitsverteilungen

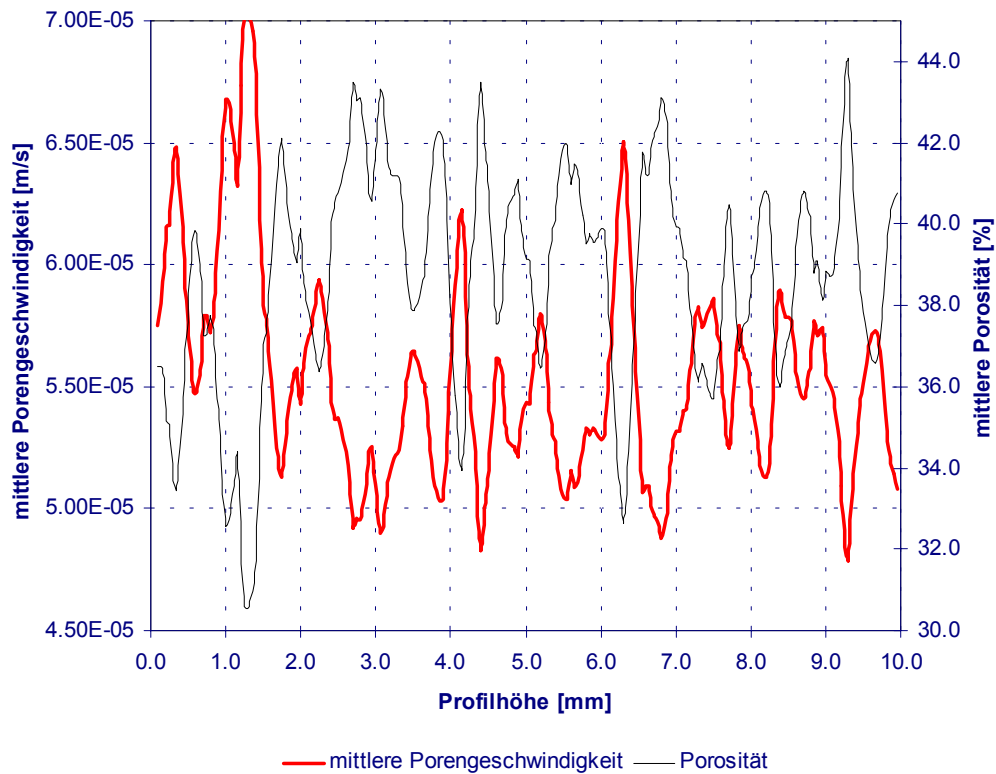
Darstellung Ergebnisse Kugelgemisch 2

Abb. A4.1: Zusammenhang Porengeschwindigkeit/Porosität im Profil des Zylinders

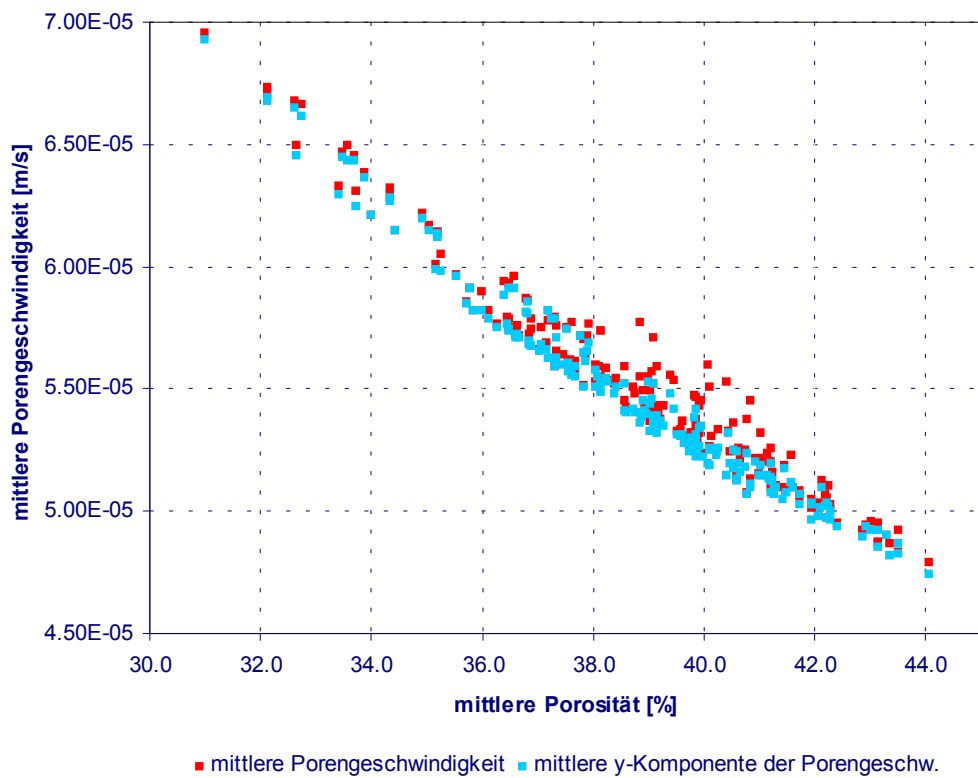


Abb. A4.2: Zusammenhang Porengeschwindigkeit/Porosität

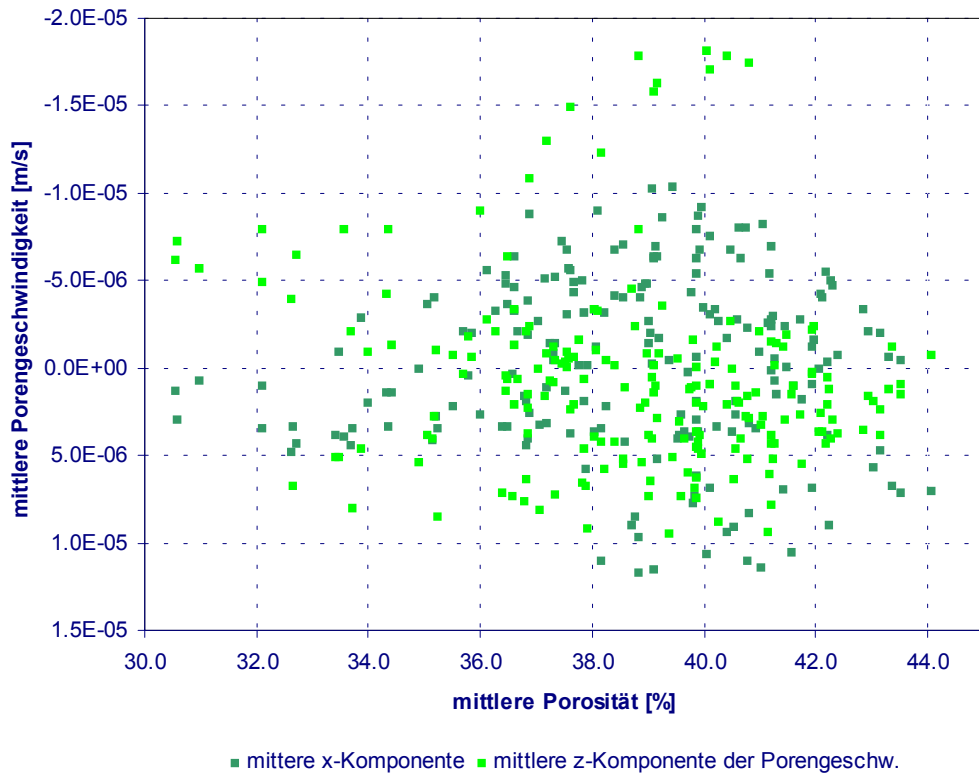


Abb. A4.3: Zusammenhang Poregeschwindigkeit der x,z-Komponenten/Porosität

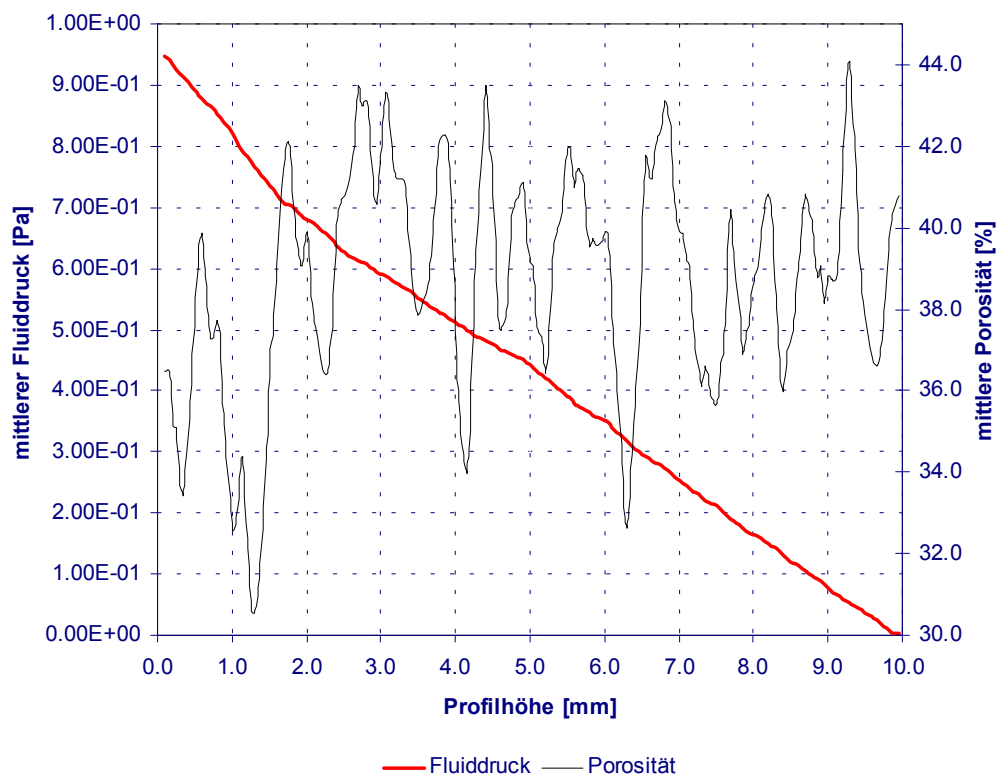


Abb. A4.4: Druckprofil im Zylinder und Porosität

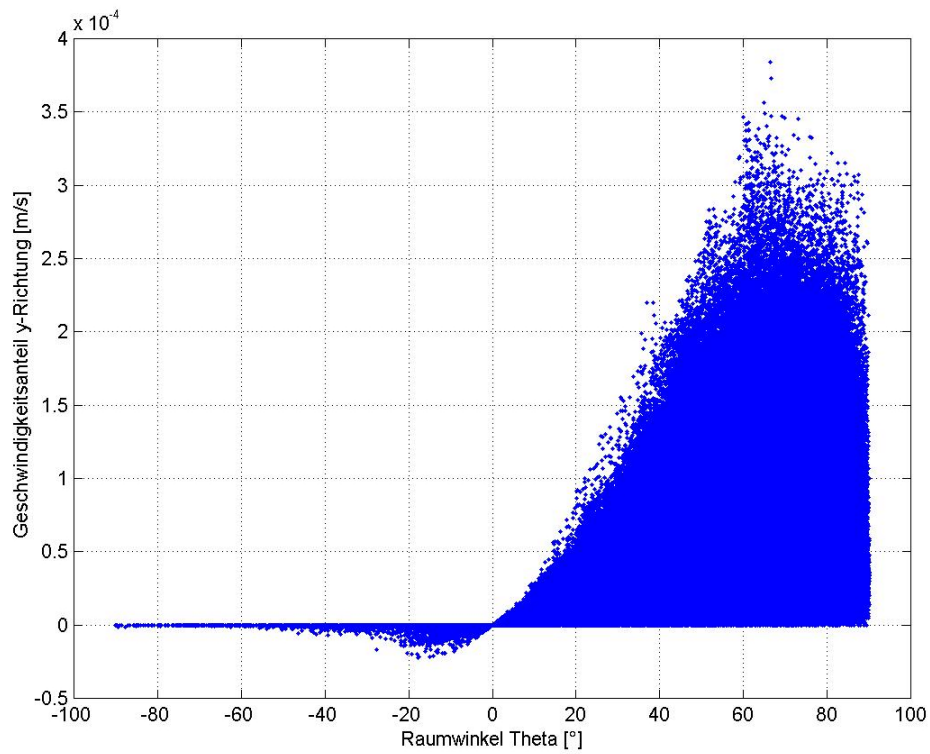


Abb. A4.5: Darstellung des Raumwinkels Theta vs. y-Komponente der Porengeschwindigkeit

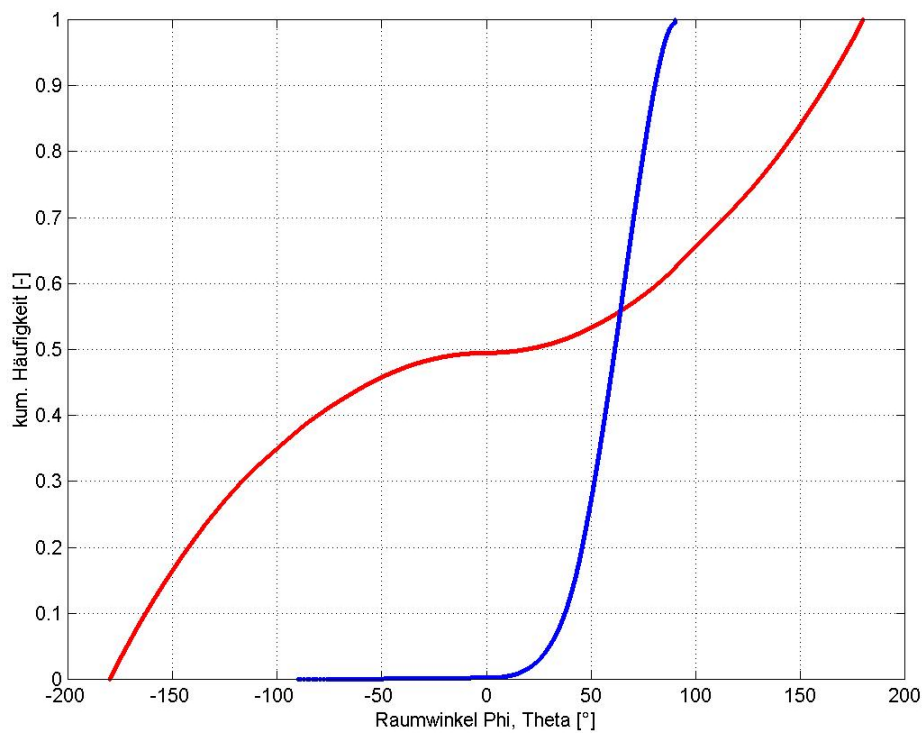


Abb. A4.6: Häufigkeitsverteilung der Raumwinkel

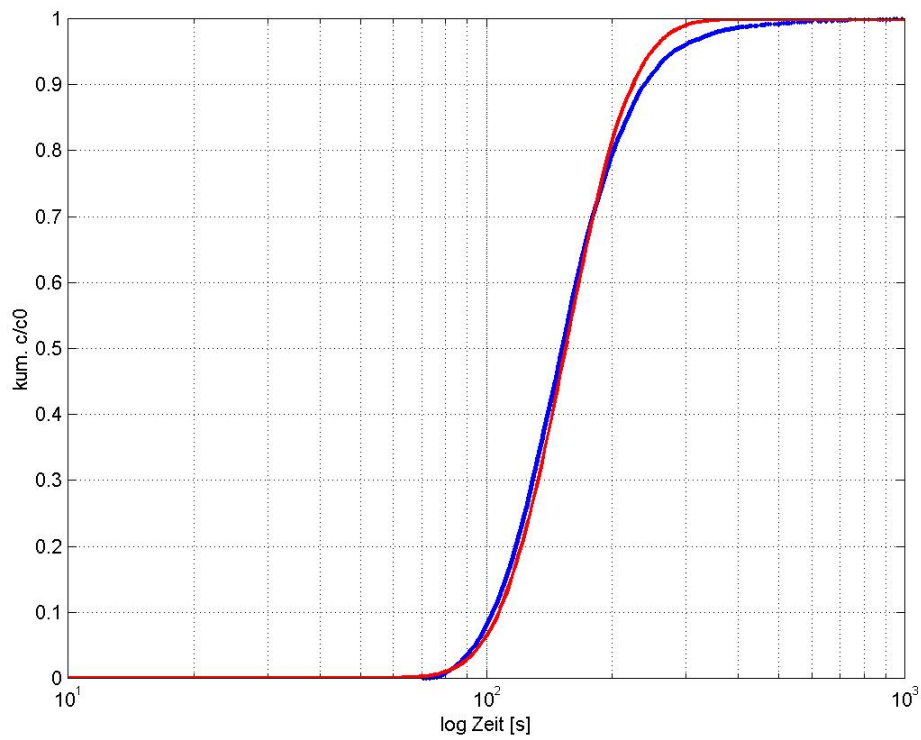


Abb. A4.7: Tracerdurchbruch als Summenkurve im Vergleich mit analytischer Lösung

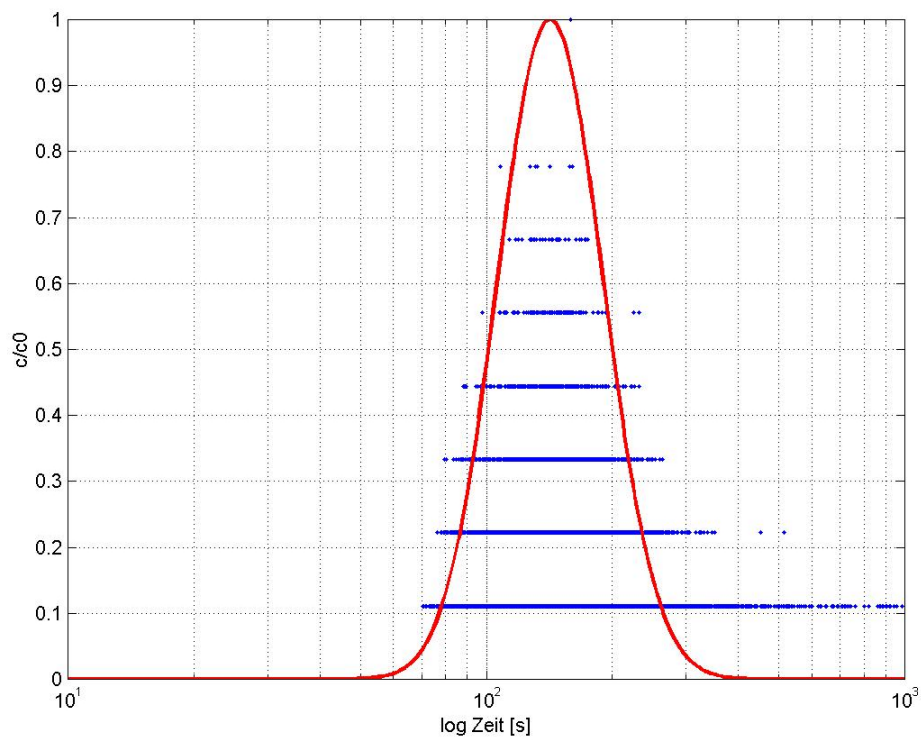


Abb. A4.8: Tracerdurchbruch im Vergleich mit analytischer Lösung

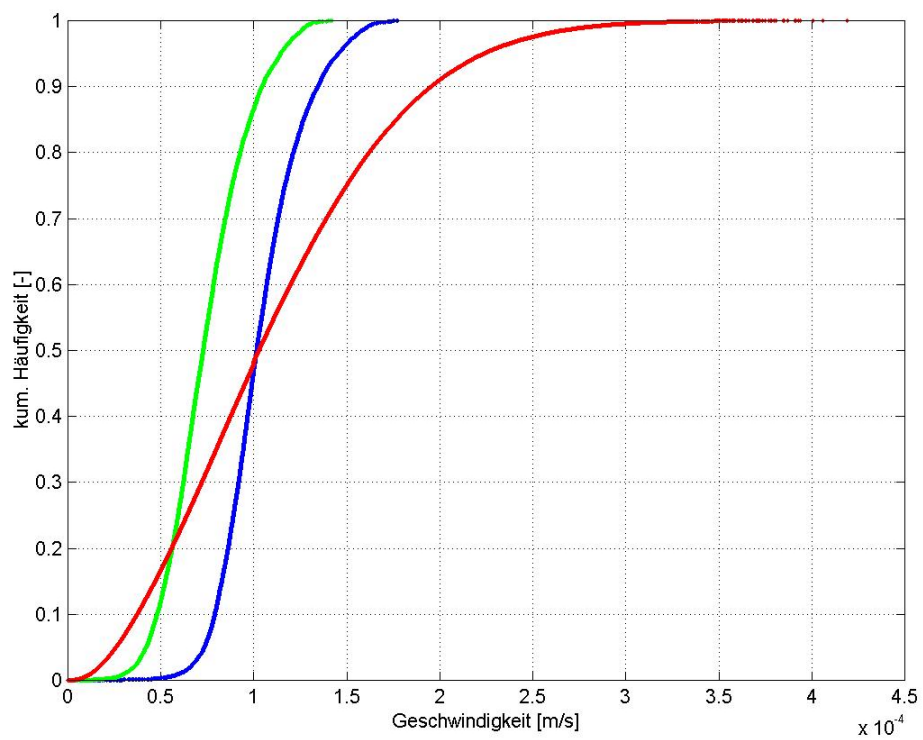


Abb. A4.9: Vergleich der Geschwindigkeitsverteilungen

Darstellung Ergebnisse Kugelgemisch 3

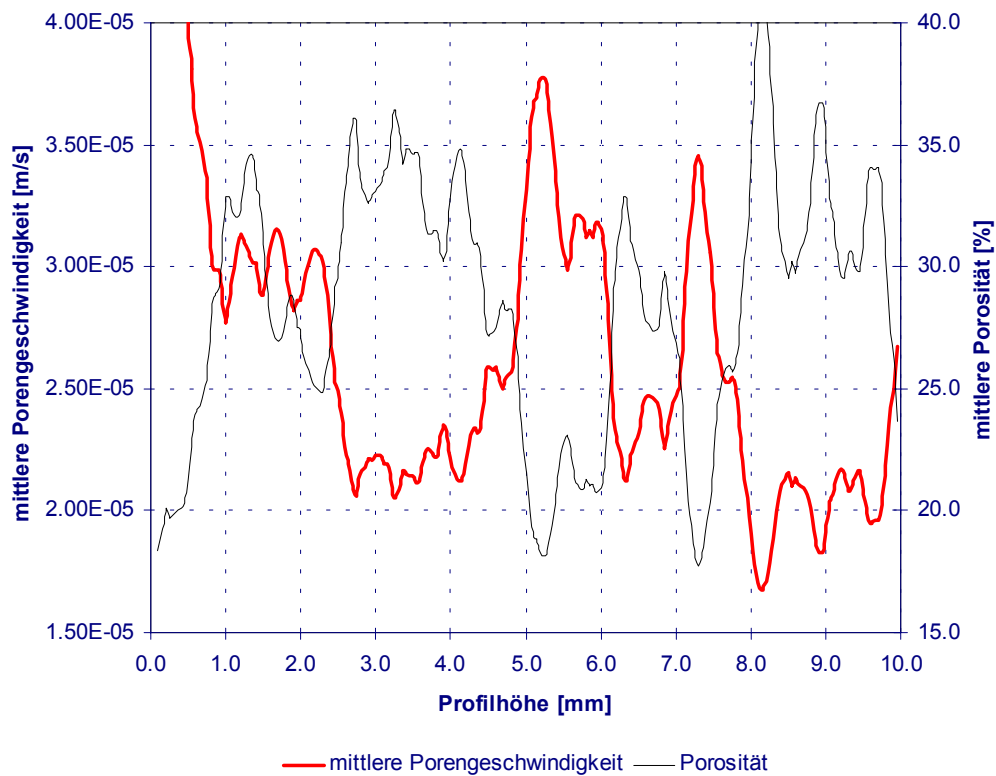


Abb. A5.1: Zusammenhang Porengeschwindigkeit/Porosität im Profil des Zylinders

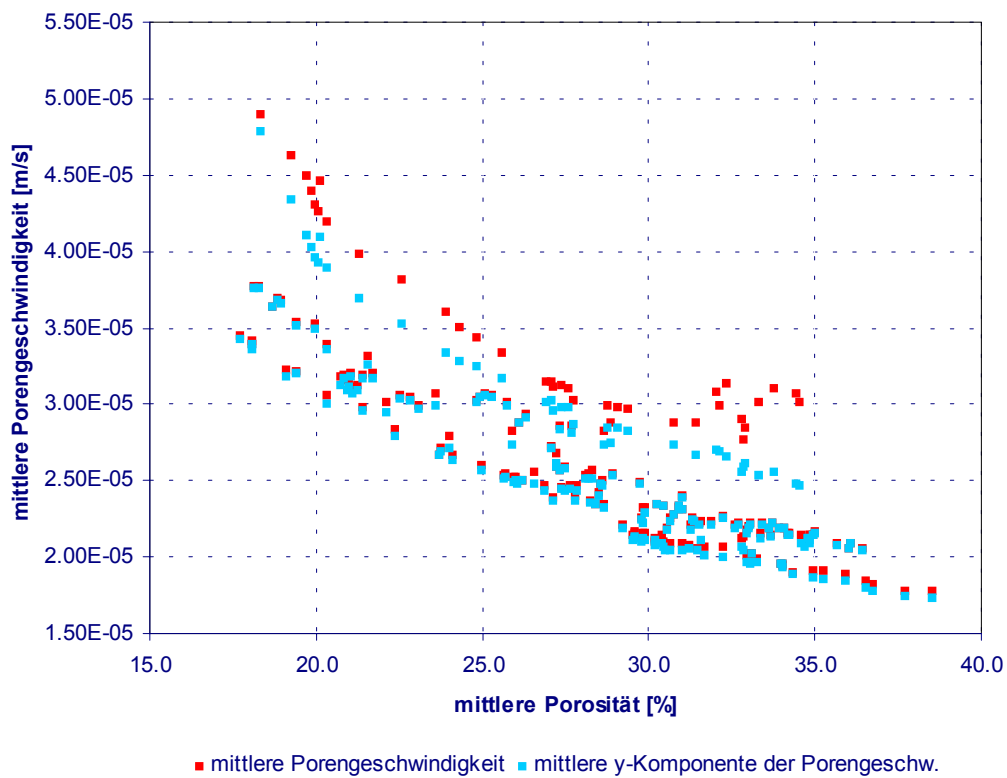


Abb. A5.2: Zusammenhang Porengeschwindigkeit/Porosität

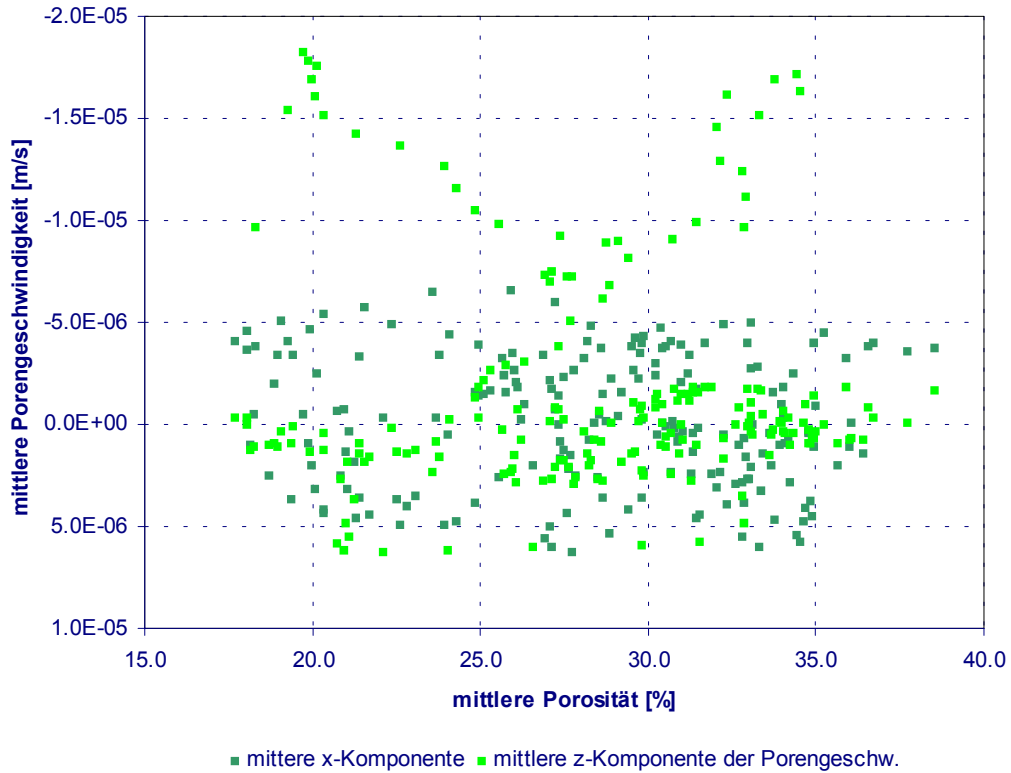


Abb. A5.3: Zusammenhang Poregeschwindigkeit der x,z-Komponenten/Porosität

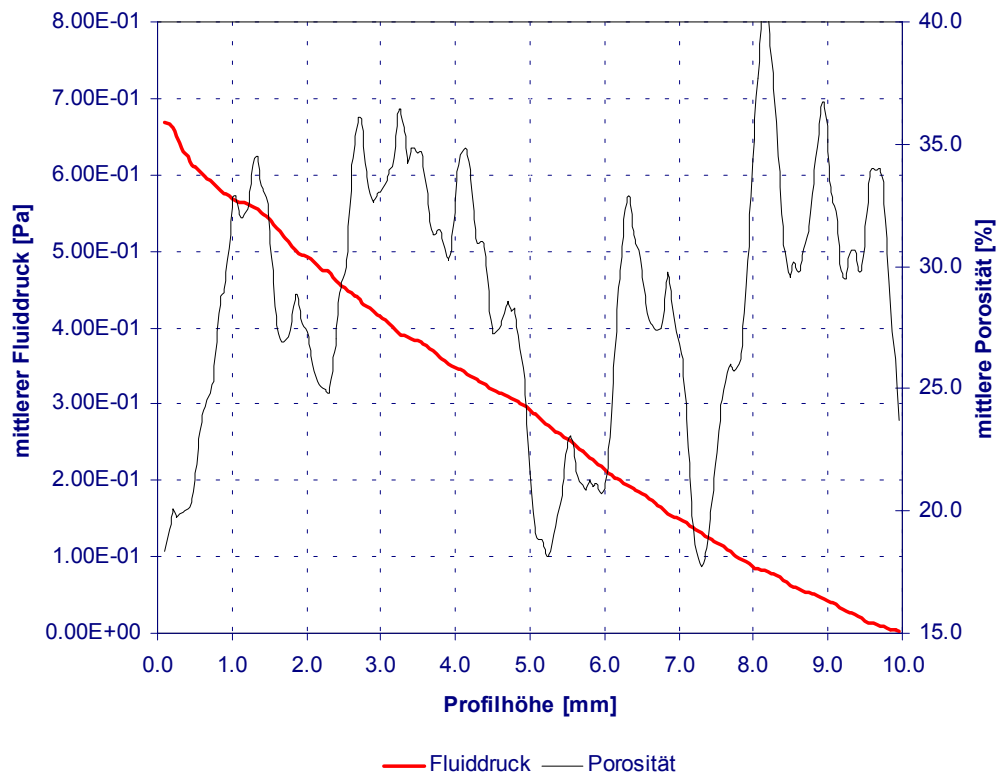


Abb. A5.4: Druckprofil im Zylinder und Porosität

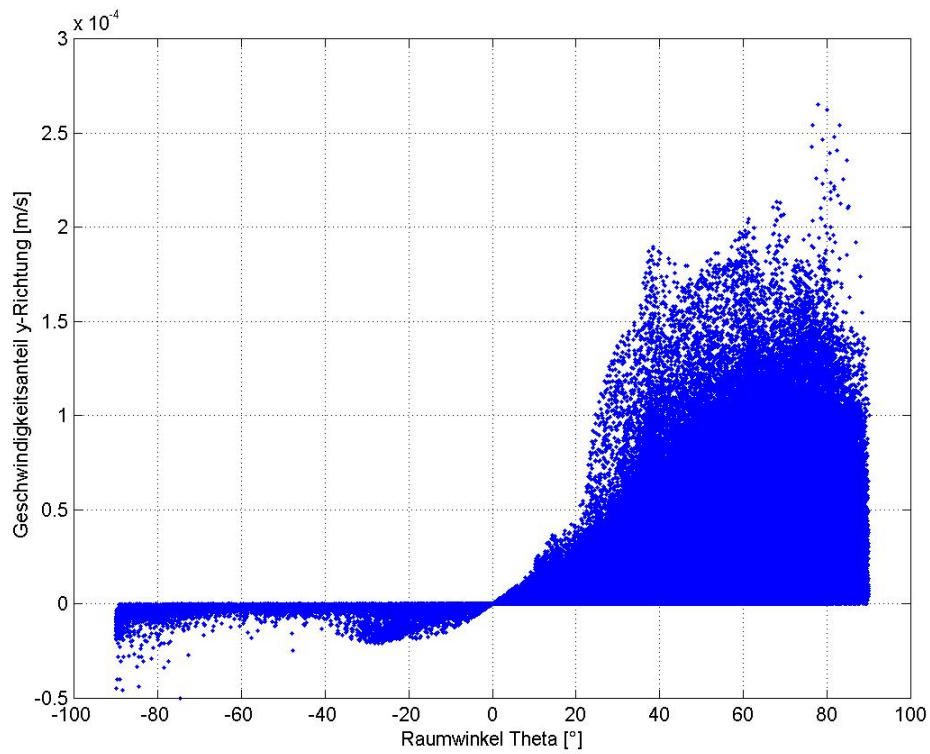


Abb. A5.5: Darstellung des Raumwinkels Theta vs. y-Komponente der Porengeschwindigkeit

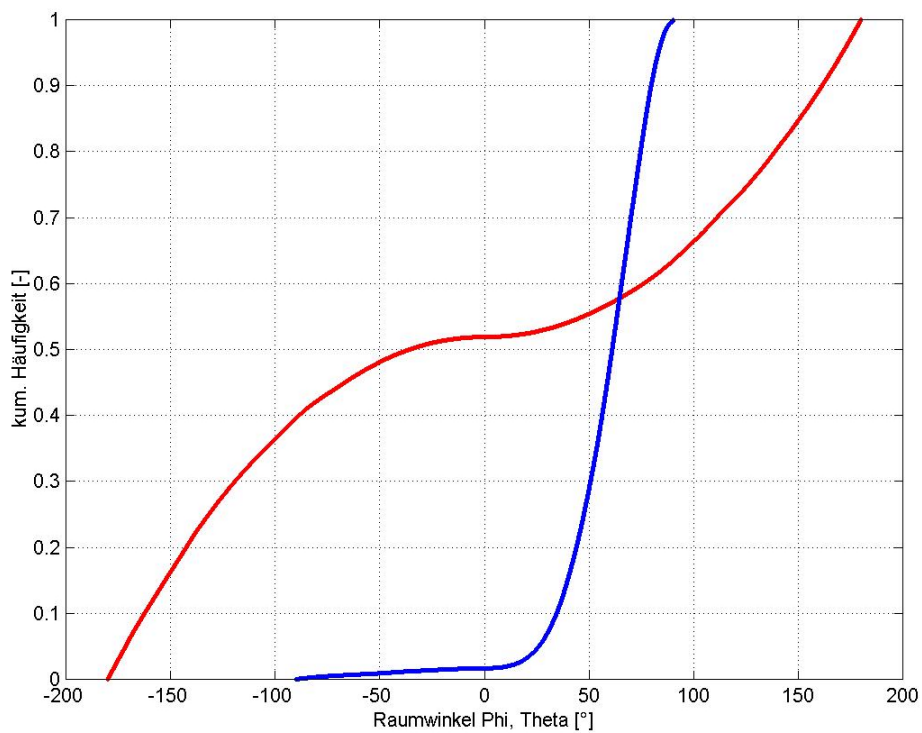


Abb. A5.6: Häufigkeitsverteilung der Raumwinkel

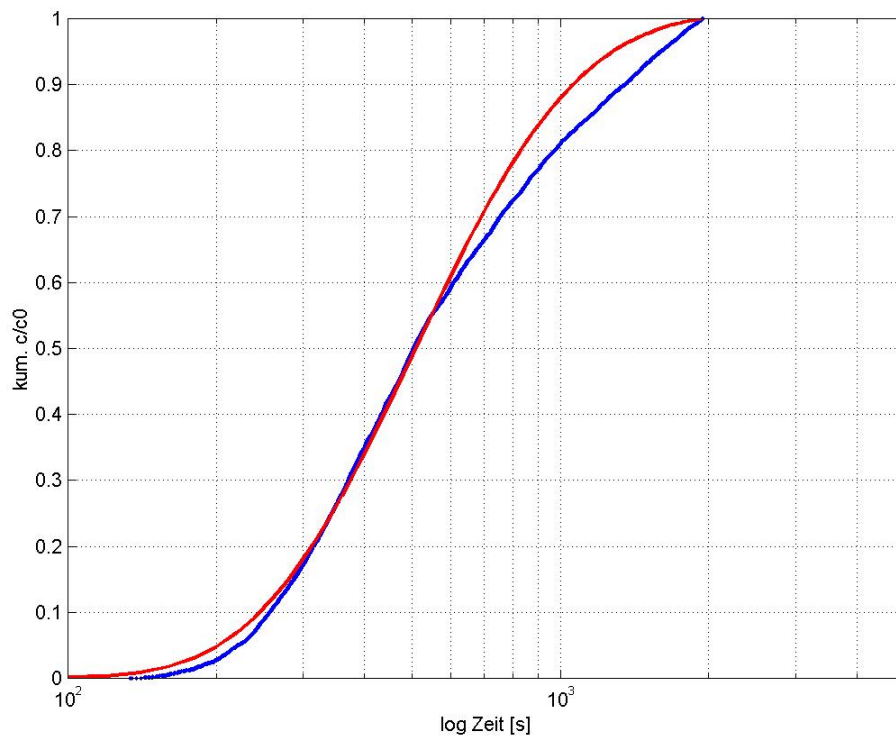


Abb. A5.7: Tracerdurchbruch als Summenkurve im Vergleich mit analytischer Lösung

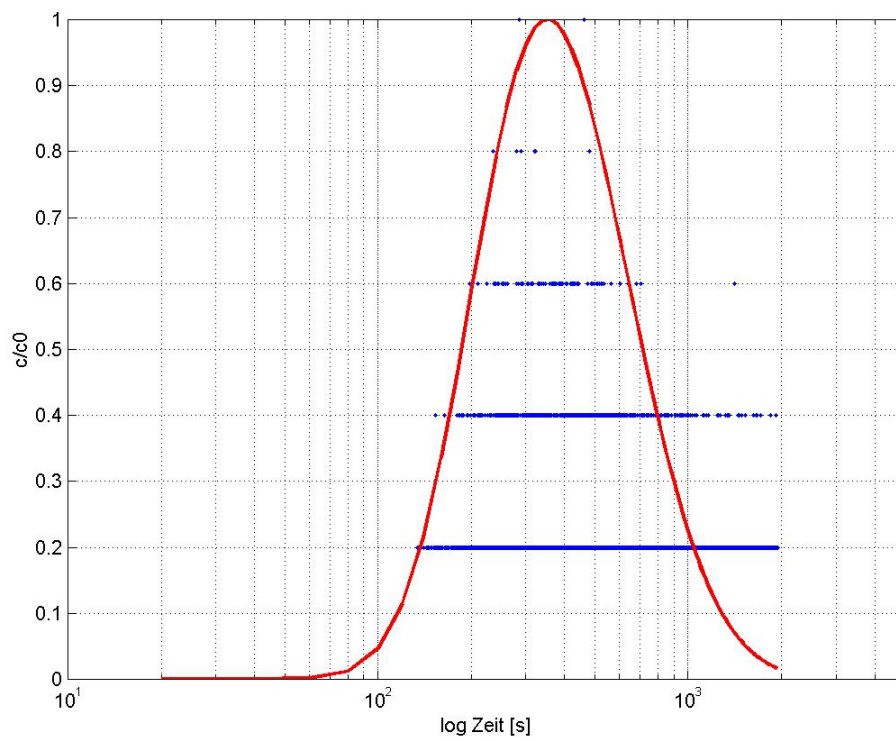


Abb. A5.8: Tracerdurchbruch im Vergleich mit analytischer Lösung

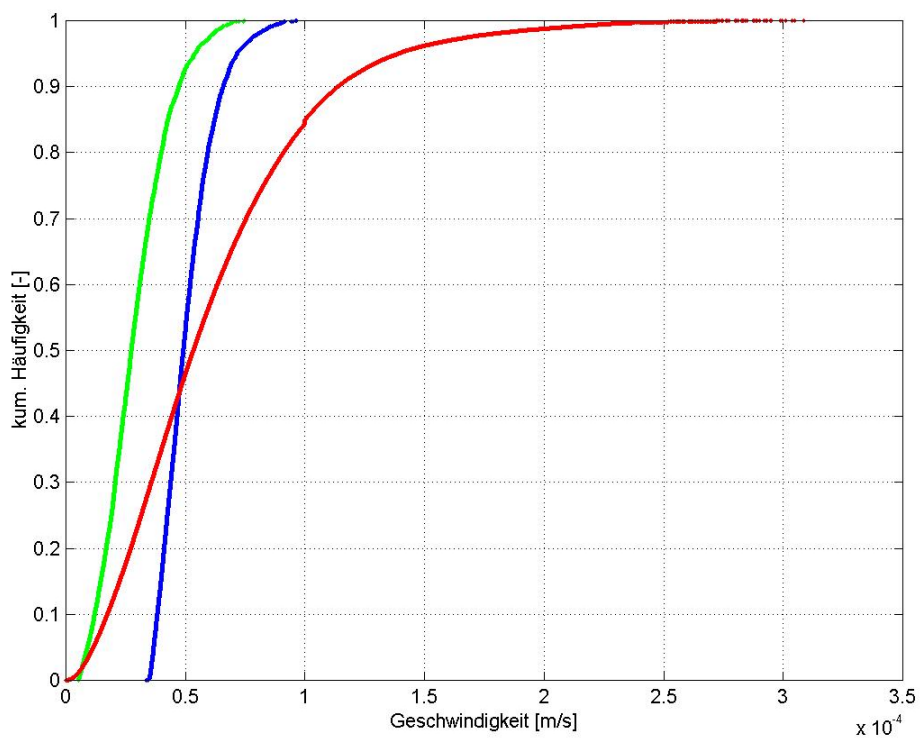


Abb. A5.9: Vergleich der Geschwindigkeitsverteilungen

Darstellung Ergebnisse Kugelgemisch 4

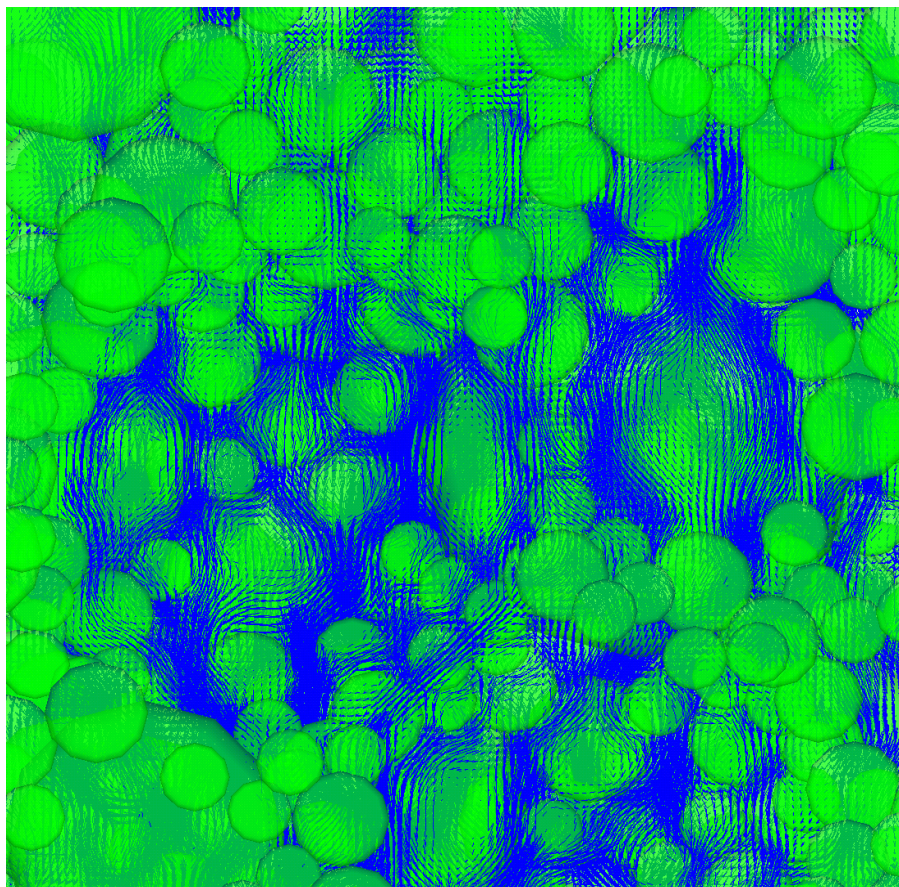


Abb. A6.1: Ausschnitt aus Strömungsvektorfeld im Porenraum

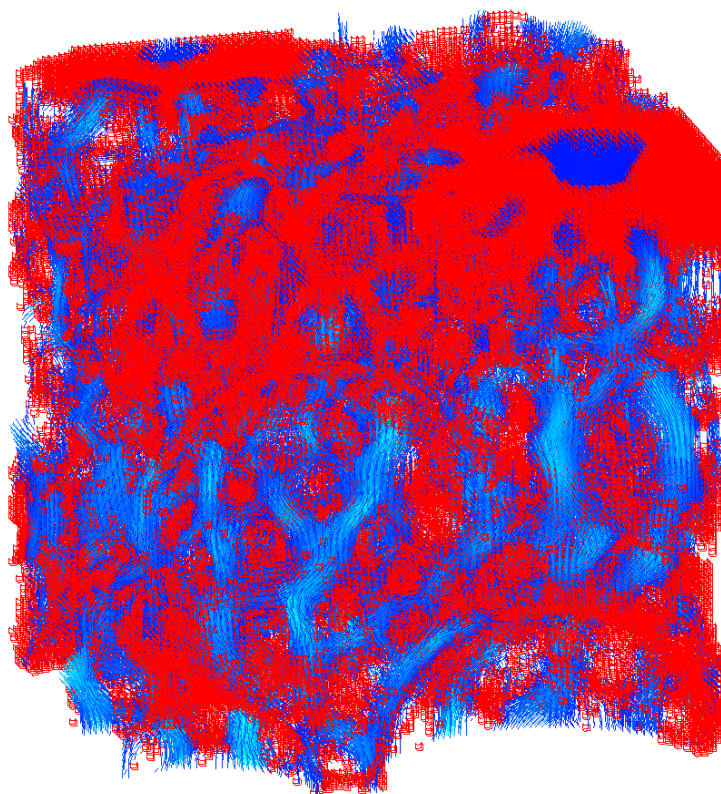


Abb. A6.2: 3D-Ausschnitt aus Strömungsvektorfeld (blau) und advektiv unwirksame Zellen (rot)

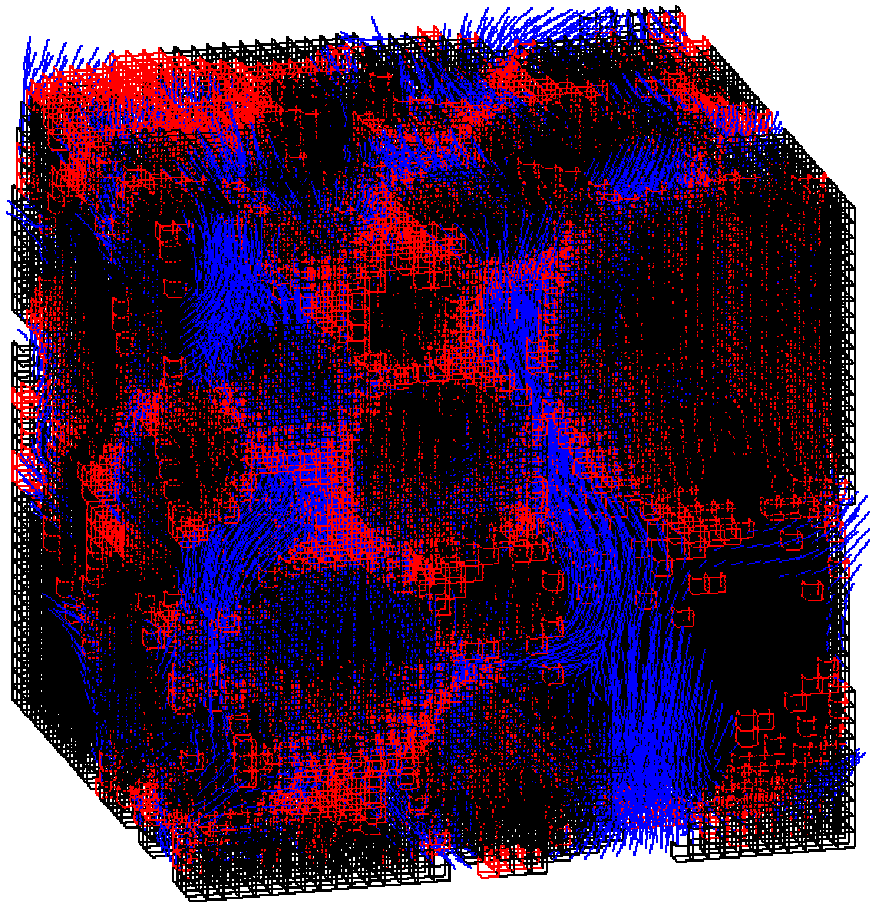


Abb. A6.3: 3D-Ausschnitt aus Strömungsvektorfeld (blau) und advektiv unwirksame Zellen (rot) und „Kugel“-Zellen (schwarz)

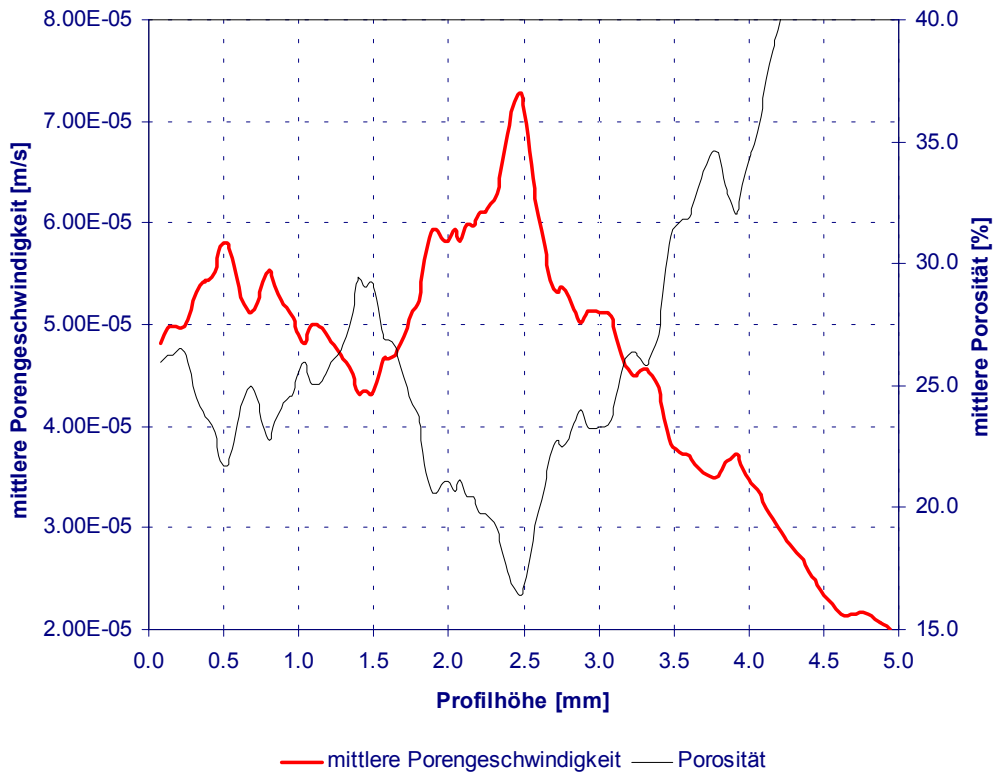


Abb. A6.4: Zusammenhang Poregeschwindigkeit/Porosität im Profil des Zylinders

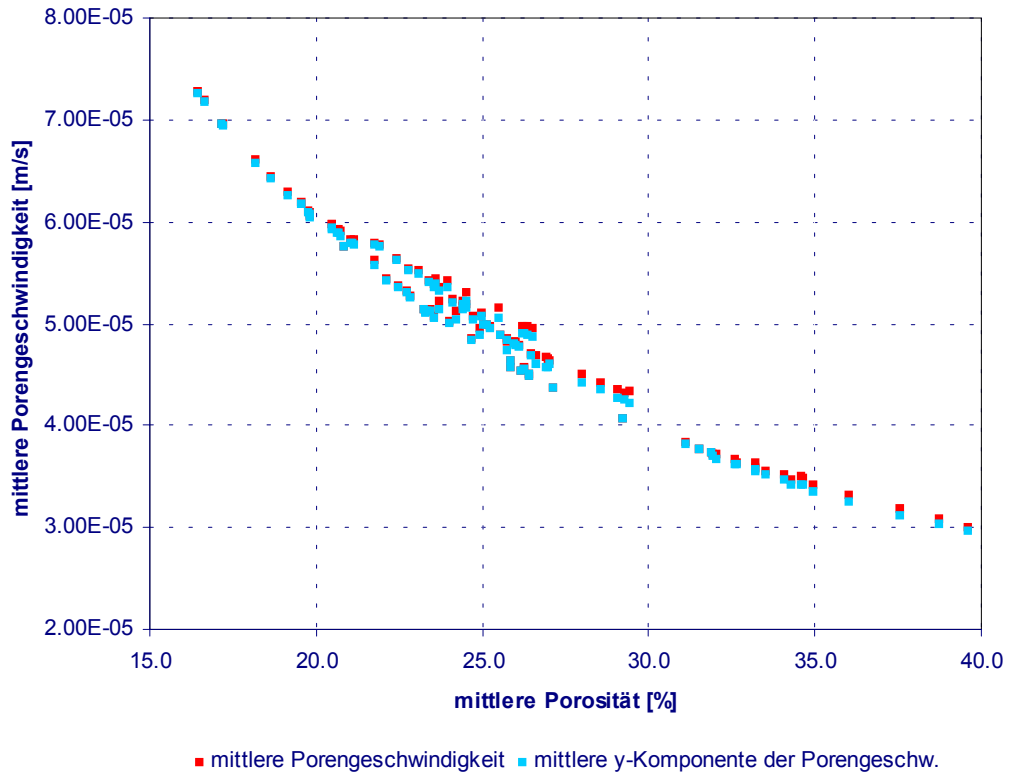


Abb. A6.5: Zusammenhang Porengeschwindigkeit/Porosität

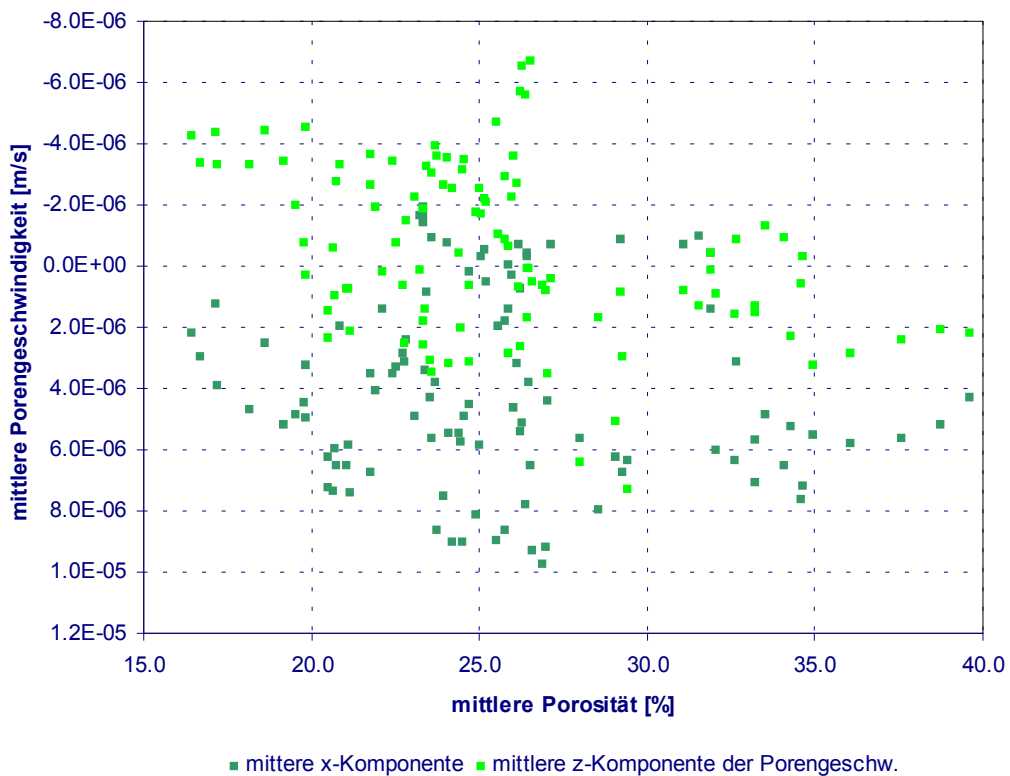


Abb. A6.6: Zusammenhang Porengeschwindigkeit der x,z-Komponenten/Porosität

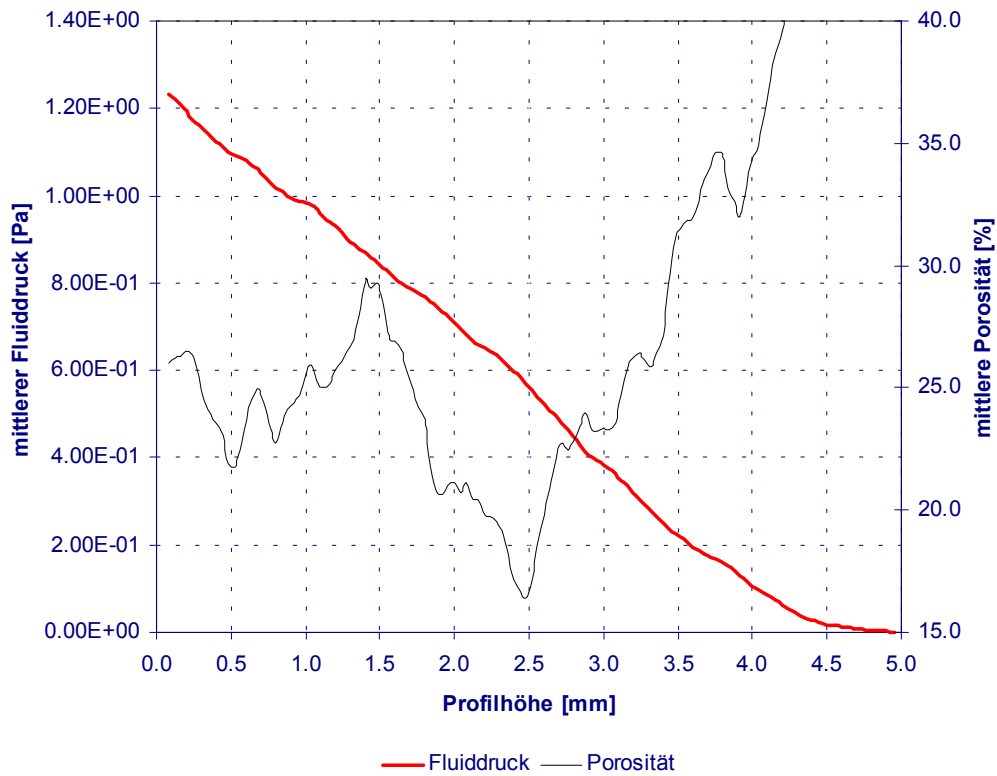


Abb. A6.7: Druckprofil im Zylinder und Porosität

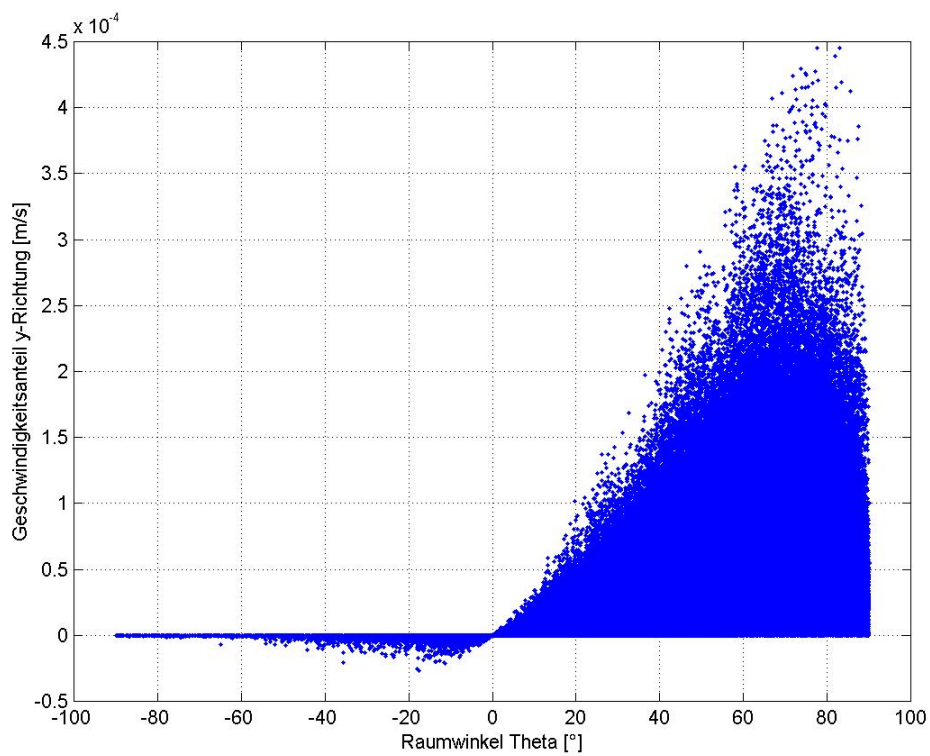


Abb. A6.8: Darstellung des Raumwinkels Theta vs. y-Komponente der Porengeschwindigkeit

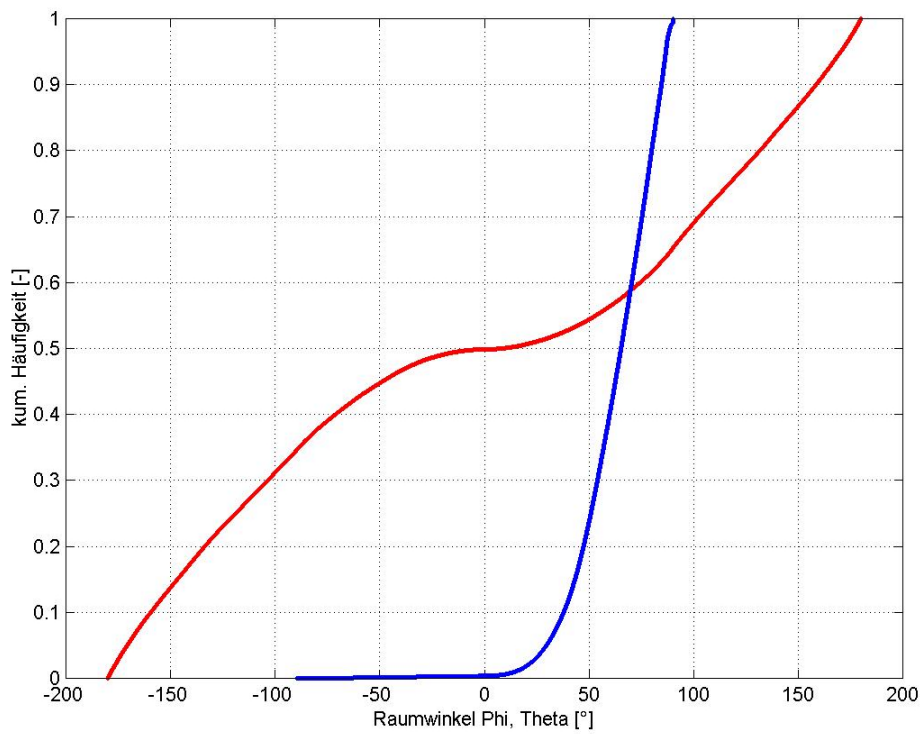


Abb. A6.9: Häufigkeitsverteilung der Raumwinkel

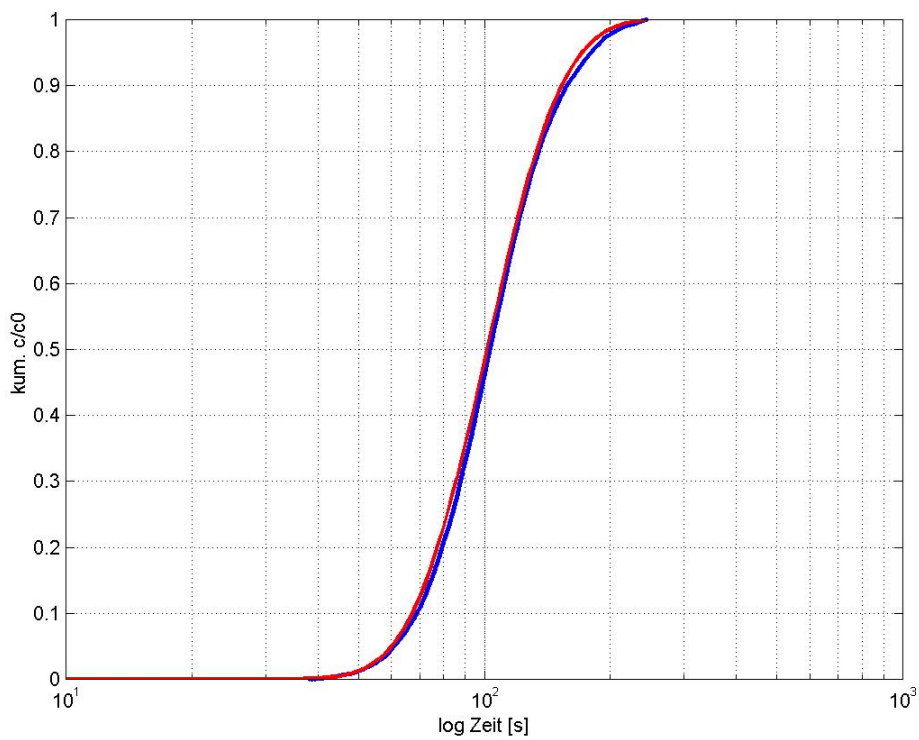


Abb. A6.10: Tracerdurchbruch als Summenkurve im Vergleich mit analytischer Lösung

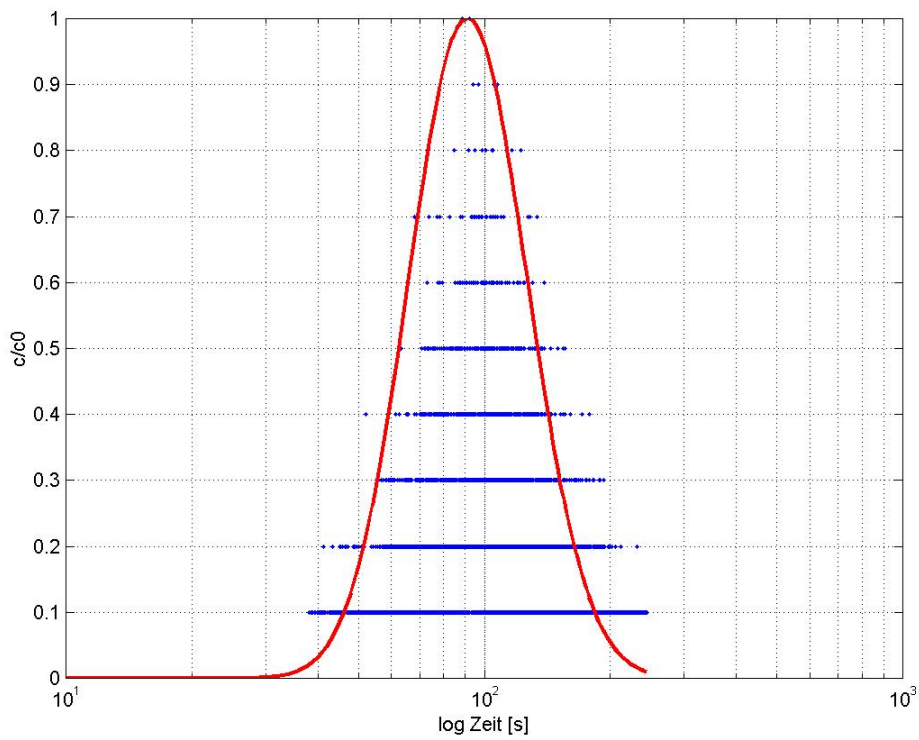


Abb. A6.11: Tracerdurchbruch im Vergleich mit analytischer Lösung

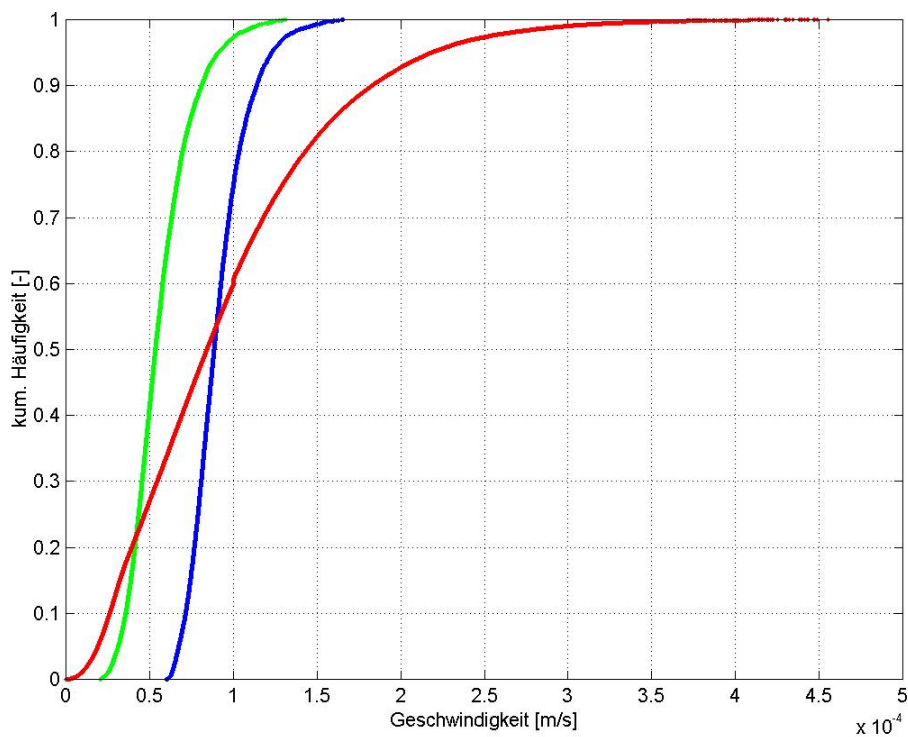


Abb. A6.12: Vergleich der Geschwindigkeitsverteilungen