

Gitteradaption für die Finite-Elemente-Modellierung gekoppelter Prozesse in geklüftet-porösen Medien

Von dem Fachbereich Bauingenieur- und Vermessungswesen
der Universität Hannover

zur Erlangung des Grades

Doktor-Ingenieur

genehmigte Dissertation

von

Dipl.-Math. René Kaiser

geboren am 22.12.1966, in Neustadt am Rübenberge

2001

Referent: Prof. Dr.-Ing. Werner Zielke
Korreferenten: Prof. Dr.-Ing. habil. Olaf Kolditz
Prof. Dr. rer. nat. Gerhard Starke

Tag der Promotion: 30. August 2001

Abstract

The main aspect of this thesis is the development of a coupled grid adaptation method and therefore the adaptive simulation of strongly coupled multifield problems in fractured–porous media. The initial grid for a finite element simulation is adapted a posteriori to all field values by superimposing the refinement indicators and consequently the refined grids. This coupled grid adaptation method is based on a hierarchical concept for refining and coarsening conformly coupled elements of different dimensions.

The complexity of such strongly coupled multifield problems requires an easy-to-handle adaptive algorithm. This affects in particular the choice of the refinement indicators. In the context of a coupled grid adaptation method, so-called heuristic refinement indicators based on gradients or curvatures of the solution function have significant advantages when compared with analytical error indicators, i.e. the superimposition of heuristic refinement indicators can be realized in a simple way.

In addition to the memory requirement and the time an engineer needs to prepare the numerical simulation (e.g. for the grid generation) the computation time is an important criterion for the development of grid adaptive algorithms, particularly with regard to the numerical simulation of strongly coupled multifield problems. The development of special adaptive algorithms leads to a significant reduction in computation time.

The possibilities of the coupled grid adaptation method are demonstrated with a set of examples dealing with weakly as well as strongly coupled multifield problems.

First transport processes of an ideal tracer in fractured–porous media are considered (weakly coupled multifield problem). The application of the coupled grid adaptation method to sinks and sources and fracture/matrix interaction areas (conformly coupled elements) is discussed. Additionally the characteristics of so-called 2.5 d –fracture networks are treated. The efficiency of the developed algorithms is demonstrated using several examples dealing with density driven flow (saltwater intrusion, thermal convection) in saturated and partly saturated porous media (strongly coupled multifield problem).

keywords:

grid adaptation, coupled multifield problems, fractured–porous media

Zusammenfassung

Schwerpunkt der vorliegenden Arbeit ist die Entwicklung eines gekoppelten gitteradaptiven Algorithmus und damit die adaptive Modellierung stark gekoppelter Mehrfeldprobleme in geklüftet-porösen Medien. Das Ausgangsgitter für eine FE-Simulation wird a posteriori an alle Feldgrößen angepaßt, indem die Verfeinerungsindikatoren und infolgedessen die verfeinerten Gitter überlagert werden. Diese Methode der gekoppelten Gitteradaption basiert auf einem hierarchischen Konzept zur Verfeinerung und Vergrößerung konform gekoppelter Elemente unterschiedlicher Dimension.

Die Komplexität solcher stark gekoppelten Mehrfeldprobleme erfordert einen einfach zu handhabenden adaptiven Algorithmus. Dies betrifft insbesondere die Wahl der Verfeinerungsindikatoren. Im Rahmen eines gekoppelten gitteradaptiven Algorithmus haben sogenannte heuristische Verfeinerungsindikatoren, die auf Gradienten oder Krümmungen der Lösungsfunktion basieren, große Vorteile im Vergleich zu analytischen Fehlerindikatoren; so ist u.a. die Überlagerung heuristischer Verfeinerungsindikatoren einfach zu realisieren.

Neben dem Speicherplatzbedarf und der Zeit, die ein Ingenieur benötigt, um die numerische Simulation vorzubereiten (z.B. für die Gitternetzgenerierung), ist die Rechenzeit ein wichtiges Kriterium bei der Entwicklung gitteradaptiver Algorithmen, insbesondere im Hinblick auf die numerische Modellierung stark gekoppelter Mehrfeldprobleme. Die Entwicklung spezieller adaptiver Algorithmen führt zu einer erheblichen Reduzierung der Rechenzeit.

Die Möglichkeiten der gekoppelten Gitteradaption werden an einer Reihe von Beispielen zu sowohl schwach als auch stark gekoppelten Mehrfeldproblemen dargestellt. Zunächst wird der Transport eines idealen Tracers in geklüftet-porösen Medien betrachtet (schwach gekoppeltes Mehrfeldproblem).

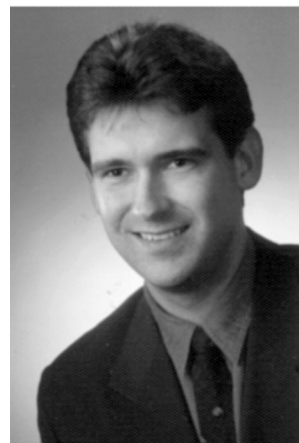
Die Anwendung der gekoppelten Gitteradaption auf Quellen und Senken und Kluft/Matrix-Übergangsbereiche (konform gekoppelte Elemente) wird diskutiert. Zusätzlich werden die Besonderheiten sogenannter 2.5 D -Kluftnetzwerke behandelt.

Die Leistungsfähigkeit des entwickelten Algorithmus wird schließlich an mehreren Beispielen zu dichteinduzierten Strömungen (Salzwasserintrusion, Thermokonvektion) in gesättigten und teilgesättigten Systemen demonstriert (stark gekoppelte Mehrfeldprobleme).

keywords:

Gitteradaption, gekoppelte Mehrfeldprobleme, geklüftet-poröse Medien

*In Erinnerung
an meinen Vater
Rolf Kaiser*



Vorwort

Die vorliegende Arbeit ist in den Jahren 1995 bis 2000 während meiner Zeit als wissenschaftlicher Mitarbeiter am *Institut für Strömungsmechanik und Elektronisches Rechnen im Bauwesen* der Universität Hannover entstanden.

Zunächst möchte ich Herrn Prof. W. Zielke für die stetige Unterstützung, für den Freiraum besonders in der Endphase meiner Dissertation und für die Übernahme des Referats danken. Des weiteren danke ich Prof. G. Starke vom Institut für Angewandte Mathematik der Universität Hannover und Prof. O. Kolditz, bis 2001 Leiter der Arbeitsgruppe Grundwassermodellierung, für die Übernahme der Korreferate.

Entscheidend für den Fortschritt meiner Arbeit war die Mitarbeit in der Arbeitsgruppe Grundwassermodellierung, die in den letzten Jahren eine Neuentwicklung des Programmsystems RockFlow vorangetrieben hat. Hier möchte allen Mitarbeitern dieser Arbeitsgruppe danken, namentlich Herrn A. Habbar, Herrn M. Kohlmeier, Herrn O. Kolditz, Frau S. Moenickes und Herrn T. Rother. Ganz besonders möchte ich aber Herrn C. Thorenz hervorheben, der mir in zahlreichen fachlichen Diskussionen immer wieder neue Impulse für meine Arbeit geliefert hat.

Durch die tatkräftige Mitarbeit meines damaligen Hiwis (wissenschaftliche Hilfskraft) Herrn K. Mittendorf, der inzwischen selbst wissenschaftlicher Mitarbeiter am Institut ist, war es mir möglich, viele Dinge in erheblich kürzerer Zeit zu realisieren.

Nicht zu vergessen sind aber auch die grundlegenden Arbeiten von Frau C. Barlag, Herrn M. Schulze-Ruhfus und Herrn H. Herrmann, die durch ihre Tätigkeit am Institut erst den Weg für die Entwicklung des Programmsystems RockFlow und dadurch auch für meine eigene Arbeit geebnet haben. Für all dies möchte ich mich ebenfalls an dieser Stelle bedanken.

Mein Dank gilt ferner allen Kollegen des Instituts für die langjährige gute Zusammenarbeit und für die Schaffung eines sehr guten Arbeitsklimas, das zum Gelingen dieser Arbeit erheblich beigetragen hat.

Ganz besonderer Dank gilt aber meiner Frau Iris für ihr Verständnis und ihre Unterstützung insbesondere in der Endphase meiner Arbeit. Hier hat sie über Monate sehr viel Geduld bewiesen und ihre eigenen Wünsche zurückgestellt.

Hannover, November 2001

René Kaiser

Inhaltsverzeichnis

1	Einleitung	1
1.1	Motivation	1
1.2	Zielsetzung	2
1.3	Gliederung der Arbeit	2
2	Gekoppelte Prozesse	5
2.1	RockFlow – Konzept	5
2.2	Mathematisches Modell	6
2.2.1	Grundwasserströmung	6
2.2.2	Konservativer Stofftransport	7
2.2.3	Wärmetransport	8
2.2.4	Dichteströmung in gesättigten und teilgesättigten Systemen	8
2.3	Numerisches Berechnungsverfahren	11
3	Gitteradaptive Methoden	15
3.1	Allgemeines	15
3.2	Verfeinerungsstrategien	16
3.2.1	r-Methode	16
3.2.2	m-Methode	17
3.2.3	h-Methode	17
3.2.4	Subgrid-Methode	18
3.2.5	Moving Grid-Methode	19
3.3	Fehler- und Verfeinerungsindikatoren	19
4	Gitteradaption für die Modellierung gekoppelter Prozesse	23
4.1	Allgemeines	23
4.2	Ausgangsgitter	24
4.3	Verfeinerungs- und Vergrößerungsalgorithmus	25
4.3.1	Anforderungen an den Verfeinerungs- und Vergrößerungsalgorithmus	25
4.3.2	Elementverfeinerung	28
4.3.3	Elementvergrößerung	29
4.3.4	Nachbarschaftsbedingung	31
4.4	Verfeinerungs- und Vergrößerungskriterien	31
4.4.1	Verfeinerungsindikatoren	32
4.4.2	Verfeinerungs- und Vergrößerungstoleranzen	36
4.5	Adaptionsalgorithmen	37
4.6	Gekoppelte Gitteradaption	39
4.6.1	Beispiel 1: Dipol-Problem mit Störungszone	39

4.6.2	Beispiel 2: Dipol–Problem in einem heterogenen Medium	44
5	Gitteradaptive Modellierung schwach gekoppelter Mehrfeldprobleme in geklüftet–porösen Medien	47
5.1	THEIS’ Problem	47
5.1.1	Analytische Lösung (Brunnenformel nach THEIS)	48
5.1.2	Numerische Simulation	50
5.2	Stofftransport zwischen Brunnendublette	52
5.2.1	Analytische Lösung (HOOPES & HARLEMAN (1967))	53
5.2.2	Numerische Simulation	54
5.3	Stofftransport in Kluft/Matrix–Systemen	59
5.3.1	Analytische Lösung (GILLHAM ET AL. (1984))	59
5.3.2	Numerische Simulation	60
5.4	Stofftransport in 2.5D–Kluftnetzwerken	71
6	Gitteradaptive Modellierung stark gekoppelter Mehrfeldprobleme in porösen Medien	79
6.1	HENRY–Problem	79
6.2	Dichteinduzierte Strömungen in teilgesättigten Systemen	84
6.3	Dichteinduzierter Schadstoffeintrag in einen Grundwasserleiter	87
6.4	Thermohalines ELDER–Problem	92
7	Zusammenfassung und Ausblick	99
	Symbolverzeichnis	103
	Literatur	107

Kapitel 1

Einleitung

1.1 Motivation

Seit Mitte der 80er Jahre werden am Institut für Strömungsmechanik und Elektronisches Rechnen im Bauwesen der Universität Hannover numerische Modelle zur Berechnung von *Strömungs- und Transportprozessen in porösen und geklüftet-porösen Medien* entwickelt (WOLLRATH 1990, KRÖHN 1991, HELMIG 1993, SHAO 1994, LEGE 1995).

Hieraus entstand das zunächst in der Programmiersprache FORTRAN realisierte Programmsystem RockFlow, bestehend aus jeweils einem Strömungsmodul zur numerischen Berechnung inkompressibler und kompressibler Strömungen (SM, GM), einem Transportmodul (TM) und einem Dichteströmungsmodul (DM), das notwendigerweise Strömungs- und Transportberechnung umfaßte. Die Interaktion zwischen den einzelnen Modulen war nur über Ein- und Ausgabefiles möglich, wodurch mit wachsender Komplexität der zu modellierenden physikalischen Prozesse, wie z.B. der reaktive Stofftransport (HABBAR 2001) oder dichteinduzierte Strömungen in teilgesättigten Systemen (THORENZ ET AL. 2000), eine Weiterentwicklung dieses Programmsystems so nicht mehr sinnvoll erschien.

Einen ersten Schritt in eine neue Richtung stellte das von SCHULZE-RUHFUS (1996) und BARLAG (1997) entwickelte *adaptive Transportmodell* (aTM) dar, das die sog. *h-Methode der Gitteradaption* (Verfeinerung durch Elementteilung) für die numerische Berechnung von Transportprozessen in geklüftet-porösen Medien bereitstellte.

Obwohl gitteradaptive Methoden ihre Anfänge bereits Ende der 70er Jahren haben, kamen sie erst in den 90er Jahren bei der numerischen Simulation von Strömungs- und Transportprozessen in Geosystemen zum Einsatz. So wurden unterschiedliche Methoden der Gitteradaption bei der Modellierung des Stofftransports (MANZINI & ROSELLA 1994, PEPPER & STEPHENSON 1995), des reaktiven Stofftransports (WOLFSBERG & FREYBERG 1994) und der dichteinduzierten Strömung (TROMPERT ET AL. 1993, THIELE 1999, LI ET AL. 2000) in porösen Medien verwendet.

LEGE (1995) und KOSAKOWSKI (1996) haben in ihren Modellanwendungen auf die Notwendigkeit gitteradaptiver Methoden bei der numerischen Simulation von Strömungs- und Transportprozessen in geklüfteten Medien hingewiesen. Insbesondere bei hoch-advectiven Transportprozessen in Kluftsystemen ist die Nutzung der Gitteradaption im Hinblick auf Rechenzeit- und Speicherplatzbedarf unausweichlich.

Folgerichtig führte dies zur Entwicklung des aTM als neues Modul für das bereits bestehende Programmsystem. Da aber auch hier die Interaktion mit dem Strömungsmodul über

Ein- und Ausgabefiles stattfand, war die Gitteradaption zunächst auf die Modellierung des Stofftransports beschränkt.

Allerdings eröffnete die Verwendung der Programmiersprache ANSI-C und die Modularität dieses Programms den Weg zu einer kompletten Neuentwicklung des Programmsystems RockFlow, die von der Arbeitsgruppe Grundwassermodellierung des Instituts seit Mitte der 90er Jahre vorangetrieben wird (KOLDITZ ET AL. 1998). Die Nutzung *dynamischer Datenstrukturen* und die Realisierung *objektorientierter Ansätze* machte die Entwicklung einer Vielzahl von Modellen möglich, führte damit aber auch, im Hinblick auf die Modellierung *gekoppelter Prozesse in geklüftet-porösen Medien*, zu neuen Anforderungen an die Gitteradaption.

1.2 Zielsetzung

Die Zielsetzung dieser Arbeit ergibt sich zwangsläufig aus der Neuentwicklung des Programmsystems RockFlow, das auch in Zukunft stetig weiterentwickelt wird. Zunächst wurde die von SCHULZE-RUHFUS (1996) und BARLAG (1997) im aTM realisierte und in das RockFlow übernommene *h-adaptive Methode* 'gekapselt' und damit für die numerische Simulation einer Vielzahl physikalischer Prozesse (z.B. Ein- und Mehrphasenströmung, Gasströmung, Dichteströmung, reaktiver Stofftransport, Wärmetransport) zugänglich gemacht. Dies eröffnete die Möglichkeit einer vielfältigen Weiterentwicklung des verwendeten gitteradaptiven Algorithmus im Hinblick auf die Modellierung beliebig gekoppelter Prozesse in porösen und geklüftet-porösen Medien, wie z.B. den *'Transport mehrerer miteinander reagierender Komponenten (reaktiver Stofftransport)'* (HABBAR ET AL. 1998) oder den *'Transport idealer Tracer in dichteinduzierten Strömungen in teilgesättigten Systemen'* (THORENZ ET AL. 2000). Die Komplexität der zugehörigen numerischen Modelle erfordert einen einfach zu handhabenden und auf alle Modelle gleichermaßen anwendbaren gitteradaptiven Algorithmus. Dies gilt insbesondere für zukünftige Modellentwicklungen, die auch bodenmechanische Prozesse berücksichtigen werden.

Während die bisher bekannten gitteradaptiven Algorithmen das Berechnungsgitter in der Regel nur für jeweils eine Feldgröße (z.B. Druck, Konzentration, Temperatur) einer numerischen Berechnung adaptieren, wird hier ein Algorithmus vorgestellt, der bei der Modellierung gekoppelter Prozesse das Berechnungsgitter an alle an den betrachteten Prozessen beteiligten Feldgrößen gleichermaßen anpaßt.

1.3 Gliederung der Arbeit

In der Arbeit werden folgende Punkte behandelt:

- In der **Einleitung** wird das Thema motiviert und das Ziel der Arbeit definiert.
- Das Kapitel **Gekoppelte Prozesse** wird sich mit dem in RockFlow realisierten *Softwarekonzept* beschäftigen. Außerdem werden die zum Verständnis dieser Arbeit notwendigen mathematischen Formulierungen der betrachteten physikalischen Prozesse bereitgestellt. Aufgrund des großen Umfangs der inzwischen in RockFlow realisierten Prozesse kann hier allerdings nur ein Überblick gegeben werden. Entsprechendes gilt für die Darstellung des verwendeten numerischen Modells.

- Im Kapitel **Gitteradaptive Methoden** wird ein Überblick über die wichtigsten *gitteradaptiven Methoden* gegeben. Es werden Vor- und Nachteile und damit auch die Einsatzmöglichkeiten diskutiert und notwendige Begriffe zum Verständnis dieser Methoden erläutert.
- Mit der in RockFlow realisierten *h-adaptiven Methode* beschäftigt sich das Kapitel **Gitteradaption für die Modellierung gekoppelter Prozesse**. Der auf den Arbeiten von SCHULZE-RUHFUS (1996) und BARLAG (1997) basierende und im Rahmen der vorliegenden Arbeit auf gekoppelte Prozesse erweiterte Algorithmus wird dargestellt und anhand einfacher Beispiele erläutert. Die hier vorgestellte Methode der *gekoppelten Gitteradaption* findet ihre Anwendung bei der numerischen Modellierung beliebig gekoppelter Prozesse (*Mehrfeldprobleme*) in porösen und geklüftet-porösen Medien (*gekoppelte geometrische Systeme*).
- Das Kapitel **Gitteradaptive Modellierung schwach gekoppelter Mehrfeldprobleme in geklüftet-porösen Medien** ist eines von zwei Kapiteln, das sich mit den Anwendungsmöglichkeiten des in dieser Arbeit realisierten gitteradaptiven Algorithmus beschäftigt. Dazu soll zunächst der Transport eines idealen Tracers in einer (inkompressiblen) Grundwasserströmung betrachtet werden, wobei besonders auf die Anwendung der Gitteradaption im Bereich von *Singularitäten* (Quellen und Senken) und in Kluft/Matrix-Übergangsbereichen (*gekoppelte geometrische Systeme*) eingegangen wird. Optimierungen des verwendeten Algorithmus im Hinblick auf eine Reduzierung der Rechenzeit werden ebenso diskutiert wie die Einsatzmöglichkeiten weiterer, in dieser Arbeit nicht realisierter, gitteradaptiver Methoden. Außerdem soll in diesem Kapitel eine erste Anwendung der Gitteradaption auf großräumige sog. *2.5D-Kluftnetzwerke* dargestellt werden. Hier wird der vorgestellte gitteradaptive Algorithmus sowohl bei der Modellierung der Grundwasserströmung (im Bereich von Quellen und Senken) als auch des Stofftransports angewendet und damit eine erste *Kopplung der Gitteradaption* demonstriert.
- Anhand einer Reihe von Beispielen zu dichteinduzierten Strömungen werden im Kapitel **Gitteradaptive Modellierung stark gekoppelter Mehrfeldprobleme in porösen Medien** die Möglichkeiten der *gekoppelten Gitteradaption* bei der Modellierung dieser *stark gekoppelten Mehrfeldprobleme* dargestellt. Wie im vorangegangenen Kapitel sollen auch hier notwendige Optimierungen des gitteradaptiven Algorithmus im Hinblick auf eine Rechenzeiterparnis diskutiert werden.
- Die Arbeit schließt mit **Zusammenfassung und Ausblick**.

Kapitel 2

Gekoppelte Prozesse

2.1 RockFlow – Konzept

Die wachsende Komplexität der zu modellierenden physikalischen Prozesse in Geosystemen macht seit Mitte der 90er Jahre eine Neuentwicklung des *Grundwassersimulators* RockFlow notwendig. Das in ANSI-C entstandene Programm (KOLDITZ ET AL. 1998) bietet die Möglichkeit, bei der Entwicklung neuer Modelle auf verschiedene sog. *Rechenkerne* (FE-Kernels) zuzugreifen und diese miteinander zu koppeln. Diese *Rechenkerne* liefern für einzelne Prozesse, wie z.B. der Ein- oder Mehrphasenströmung, dem Stofftransport oder dem reaktiven Stofftransport, die mittels einer *Finite-Elemente-Formulierung* hergeleiteten diskreten Gleichungssysteme, die beliebig zu neuen *Modellen* (Models) zusammengefügt werden können (Abbildung 2.1).

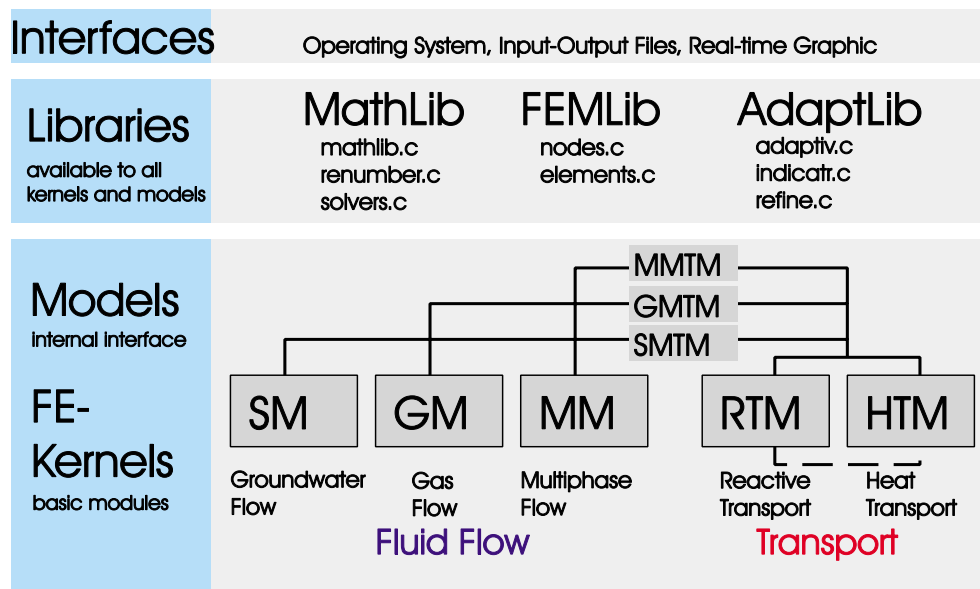


Abbildung 2.1: RockFlow-Konzept für die numerische Simulation gekoppelter Prozesse in Geosystemen (KOLDITZ ET AL. 1998)

Außerdem besteht die Möglichkeit, neben der hier verwendeten *semidiskreten Finite-Elemente-Methode (FEM)* weitere numerische Verfahren zu realisieren und über entsprechende Rechenkerne allen Modellen gleichermaßen zur Verfügung zu stellen.

Sowohl die Umsetzung dieses Konzeptes als auch die Entwicklung der in RockFlow implementierten *Gitteradaptation*, die ebenfalls allen Modellen zur Verfügung steht, erfordert die in ANSI-C realisierbaren *dynamischen Datenstrukturen*.

2.2 Mathematisches Modell

Im folgenden werden die zum Verständnis dieser Arbeit, insbesondere der Anwendungsbeispiele, notwendigen *Bilanzgleichungen* bereitgestellt. Aufgrund der Vielzahl der in RockFlow realisierten Modelle kann nur ein kleiner Überblick gegeben werden. Deshalb soll hier auf weiterführende Arbeiten von WOLLRATH (1990) und HELMIG (1993) zur Grundwassermodellierung und von KRÖHN (1991) und SHAO (1994) zur Modellierung des Stofftransports bzw. HABBAR ET AL. (1998) des reaktiven Stofftransports verwiesen werden. Die Herleitung der Bilanzgleichung für den Wärmetransport in geklüftet-porösen Medien findet sich in KOLDITZ (1997). Die Ausführungen zur dichteinduzierten Strömung in teilgesättigten Systemen basieren auf der Arbeit von THORENZ ET AL. (2000).

2.2.1 Grundwasserströmung

Aus der *Bilanzierung der Fluidmasse* über ein gegebenes räumlich und zeitlich konstantes Kontrollvolumen (REV, *repräsentatives Elementarvolumen*) ergibt sich die integrale Form der Bilanzgleichung:

$$\int_V \left[\frac{\partial(n\rho)}{\partial t} + \operatorname{div}(n\rho \mathbf{v}_a) - \rho Q_\rho \right] dV = 0. \quad (2.1)$$

mit der Fluidichte ρ , der effektiven Porosität n , der Abstandsgeschwindigkeit \mathbf{v}_a und einem Quellterm Q_ρ .

Aufgrund der willkürlichen Größe und Gestalt des ortsfesten Volumens muß der Integrand verschwinden. Damit ergibt sich die *Kontinuitätsgleichung* zu:

$$\frac{\partial(n\rho)}{\partial t} + \operatorname{div}(n\rho \mathbf{v}_a) - \rho Q_\rho = 0. \quad (2.2)$$

Unter der Voraussetzung einer konstanten Fluidichte ρ ergibt sich hieraus die *Druckformulierung der Strömungsgleichung*

$$\rho S_p \frac{\partial p}{\partial t} + \operatorname{div}(n\rho \mathbf{v}_a) - \rho Q_\rho = 0 \quad (2.3)$$

und nach Division durch ρ

$$S_p \frac{\partial p}{\partial t} + \operatorname{div}(n \mathbf{v}_a) - Q_\rho = 0. \quad (2.4)$$

Der Speicherkoeffizient S_p beschreibt die Kompressibilität des Fluids und die druckabhängige Veränderlichkeit des Porenvolumens. Bei inkompressiblen Fluiden hängt der Speicherkoeffizient nur von der Kompressibilität des Porenraumes ab. Eine Herleitung des Speicherkoeffizienten ist u.a. bei KRÖHN (1991) zu finden.

Nach dem DARCYschen Filtergesetz ergibt sich für einen unbeweglichen Grundwasserleiter die Filtergeschwindigkeit $\mathbf{v}_f = n \mathbf{v}_a$ zu

$$\mathbf{v}_f = -\frac{\mathbf{k}}{\mu}(\mathbf{grad} p - \rho \mathbf{g}) \quad (2.5)$$

mit dem Tensor der spezifischen Permeabilität \mathbf{k} , der dynamischen Viskosität μ und dem Vektor der Erdbeschleunigung \mathbf{g} .

Nach Einsetzen von Gleichung (2.5) in Gleichung (2.4) erhält man schließlich die Strömungsgleichung für die Grundwasserströmung zu:

$$S_p \frac{\partial p}{\partial t} - \operatorname{div}\left(\frac{\mathbf{k}}{\mu}(\mathbf{grad} p - \rho \mathbf{g})\right) - Q_p = 0. \quad (2.6)$$

2.2.2 Konservativer Stofftransport

Analog zu der Bilanzierung der Fluidmasse ergibt sich für die *gelöste Masse eines Inhaltsstoffes* folgende Bilanzgleichung:

$$\frac{\partial(nC)}{\partial t} + \operatorname{div}(n \mathbf{v}_a C) - \operatorname{div}(n \mathbf{D} \mathbf{grad} C) - Q_C = 0 \quad (2.7)$$

bzw. mit $C = \rho c$ die Bilanzgleichung für die Massenkonzentration c :

$$\frac{\partial(n\rho c)}{\partial t} + \operatorname{div}(n \mathbf{v}_a \rho c) - \operatorname{div}(n \mathbf{D} \mathbf{grad}(\rho c)) - \rho Q_c = 0. \quad (2.8)$$

Nach Anwendung der Produktregel der Differentialrechnung und der Kontinuitätsgleichung (2.2) folgt hieraus

$$n\rho \frac{\partial c}{\partial t} - \operatorname{div}(n\rho \mathbf{D} \mathbf{grad} c) + n\rho \mathbf{v}_a \mathbf{grad} c + c\rho Q_\rho - \rho Q_c = 0 \quad (2.9)$$

bzw.

$$n \frac{\partial C}{\partial t} - \operatorname{div}(n \mathbf{D} \mathbf{grad} C) + n \mathbf{v}_a \mathbf{grad} C + C Q_\rho - Q_C = 0. \quad (2.10)$$

Der Tensor $\mathbf{D} = \mathbf{D}_m + \mathbf{D}_D$ der hydrodynamischen Dispersion setzt sich zusammen aus dem Tensor der molekularen Diffusion

$$\mathbf{D}_m = \tau D_m \mathbf{I}, \quad (2.11)$$

mit der Tortuosität τ und dem molukularen Diffusionskoeffizienten D_m , und dem Tensor der mechanischen Dispersion (SCHEIDEGGER 1961)

$$\mathbf{D}_D := D_{Dij} = \alpha_T |\mathbf{v}_a| \delta_{ij} + (\alpha_L - \alpha_T) \frac{v_{ai} v_{aj}}{|\mathbf{v}_a|}. \quad (2.12)$$

Dieser Tensor nimmt im *isotropen Medium* Diagonalform an, wenn eine der Koordinatenachsen in die Strömungsrichtung fällt. Falls die x -Achse die ausgezeichnete Koordinatenachse ist, gilt damit für den Tensor der mechanischen Dispersion

$$\mathbf{D}_D = \begin{pmatrix} \alpha_L |\mathbf{v}_a| & 0 & 0 \\ 0 & \alpha_T |\mathbf{v}_a| & 0 \\ 0 & 0 & \alpha_T |\mathbf{v}_a| \end{pmatrix}, \quad (2.13)$$

mit der longitudinalen und der transversalen Dispersionslänge α_L und α_T .

2.2.3 Wärmetransport

Der Thermodispersionstensor \mathbf{E} für ein poröses Medium ist entsprechend dem Tensor der mechanischen Dispersion gegeben durch:

$$\mathbf{E} := E_{ij} = \beta_T |\mathbf{v}_f| \delta_{ij} + (\beta_L - \beta_T) \frac{v_{fi} v_{fj}}{|\mathbf{v}_f|}, \quad (2.14)$$

mit der longitudinalen und der transversalen Thermodispersionslänge β_L und β_T .

Aus der Energiebilanz für ein poröses Medium ergibt sich nach KOLDITZ (1997) folgende Gleichung für den Wärmetransport:

$$c\rho \frac{\partial T}{\partial t} + c^w \rho^w \mathbf{v}_f \mathbf{grad} T - \operatorname{div}(\mathbf{D}^T \mathbf{grad} T) - \rho Q_T = 0, \quad (2.15)$$

mit der Wärmekapazität des porösen Mediums

$$c\rho = n c^w \rho^w + (1 - n) c^s \rho^s, \quad (2.16)$$

dem Tensor der hydrodynamischen Wärmedispersion des porösen Mediums

$$\mathbf{D}^T := D_{ij}^T = n \lambda^w \delta_{ij} + (1 - n) \lambda_{ij}^s + c^w \rho^w E_{ij} \quad (2.17)$$

und dem Wärmequellterm

$$\rho Q_T = n \rho^w Q_T^w + (1 - n) \rho^s Q_T^s. \quad (2.18)$$

2.2.4 Dichteströmung in gesättigten und teilgesättigten Systemen

Ein *Mehrphasensystem* liegt vor, wenn der *Porenraum* nicht wie bei der gesättigten Grundwasserströmung durch nur eine Phase ausgefüllt ist. Für jede Phase muß dann analog zur Kontinuitätsgleichung (2.2) für ein Einphasensystem eine Kontinuitätsbeziehung aufgestellt werden:

$$\frac{\partial(n^\alpha \rho^\alpha)}{\partial t} + \operatorname{div}(n \rho^\alpha \mathbf{v}_a^\alpha) - \rho^\alpha Q_\rho^\alpha = 0. \quad (2.19)$$

Da Phase α nicht den gesamten Porenraum ausfüllt, tritt an die Stelle der effektiven Porosität n der Porenanteil n^α dieser Phase. Der Sättigungsgrad S^α mit

$$n^\alpha = S^\alpha n \quad (2.20)$$

ist definiert als der Anteil des Porenraums, der mit Phase α gefüllt ist. Daraus folgt für die *Kontinuitätsbeziehung* der Phase α

$$\frac{\partial(S^\alpha n \rho^\alpha)}{\partial t} + \operatorname{div}(\rho^\alpha \mathbf{v}_f^\alpha) - \rho^\alpha Q_\rho^\alpha = 0. \quad (2.21)$$

Für die Zeitableitung ergibt sich

$$\frac{\partial(S^\alpha n \rho^\alpha)}{\partial t} = \underbrace{n S^\alpha \frac{\partial \rho^\alpha}{\partial t}}_I + \underbrace{\rho^\alpha S^\alpha \frac{\partial n}{\partial t}}_{II} + \underbrace{n \rho^\alpha \frac{\partial S^\alpha}{\partial t}}_{III}. \quad (2.22)$$

Die Terme *I* (*Speicherterm*) und *II* (*Korngerüstterm*) lassen sich entsprechend der Herleitung des Einphasensystems zusammenfassen zu

$$n S^\alpha \frac{\partial \rho^\alpha}{\partial t} + \rho^\alpha S^\alpha \frac{\partial n}{\partial t} = S^\alpha \frac{\partial(n \rho^\alpha)}{\partial t} = \rho^\alpha S^\alpha S_p \frac{\partial p^\alpha}{\partial t}. \quad (2.23)$$

Damit erhält man für die Kontinuitätsgleichung des Mehrphasensystems

$$n \rho^\alpha \frac{\partial S^\alpha}{\partial t} + \rho^\alpha S^\alpha S_p \frac{\partial p^\alpha}{\partial t} + \operatorname{div}(\rho^\alpha \mathbf{v}_f^\alpha) - \rho^\alpha Q_\rho^\alpha = 0. \quad (2.24)$$

Für die Filtergeschwindigkeit \mathbf{v}_f^α der Phase α ergibt sich das erweiterte Darcy-Gesetz

$$\mathbf{v}_f^\alpha = -\frac{k_r^\alpha \mathbf{k}}{\mu} (\mathbf{grad} p^\alpha - \rho^\alpha \mathbf{g}), \quad (2.25)$$

mit der relativen Permeabilität k_r^α , die die spezifische Permeabilität \mathbf{k}^α für die Phase α mit der fluidunabhängigen spezifischen Permeabilität \mathbf{k} über

$$\mathbf{k}^\alpha = k_r^\alpha \mathbf{k} \quad (2.26)$$

in Beziehung setzt. Nach Einsetzen von Gleichung (2.25) in Gleichung (2.24) erhält man die Kontinuitätsgleichung der Phase α

$$n \rho^\alpha \frac{\partial S^\alpha}{\partial t} + \rho^\alpha S^\alpha S_p \frac{\partial p^\alpha}{\partial t} - \operatorname{div}\left(\rho^\alpha \frac{k_r^\alpha \mathbf{k}}{\mu} (\mathbf{grad} p^\alpha - \rho^\alpha \mathbf{g})\right) - \rho^\alpha Q_\rho^\alpha = 0. \quad (2.27)$$

Für ein *Zweiphasensystem*, bestehend aus einer Gas- und einer Fluidphase (hier Luft und Wasser), wird diese Gleichung für jede der beiden Phasen aufgestellt. Der Sättigungsgrad der jeweiligen Phase hängt dabei vom Kapillardruck

$$p_c = p^n - p^w \quad (2.28)$$

ab, der die Druckdifferenz aus dem Druck p^n der *nicht benetzenden* (*non-wetting*) und p^w der *benetzenden* (*wetting*) Phase beschreibt.

Für poröse Medien mit Verbindung zur Erdoberfläche kann nach RICHARDS (1931) angenommen werden, daß der Druck in der Gasphase konstant ist. Damit reduziert sich das System mit einer weiteren Vereinfachung der Zeitableitung (*Sättigungsterm* III)

$$n\rho^\alpha \frac{\partial S^\alpha}{\partial t} = n\rho^\alpha \frac{\partial S^\alpha}{\partial p_c} \frac{\partial p_c}{\partial t} \approx n\rho^\alpha \frac{\partial S^\alpha}{\partial p^w} \frac{\partial p^w}{\partial t} \quad (2.29)$$

auf eine Gleichung für die benetzende Phase:

$$\rho^w (S^w S_p + n \frac{\partial S^w}{\partial p^w}) \frac{\partial p^w}{\partial t} - \operatorname{div}(\rho^w \frac{k_r^w}{\mu^w} \mathbf{k} (\mathbf{grad} p^w - \rho^w \mathbf{g})) - \rho^w Q_\rho^w = 0. \quad (2.30)$$

Dichteänderungen werden über die sog. BOUSSINESQ-Approximation berücksichtigt, bei der die Dichte in allen Termen außer dem Auftriebsterm als konstant angenommen wird.

Die Dichte errechnet sich nach

$$\rho = \rho_0 \{ 1 + \bar{\beta}_p (p - p_0) - \bar{\beta}_T (T - T_0) + \frac{\bar{\beta}_c}{(C_{max} - C_0)} (C - C_0) \}, \quad (2.31)$$

mit dem isothermen Kompressibilitätskoeffizienten

$$\bar{\beta}_p = \frac{1}{\rho} \frac{\partial \rho}{\partial p} \Big|_{T,C}, \quad (2.32)$$

dem isobaren Wärmeausdehnungskoeffizienten

$$\bar{\beta}_T = \frac{1}{\rho} \frac{\partial \rho}{\partial T} \Big|_{p,C} \quad (2.33)$$

und der Massendichteverhältniszahl

$$\bar{\beta}_c = \frac{1}{\rho} \frac{\partial \rho}{\partial c} \Big|_{p,T}, \quad (2.34)$$

die die Dichteänderung infolge Konzentrationsänderung beschreibt.

Für die Transportgleichung ergibt sich

$$\frac{\partial (nS^w C)}{\partial t} - \operatorname{div}(nS^w \mathbf{D} \mathbf{grad} C) + \mathbf{v}_f^w \mathbf{grad} C + C Q_\rho^w - Q_C = 0. \quad (2.35)$$

2.3 Numerisches Berechnungsverfahren

Ein großer Vorteil der *Finite-Elemente-Methode (FEM)* ist die flexible Behandlung *komplexer Modellgeometrien*, wie sie bei *geklüfteten geologischen Formationen* auftreten. Im Rahmen dieser Arbeit wird eine *semidiskrete FEM* verwendet, mit unterschiedlichen numerischen Verfahren für die Orts- und die Zeitdiskretisierung. Dazu wird zunächst die zeitliche Diskretisierung mittels eines *Differenzen-Ansatzes* und anschließend die Ortsdiskretisierung mittels einer *FEM-Formulierung* durchgeführt.

Die ausführliche Entwicklung der Finite-Elemente-Gleichungen für Transportprobleme ist in den Arbeiten von KRÖHN (1991) (Stofftransport) und KOLDITZ (1990) (Wärmetransport) zu finden. Für die Grundwasserströmung sei auf die Arbeit von WOLLRATH (1990) und für Mehrphasenströmungen auf Arbeiten von HELMIG (1993) und THORENZ (2001) verwiesen. Letztere schließt die Behandlung dichteinduzierter Strömungen mit ein. Aufgrund der Vielfalt der Arbeiten, die sich ausführlich mit der numerischen Modellierung der beschriebenen Prozesse beschäftigen, sollen im folgenden nur einige grundlegende Erläuterungen zu der verwendeten semidiskreten FEM gegeben werden:

Zeitdiskretisierung

Die zeitliche Diskretisierung erfolgt mittels eines *Differenzen-Ansatzes* für die jeweilige Unbekannte u :

$$\frac{\partial u}{\partial t} \approx \frac{\Delta u}{\Delta t} = \frac{u(t + \Delta t) - u(t)}{\Delta t} \quad (2.36)$$

Für die zeitliche Auswertung der übrigen Terme wird mit der Wahl der *Kollokationsstelle* θ eine Wichtung zwischen alter und neuer Zeitebene herbeigeführt:

$$u \approx \theta u(t + \Delta t) + (1 - \theta) u(t), \quad 0 \leq \theta \leq 1. \quad (2.37)$$

Die Wahl der *Kollokationsstelle* und das damit definierte *Differenzen-Verfahren* haben einen starken Einfluß auf das Lösungsverhalten der numerischen Berechnung. Folgende Zeitschrittverfahren können unterschieden werden:

$$\begin{array}{lll} \text{EULER (vorwärts):} & \theta = 0 & \text{explizit} \\ \text{CRANK-NICOLSON:} & \theta = 0.5 & \text{semi-implizit} \\ \text{EULER (rückwärts):} & \theta = 1 & \text{implizit} \end{array} \quad (2.38)$$

Während sowohl das explizite als auch das implizite EULER-Verfahren von erster Genauigkeitsordnung sind, führt die Verwendung des CRANK-NICOLSON-Verfahrens auf eine Genauigkeit zweiter Ordnung. Gleichzeitig kann bei geeigneter Wahl der *Kollokationsstelle* ($\theta \geq 0.5$) eine *Stabilität des Differenzen-Verfahrens* herbeigeführt werden. So bildet das CRANK-NICOLSON-Verfahren bei hoher Genauigkeitsordnung die untere Grenze der stabilen Verfahren (vgl. KOLDITZ 1997). Um bei der Modellierung advektiv-dispersiver Transportprozesse (Stofftransport) Oszillationsfreiheit zu erreichen, muß bei Verwendung des CRANK-NICOLSON-Verfahrens außerdem die Bedingung

$$PgCr < 2 \quad (2.39)$$

mit der Gitter-PECLET-Zahl

$$Pg = \frac{vh}{D} \quad (2.40)$$

und der COURANT-Zahl

$$Cr = \frac{v\Delta t}{h} \quad (2.41)$$

erfüllt sein und der Zeitschritt Δt entsprechend gewählt werden.

Die *gitteradaptive Modellierung* dominant-advektiver Transportprozesse führt durch Reduzierung der *charakteristischen Elementlänge* h zu einer Verringerung der Gitter-PECLET-Zahl Pg , aber gleichzeitig zu einer Erhöhung der COURANT-Zahl Cr . Deshalb ist darauf zu achten, daß der Zeitschritt entsprechend dem COURANT-Kriterium

$$Cr \leq 1 \quad (2.42)$$

jeweils an das sich ändernde Berechnungsgitter angepaßt wird. Entsprechendes gilt für dominant-dispersive Transportprozesse. Hier ist das NEUMANN-Kriterium

$$Ne = \frac{D\Delta t}{h^2} \leq \frac{1}{2} \quad (2.43)$$

einzuhalten. Bei der Modellierung *gekoppelter Prozesse* ist hingegen der minimale Zeitschritt aller betrachteten Prozesse, z.B.

$$\Delta t = \min(\Delta t_p, \Delta t_C, \Delta t_T), \quad (2.44)$$

vorgegeben und ebenfalls an das sich ändernde Berechnungsgitter anzupassen.

Ortsdiskretisierung

Nach der zeitlichen Diskretisierung ist die unbekannte Größe u formal nur noch von den Ortskoordinaten abhängig, so daß die Ortsdiskretisierung mittels Finiter Elemente durchgeführt werden kann.

Die unbekannte Funktion u einer Randwertaufgabe, wie z.B. der POISSON-Gleichung

$$-\operatorname{div}(\mathbf{grad} u) = f \quad \text{mit} \quad u = 0 \quad \text{auf} \quad \partial\Omega, \quad (2.45)$$

wird zunächst mit Hilfe geeigneter Ansatzfunktionen ω_i durch eine Näherungsfunktion der Form

$$u_h = \hat{\mathbf{u}} \boldsymbol{\omega} = \sum_{i=1}^{n_{kno}} \hat{u}_i \omega_i \quad (2.46)$$

approximiert (RITZ'scher Ansatz). Die Näherungslösung u_h wird die ursprüngliche Bilanzgleichung nicht mehr exakt erfüllen, statt dessen gilt

$$R := \operatorname{div}(\mathbf{grad} u_h) + f \neq 0. \quad (2.47)$$

Die beste Näherungslösung wird demnach diejenige sein, für die das *Residuum* R zu einem Minimum wird.

Nach der *Methode der gewichteten Residuen* wird die betrachtete Differentialgleichung in eine Funktionalgleichung überführt. Dazu wird die *Orthogonalität des Residuums* R zu den linear unabhängigen Wichtungsfunktionen ϕ_i gemäß

$$\int_V R \phi \, dV = 0 \quad (2.48)$$

gefordert (*Minimierung des Residuums im integralen Mittel über das Berechnungsgebiet*).

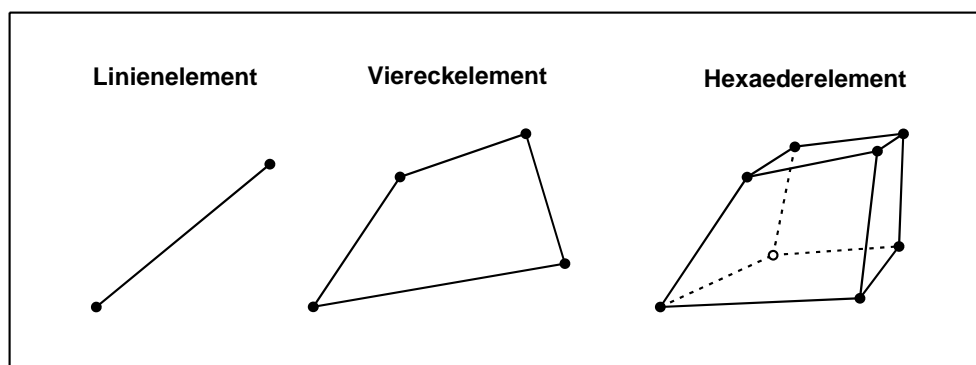


Abbildung 2.2: Elementtypen

Um das Berechnungsgebiet einerseits durch hinreichend viele Knoten zu diskretisieren, andererseits den Grad der Ansatzfunktionen möglichst gering zu halten, wird es in einzelne sich nicht überschneidende Teilgebiete (*Finite Elemente*) zerlegt. Zur Beschreibung der Geometrie des zu modellierenden Gebietes stehen zur Zeit die folgenden *Elementtypen* zur Verfügung (Abbildung 2.2):

- *Linienelemente* zur Nachbildung von ausgeprägten linienförmigen Fließkanälen oder Bohrlöchern (3D-Modell) und zur Modellierung von Klüften (2D-Modell)
- *Viereckselemente* zur Modellierung ebener Klüfte (3D-Modell) und zur Darstellung der Gesteinsmatrix als Kontinuum (2D-Modell)
- *Hexaederelemente* zur Darstellung der Gesteinsmatrix (3D-Modell)

Die einzelnen Elementtypen können, unter Berücksichtigung der *Konformitätsbedingung* (vgl. **Kapitel 4**), beliebig miteinander kombiniert werden (Abbildung 4.1).

Als Ansatzfunktionen werden lineare LAGRANGESche Ansatzfunktionen ω_i mit der Eigenschaft

$$\omega_i(x_j, y_j, z_j) = \delta_{ij} = \begin{cases} 0 & \text{für } j \neq i \\ 1 & \text{für } j = i \end{cases} \quad (2.49)$$

vorgegeben. LAGRANGESchen Ansatzfunktionen sind normiert, d.h. die Summe aller Ansatzfunktionen ist an jedem Punkt des Raumes eins.

Die FEM läßt sich in verschiedene Lösungstechniken unterteilen. So können bei der Behandlung von parabolischen Anfangsrandwertaufgaben (instationäre Grundwasserströmung, rein diffusiver Stofftransport) die Ansatzfunktionen ω gleich den Wichtungsfunktionen ϕ gewählt werden (Standard-GALERKIN-FEM).

Überwiegt dagegen der advective Transportanteil, kommt es zur Ausbildung scharfer Fronten. Die hier auftretenden großen Gradienten der Transportgröße führen zu Oszillationen in der Vermischungszone. Für die numerische Simulation dominant-advectiver Transportprozesse bieten sich neben der Nutzung gitteradaptiver Methoden deshalb sog. *Upwind-Verfahren* an. *Upwind-Verfahren* modifizieren die Wichtungsfunktionen derart, daß numerische Oszillationen durch die Erzeugung *numerischer Dispersion* gedämpft werden. Die Lösungen werden 'glatter'.

Ganz allgemein bezeichnet man Verfahren, bei denen die Wichtungsfunktionen von den Ansatzfunktionen verschieden sind als PETROV-GALERKIN-Verfahren.

Das Streamline Upwind/PETROV-GALERKIN-Verfahren (SU/PG-Verfahren) von BROOKS & HUGHES (1982) modifiziert die Wichtungsfunktionen strömungsgerichtet durch den Ansatz

$$\phi = \omega + \alpha \frac{\mathbf{v}_a}{|\mathbf{v}_a|} \mathbf{grad} \omega \quad (2.50)$$

mit dem *Upwindparameter* α . Die Wahl des *Upwindparameters* bestimmt entscheidend die Stabilität des Verfahrens. BROOKS & HUGHES (1982) schlagen hier

$$\alpha = \frac{h}{2} \quad (2.51)$$

vor.

BARLAG (1997) gibt für advektiv-dispersive Transportprozesse in porösen Medien den *Upwindparameter* in Abhängigkeit von der Gitter-PECLET-Zahl Pg an:

$$\alpha = \begin{cases} 0 & \text{für } Pg \leq 2 \\ \frac{h}{2} - \frac{D}{|\mathbf{v}_a|} & \text{für } Pg > 2 \end{cases} \quad (2.52)$$

Damit erhält man bei dominant-dispersivem Transport das für parabolische Gleichungen optimale BUBNOV-GALERKIN-Verfahren, während bei dominant-advectiven Prozessen das SU/PG-Verfahren zum Tragen kommt.

Kapitel 3

Gitteradaptive Methoden

3.1 Allgemeines

Gitteradaptive Methoden haben ihre Anfänge bereits Ende der 70er Jahre. BABUSKA & RHEINBOLDT (1978) haben erstmalig eine Methode angegeben, bei der aus einer Schätzung des lokalen Fehlers einer numerischen Berechnung auf notwendige Gitterverfeinerungen in bestimmten Regionen geschlossen werden kann. Das Ziel der Gitteradaption ist es also, das Berechnungsgitter, gesteuert durch *Fehler- bzw. Verfeinerungsindikatoren*, a posteriori so zu verändern, daß sich bei einer geringstmöglichen Anzahl an Freiheitsgraden eine größtmögliche Genauigkeit der numerischen Lösung ergibt.

Die *Finite-Elemente-Methode (FEM)* hat aufgrund der Verwendung *unstrukturierter Gitternetze* den Vorteil einer großen Flexibilität bei der Netzerstellung. Die Knotendichte der Berechnungsgitter muß ausreichen, um einerseits die Geometrie des Modellgebietes angemessen aufzulösen, andererseits den Diskretisierungsfehler der numerischen Lösung gering zu halten. Allerdings kann die Genauigkeit einer Näherungslösung aufgrund der verschiedenen Einflußparameter, wie z.B. der Geometrie des Modellgebietes oder der vorgegebenen Materialdaten, nur selten a priori abgeschätzt werden. Damit ist die Erstellung eines optimalen, problemangepaßten Berechnungsgitters insbesondere bei instationären Problemstellungen a priori sehr aufwendig. Dies führt häufig, um den Aufwand für die Netzerstellung zu reduzieren, zu sehr fein aufgelösten Berechnungsgittern mit den bekannten Auswirkungen auf Rechenzeit und Speicherplatzbedarf.

Nach RANK (1985) muß die sog. *Ingenieurzeit*, die u.a. für die Erstellung des Berechnungsgitters benötigt wird, neben der Rechenzeit und dem Speicherplatzbedarf deshalb auch zu den *Berechnungskosten* einer numerischen Berechnung gezählt werden. Um diese *Berechnungskosten* gering zu halten, bieten sich *gitteradaptive Methoden (h-,m-,r-Methode)* an. Neben der Möglichkeit, durch Netzverfeinerung Konvergenz bei FE-Berechnungen zu erhalten, hat in den letzten Jahren aber auch die sog. *p-Methode* als sukzessive Erhöhung des Polynomgrades der Ansatzfunktionen und die *hp-Methode* als Kombination von Netzverfeinerung und Ansatzgraderhöhung großes Interesse gefunden.

All diese Methoden geben dem Anwender die Möglichkeit, das Startgitter für eine numerische Berechnung mit einer geringen Anzahl an Elementen und damit auch Knoten zu modellieren. Die Knotendichte muß lediglich ausreichen, um die Geometrie des Modellgebietes aufzulösen, über einen evtl. Diskretisierungsfehler der Lösung muß sich der Anwender a priori keine Gedanken machen.

3.2 Verfeinerungsstrategien

Grundlegend lassen sich drei *Verfeinerungsstrategien* (gitteradaptive Methoden) unterscheiden:

- die Verschiebung vorhandener Knoten in Richtung kritischer Stellen (*r-Methode*)
- die Neuvernetzung kritischer Bereiche mittels eines Gittergenerators (*m-Methode*),
- und die Netzverdichtung durch Elementteilung und die damit einhergehende Reduzierung der charakteristischen Elementabmessungen h (*h-Methode*).

Als weitere Methoden können die *Subgrid-* und die *Moving Grid-Methode* genannt werden. Um a posteriori optimale Berechnungsgitter zu erzielen, besteht bei Bedarf außerdem die Möglichkeit, die genannten Methoden miteinander zu kombinieren.

3.2.1 r-Methode

Die in einem Ausgangsgitter vorhandenen Knoten werden in Richtung kritischer Stellen verschoben (Abbildung 3.1). Dadurch bleibt die Zahl der Freiheitsgrade in allen Berechnungsschritten gleich. Da sich die Geometrie der vorhandenen Elemente durch die Knotenverschiebung verändert, können auch stark verzerrte Elemente entstehen. Bei Vorhandensein von Materialheterogenitäten kann es, da sich die Materialdaten im Ausgangsgitter auf bestimmte Elemente beziehen, außerdem zu einer Verschiebung der Materialgrenzen kommen.

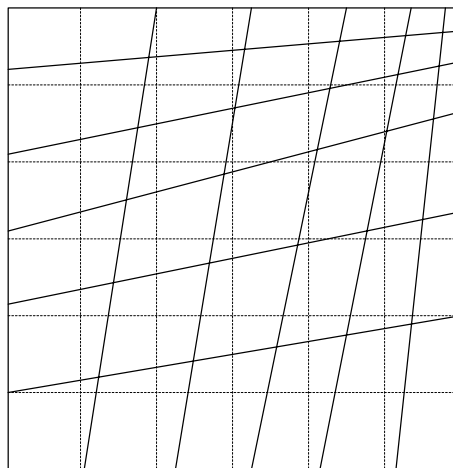


Abbildung 3.1: Verfeinerung durch Verschiebung der Knoten (*r-Methode*)

Die *r-Methode* wird in der Regel in Verbindung mit der Finite-Differenzen-Methode verwendet. Bei der FEM ist die *r-Methode* nur für kleine Problemgrößen effektiv und deshalb nur für Subprobleme, wie z.B. bei hierarchischen *hp-Ansätzen*, in der Nähe von Singularitäten (z.B. punktuelle Quellen und Senken) sinnvoll (STEIN ET AL. 1994).

3.2.2 m-Methode

Die *m-Methode* benötigt einen Gittergenerator zur lokalen oder globalen Neuvernetzung des betrachteten Gebietes. Damit können die Berechnungsgitter an evtl. Veränderungen des Berechnungsgebietes (z.B. bei freien Oberflächen) angepaßt werden. Die numerische Lösung auf dem Ausgangsgitter muß auf das neue Gitter interpoliert werden. Eine weitere Verbesserung des Berechnungsgitters läßt sich schließlich mit Hilfe der *h-Methode* erzielen.

3.2.3 h-Methode

Einfügen neuer Elemente

Die Genauigkeit der FE-Lösung ist u.a. von der *charakteristischen Elementabmessung* h abhängig. Bei adaptiver Netzverdichtung durch Elementteilung liegt die *h-Methode* vor. Um die Stetigkeit einer FE-Lösung zu garantieren, muß die sog. *geometrische Kompatibilitätsbedingung* an die Elemente erfüllt sein. Dazu müssen zwei Elemente, die sich in mehr als einem Eckknotenpunkt berühren, eine ganze Kante gemeinsam haben (RANK 1985).

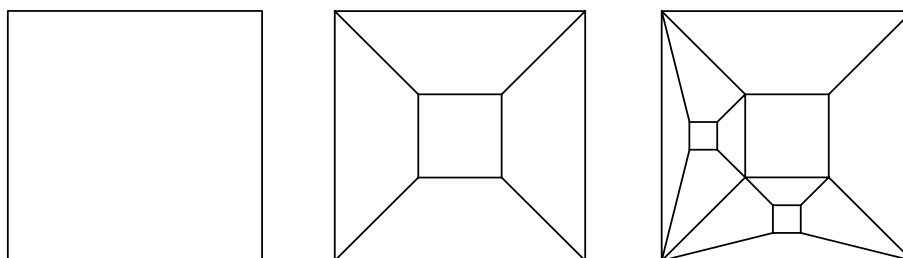


Abbildung 3.2: Verfeinerung durch Einfügen neuer Elemente (h-Methode)

Die in Abbildung 3.2 dargestellte Verfeinerung (Einfügen neuer Elemente) erfüllt zwar die Kompatibilitätsbedingung, hat aber den Nachteil, daß nach wenigen Verfeinerungsschritten stark verzerrte Elemente auftreten können. Dadurch wird gerade in den kritischen Bereichen, in denen eine Netzverfeinerung notwendig ist, die Genauigkeit der numerischen Lösung stark vermindert.

Verfeinerung durch Elementteilung

Dagegen bleibt bei der in Abbildung 3.3 dargestellten Elementteilung die Qualität des Ausgangselements auch nach mehreren Verfeinerungsschritten erhalten.

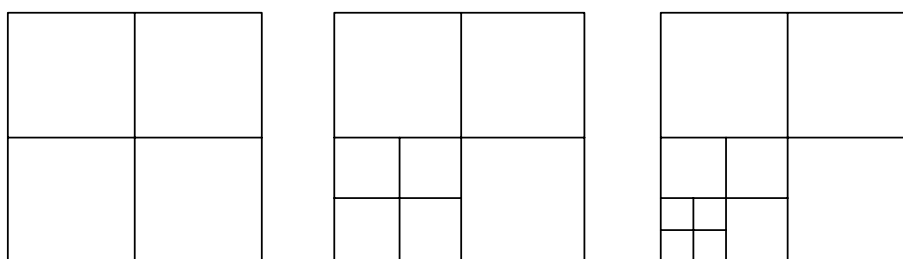


Abbildung 3.3: Verfeinerung durch Elementteilung (h-Methode)

Allerdings ist hier die geometrische Kompatibilitätsbedingung verletzt, so daß die Stetigkeit der numerischen Lösung in den sog. *irregulären* oder *hängenden* Knoten sichergestellt werden muß.

Anmerkung: Ein Knoten eines bilinearen Viereckselements wird als *regulärer* Knoten bezeichnet, wenn er Eckknoten aller angrenzenden Elemente ist. Alle anderen Knoten heißen *irregulär*.

Die Stetigkeit der Lösung in den *irregulären* Knoten (Abbildung 3.4, Mitte) kann entweder durch Übergangselemente (RUST 1991, BASTIAN 1994) oder durch Elimination der zugehörigen Freiheitsgrade im Gesamtgleichungssystem bzw. bereits beim Aufbau der Elementmatrizen erfolgen (RANK 1985, DEVLOO ET AL. 1987). Dabei wird gefordert, daß sich die Lösung im *irregulären* Knoten durch Interpolation der Lösungswerte in den benachbarten *regulären* Knoten ergibt.

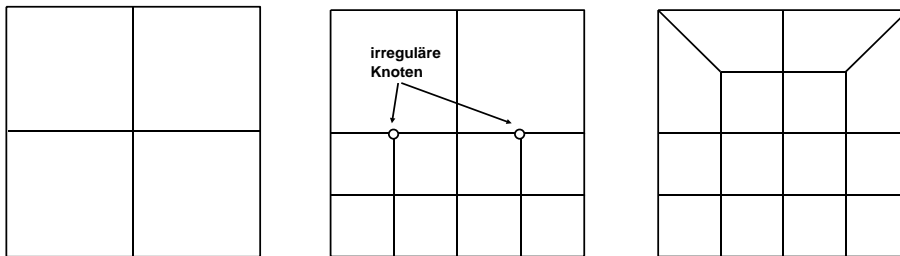


Abbildung 3.4: Behandlung irregulärer Knoten

Bei der Verwendung von Übergangselementen (Abbildung 3.4, rechts) ist darauf zu achten, daß diese Elemente vor jedem weiteren Adaptionsschritt aufgelöst werden, um das Entstehen von verzerrten Elementen durch erneute Verfeinerung zu verhindern.

Diese Methode (Verfeinerung durch Elementteilung) ist in Verbindung mit der FEM sehr gut auf geometrisch komplexe Gebiete anwendbar. Deshalb wird sie bevorzugt zur gitteradaptiven Modellierung von Strömungs- und Transportprozessen in porösen (PEPPER & STEPHENSON 1995, LI ET AL. 2000) und geklüftet-porösen (BARLAG 1997) Medien verwendet.

3.2.4 Subgrid-Methode

Die *Subgrid-Methode* (Abbildung 3.5), die auf BERGER & OLIGER (1984) zurückgeht, wurde für die Finite-Differenzen-Methode und damit für strukturierte Gitternetze entwickelt. Hierbei wird ein grobes Ausgangsgitter durch feinere 'subgrids' überlagert, auf denen getrennt voneinander die numerischen Berechnungen durchgeführt werden.

Je nach Feinheit dieser Gitter wird mit unterschiedlichen Zeitschritten gerechnet. Da nur die lokal begrenzten feinen Gitter mit einem entsprechend kleinen Zeitschritt versehen werden, kann dadurch Rechenzeit eingespart werden. Die 'subgrids' müssen mit geeigneten Randbedingungen versehen und die Ergebnisse nach erfolgter Rechnung auf das grobe Ausgangsgitter interpoliert werden. Da die 'subgrids' beliebig orientiert sein können, besteht die Möglichkeit, diese Gitter an den Stromlinien auszurichten. MANZINI & ROSELLA (1994)

und WOLFSBERG & FREYBERG (1994) haben die Subgrid-Methode verwendet, um einerseits Stofftransport, andererseits reaktiven Stofftransport in porösen Medien zu modellieren. Allerdings ist diese Methode auf geometrisch komplexe Gebiete, wie geklüftet-poröse Medien, nur eingeschränkt anwendbar.

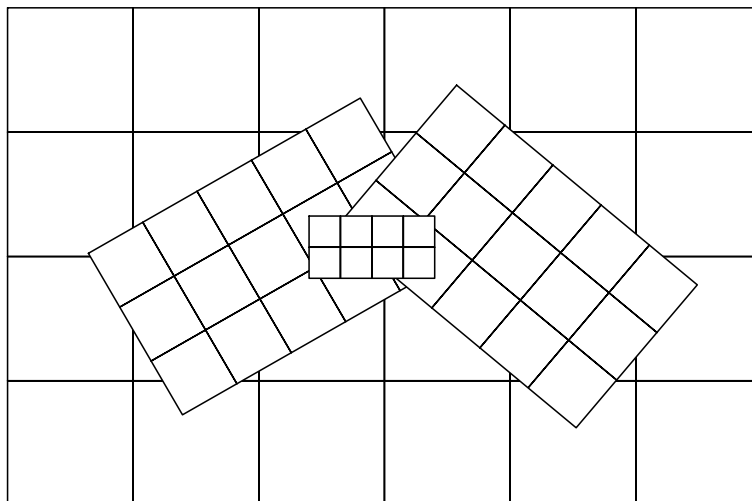


Abbildung 3.5: Subgrid-Methode

3.2.5 Moving Grid-Methode

Im Unterschied zu der *Subgrid-Methode* haben bei der von GROPP (1980) entwickelten *Moving Grid-Methode* die feineren Gitter eine Geschwindigkeit, mit der sie sich durch das nächst größere Gitter bewegen. Die zunächst nur für eine Verfeinerungstiefe entwickelte Methode wurde schließlich auf eine beliebige Anzahl von Verfeinerungstiefen erweitert (GROPP 1987). Dabei findet eine Neuvernetzung des Gebietes erst dann statt, wenn ein Gitter aufgrund seiner Geschwindigkeit das größere Gitter, in dem es sich bewegt, verläßt oder zwei Gitter kollidieren.

3.3 Fehler- und Verfeinerungsindikatoren

Um auf notwendige Gitterverfeinerungen in bestimmten Regionen des Berechnungsgebietes schließen zu können, sind *Fehler- oder Verfeinerungsindikatoren* notwendig, mittels derer man den lokalen Fehler einer numerischen Berechnung abschätzen oder zumindest eine Gitternetzanpassung steuern kann.

Eine große Gruppe von Fehlerschätzern stellen die sog. *Residualen Schätzer* dar, die auf BABUSKA & RHEINBOLDT (1978) zurückgehen. Hierbei wird der auf ein Element E bezogene Fehler über die Größe des Residuums im Elementinnern R_E und der Kantensprünge R_K für $K \in \partial E$ abgeschätzt. Auf die genaue Herleitung dieser Fehlerschätzer soll hier nicht weiter eingegangen, sondern auf die Literatur verwiesen werden (z.B. BABUSKA & RHEINBOLDT 1978, BABUSKA & MILLER 1981, BIETERMAN & BABUSKA 1982, JOHNSON 1990).

Zum besseren Verständnis dieser Arbeit müssen die Begriffe *Fehlerindikator* und *Verfeinerungsindikator* eindeutig geklärt werden. Die nun folgenden Definitionen findet man u.a.

bei BABUSKA & MILLER (1981) und RANK (1985):

Eine aus einer FE-Näherung berechenbare Größe η heißt *Fehlerestimator* bzw. *Fehlerschätzer*, wenn es zwei Konstanten C_1 und C_2 gibt, so daß für $e := u_h - u$ gilt:

$$C_1\eta \leq \|e\| \leq C_2\eta. \quad (3.1)$$

Für $C_1 \approx 1$ und $C_2 \approx 1$ gibt η die Größenordnung des Fehlers der FE-Näherung an. Ein Fehlerschätzer heißt *asymptotisch exakt*, falls gilt

$$\lim_{h \rightarrow 0} \frac{\eta}{\|e\|} = 1. \quad (3.2)$$

Ein *Fehlerindikator* bzw. *lokaler Fehlerschätzer η_i ist eine Größe, die sich für jedes Element aus der FE-Lösung berechnen läßt. Der Zusammenhang zwischen Fehlerestimator und Fehlerindikator ist durch die Gleichung*

$$\eta^2 = \sum_{i=1}^{n_{ele}} \eta_i^2 \quad (3.3)$$

gegeben.

Läßt sich mittels η_i zwar eine Aussage über die Fehlerverteilung machen, ohne daß zugleich die linke Seite der Ungleichung (3.1) für einen zugehörigen Fehlerestimator gezeigt wird, so spricht man von einem *Verfeinerungsindikator*. Obwohl damit keine Abschätzung des Gesamtfehlers vorgenommen werden kann, kann mit Hilfe dieser *analytischen Verfeinerungsindikatoren* eine automatische Gitternetzanzpassung gesteuert werden.

Im Gegensatz hierzu geben *heuristische Verfeinerungsindikatoren* keine Information über die tatsächliche Fehlerverteilung. Vielmehr wird von der Annahme ausgegangen, daß in Bereichen großer Gradienten oder Gradienten-Sprünge mit einem Fehler in der numerischen Lösung zu rechnen ist.

Über das Residuum R einer numerischen Lösung lassen sich bereits einfache heuristische Verfeinerungsindikatoren herleiten. Betrachtet man auch hier wieder die POISSON-Gleichung

$$-\operatorname{div}(\mathbf{grad} u) = f \quad \text{mit} \quad u = 0 \quad \text{auf} \quad \partial\Omega, \quad (3.4)$$

so erhält man, wenn die FE-Lösung u_h in die Differentialgleichung eingesetzt wird, das Residuum R mit

$$R := R(u_h) := \operatorname{div}(\mathbf{grad} u_h) + f. \quad (3.5)$$

Da u_h hier eine stückweise lineare Funktion ist, ist die zweite Ableitung u_h'' nicht definiert. Deshalb wird die Sprunghöhe von u_h' als zweite Ableitung verstanden (Abbildung 3.6). Das Residuum R setzt sich somit aus zwei Anteilen zusammen. Im Elementinnern ist

$$R_E := R_E(u_h) := f, \quad (3.6)$$

und auf dem Rand der Elemente ergibt sich das kantenbezogene Residuum R_K mit

$$R_K := R_K(u_h) := \left[\frac{\partial u_h}{\partial n} \right] \quad \text{für } K \in \partial E. \quad (3.7)$$

Betrachtet man lediglich das kantenbezogene Residuum R_K , so erhält man hieraus bereits einen sog. *Sprung-Indikator* mit den Gradienten-Sprüngen $[\partial u_h / \partial n]$.

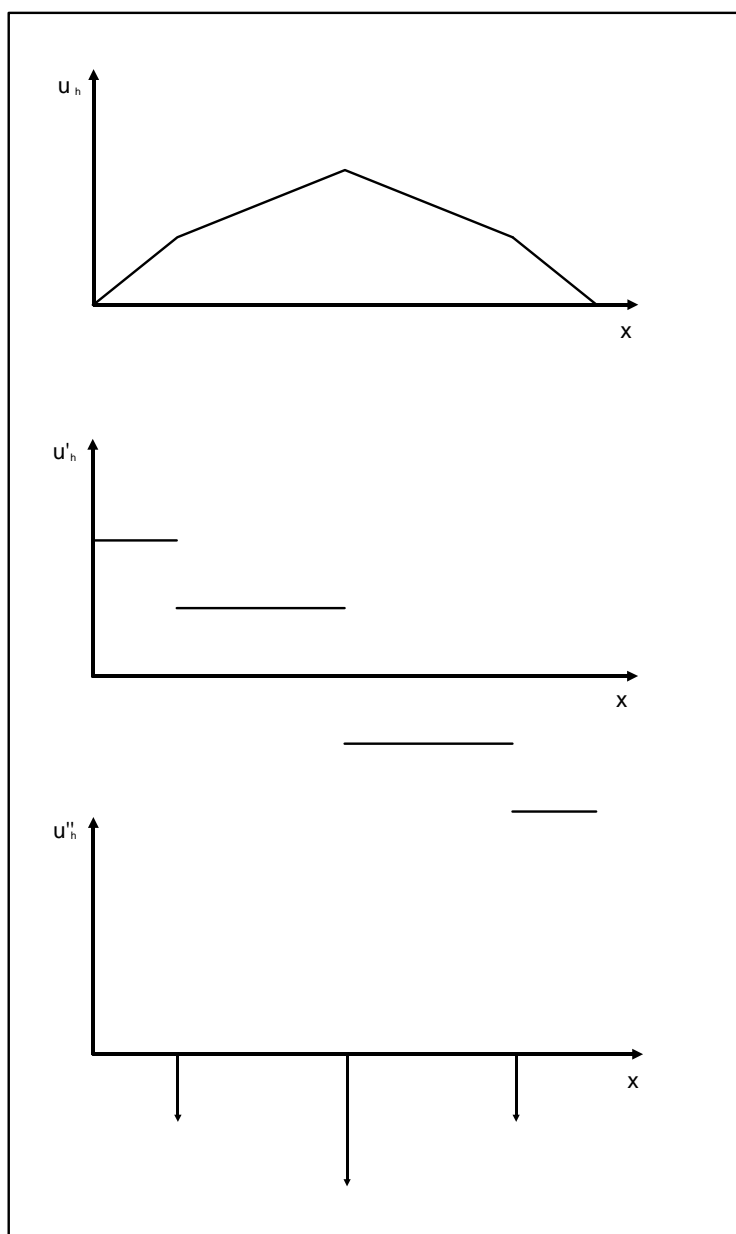


Abbildung 3.6: Funktionsverlauf der FE-Lösung sowie erste und zweite Ableitung bei linearen Ansatzfunktionen (nach RANK 1985)

Kapitel 4

Gitteradaption für die Modellierung gekoppelter Prozesse

4.1 Allgemeines

Der von SCHULZE-RUHFUS (1996) und BARLAG (1997) entwickelte *h-adaptive Algorithmus* zur Modellierung des Stofftransports im Kluftgestein wurde im Rahmen dieser Arbeit zunächst von *konform gekoppelten 1D-/2D-/3D-Elementen* (Abbildung 4.1 (links)) auf sog. *2.5D-Kluftnetzwerke* (Abbildung 4.1 (rechts)) und schließlich auf beliebig (*konform*) *gekoppelte geometrische Systeme* erweitert (KAISER ET AL. 1998, KAISER ET AL. 1999).

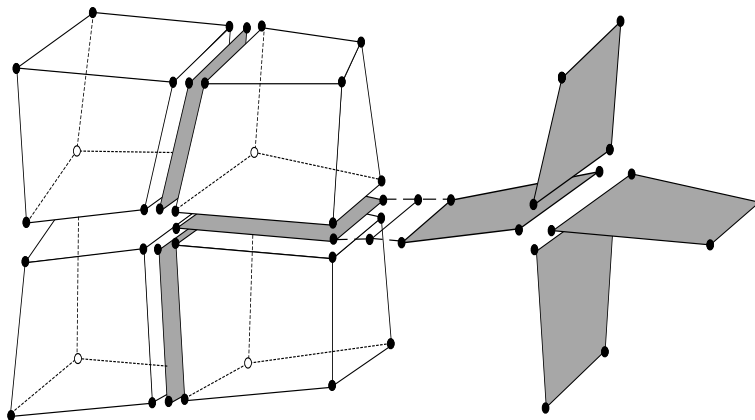


Abbildung 4.1: Kopplung verschiedener Elementdimensionen (1D, 2D, 3D)

Die stetige Weiterentwicklung des Grundwassersimulators RockFlow machte zudem umfangreiche Erweiterungen des gitteradaptiven Algorithmus notwendig, um die Gitteradaption auf beliebig gekoppelte Prozesse (*Mehrfeldprobleme*) in porösen und geklüftet-porösen Medien (*gekoppelte geometrische Systeme*) anwenden zu können (KAISER ET AL. 2000a, KAISER ET AL. 2000b). In diesem Zusammenhang soll im folgenden von *gekoppelter Gitteradaption* die Rede sein.

4.2 Ausgangsgitter

Die numerische Simulation gekoppelter Prozesse in porösen oder geklüftet-porösen Medien erfordert Gitternetze, die die Geometrie dieser *komplexen geologischen Formationen* abbilden. Dabei müssen Klüfte, Materialheterogenitäten (Porositäten, Durchlässigkeiten) der unterschiedlichen Bodenschichten sowie Injektions- und Extraktionsstellen (Quellen und Senken) berücksichtigt werden.

Die Komplexität dreidimensionaler geologischer Strukturen kann nur mittels *unstrukturierter Gitternetze* gut erfaßt werden. Da bereits die Erfassung der Grobstruktur eines heterogenen Aquifers einen hohen Diskretisierungsaufwand erfordert (KASPER ET AL. 1996, ROTHER ET AL. 2000), kann insbesondere bei der Modellierung instationärer Prozesse die zu erwartende Näherungslösung bei der räumlichen Diskretisierung nicht berücksichtigt werden.

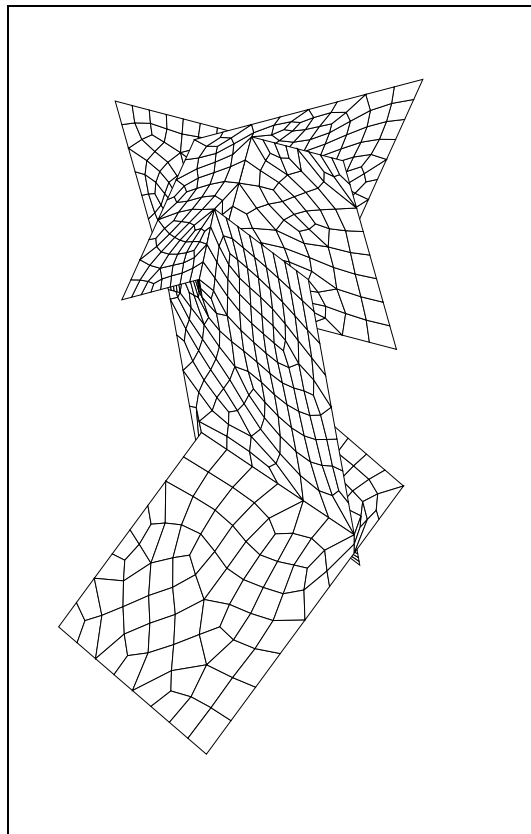


Abbildung 4.2: 2.5D-Kluftnetzwerk

Das Lösungsverhalten einer numerischen Simulation wird durch die Gitternetzgeometrie stark beeinflusst. Die besten numerischen Ergebnisse ergeben sich bei gedrungenen Elementformen. So sollten die Elemente in Vierecksnetzen möglichst quadratisch oder zumindest rechtwinklig sein. Außerdem sind zu große Unterschiede in der Größe benachbarter Elemente gleicher Dimension zu vermeiden.

Für die Diskretisierung eines 3D-Kluftaquifers stehen drei Typen von *Strukturelementen* zur Verfügung. So wird

- die Gesteinsmatrix dreidimensional (*Volumen-Elemente*),
- angrenzende Kluftebenen zweidimensional (*Flächen-Elemente*)
- und bevorzugte Fließ- und Transportpfade eindimensional (*Linien-Elemente*)

dargestellt (Abbildung 4.1).

Eine grundlegende Voraussetzung für die Anwendung der Finite-Elemente-Methode ist die *Konformität der Elementverknüpfungen*. Sie besagt, daß Knoten, Kanten und Flächen benachbarter Elemente miteinander korrespondieren müssen (*konform gekoppelte Elemente*). Diese Bedingung muß auch durch 2.5D-Kluftnetzwerke (Abbildung 4.2) erfüllt sein. Dabei handelt es sich um *diskrete Kluftnetzwerke* (2D-Elemente) ohne Berücksichtigung der Gesteinsmatrix (3D-Elemente), die z.B. im Falle geringer Durchlässigkeiten vernachlässigt werden kann.

4.3 Verfeinerungs- und Vergrößerungsalgorithmus

Insbesondere die Modellierung instationärer Prozesse macht ein sich ständig anpassendes Berechnungsgitter erforderlich. Damit das Berechnungsgitter in jedem Zeitschritt optimal an zeitabhängige Prozesse angepaßt werden kann, muß neben der Elementverfeinerung die Möglichkeit bestehen, Elemente durch Vergrößerung wieder aufzulösen.

SCHULZE-RUHFUS (1996) hat, basierend auf Arbeiten von DEVLOO ET AL. (1987), einen Algorithmus entwickelt, der diese Möglichkeit für *konform gekoppelte 1D-/2D-/3D-Elemente* bereitstellt. Dieser Algorithmus (Abbildung 4.4) wurde in modifizierter Form in den Grundwassersimulator RockFlow übernommen und derart erweitert, daß er sowohl für 2.5D-Kluftnetzwerke und beliebig *gekoppelte geometrische Systeme* als auch zur numerischen Simulation beliebig gekoppelter Prozesse (*Mehrfeldprobleme*) verwendet werden kann.

4.3.1 Anforderungen an den Verfeinerungs- und Vergrößerungsalgorithmus

Die im wesentlichen von SCHULZE-RUHFUS (1996) definierten und im Rahmen dieser Arbeit erweiterten Anforderungen an den verwendeten Algorithmus sollen hier der Vollständigkeit halber erläutert werden. Dies macht zunächst einige **Begriffserklärungen** notwendig:

- *Ausgangselemente* sind Elemente, die bereits vor dem ersten Verfeinerungsschritt existieren (*Elemente des Ausgangsgitters*) und somit keine Vorgängerelemente besitzen. Diesen Elementen wird der *Verfeinerungslevel 0* zugewiesen.
- Jedes Element, das durch eine Elementverfeinerung entstanden ist, erhält den um 1 erhöhten *Verfeinerungslevel* seines Vorgängerelementes (Abbildung 4.3). Ein Element mit dem Verfeinerungslevel 4 ist folglich durch die vierte Verfeinerung des hierarchisch darüberliegenden Ausgangselementes entstanden. Über die Vorgabe eines *maximalen Verfeinerungslevels* lev_{max} besteht die Möglichkeit, die maximale Anzahl an Elementen zu begrenzen.

- Die durch die Verfeinerung eines Elementes entstandenen Elemente werden als *Kinder* bezeichnet.
- Elemente, die nicht verfeinert wurden und somit keine Kinder haben, heißen *aktive Elemente*. Alle verfeinerten Elemente sind dagegen *inaktiv*.

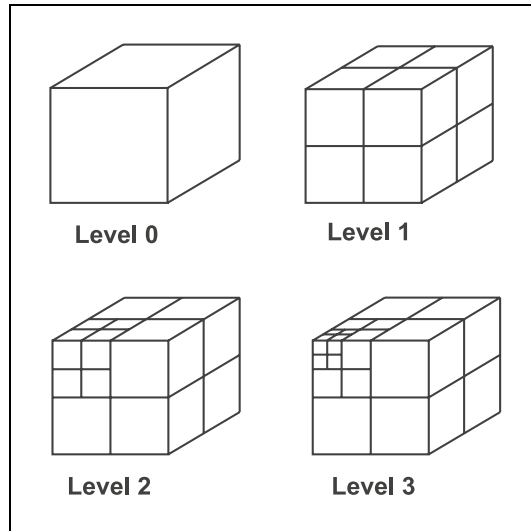


Abbildung 4.3: Verfeinerungslevel

- *Geschwisterelemente* zueinander sind die Kinder desselben Vorgängerelementes. Sie besitzen den gleichen *Verfeinerungslevel*.
- Als *Nachbarelemente* werden bei reinen 1D-Netzen *aktive* Elemente bezeichnet, die über einen Knoten zusammenhängen, bei gekoppelten 1D-/2D- und 1D-/2D-/3D-Netzen *aktive* Elemente, deren Kanten zusammenfallen.

Anforderungen an den Algorithmus

1. Elementverfeinerung

- (a) Die *aktuellen Verfeinerungslevel* zweier benachbarter Elemente dürfen sich nur um maximal einen Level unterscheiden. Damit ist sichergestellt, daß benachbarte Elemente keine zu großen Größenunterschiede aufweisen und pro Kante und Fläche nicht mehr als ein *irregulärer Knoten* auftritt.
- (b) Elemente, die den *maximalen Verfeinerungslevel* lev_{max} erreicht haben, dürfen nicht weiter verfeinert werden. Dadurch wird sowohl die maximale Anzahl an Elementen und damit auch an Knoten als auch die Größe des kleinsten durch Verfeinerung entstehenden Elementes begrenzt.
- (c) Ein Element, das zum Verfeinern markiert wurde, wird auf jeden Fall verfeinert, es sei denn, der *maximale Verfeinerungslevel* lev_{max} ist bereits erreicht. Das bedeutet, daß benachbarte Elemente, deren Verfeinerungslevel zu niedrig ist, ebenfalls verfeinert werden müssen (Anforderung 1(a)).

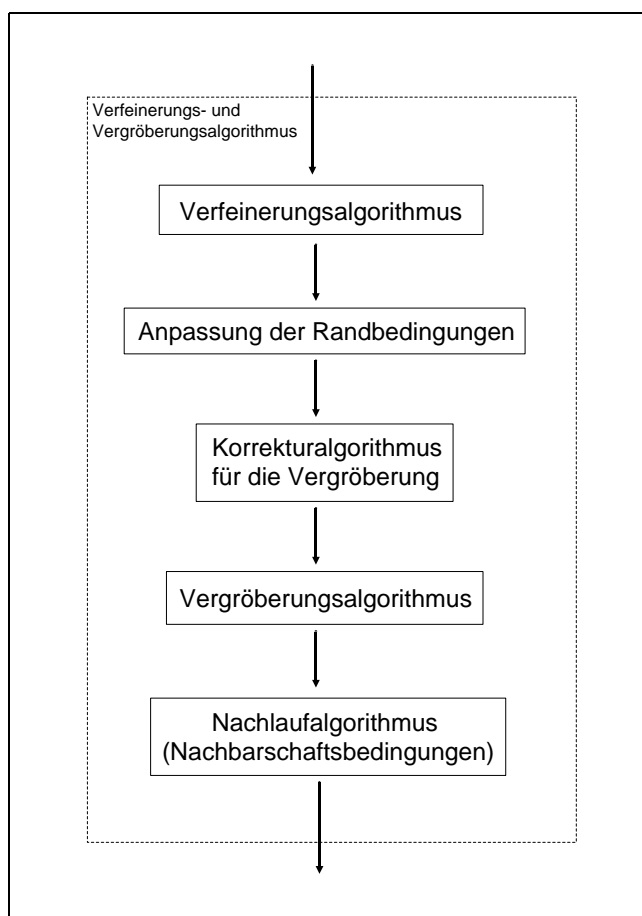


Abbildung 4.4: Verfeinerungs- und Vergrößerungsalgorithmus (Flußdiagramm)

2. Elementvergrößerung

- (a) Da *Ausgangselemente* (Verfeinerungslevel 0) keine Vorgängerelemente besitzen, dürfen sie nicht vergrößert werden.
- (b) Ein Element, das zum Vergrößern markiert wurde, darf nur vergrößert werden, wenn alle *Geschwisterelemente* ebenfalls markiert wurden.
- (c) *Geschwisterelemente*, die zum Vergrößern markiert wurden, werden nur dann vergrößert, wenn sich der Verfeinerungslevel zweier benachbarter Elemente nach der Vergrößerung um nicht mehr als 1 unterscheidet. Dadurch werden ebenfalls zu große Größenunterschiede benachbarter Elemente vermieden.
- (d) Elemente, die Kinder haben, (*inaktive* Elemente) dürfen nicht aufgelöst werden.

3. Weitere Anforderungen

- (a) Wenn bei gekoppelten $1D$ -/ $2D$ -Netzen ein $2D$ -Element, das keine Kinder hat, mindestens n $2D$ -Nachbarn aufweist, die Kinder haben, so wird es ebenfalls verfeinert. Damit wird die Anzahl der *irregulären Knoten* im Gebiet reduziert. (*Glättung der Verfeinerungszonen* für $n = 2$ und $n = 3$).
Bei gekoppelten $1D$ -/ $2D$ -/ $3D$ -Netzen gilt entsprechendes für die über die Flächen definierten $3D$ -Nachbarn. Hier sorgt ein Wert von $n = 4$ oder $n = 5$ für *glatte Grenzen*.

- (b) Werden Elemente unterschiedlicher Dimension miteinander gekoppelt, so darf es keine *irregulären Elementmittelpunkten* geben. Für gekoppelte $1D$ -/ $2D$ -Netze bedeutet das, daß die einem $1D$ -Element benachbarten $2D$ -Elemente den gleichen Verfeinerungslevel aufweisen müssen, wie das $1D$ -Element. So kann auf einem $1D$ -Element kein *irregulärer Knoten* liegen.

Bei gekoppelten $1D$ -/ $2D$ -/ $3D$ -Netzen werden auf diese Weise *irreguläre Knoten* auf den Rändern von $2D$ -Elementen mit direkt angrenzendem $1D$ -Element sowie als Flächenmittel- und Flächenrandknoten von $3D$ -Elementen mit direkt angrenzendem $2D$ - bzw. $1D$ -Element verhindert.

Eine Beschreibung der für den Verfeinerungs- und Vergrößerungsalgorithmus notwendigen Datenstrukturen, wie z.B. die Realisierung der Knoten-, Kanten- und Flächenverzeichnisse, kann ebenfalls im wesentlichen der Arbeit von SCHULZE-RUHFUS (1996) entnommen werden.

4.3.2 Elementverfeinerung

Die Verfeinerung eines Elementes erfolgt durch *gleichmäßige Teilung*. Dazu werden Knoten im Mittelpunkt der Kante, im Schwerpunkt der Fläche und im Schwerpunkt des Volumens erzeugt. Hieraus entstehen die *Kindelemente* des zu verfeinernden Elementes, wobei aus jedem $1D$ -Element zwei, aus jedem $2D$ -Element vier und aus jedem $3D$ -Element acht neue Elemente hervorgehen (Abbildung 4.5).

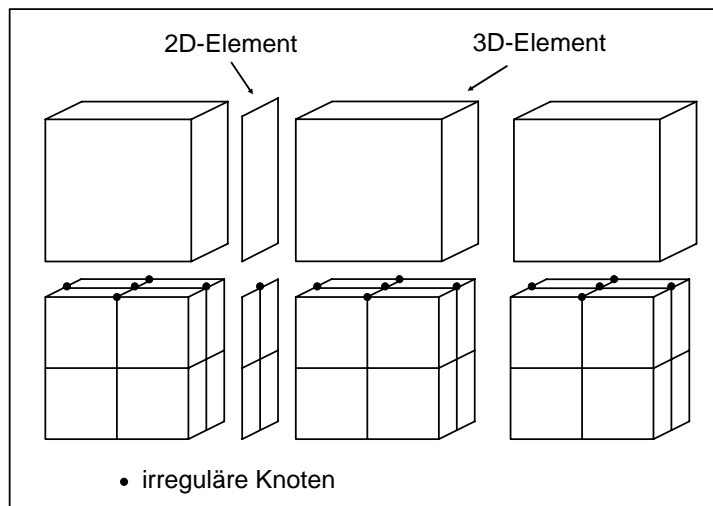


Abbildung 4.5: Verfeinerungsstrategie

Die Qualität der Elemente des Ausgangsgitters entscheidet dabei über die Qualität aller hierarchisch darunter liegenden Elemente und damit über die Qualität der Ergebnisse einer numerischen Berechnung.

Um im Falle gekoppelter Netze *irreguläre Element-Mittelpunkten* entsprechend Anforderung 3(b) zu vermeiden, wird gefordert, daß die Verfeinerung eines Elementes mit geringerer Dimension die Verfeinerung der benachbarten Elemente höherer Dimension nach sich zieht. Hier wird von einer *Hierarchie der Elementdimensionen* (BARLAG 1997) ausgegangen,

die besagt, daß numerisch schwieriger zu erfassende advective Transportvorgänge in den Klüften (2D-Elemente) und diffusive Vorgänge in der Gesteinsmatrix (3D-Elemente) stattfinden.

Bei jeder Elementverfeinerung werden Prozeßdaten, wie Materialparameter (Durchlässigkeitsbeiwerte, Porositäten, Diffusions- und Dispersionsbeiwerte), elementbezogene numerische Parameter (Anzahl der Gauß-Punkte) und Geometriedaten (Querschnittsflächen der 1D-Elemente, Dicken der 2D-Elemente), an die Kindelemente *vererbt*. Notwendige Elementmatrizen werden für die neu entstandenen Elemente berechnet.

Außerdem werden bei der Erzeugung neuer Knoten die am jeweiligen zu modellierenden Prozeß beteiligten Feldgrößen (z.B. 'Druck', 'Sättigung', 'Konzentration', 'Temperatur') in den neuen Knoten durch *lineare Interpolation* gewonnen. Entsprechend wird bei einem neuen Knoten zwischen zwei Randbedingungsknoten vorgegangen, der dann als neuer Randbedingungsknoten definiert wird.

Wie bereits erwähnt, entstehen bei der hier vorgestellten h-adaptiven Methode *irreguläre Knoten*, in denen die Stetigkeit der numerischen Lösung sichergestellt werden muß. Da die Verwendung von Hexaedern als *Übergangselemente* bei 3D-Netzen und insbesondere bei gekoppelten 1D-/2D-/3D-Netzen sehr aufwendig ist, werden die zugehörigen Freiheitsgrade entweder im Gesamtgleichungssystem oder bereits beim Aufbau der Elementmatrizen eliminiert (RANK 1985, DEVLOO ET AL. 1987, BARLAG 1997). Die Lösung im *irregulären Knoten* ergibt sich durch Interpolation der Lösungswerte der benachbarten *regulären Knoten*. Durch Einfügen einer entsprechenden *Zwangsbedingung* in das Gesamtgleichungssystem steht, nachdem das Gleichungssystem gelöst wurde, die numerische Lösung in diesen Knoten direkt zur Verfügung (THORENZ 2001).

4.3.3 Elementvergrößerung

Eine Elementvergrößerung bedeutet die Auflösung von zur Vergrößerung markierten *Geschwisterelementen* und die Wiederherstellung des bis dahin *inaktiven Vorgängerelementes*. Aufgrund der oben aufgeführten Anforderungen an die Elementvergrößerung ergibt sich eine deutliche Bevorzugung der Verfeinerung. Dies ist notwendig, um eine Konkurrenz zwischen Verfeinerung und Vergrößerung zu vermeiden. Damit wird zugunsten eines feineren Berechnungsgitters entschieden.

Die Vergrößerung von zuvor verfeinerten Elementen führt in der Regel zu einem geringen Fehler in der numerischen Lösung, der sich bei der numerischen Simulation des Stofftransports als *Massenfehler* darstellt. BARLAG (1997) hat nach einer Idee von BRAUN (1993) einen *Korrekturalgorithmus für mehrdimensionale Probleme* realisiert, der im Rahmen dieser Arbeit beliebigen Feldgrößen zugänglich gemacht wurde. Für die Näherungsfunktion u_h mit

$$u_h = \sum_{i=1}^{n_{kno}} \hat{u}_i \omega_i \quad (4.1)$$

muß für den zu vergrößernden Bereich die Bedingung

$$\int u_{h,fein} dV = \int u_{h,grob} dV \quad (4.2)$$

erfüllt sein. Dazu wird, wie in Abbildung (Abbildung 4.6) dargestellt, in den betreffenden Knoten zu der numerischen Lösung ein *Korrekturwert* addiert, so daß Bedingung (4.2) erfüllt ist. Randbedingungsknoten dürfen dabei nicht *'korrigiert'* werden.

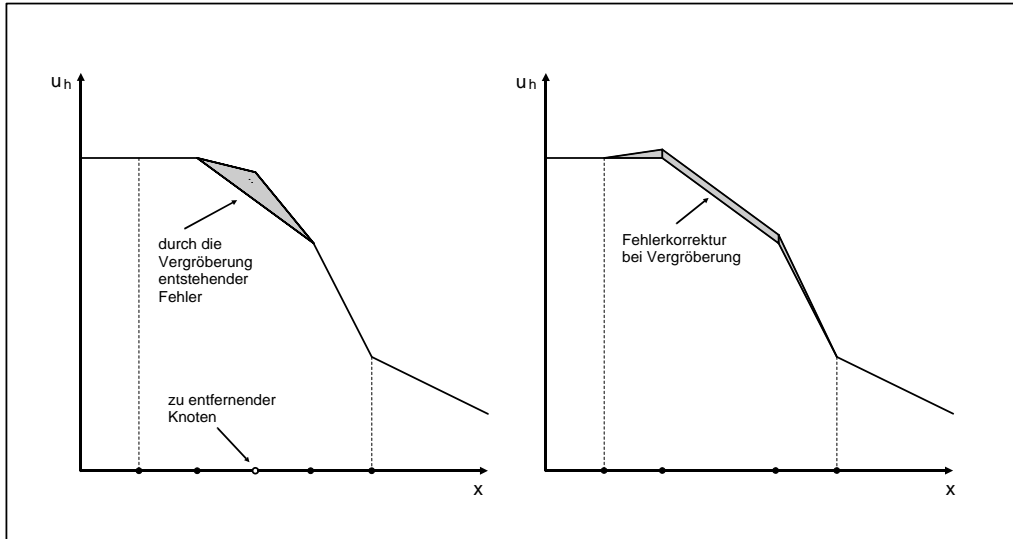


Abbildung 4.6: Fehlerkorrektur bei Elementvergrößerung

Da durch die Elementverfeinerung neue Randbedingungsknoten entstehen können, ist diese Korrektur nach der Aktualisierung der Randbedingungen und vor der eigentlichen Vergrößerung durchzuführen (Abbildung 4.4).

Wie bei der Elementverfeinerung werden bei gekoppelten $1D/2D/3D$ -Netzen Elemente mit geringerer Dimension gegenüber Elementen mit höherer Dimension bevorzugt. Dazu zieht, gemäß der *Hierarchie der Elementdimensionen*, die Vergrößerung eines Elementes geringerer Dimension die Vergrößerung eines benachbarten Elementes höherer Dimension nach sich.

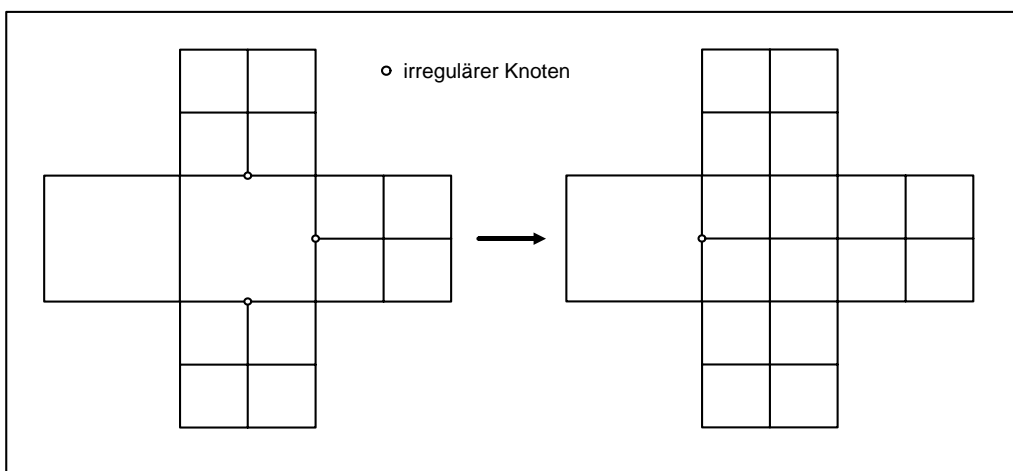


Abbildung 4.7: Nachbarschaftsbedingung

4.3.4 Nachbarschaftsbedingung

Irreguläre Knoten führen unweigerlich zu numerischen Ungenauigkeiten in den betreffenden Bereichen, insbesondere dann, wenn an einem Element mehrere *irreguläre Knoten* entstehen (Abbildung 4.7). Deshalb ist es sinnvoll, durch eine *Glättung der Verfeinerungszonen* (Anforderung 3(a)) die *Anzahl der irregulären Knoten im Gesamtgleichungssystem* klein zu halten. Gleichzeitig wird dadurch der Rechenaufwand zur Eliminierung dieser Knoten reduziert.

4.4 Verfeinerungs- und Vergrößerungskriterien

Um eine Gitternetzanpassung mittels des beschriebenen h-adaptiven Algorithmus durchführen zu können, sind *Verfeinerungs- und Vergrößerungskriterien* notwendig. Hierzu zählen

- *Fehler- oder Verfeinerungsindikatoren* η_E zur Bestimmung der lokalen Fehler einer numerischen Berechnung und damit einer Fehlerverteilung über das Berechnungsgebiet
- und *Verfeinerungs- und Vergrößerungstoleranzen* tol^f und tol^g zur Bestimmung der Gebiete, in denen eine Gitternetzanpassung notwendig ist.

Dies sind neben der *maximalen Verfeinerungstiefe* lev_{max} die wesentlichen Kriterien, über die ein Anwender den Verlauf der Gitteradaption steuern kann (Abbildung 4.8).

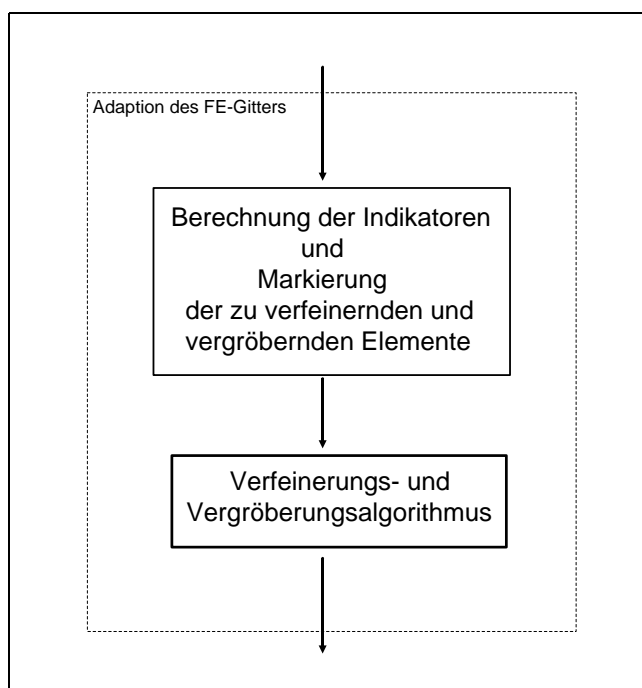


Abbildung 4.8: Adaption des FE-Gitters (Flußdiagramm)

4.4.1 Verfeinerungsindikatoren

Insbesondere großräumige Berechnungen erfordern mehr und mehr den Einsatz gitteradaptiver Methoden. Um einem Anwender den Zugang zu diesen Methoden zu erleichtern, sind einfach zu handhabende Algorithmen notwendig. Dies betrifft insbesondere die oben genannten Kriterien zur Steuerung der Gitteradaption und hier im wesentlichen die verwendeten Indikatoren.

Neben *Fehlerindikatoren* (z.B. *Residuale Schätzer* nach BIETERMAN & BABUSKA 1982, JOHNSON 1990) können *heuristische Verfeinerungsindikatoren* (Differenzen, Gradienten, Gradienten-Sprünge) zur Bestimmung der zu verfeinernden oder vergrößernden Elemente verwendet werden:

Fehlerindikatoren haben den Vorteil, daß sie analytisch abgesichert sind, so daß damit der *lokale Fehler einer numerischen Berechnung* abgeschätzt werden kann. Daraus läßt sich auf notwendige Gitternetzadaptungen schließen. Ein zugehöriger *Fehlerestimator* liefert zudem eine Abschätzung des globalen Fehlers, der zur Steuerung der Gitteradaption genutzt werden kann. Die Gitteradaption wird so lange fortgeführt, bis der globale Fehler der Näherungslösung unterhalb einer vorgegebenen Toleranzgrenze liegt.

Allerdings gelten *Fehlerindikatoren und -estimatoren* nur für die zugrunde gelegte Differentialgleichung (z.B. parabolisch/hyperbolisch, linear/nichtlinear) und das verwendete numerische Verfahren (Finite-Elemente-Methode, Finite-Volumen-Methode). Auch im Hinblick auf die räumliche Dimension sind Fehlerindikatoren nicht allgemeingültig, es sei denn, sie wurden bereits für beliebige Raumdimensionen hergeleitet. Ist letzteres nicht der Fall, so muß der zugehörige Fehlerestimator im Falle einer Übertragung auf unterschiedliche räumliche Dimensionen analytisch neu abgesichert werden (GROSSMANN & ROOS 1992).

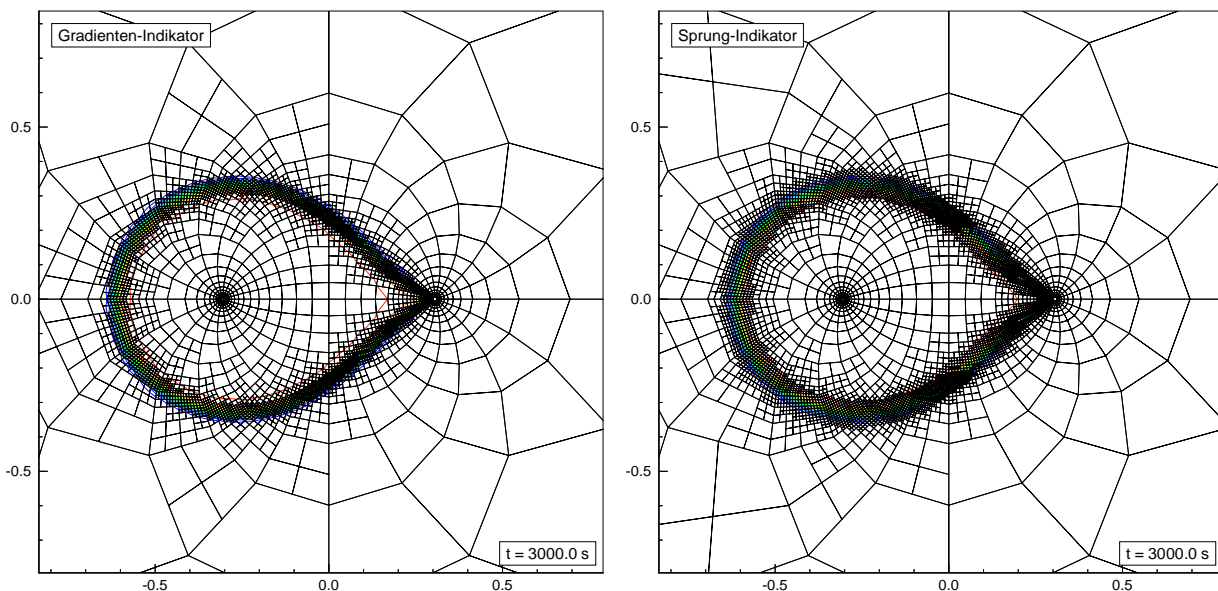


Abbildung 4.9: Vergleich Gradienten-/Sprung-Indikator (Modellierung des Stofftransports zwischen einer Brunnendublette nach HOOPES/HARLEMNAN 1967)

Heuristische Verfeinerungsindikatoren (Differenzen, Gradienten, Gradienten-Sprünge) berechnen sich direkt aus der numerischen Lösung und sind damit vom numerischen Verfah-

ren unabhängig. Außerdem hat man festgestellt, daß diese Indikatoren für unterschiedliche Typen von Differentialgleichungen funktionieren. Damit sind sie auf alle Feldgrößen, insbesondere bei der numerischen Simulation gekoppelter Prozesse (*Mehrfeldprobleme*), gleichermaßen anwendbar.

Allerdings geben sie keine Information über den tatsächlichen lokalen und globalen Fehler einer numerischen Berechnung, so daß auch kein Fehlerestimator zur Verfügung steht. Die Gitteradaption kann somit nicht über eine vorgegebene Fehlertoleranz gesteuert werden. Vielmehr wird von der Annahme ausgegangen, daß insbesondere in Bereichen großer Gradienten oder Gradienten-Sprünge mit einem Fehler in der Näherungslösung zu rechnen ist.

Aufgrund der Komplexität der hier betrachteten gekoppelten Prozesse sind möglichst einfache *heuristische Verfeinerungsindikatoren* den weitaus komplexeren Fehlerindikatoren vorzuziehen. Einerseits sind *heuristische Verfeinerungsindikatoren* weitaus einfacher in ein bestehendes Programm zu implementieren (KAISER & ZIELKE 1996) als Fehlerindikatoren, andererseits für einen Anwender des Programmsystems erheblich einfacher zu handhaben, da hier keine vertieften Kenntnisse über deren Funktionsweise notwendig sind.

Bei einem Vergleich eines Residualen Schätzers nach JOHNSON (1990) mit einem *heuristischen Verfeinerungsindikator* (Sprung-Indikator) konnte BARLAG (1997) im Falle der Modellierung eines advektiven Stofftransports außerdem zeigen, daß der Sprung-Indikator bei gleicher Güte der Näherungslösung weitaus weniger Rechenzeit und Speicherplatz benötigt als der verwendete Fehlerindikator.

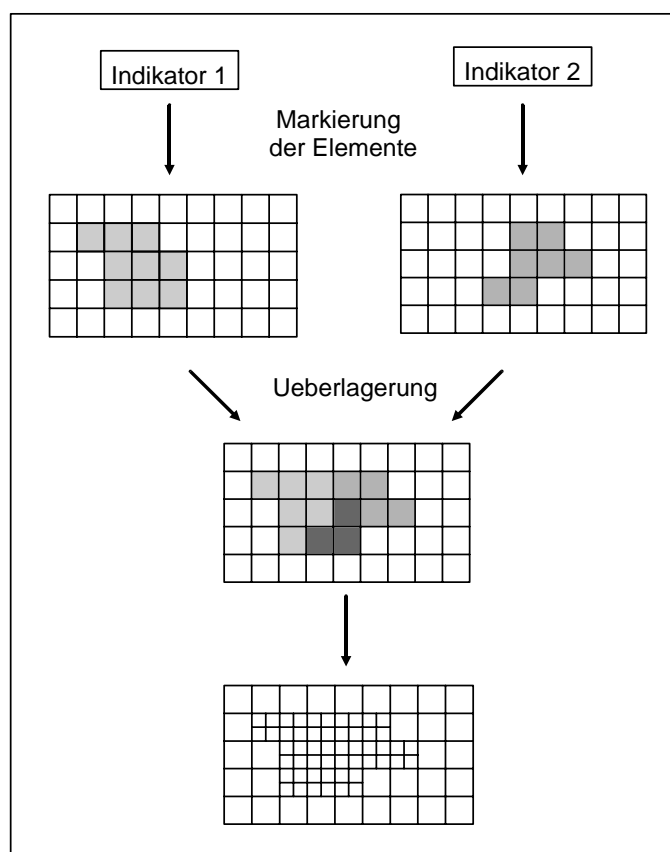


Abbildung 4.10: Überlagerung von Indikatoren bei gekoppelter Gitteradaption

Obwohl mittels *heuristischer Verfeinerungsindikatoren* keine wirkliche Fehlerabschätzung durchgeführt werden kann, werden Bereiche, in denen man einen Fehler in der Näherungslösung erwarten kann (Bereiche großer Gradienten oder großer Krümmungen bzw. Gradienten-Sprünge) durch entsprechende Verfeinerungsindikatoren gut erfaßt (Abbildung 4.9).

Hinzu kommt, daß die bei der gitteradaptiven Modellierung gekoppelter Prozesse notwendige *Überlagerung von Indikatoren* bei Verwendung *heuristischer Verfeinerungsindikatoren* einfach zu realisieren ist (Abbildung 4.10). Dabei können einerseits die Indikatoren der jeweils betrachteten Feldgrößen ('Druck', 'Sättigung', 'Konzentration', 'Temperatur'), andererseits für jede der betrachteten Feldgrößen mehrere Indikatoren (Differenzen, Gradienten, Gradienten-Sprünge) beliebig miteinander kombiniert werden. Die jeweiligen Elementmarkierungen zur Verfeinerung bzw. Vergrößerung werden derart überlagert, daß auch hier die Verfeinerung eines Elementes gegenüber der Vergrößerung bevorzugt wird.

Aus den genannten Gründen werden im folgenden ausschließlich *heuristische Verfeinerungsindikatoren* verwendet:

- **Differenzen-Indikator**

Nach JOHN (1994) ergibt sich für jedes Element E der folgende *Differenzen-Indikator*:

$$\eta_E = \max_{i \neq j} |\hat{u}_i - \hat{u}_j| \quad (i, j = 1, \dots, n_E). \quad (4.3)$$

Betrachtet man dagegen die Differenz zum Mittelwert, erhält man einen *Differenzen-Indikator* der Form

$$\eta_E = \sum_{i=1}^{n_E} \left| \hat{u}_i - \frac{\sum_{j=1}^{n_E} \hat{u}_j}{n_E} \right|. \quad (4.4)$$

n_E beschreibt hier die Anzahl der Knoten des betrachteten Elementes.

- **Gradienten-Indikator**

Aus den Gradienten der Näherungslösung u_h im Schwerpunkt S_E des Elementes E ergibt sich folgender *Gradienten-Indikator* (vgl. JOHN 1994, BARLAG 1997):

$$\eta_E = h_E |\mathbf{grad} u_h(S_E)|. \quad (4.5)$$

- **Sprung-Indikator**

Mit den *kantenbezogenen Sprüngen* der Richtungsableitung (Gradienten-Sprünge) von u_h in Richtung des Einheitsnormalenvektors \mathbf{n}_τ ($|\mathbf{n}_\tau| = 1$) erhält man den *Sprung-Indikator*

$$\eta_E = h_E \max_{\tau \in \partial E \cap \Omega} \left| \left[\frac{\partial u_h}{\partial n_\tau} \right] \right| = h_E \max_{\tau \in \partial E \cap \Omega} |[\mathbf{grad} u_h] \cdot \mathbf{n}_\tau|. \quad (4.6)$$

Der Sprung-Indikator findet sich als wesentlicher Bestandteil in residualen Fehlerschätzern wieder, woraus sich die gute Anwendbarkeit als Verfeinerungsindikator erklärt.

Für alle Indikatoren wird die *charakteristische Elementlänge* h_E wie folgt gewählt:

$$h_E = \begin{cases} L & \text{für } 1D\text{-Elemente} \\ \sqrt{A} & \text{für } 2D\text{-Elemente} \\ \sqrt[3]{V} & \text{für } 3D\text{-Elemente} \end{cases} \quad (4.7)$$

mit der Länge L eines $1D$ -Elementes, der Fläche A eines $2D$ -Elementes und dem Volumen V eines $3D$ -Elementes.

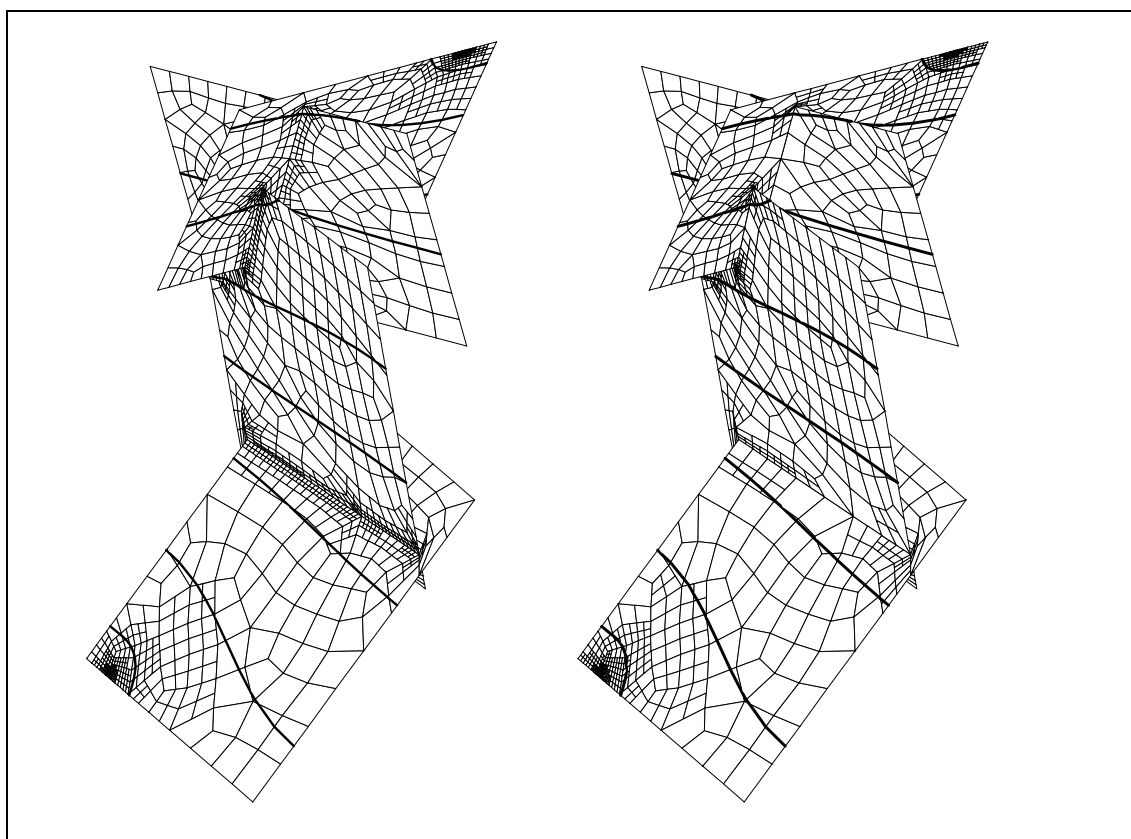


Abbildung 4.11: Gitteradaptive Berechnung der Druckverteilung in einem $2.5D$ -Kluftnetzwerk unter Verwendung eines modifizierten Sprung-Indikators

Soll die Gitteradaption zur numerischen Berechnung des Druckfeldes in $2.5D$ -Kluftnetzwerken genutzt werden, um z.B. die Bereiche um Quellen und Senken (*Singularitäten*) zu adaptieren, ist ein *modifizierter Sprung-Indikator* notwendig. Aufgrund der unterschiedlichen Neigungen der Einzelklüfte im Raum, kommt es bereits durch die hydrostatische Druckverteilung zu unterschiedlichen Druckgradienten in den einzelnen Klüften. Ein Gradienten-Indikator führt deshalb unweigerlich zu einer übermäßigen und nicht gewollten Verfeinerung des Kluftnetzwerks, ohne dabei gezielt die Quellen und Senken zu erfassen. Weitaus bessere Ergebnisse liefert dagegen der Sprung-Indikator, der allerdings, aufgrund der unterschiedlichen Druckgradienten in den Einzelklüften, die Verschneidungsbereiche zu stark erfasst (Abbildung 4.11, links).

Um eine Überbewertung dieser Bereiche zu vermeiden, wurde der Sprung-Indikator für die Druckberechnung dahingehend modifiziert, daß die Schnittkanten bei der Berechnung dieses Indikators nicht berücksichtigt werden. Die Elemente in den Verschneidungsbereichen werden zwar weiterhin von der Gitteradaption erfaßt, allerdings kann durch Verwendung dieses modifizierten Indikators eine übermäßige Verfeinerung verhindert werden (Abbildung 4.11, rechts).

4.4.2 Verfeinerungs- und Vergrößerungstoleranzen

Zur Steuerung der Gitteradaption müssen vom Anwender neben einer *maximalen Verfeinerungstiefe* lev_{max} *Verfeinerungs- und Vergrößerungstoleranzen* tol^f und tol^g vorgegeben werden. Das Berechnungsgitter soll in jedem Zeitschritt Δt in möglichst wenig Iterationsschritten $I_{\Delta t}$ derart adaptiert werden, daß die für jedes Element E berechneten *Indikatorwerte* η_E innerhalb des Toleranzbereiches liegen.

Anmerkung: Hier ist bewußt der Begriff *Indikatorwert* eingeführt worden, da die verwendeten *heuristischen Verfeinerungsindikatoren* keine direkte Aussage über die lokalen Fehler machen. Vielmehr wird, wie bereits erläutert, aus der Erfahrung heraus 'angenommen', daß in Bereichen großer Gradienten oder Gradienten-Sprünge mit einem Fehler in der numerischen Lösung zu rechnen ist. Eine Verfeinerung der betreffenden Gebiete wird demnach auch Bereiche erfassen, in denen ein Fehler in der Näherungslösung auftritt.

Neben der Möglichkeit, den Toleranzbereich für die absoluten Indikatorwerte vorzugeben, können diese Werte zunächst am Maximal- oder Mittelwert ($\eta_{max}, \bar{\eta}$) normiert werden:

- **Absolutwert**

$$\eta_E \begin{cases} > tol^f & \text{verfeinern} \\ < tol^g & \text{vergrößern} \end{cases}, \quad (4.8)$$

mit

$$tol^f \geq tol^g, \quad tol^f \in [\infty, 0.0], \quad tol^g \in [\infty, 0.0].$$

- **Maximalwert**

$$\eta_E / \eta_{max} \begin{cases} > tol_{max}^f & \text{verfeinern} \\ < tol_{max}^g & \text{vergrößern} \end{cases}, \quad (4.9)$$

mit

$$tol_{max}^f \geq tol_{max}^g, \quad tol_{max}^f \in]1.0, 0.0], \quad tol_{max}^g \in]1.0, 0.0].$$

- **Mittelwert**

$$\eta_E/\bar{\eta} \begin{cases} > tol_{mit}^f & \text{verfeinern} \\ < tol_{mit}^g & \text{vergrößern} \end{cases}, \quad (4.10)$$

mit

$$tol_{mit}^f > tol_{mit}^g, \quad tol_{mit}^f \in [\infty, 1.0[, \quad tol_{mit}^g \in]1.0, 0.0].$$

Die Betrachtung der *absoluten Indikatorwerte* bringt den Nachteil mit sich, daß deren Größenordnung nur sehr schwer einzuschätzen ist.

Deshalb bietet sich die Betrachtung der *normierten Indikatorwerte* an. So wird im Falle der Normierung am Maximalwert die Skalenbreite der vorzugebenden Toleranzen auf Werte zwischen 0. und 1. beschränkt. Nachteilig ist aber, daß in den betroffenen Gebieten stets der maximale Verfeinerungslevel lev_{max} erreicht wird.

Dieses Problem tritt dagegen bei einer Normierung am Mittelwert nicht auf. Die Verfeinerungstoleranz tol^f sollte hier größer und die Vergrößerungstoleranz tol^g kleiner als 1. vorgegeben werden.

4.5 Adaptionalgorithmen

Bisher wurden der h-adaptive Verfeinerungs- und Vergrößerungsalgorithmus und die Verfeinerungs- und Vergrößerungskriterien (Verfeinerungsindikatoren, Verfeinerungstoleranzen) betrachtet. Nun ist es an der Zeit daraus den eigentlichen Adaptionalgorithmus zuzufügen, der die Schnittstelle zu den einzelnen in RockFlow realisierten Modellen bildet (Abbildung 4.12). Hier liegen vier Varianten dieses Algorithmus vor, die im folgenden beschrieben und mit Werten von 1 bis 4 bezeichnet werden sollen. Dies ist notwendig, um an späterer Stelle auf diese Algorithmen Bezug nehmen zu können.

Allen Algorithmen ist gemeinsam, daß im ersten Zeitschritt lev_{max} *gitteradaptive Iterationen* durchgeführt werden, um, ausgehend vom Ausgangsgitter, bereits hier ein optimales Berechnungsgitter zu erzeugen. In allen weiteren Zeitschritten wird das Berechnungsgitter mit einer vorgegebenen Anzahl an Iterationen $I_{\Delta t}$ adaptiert. Dabei hat sich in der Regel 'eine Iteration pro Zeitschritt ($I_{\Delta t} = 1$)' als ausreichend erwiesen.

- **Algorithmus 1**

In jedem Zeitschritt werden, ausgehend von einer ersten numerischen Rechnung am Anfang des Zeitschritts, maximal lev_{max} *gitteradaptive Iterationen* durchgeführt. Während im ersten Zeitschritt mit lev_{max} Iterationen ein optimales Berechnungsgitter erzeugt wird, werden in allen weiteren Zeitschritten $I_{\Delta t} = n$ Iterationen mit $n \leq lev_{max}$ durchgeführt. Jeder Zeitschritt wird mit einer letzten Rechnung abgeschlossen, bevor der nächste Zeitschritt beginnt (Abbildung 4.12, links).

- **Algorithmus 2**

In jedem Zeitschritt werden, ausgehend von der numerischen Lösung des vorangegangenen Zeitschritts, maximal lev_{max} *gitteradaptive Iterationen* durchgeführt. Jeder

Zeitschritt beginnt also mit einer Anpassung des Berechnungsgitters, wodurch jeweils ein Rechenschritt zu Beginn des Zeitschritts eingespart wird. Dadurch kann, insbesondere bei nichtlinearen Prozessen (z.B. dichteinduzierten Strömungen), die Rechenzeit erheblich reduziert werden. Auch hier wird im ersten Zeitschritt mit lev_{max} Iterationen ein optimales Berechnungsgitter erzeugt. Da zu Beginn des ersten Zeitschritts noch keine numerische Lösung zur Verfügung steht, wird das Ausgangsgitter zunächst anhand der vorzugebenden Anfangs- und Randbedingungen adaptiert. Dies macht 'sinnvolle' Anfangsbedingungen notwendig.

In allen weiteren Zeitschritten werden, entsprechend Algorithmus 1, $I_{\Delta t} = n$ Iterationen mit $n \leq lev_{max}$ durchgeführt. Jeder Zeitschritt wird mit einer letzten Rechnung abgeschlossen (Abbildung 4.12, rechts).

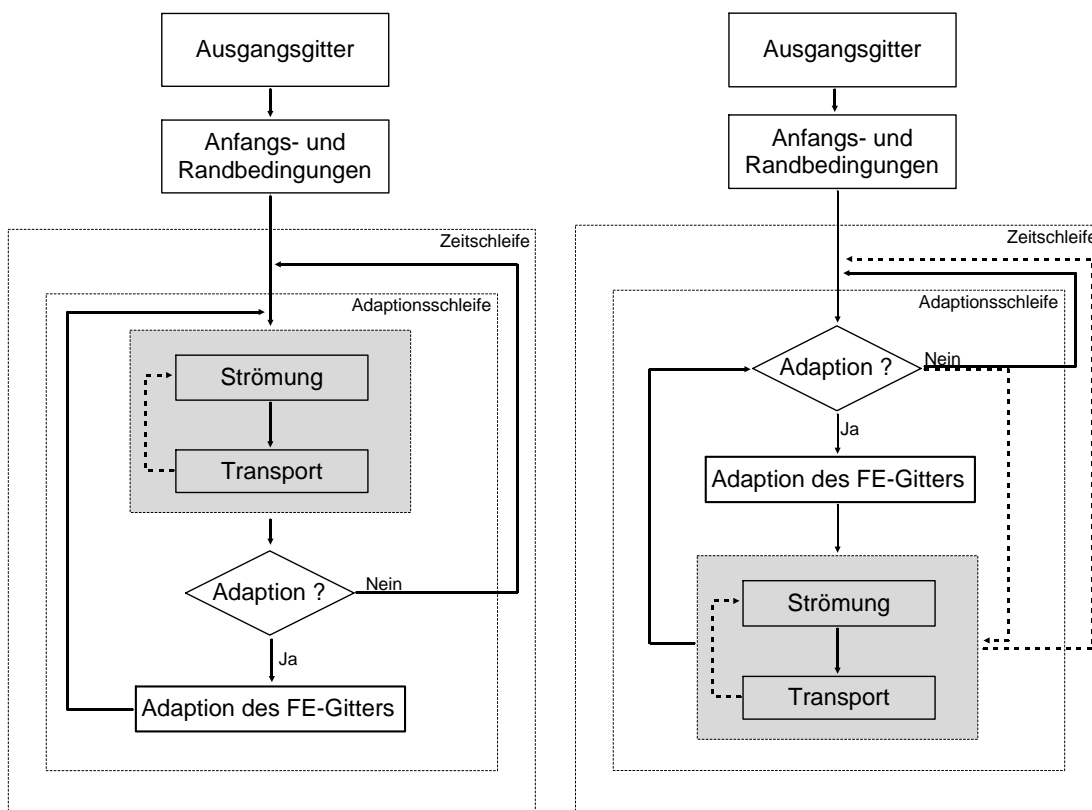


Abbildung 4.12: Gitteradaptive Algorithmen (Flußdiagramme)

- **Algorithmus 3**

Dieser Algorithmus entspricht Algorithmus 1, mit der zusätzlichen Möglichkeit, nur in jedem m -ten Zeitschritt eine Anpassung des Berechnungsgitters durchzuführen. Dadurch kann zusätzlich Rechenzeit eingespart werden. Allerdings sollte dieser Algorithmus mit Vorsicht eingesetzt werden, um eine zu 'späte' Anpassung des Berechnungsgitters zu vermeiden.

- **Algorithmus 4**

Algorithmus 4 entspricht Algorithmus 2. Auch hier besteht zusätzlich die Möglichkeit, das Berechnungsgitter nur in jedem m -ten Zeitschritt anzupassen.

4.6 Gekoppelte Gitteradaption

Die numerische Simulation gekoppelter Prozesse (*Mehrfeldprobleme*) macht eine überlagerte oder *gekoppelte Gitteradaption* notwendig, die das Berechnungsgitter bei Bedarf an eine beliebige Anzahl an Feldgrößen wie 'Druck', 'Sättigung', 'Konzentration' (n Komponenten) und 'Temperatur' anpaßt. Dazu werden die Verfeinerungsindikatoren der betrachteten Feldgrößen, wie in Abbildung 4.10 dargestellt, überlagert, wobei für jede der Feldgrößen und, bei gekoppelten 1D-/2D-/3D-Netzen (*gekoppelte geometrische Systeme*), zusätzlich für jede räumliche Dimension unterschiedliche Verfeinerungstiefen $lev \leq lev_{max}$ vorgegeben werden können.

Da dadurch die Verfeinerung eines Elementes durch mehrere Verfeinerungsindikatoren hervorgerufen werden kann, ist eine Vergrößerung dieses Elementes nur dann möglich, wenn es von allen betroffenen Verfeinerungsindikatoren (entsprechend den Anforderungen an die Vergrößerung) wieder freigegeben wird (Abbildung 4.13).

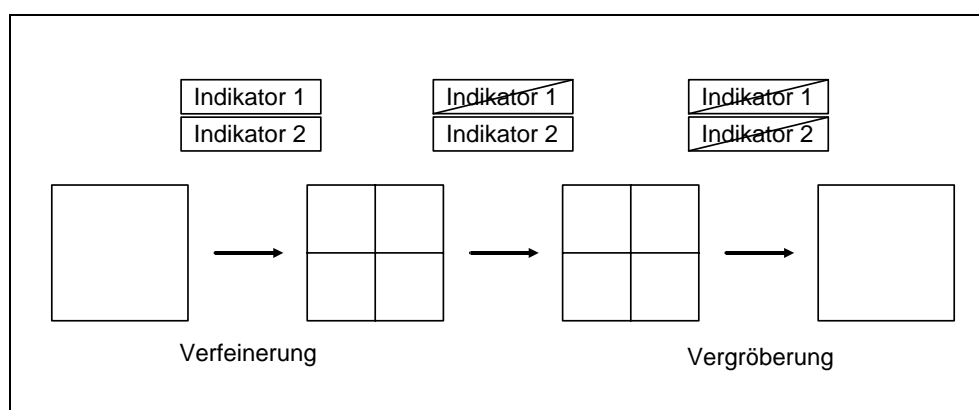


Abbildung 4.13: Vergrößerung bei überlagerten Indikatoren

Anhand zweier Beispiele soll im folgenden die *gekoppelte Gitteradaption* genauer erläutert werden. Einerseits wird dazu ein

- Dipol-Problem mit Störungszone,

andererseits

- ein Dipol-Problem in einem heterogenen Medium

betrachtet.

4.6.1 Beispiel 1: Dipol-Problem mit Störungszone

Das hier betrachtete System entspricht einem von BARLAG (1997) vorgestellten zweidimensionalen Dipol-Problem, das von einer eindimensionalen Störungszone (z.B. einer Kluft) durchzogen wird.

Die Störungszone hat eine weit höhere Durchlässigkeit als das sie umgebende Gestein, das im folgenden als Gesteinsmatrix (kurz: Matrix) bezeichnet werden soll (Abbildung 4.14). Das (stationäre) Strömungsfeld wird von einer Injektions- zu einer Extraktionsstelle (Quelle und Senke) erzeugt.

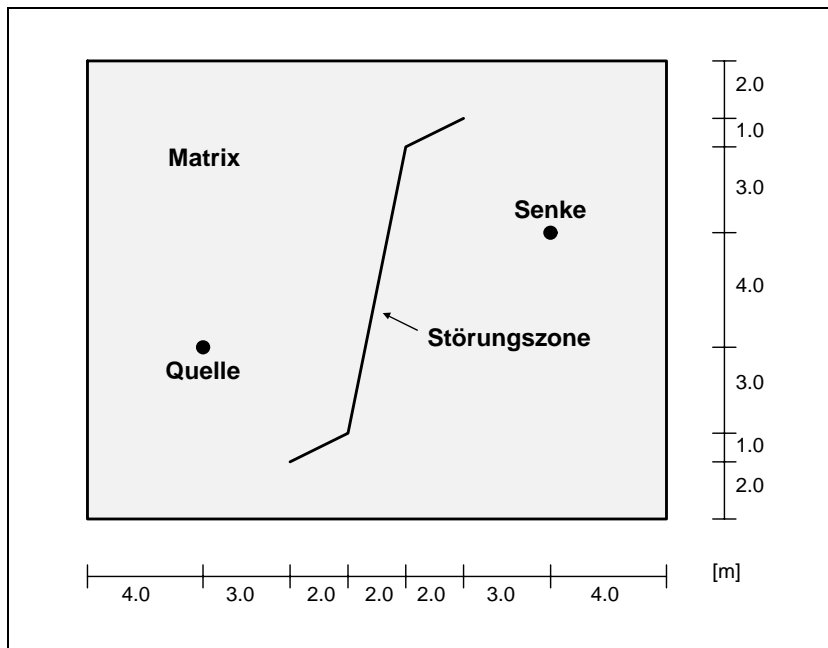


Abbildung 4.14: Systembeschreibung Dipol-Problem mit Störungszone

An diesem Beispiel kann sowohl die gitteradaptive Behandlung von *Singularitäten* (Quelle/Senke) als auch *gekoppelter geometrischer Systeme* (Kluft/Matrix-System) sehr gut gezeigt werden.

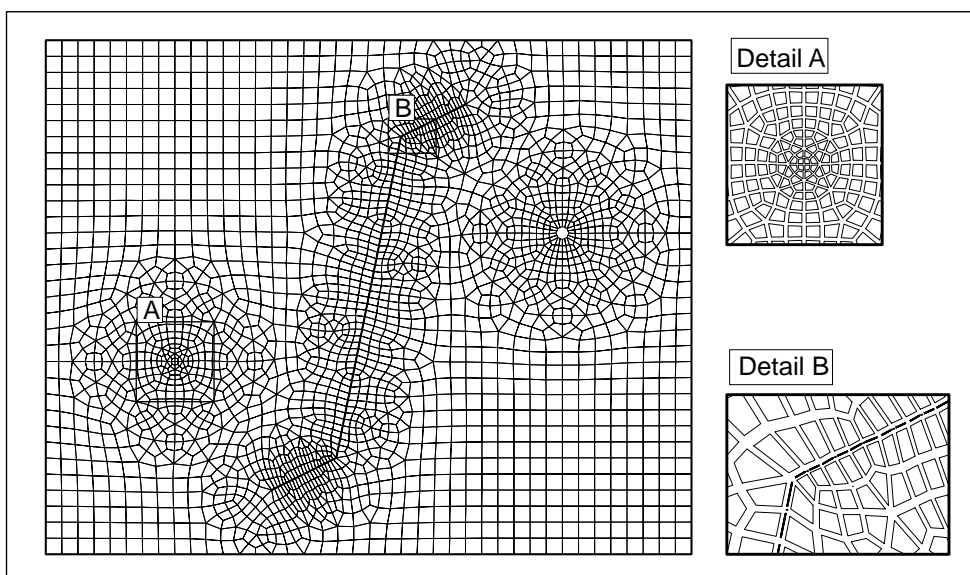


Abbildung 4.15: A priori Verfeinerung (BARLAG 1997)

Sowohl im Übergangsbereich großer Materialheterogenitäten als auch im Bereich punktförmiger Quellen und Senken können im Geschwindigkeitsfeld große Gradienten auftreten. Außerdem kann es in *Kluft/Matrix-Interaktionsbereichen* zu großen Krümmungen der Stromlinien (Richtungsänderungen der Geschwindigkeitsvektoren) kommen. Deshalb ist in derartigen Bereichen, um das Strömungsfeld optimal für eine nachfolgende Transportsimulation

zu approximieren, ein angepaßtes Berechnungsgitter erforderlich.

BARLAG (1997) hat das Berechnungsgitter deshalb in den strömungskritischen Bereichen a priori angepaßt (Abbildung 4.15). Dazu wurde die Quelle als Knotenpunkt und die Senke als Innenrand diskretisiert.

Da bei einer statischen Diskretisierung Bereiche erfaßt werden können, die nur kurzzeitig für die Genauigkeit der Lösung von Bedeutung sind, wurde für die numerische Simulation des Stofftransports die Gitteradaption verwendet.

Mittels der in der vorliegenden Arbeit vorgestellten *gekoppelten Gitteradaption* bietet sich nun die Möglichkeit, das Berechnungsgitter sowohl an das Strömungsfeld als auch an den Stofftransport a posteriori anzupassen. Damit wird eine a priori Verfeinerung, wie sie von BARLAG (1997) vorgestellt wurde, vermieden.

Um eine Anpassung des Berechnungsgitters (Abbildung 4.16, oben) in den strömungskritischen Bereichen der Quelle und der Senke zu erreichen, wird es für die Feldgröße 'Druck' mit einem Verfeinerungslevel $lev_{max,2D,p} = 3$ (2D-Elemente) adaptiert (Tabelle 4.1). Dies führt außerdem zu einer Gitternetzadaption im Kluftbereich (Abbildung 4.16, unten).

Tabelle 4.1: Adaptionparameter Dipol-Problem mit Störungszone

Adaptionsalgorithmus	1
max. Verfeinerungslevel (global)	$lev_{max} = 3$
Druck (2D)	
Verfeinerungsindikator	Sprung-Indikator
Verfeinerungstoleranzen	$tol_{mit}^f = 2.5, tol_{mit}^g = 0.5$
max. Verfeinerungslevel	$lev_{max,2D,p} = 3$
Konzentration (2D)	
Verfeinerungsindikator	Sprung-Indikator
Verfeinerungstoleranzen	$tol_{mit}^f = 1.4, tol_{mit}^g = 0.4$
max. Verfeinerungslevel	$lev_{max,2D,c} = 1$

Dadurch ist für die gitteradaptive Modellierung des Stofftransports ein weitaus geringerer Verfeinerungslevel für die Feldgröße 'Konzentration' möglich. Hier ist ein max. Verfeinerungslevel von $lev_{max,2D,c} = 1$ (2D-Elemente) ausreichend (Abbildung 4.17, oben).

Um bei Bedarf eine weitere Verbesserung der numerischen Lösung im Kluftbereich zu erreichen, besteht die Möglichkeit, für die Feldgröße 'Konzentration' zusätzlich eine Adaption der 1D-Elemente und damit des Kluft/Matrix-Übergangsbereiches zu bewirken. In Abbildung 4.17 (unten) werden die 1D-Elemente deshalb mit einem Verfeinerungslevel von $lev_{max,1D,c} = 2$ adaptiert.

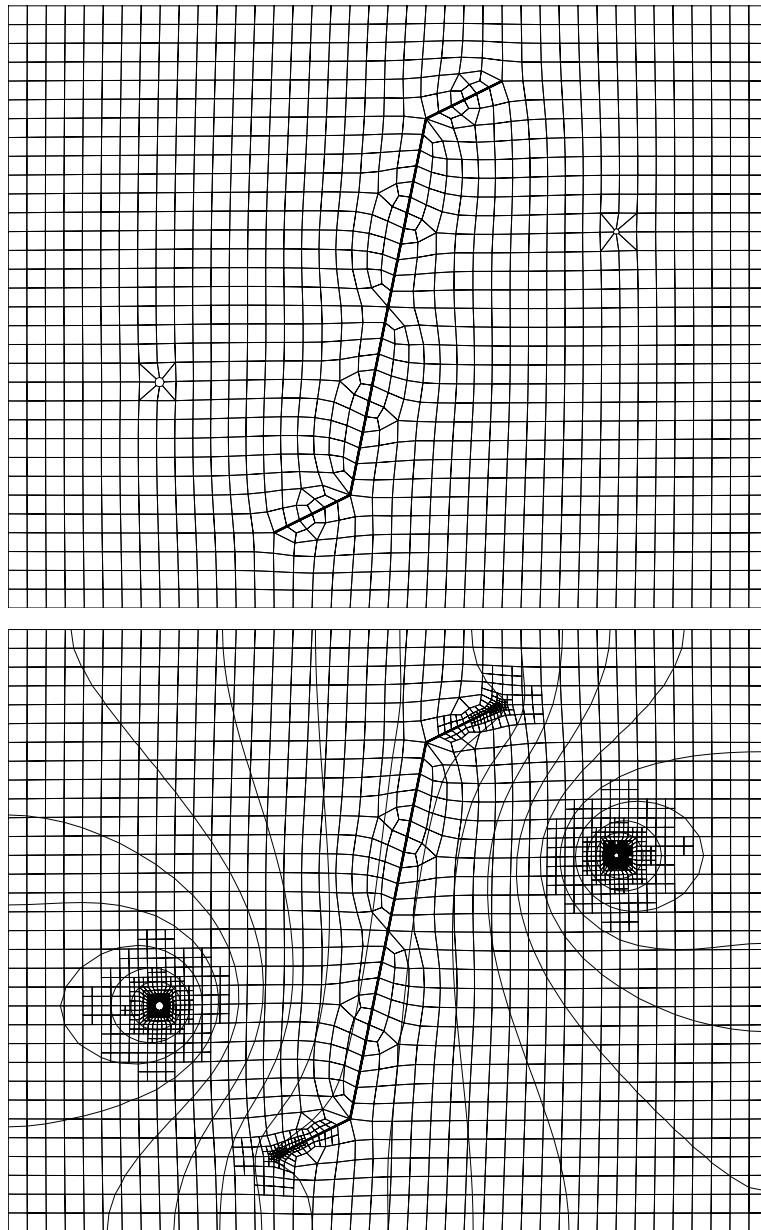


Abbildung 4.16: Dipol–Problem mit Störungszone (Ausgangsgitter und a posteriori an das Druckfeld (Strömungsfeld) angepaßtes Berechnungsgitter)

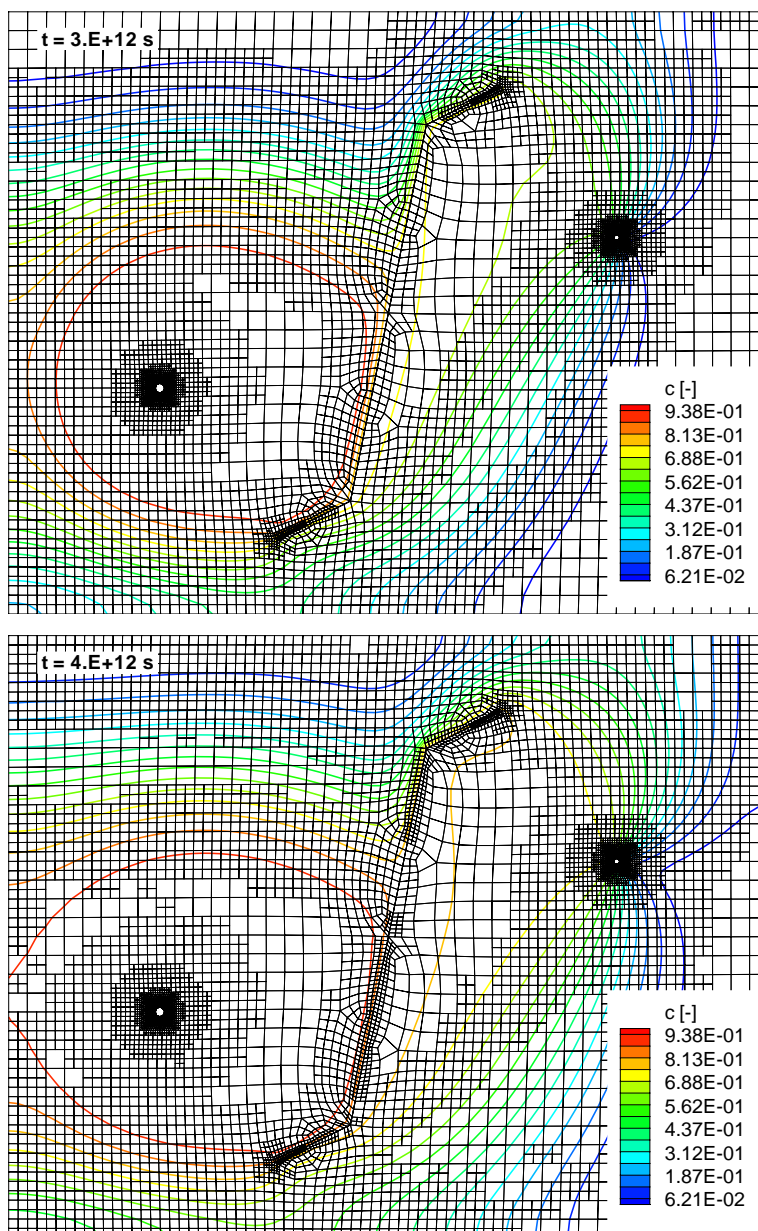


Abbildung 4.17: Dipol–Problem mit Störungszone (A posteriori an den Stofftransport angepaßte Berechnungsgitter)

4.6.2 Beispiel 2: Dipol–Problem in einem heterogenen Medium

In einem weiteren Beispiel soll nun, wie in Abbildung 4.18 dargestellt, ein Dipol–Problem in einem *heterogenen Medium* betrachtet werden. Die Materialgruppen *I – IV* unterscheiden sich hier durch unterschiedliche Durchlässigkeiten.

Im Übergangsbereich großer Materialheterogenitäten können, wie bereits erwähnt, große Gradienten im Geschwindigkeitsfeld auftreten, so daß hier eine Anpassung des Berechnungsgitters im Bereich der Materialgrenzen, aber auch im Bereich der Quelle und Senke, notwendig ist.

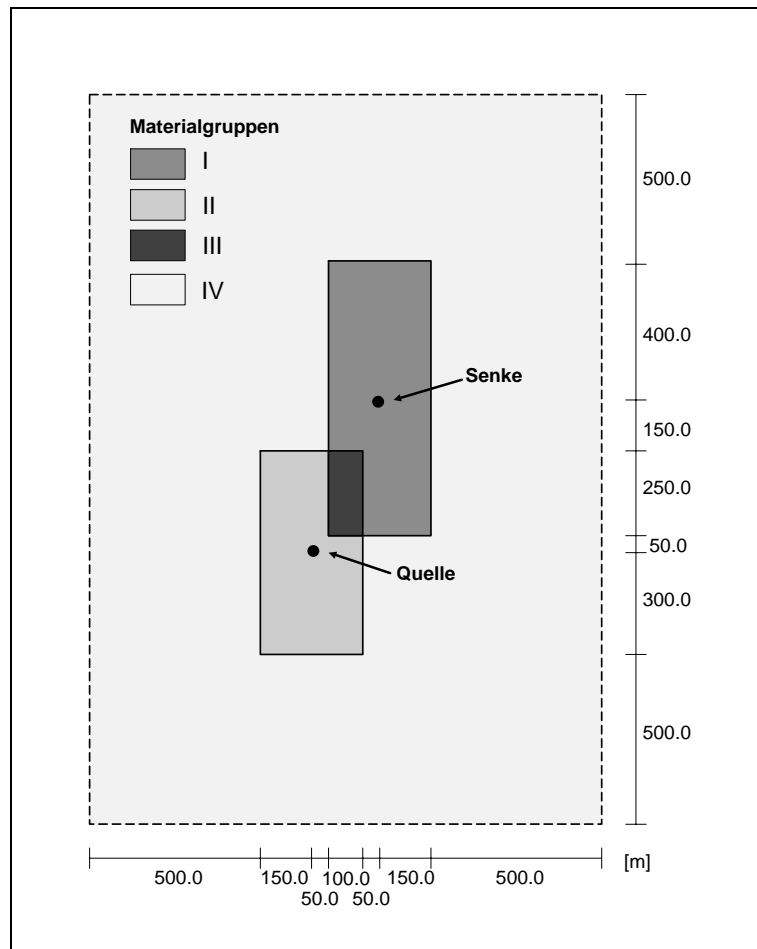


Abbildung 4.18: Systembeschreibung Dipol–Problem in einem heterogenen Medium

Diese Gitternetzadaption erfolgt zunächst a posteriori für das Strömungsfeld, gefolgt von einer gitteradaptiven Simulation des Stofftransports.

Da das Ausgangsgitter (Abbildung 4.19, links) nach dem ersten Zeitschritt, und damit nach lev_{max} gitteradaptiven Iterationen, bereits optimal an das hier betrachtete stationäre Strömungsfeld angepaßt ist (Abbildung 4.19, rechts), wird sich in allen weiteren Zeitschritten die Gitteradaption weitestgehend auf den Stofftransport beschränken.

Die strömungskritischen Bereiche werden über die Feldgröße 'Druck' mit einem Verfeinerungslevel von $lev_{max,2D,p} = 3$ (Tabelle 4.2) bereits gut erfaßt. Deshalb reicht hier für die gitteradaptive Simulation des Stofftransports ein Verfeinerungslevel von $lev_{max,2D,c} = 1$ aus (Abbildung 4.20).

Tabelle 4.2: Adaptionparameter Dipol–Problem in einem heterogenen Medium

Adaptionsalgorithmus	1
max. Verfeinerungslevel (global)	$lev_{max} = 3$
Druck (2D)	
Verfeinerungsindikator	Sprung–Indikator
Verfeinerungstoleranzen	$tol_{mit}^f = 1.8, tol_{mit}^g = 0.4$
max. Verfeinerungslevel	$lev_{max,2D,p} = 3$
Konzentration (2D)	
Verfeinerungsindikator	Sprung–Indikator
Verfeinerungstoleranzen	$tol_{mit}^f = 2.0, tol_{mit}^g = 0.6$
max. Verfeinerungslevel	$lev_{max,2D,c} = 1$

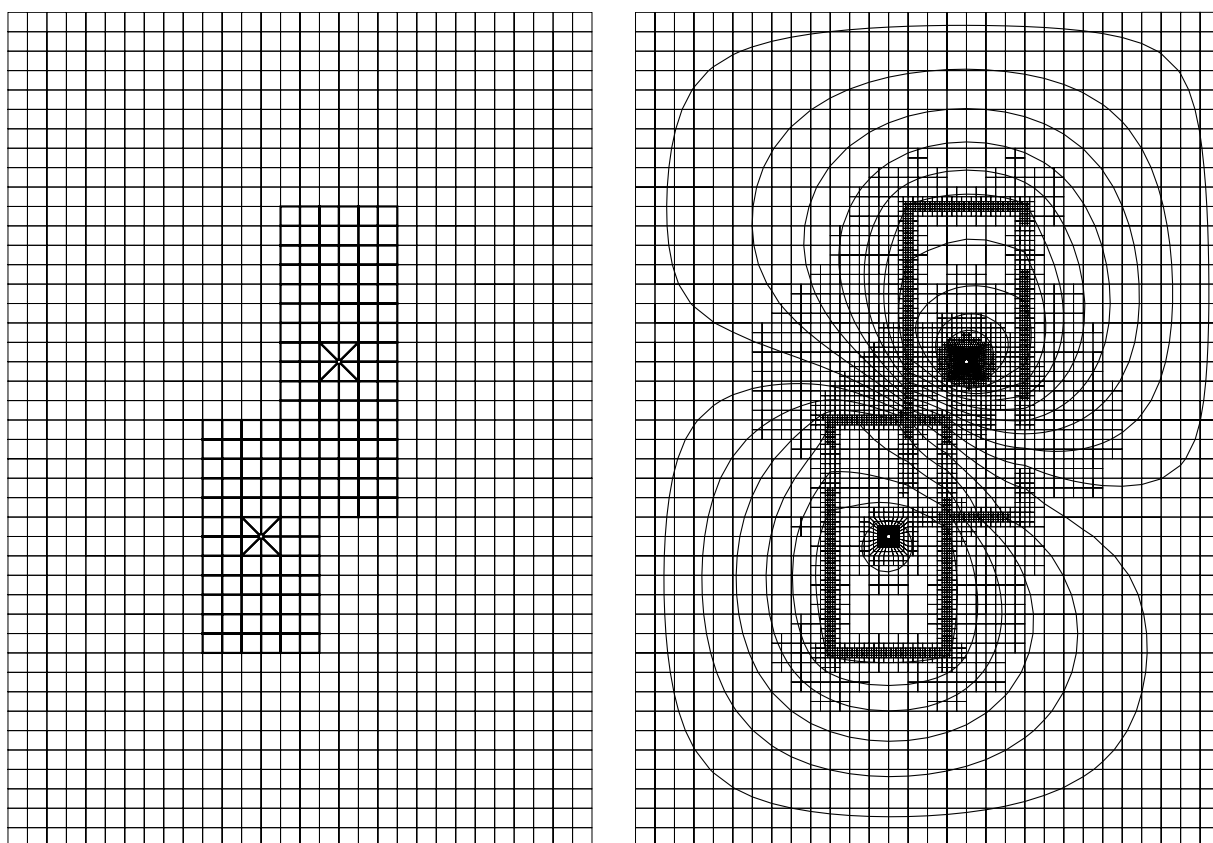


Abbildung 4.19: Dipol–Problem in einem heterogenen Medium (Ausgangsgitter und a posteriori an das Druckfeld (Strömungsfeld) angepasstes Berechnungsgitter)

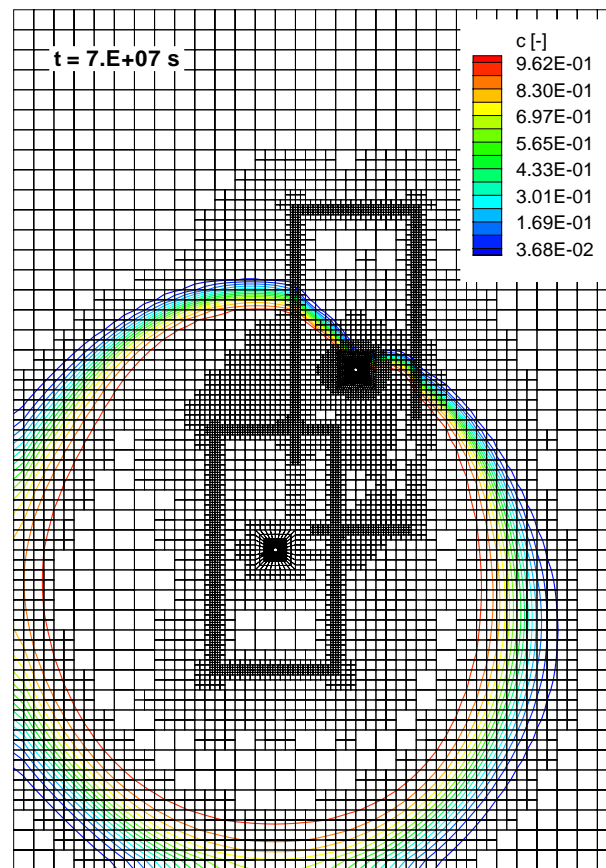


Abbildung 4.20: Dipol-Problem in einem heterogenen Medium (A posteriori an den Stofftransport angepaßtes Berechnungsgitter)

Ohne die Möglichkeiten der *gekoppelten Gitteradaption* wäre auch hier eine a priori Gitternetz-anpassung nötig. Andernfalls müßte die gitteradaptive Modellierung des Stofftransports mit einem entsprechend größeren max. Verfeinerungslevel durchgeführt werden, um, beim Durchlaufen der strömungskritischen Bereiche, für ein optimal angepaßtes Berechnungsgitter zu sorgen. Da der Verfeinerungslevel während der gesamten Simulation beibehalten wird, kann dies, außerhalb der kritischen Bereiche, zu einer übersteigerten Gitternetz-anpassung führen.

Kapitel 5

Gitteradaptive Modellierung schwach gekoppelter Mehrfeldprobleme in geklüftet–porösen Medien

Das vorliegende Kapitel beschäftigt sich in einer Reihe von Beispielen mit der gitteradaptiven Modellierung *schwach gekoppelter Mehrfeldprobleme* (Transport idealer Tracer in einer inkompressiblen Strömung (Grundwasserströmung)). Dabei wird besonders auf die Anwendung der *gekoppelten Gitteradaption* im Bereich von *Singularitäten* (punktuelle Quellen und Senken) und Kluft/Matrix–Systemen (*gekoppelte geometrische Systeme*) eingegangen. Folgende Problemstellungen wurden dazu ausgewählt:

- instationäre Grundwasserströmung im Bereich eines Extraktionsbrunnens (Senke),
- hoch–advektiver Stofftransport zwischen Brunnendubletten,
- advektiv–diffusiver Stofftransport in Kluft/Matrix–Systemen.

In einem Beispiel zum

- Stofftransport in 2.5D–Kluftnetzwerken

wird außerdem eine erste Kopplung der Gitteradaption für die Feldgrößen 'Druck' und 'Konzentration' in großräumigen 2.5D–Kluftnetzwerken dargestellt, wobei insbesondere auf die Möglichkeiten der *gekoppelten Gitteradaption* im Nahfeld von Quellen und Senken (*Singularitäten*) eingegangen wird.

Bei der Steuerung des Zeitschritts sind in den Beispielen zum advektiv–dispersiven Stofftransport (parabolisch/hyperbolische Problemstellungen) sowohl das NEUMANN– als auch das COURANT–Kriterium einzuhalten. Mittels einer *automatischen Zeitschrittsteuerung* kann der Zeitschritt unter Beachtung dieser Kriterien an das jeweilige verfeinerte Berechnungsgitter automatisch angepaßt werden (vgl. BARLAG 1997).

5.1 THEIS' Problem

Der sensitivste Eingabeparameter in ein Transportmodell ist das Strömungsfeld (KINZELBACH 1992), dessen Erfassung daher besondere Aufmerksamkeit gewidmet werden muß.

Da punkt- und linienförmige Quellen und Senken Singularitäten in der Lösung darstellen, muß deren Nahfeld gesondert betrachtet werden. Der zu erwartende Fehler in der numerischen Lösung kann sowohl durch die Modellierung der Brunnen mit einem endlichen Radius als auch durch eine erhöhte Verfeinerung des Nahfeldes reduziert werden.

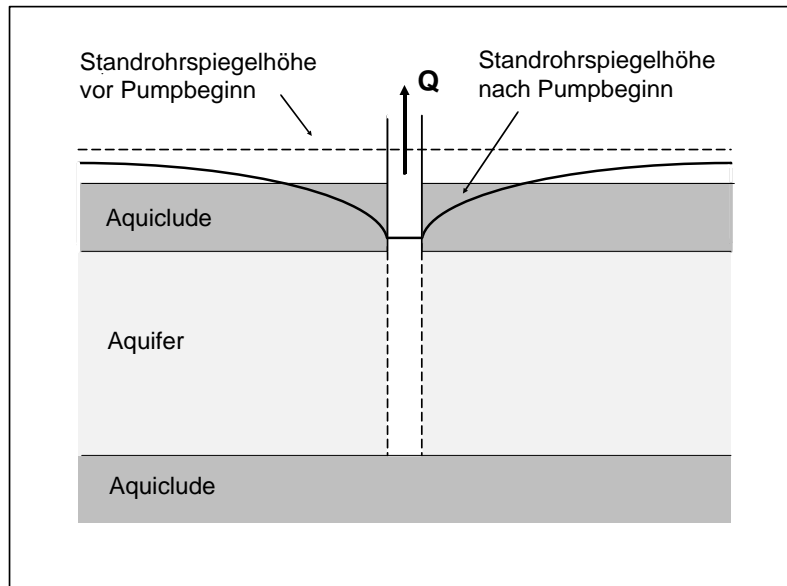


Abbildung 5.1: Definition THEIS' Problem

Die Gitteradaption soll deshalb zunächst an einer instationären Strömung im Bereich eines Extraktionsbrunnens (Senke) in einem unendlich ausgedehnten gespannten Aquifer demonstriert werden (Abbildung 5.1). Als analytische Vergleichslösung wird die sog. "Brunnenformel nach THEIS" verwendet.

5.1.1 Analytische Lösung (Brunnenformel nach THEIS)

Für einen unendlich ausgedehnten gespannten Aquifer (homogen, isotrop) hat THEIS (1935) folgende analytische Lösung angegeben:

$$\begin{aligned}
 h(t, r) &= h_0 - \frac{Q}{4\pi K_f} W(u) \\
 W(u) &= \int_u^{+\infty} \frac{\exp(-\xi)}{\xi} d\xi \quad \text{mit} \quad u = \frac{r^2 S_0}{4 K_f t}. \\
 W(u) &= -C - \ln(u) + \sum_{i=1}^{+\infty} (-1)^{i-1} \frac{u^i}{i \cdot i!},
 \end{aligned} \tag{5.1}$$

mit

$$C = 0.57721566\dots \text{ (Eulerkonstante)}, \quad K_f = \frac{k \rho g}{\mu}, \quad S_0 = S_p \rho g, \quad r = \sqrt{x^2 + y^2}.$$

Die Grundwasserneubildung durch Niederschlag wurde vernachlässigt und die Entnahme von Grundwasser aus dem Brunnen als konstant angenommen.

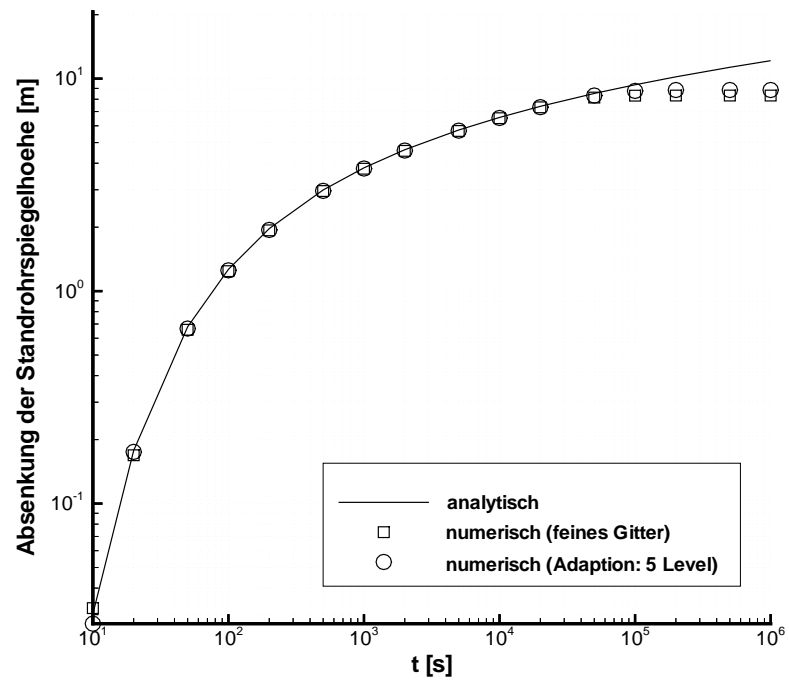


Abbildung 5.2: Vergleich der numerischen mit der analytischen Lösung (THEIS' Problem)

Tabelle 5.1: Absenkung der Standrohrspiegelhöhe ($r = 9.639 \text{ m}$)

Zeit in [s]	analytisch [m]	numerisch [m]		
		feines Gitter	4 Verf.-Level	5 Verf.-Level
10.	0.0302	0.0322	0.0096	0.0272
50.	0.6789	0.6577	0.6578	0.6664
100.	1.2664	1.2415	1.2379	1.2521
500.	2.9929	2.9586	2.9491	2.9640
1000.	3.8037	3.7669	3.7562	3.7758
5000.	5.7315	5.6727	5.6727	5.6920
10000.	6.5690	6.5135	6.5117	6.5316
50000.	8.5184	8.1445	8.1329	8.3289
100000.	9.3587	8.3172	8.3019	8.7576
500000.	11.3103	8.3281	8.3124	8.8435
1000000.	12.1508	8.3281	8.3124	8.8435

5.1.2 Numerische Simulation

Vor der eigentlichen gitteradaptiven Modellierung wird eine erste numerische Simulation auf einem feinen Ausgangsgitter mit 246 Knoten und 200 $2D$ -Elementen durchgeführt. Die Simulationsparameter können der Tabelle 5.2 entnommen werden.

Tabelle 5.2: Simulationsparameter THEIS' Problem

Symbol	Bezeichnung	Wert
Q	Pumprate	$1.4158 \cdot 10^{-2} \text{ m}^3/\text{s}$
S_p	Speicherkoeffizient	$1.01937 \cdot 10^{-7} \text{ m s}^2/\text{kg}$
k	spezifische Permeabilität	$9.470234 \cdot 10^{-11} \text{ m}^2$

Das a priori verfeinerte Berechnungsgitter (Abbildung 5.3), das vor allem im Nahbereich des Brunnens sehr fein aufgelöst ist, wurde bereits mehrfach für entsprechende Berechnungen verwendet (KOLDITZ 1994, KAISER 1996) und hat auch hier ausgereicht, um eine gute Übereinstimmung der numerischen Näherungslösung mit der analytischen Lösung zu erzielen (Abbildung 5.2). Die Abweichung der numerischen von der analytischen Lösung für $t > 10^5 \text{ s}$ ist auf den Einfluß der Druck- bzw. Standrohrspiegel-Randbedingung auf den Beobachtungspunkt bei $r = 9.639 \text{ m}$ zurückzuführen.

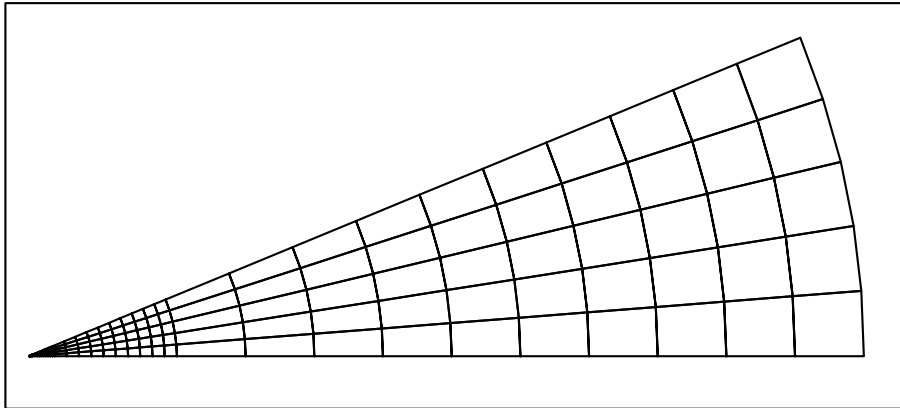


Abbildung 5.3: A priori verfeinertes Berechnungsgitter (THEIS' Problem)

Für die gitteradaptive Modellierung wird ein weitaus gröberes Ausgangsgitter mit 27 Knoten und 16 $2D$ -Elementen verwendet (Abbildung 5.4). Es werden zwei Berechnungen mit unterschiedlichen max. Verfeinerungsleveln ($lev_{max} = 4$ und $lev_{max} = 5$) bei sonst identischen Adaptionsparametern durchgeführt (Tabelle 5.3).

Der verwendete Sprung-Indikator erfaßt die strömungskritischen Bereiche in Brunnennähe sehr gut (Abbildung 5.5). Auch hier ist der Einfluß der am rechten Rand vorgegebenen Randbedingung zu erkennen; es erfolgt eine nicht gewollte Verfeinerung der zugehörigen Randelemente.

Tabelle 5.3: Adaptionparameter 'THEIS' Problem

Adaptionsalgorithmus	1
max. Verfeinerungslevel	$lev_{max} = 4$ und $lev_{max} = 5$
Druck (2D)	
Verfeinerungsindikator	Sprung-Indikator
Verfeinerungstoleranzen	$tol_{max}^f = 0.7$, $tol_{max}^g = 0.2$

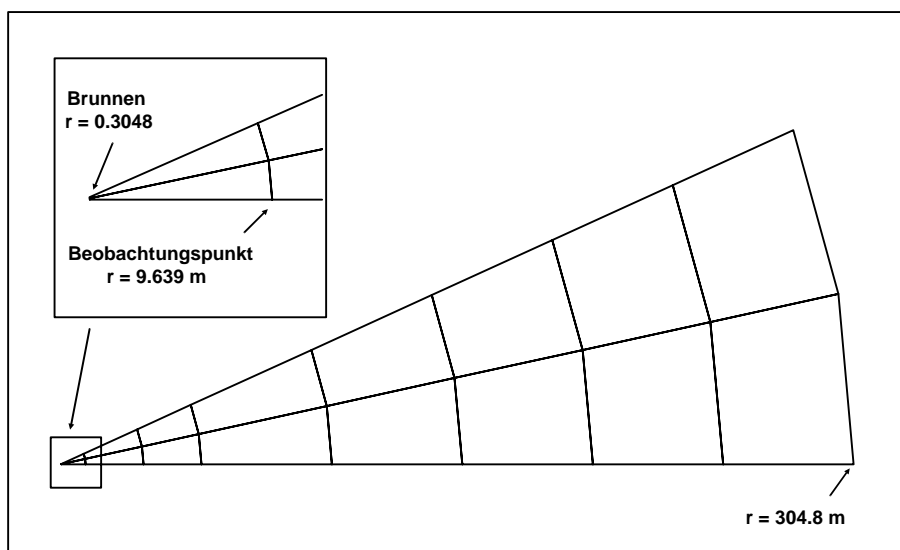


Abbildung 5.4: Ausgangsgitter für die gitteradaptive Modellierung (THEIS' Problem)

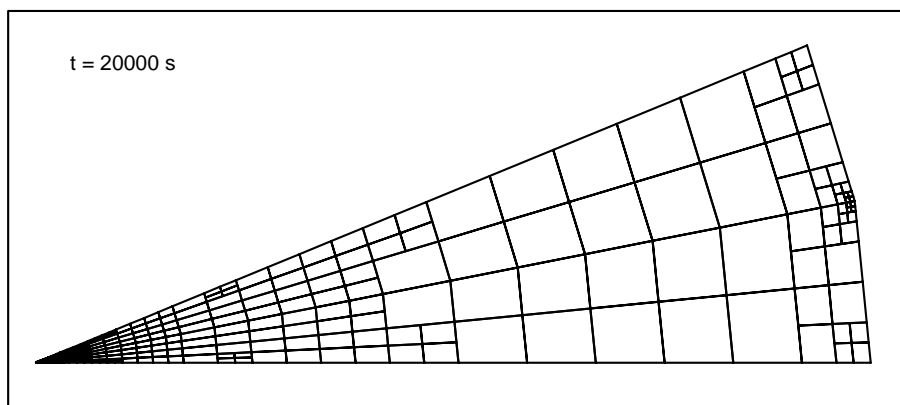


Abbildung 5.5: Adaptiertes Berechnungsgitter (5 Verf.-Level)

Bereits ein max. Verfeinerungslevel von $lev_{max} = 4$ ergibt eine gute Übereinstimmung von numerischer und analytischer Lösung (Tabelle 5.1). Eine Erhöhung des max. Verfeinerungslevels auf $lev_{max} = 5$ führt allerdings erwartungsgemäß zu einer weiteren Verbesserung der numerischen Lösung, die der Güte der Lösung auf dem a priori verfeinerten Gitter entspricht und sogar geringfügig übertrifft (Abbildung 5.2).

Die Anpassung des Berechnungsgitters im Nahfeld von Quellen und Senken kann also einerseits a priori erfolgen oder, wie hier dargestellt, a posteriori durch eine gitteradaptive Berechnung des Druckfeldes. Neben der h-Adaption ist hier aber auch die Verwendung der r-Adaption (Verschiebung der Knoten) denkbar, da sich dadurch die Anzahl der Knoten und Elemente des Berechnungsgitters nicht erhöht.

5.2 Stofftransport zwischen Brunnendublette

HOOPES & HARLEMAN (1967) haben in Laborversuchen den advektiv-dispersiven Stofftransport zwischen Brunnendubletten untersucht. Ein von ihnen mit einem Sand-Modell durchgeführtes Experiment (Abbildung 5.6) lieferte die Daten zur Verifikation einer vereinfachten analytischen Lösung, die ihrerseits oftmals zur Verifikation numerischer Modelle verwendet wird (HUYAKORN ET AL. 1986, SEGOL 1994, KOLDITZ 1994, THORENZ 1995).

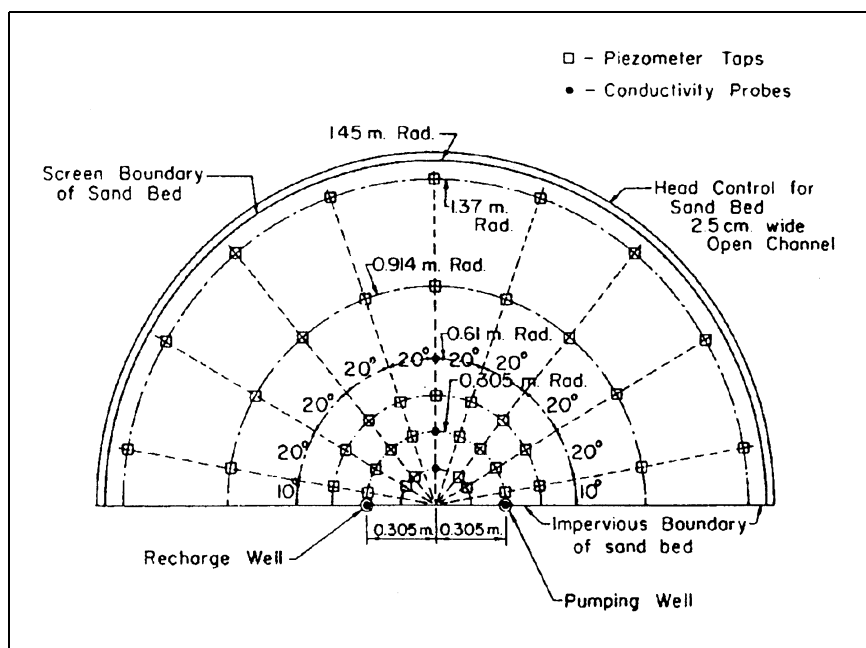


Abbildung 5.6: Darstellung des Laboraquifers (HOOPES & HARLEMAN (1967))

KRAUSE (1996) hat, unter Verwendung des aTM (adaptives Transportmodell) (BARLAG 1997), eine gitteradaptive Modellierung des Stofftransports zwischen einer Brunnendublette durchgeführt. Deshalb bietet es sich an, diese analytische Lösung auch zur Verifikation des in RockFlow implementierten gitteradaptiven Algorithmus zu verwenden. Die numerischen Berechnungen werden auf horizontale 2D-Strömungen beschränkt.

5.2.1 Analytische Lösung (HOOPES & HARLEMAN (1967))

Die von HOOPES & HARLEMAN (1967) angegebene analytische Lösung für den advektiv-dispersiven Stofftransport zwischen Brunnendubletten läßt sich wie folgt (in kartesische Koordinaten) schreiben:

$$c(x, y, t) = c_0 \cdot \operatorname{erfc} \left\{ \frac{a - \tau}{\sqrt{4b}} \right\} \quad (5.2)$$

mit

$$a = \csc^2 \xi \left[1 + \frac{\sinh \eta}{\cosh \eta + \cos \xi} - \cot \xi \left\{ \arcsin(\cos \xi) - \arcsin \left(\frac{\cosh \eta \cos \xi + 1}{\cosh \eta + \cos \xi} \right) \right\} \right]$$

$$\forall 0 < \xi < 2\pi$$

$$a = \frac{1}{3} \left[1 + \tanh \left(\frac{\eta}{2} \right) \left\{ 1 + \frac{1}{\cosh \eta + 1} \right\} \right]$$

$$\xi = 0, 2\pi \quad (5.3)$$

$$\begin{aligned} b = & \frac{\beta}{2 \sin^2 \xi} \left[\frac{\sinh \eta}{(\cosh \eta + \cos \xi)^2} \right. \\ & - \frac{3 \cos \xi}{\sin^2 \xi} \left\{ 1 - \cot \xi \arcsin(\cos \xi) + \frac{\sinh \eta}{\cosh \eta + \cos \xi} + \cot \xi \arcsin \left(\frac{\cosh \eta \cos \xi + 1}{\cosh \eta + \cos \xi} \right) \right\} \\ & + \frac{1}{\sin \xi} \left\{ \arcsin(\cos \xi) - \arcsin \left(\frac{\cosh \eta \cos \xi + 1}{\cosh \eta + \cos \xi} \right) \right\} \left. \right] \\ & + \frac{\gamma}{3 \sin^2 \xi} \left[\frac{\sinh \eta}{(\cosh \eta + \cos \xi)^3} \right. \\ & + \frac{2}{\sin^2 \xi} \left\{ 1 - \cot \xi \arcsin(\cos \xi) + \frac{\sinh \eta}{\cosh \eta + \cos \xi} + \cot \xi \arcsin \left(\frac{\cosh \eta \cos \xi + 1}{\cosh \eta + \cos \xi} \right) \right\} \\ & - \frac{5 \cos \xi}{2 \sin^2 \xi} \left[\frac{\sinh \eta}{(\cosh \eta + \cos \xi)^2} \right. \\ & - \frac{3 \cos \xi}{2 \sin^2 \xi} \left\{ 1 - \cot \xi \arcsin(\cos \xi) + \frac{\sinh \eta}{\cosh \eta + \cos \xi} + \cot \xi \arcsin \left(\frac{\cosh \eta \cos \xi + 1}{\cosh \eta + \cos \xi} \right) \right\} \\ & \left. \left. + \frac{1}{2 \sin \xi} \left\{ \arcsin(\cos \xi) - \arcsin \left(\frac{\cosh \eta \cos \xi + 1}{\cosh \eta + \cos \xi} \right) \right\} \right] \right] \end{aligned}$$

$$\forall 0 < \xi < 2\pi$$

$$\begin{aligned} b = & \frac{\beta}{5} \left[\frac{2}{3} + \frac{\sinh \eta}{\cosh \eta + 1} \left\{ \frac{1}{(\cosh \eta + 1)^2} + \frac{2}{3(\cosh \eta + 1)} + \frac{2}{3} \right\} \right] \\ & + \frac{\gamma}{7} \left[\frac{2}{5} + \frac{\sinh \eta}{\cosh \eta + 1} \left\{ \frac{1}{(\cosh \eta + 1)^3} + \frac{3}{(\cosh \eta + 1)^2} + \frac{2}{\cosh \eta + 1} + \frac{2}{5} \right\} \right] \end{aligned}$$

$$\xi = 0, 2\pi \quad (5.4)$$

und

$$\xi = \arctan\left(\frac{2dy}{d^2 - (x^2 + y^2)}\right), \quad \eta = \frac{1}{2} \ln\left(\frac{(x+d)^2 + y^2}{(x-d)^2 + y^2}\right) \quad (5.5)$$

$$\gamma = \frac{D_m 2\pi m n}{Q}, \quad \beta = \frac{\alpha_L}{d}, \quad \tau = \frac{Qt}{2\pi m n d^2}, \quad (5.6)$$

mit dem halben Brunnenabstand d , der Aquiferdicke m , der molekularen Diffusion D_m , der longitudinalen Dispersionslänge α_L , der effektiven Porosität n und der Pumprate Q .

5.2.2 Numerische Simulation

Für die gitteradaptive Modellierung wird ein von THORENZ (1995) generiertes Finite-Elemente-Gitter verwendet. Dazu hat THORENZ (1995) einen Gittergenerator entwickelt, der für advektive Transportvorgänge in Brunnensystemen das FE-Gitter mit Hilfe von Strom- und Potentiallinienverfolgungen optimal an das Strömungsfeld anpaßt (Abbildung 5.7).

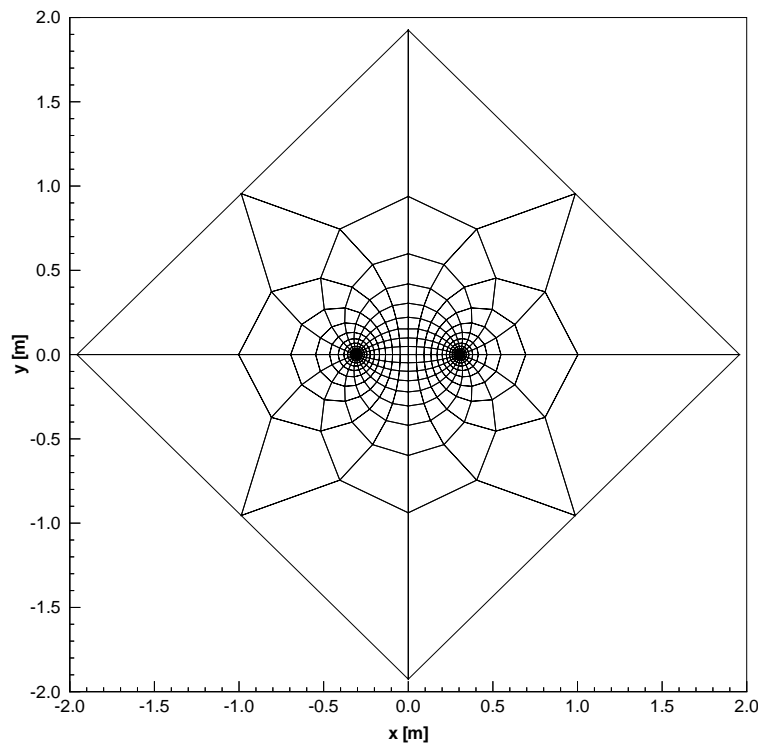


Abbildung 5.7: Ausgangsgitter Brunnendublette (THORENZ 1995)

Da in Brunnennähe, wo große Geschwindigkeitsgradienten auftreten können, das Ausgangsgitter bereits eine feinere örtliche Auflösung aufweist und damit in diesem Bereich Oszillationen weitestgehend vermieden werden, ist hier eine auf das Strömungs- bzw. Druckfeld bezogene Gitteradaption nicht notwendig.

Die Simulations- und Adaptionparameter für die folgenden Berechnungen können den Tabellen 5.4 und 5.5 entnommen werden. Die Ergebnisse werden mit der analytischen Lösung in den Beobachtungspunkten $A(0m, 0m)$, $B(0m, 0.1524m)$, und $C(0m, 0.3048m)$ verglichen.

Tabelle 5.4: Simulationsparameter Brunnendublette

Symbol	Bezeichnung	Wert
<i>Allgemeines</i>		
$2d$	Brunnenabstand	0.61 m
Q_{in}, Q_{out}	Pumpraten	$2 \cdot 2.339 \cdot 10^{-6} \text{ m}^3/\text{s}$
c_{in}	Randbedingung Transport	1.0
<i>Materialdaten</i>		
m	Dicke des Aquifers	0.089 m
k	spezifische Permeabilität	$1.019 \cdot 10^{-12} \text{ m}^2$
n	effektive Porosität	$0.374 \text{ m}^3 \text{ m}^{-3}$
α_L	longitudinale Dispersionslänge	$1.54 \cdot 10^{-3} \text{ m}$

Tabelle 5.5: Adaptionparameter Brunnendublette

Adaptionsalgorithmus	1
max. Verfeinerungslevel	$lev_{max} = 4$
Konzentration (2D)	
Verfeinerungsindikator	Sprung-Indikator
Verfeinerungstoleranzen	$tol_{mit}^f = 2.5, tol_{mit}^g = 0.5$

Zunächst wird für die gitteradaptive Modellierung des Stofftransports eine max. Verfeinerungstiefe von $lev_{max} = 4$ vorgegeben (Tabelle 5.5).

Abbildung 5.8 zeigt, bei Verwendung des Sprung-Indikators, eine gute Übereinstimmung zwischen numerischer und analytischer Lösung, die auch durch eine Erhöhung des max. Verfeinerungslevels lev_{max} nicht weiter verbessert werden kann. Dagegen führt eine Reduzierung des max. Verfeinerungslevels zu einer deutlichen Verschlechterung der Ergebnisse (Abbildung 5.9).

Da die dem analytischen Modell zugrunde liegenden Voraussetzungen nicht vollständig auf das numerische Modell übertragen werden können (siehe auch KOLDITZ 1997), sind die vorhandenen Abweichungen (Abbildung 5.8) zwischen numerischer und analytischer Lösung nicht zu vermeiden. So wird für das analytische Modell ein unendlich ausgedehnter Aquifer mit punktueller Quelle und Senke betrachtet, wohingegen das numerische Modell einen begrenzten Aquifer simuliert, in dem die Brunnen einen endlichen Radius besitzen.

Die Konzentrationsverteilungen einschließlich der adaptierten Berechnungsgitter sind für unterschiedliche Zeiten t in Abbildung 5.10 dargestellt. Sowohl die durch den verwendeten Sprung-Indikator hervorgerufene Verfeinerung im Frontbereich als auch die Vergrößerungen sind sehr gut zu erkennen.

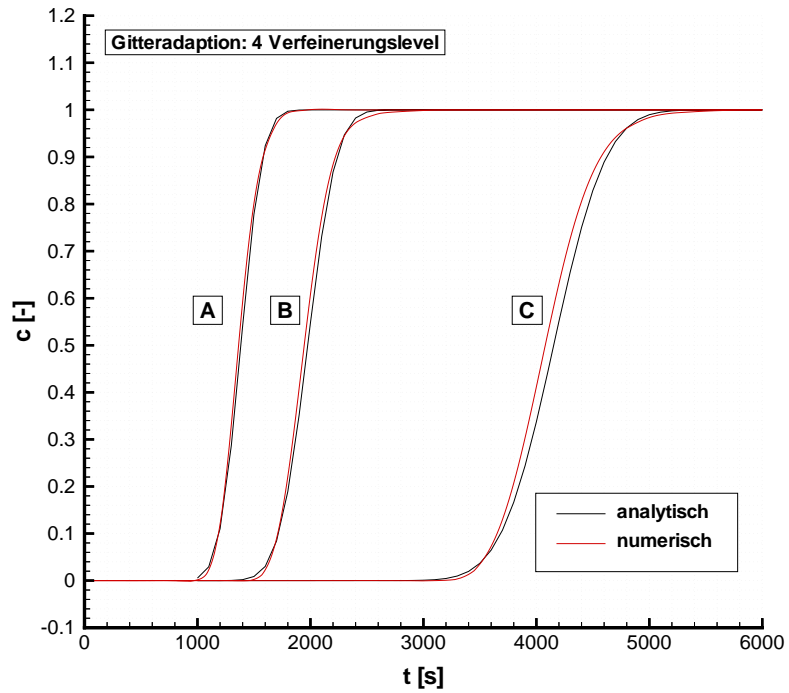


Abbildung 5.8: Vergleich analytischer und numerischer Ergebnisse in den Beobachtungspunkten $A(0m, 0m)$, $B(0m, 0.1524m)$, und $C(0m, 0.3048m)$ (Brunnendublette)

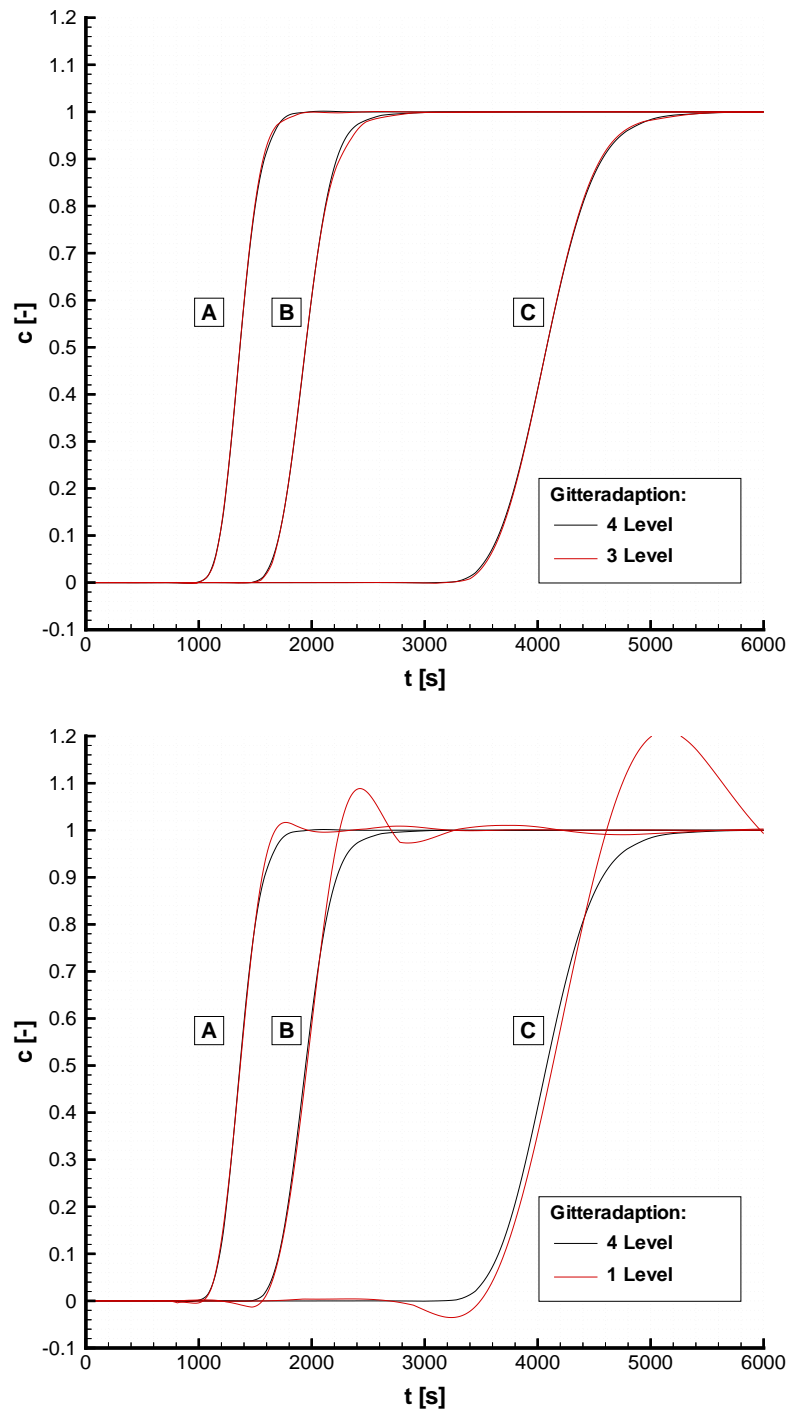


Abbildung 5.9: Vergleich der numerischen Ergebnisse in den Beobachtungspunkten $A(0m, 0m)$, $B(0m, 0.1524m)$, und $C(0m, 0.3048m)$ bei verschiedenen maximalen Verfeinerungsniveaus (Brunnendublette)

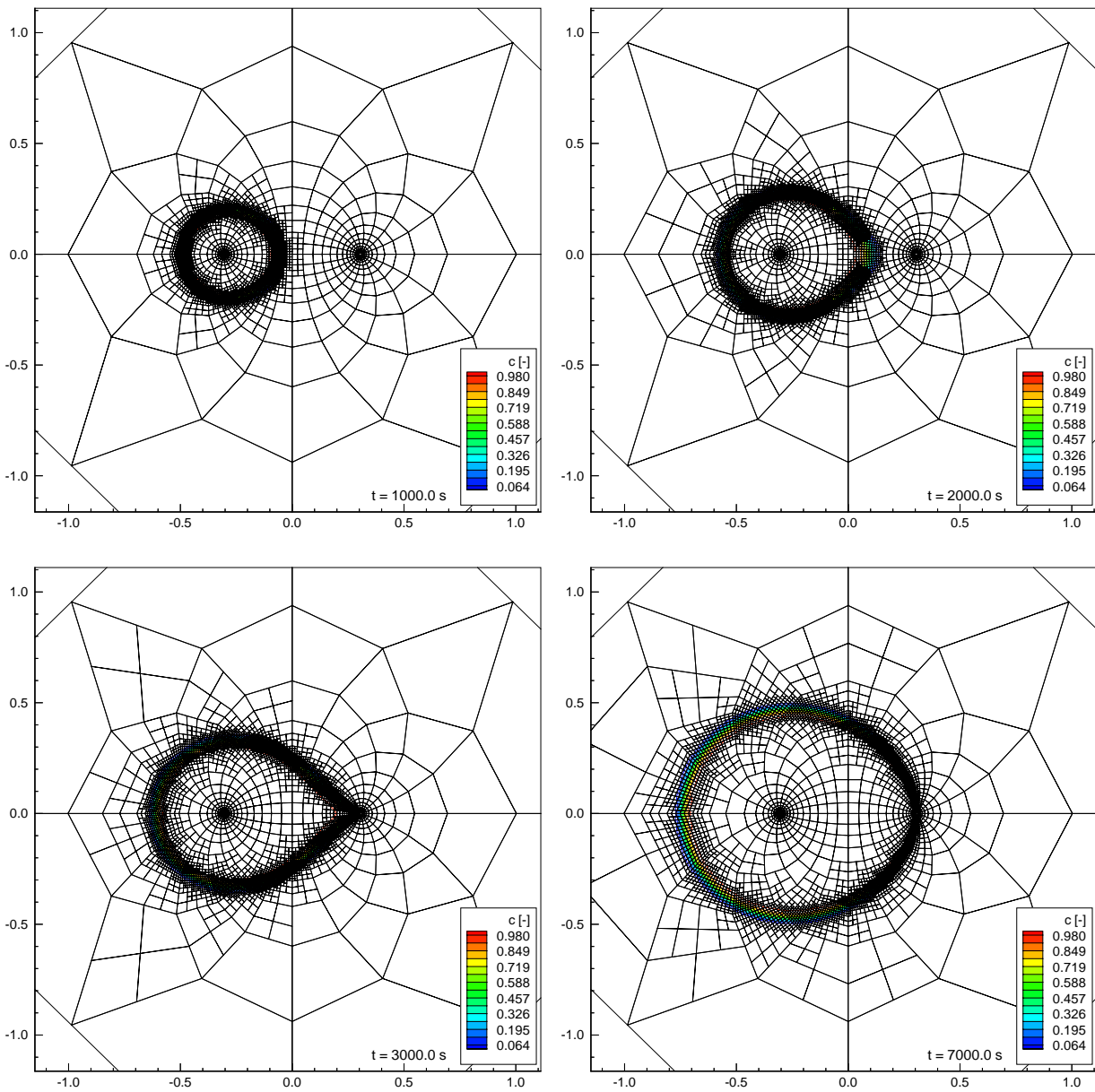


Abbildung 5.10: Konzentrationsverteilungen und adaptierte Berechnungsgitter (Brunnendublette)

5.3 Stofftransport in Kluft/Matrix-Systemen

Unter dem Begriff der Matrixdiffusion werden Problemstellungen verstanden, die den Einfluß des Stoff- aber auch Wärmeaustausches zwischen Grundwasserleitern und wenig oder nicht durchflossenen Aquiferteilen untersuchen (KOLDITZ 1997). Hierunter fallen Systeme wasserführender Klüfte mit angrenzender nahezu undurchlässiger Festgesteinsmatrix (Abbildung 5.11).

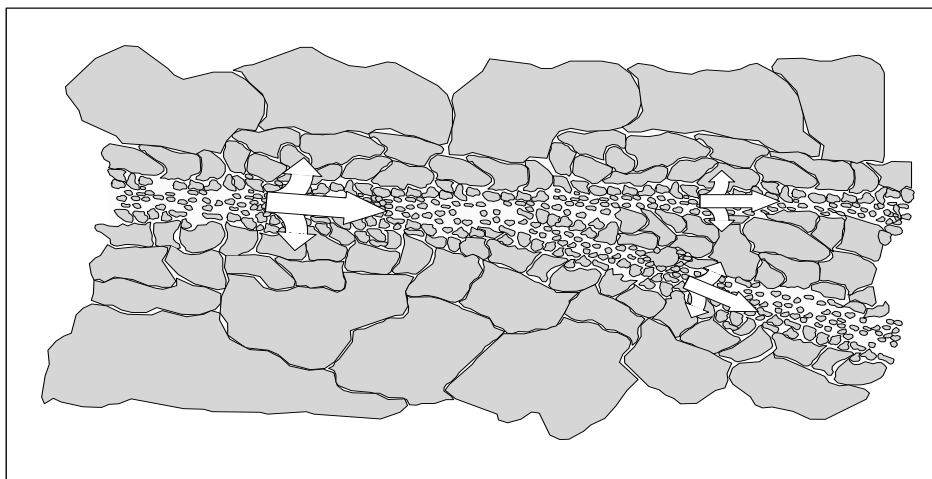


Abbildung 5.11: Kluft/Matrix-System (BARLAG 1997)

Analog zu einer von TANG ET AL. (1981) angegebenen analytischen Lösung zum Problem der Matrixdiffusion in einem Kluft/Matrix-System haben GILLHAM ET AL. (1984) eine analytische Lösung für einen porösen Grundwasserleiter hergeleitet. Dabei betrachteten sie eine Bodenschicht hoher Durchlässigkeit, die von einer wenig durchlässigen Schicht umgeben ist. Diese analytische Lösung läßt sich ihrerseits auf ein Kluft/Matrix-System übertragen (KRÖHN 1991).

BARLAG (1997) hat eine zweidimensionale gitteradaptive Berechnung des advektiv-diffusiven Stofftransports in einem Kluft/Matrix-System durchgeführt. Dazu wurde die Kluft mit eindimensionalen und die Gesteinsmatrix mit zweidimensionalen Elementen modelliert. Im folgenden sollen u.a. anhand einer entsprechenden dreidimensionalen Simulation die Möglichkeiten und Grenzen der h-Adaption aufgezeigt werden.

5.3.1 Analytische Lösung (GILLHAM ET AL. (1984))

Für die analytische Lösung wird angenommen, daß eine rechteckförmige Anfangsverteilung, die um den Nullpunkt angeordnet ist, mit einer Strömung konstanter Geschwindigkeit durch eine Kluft befördert wird (vgl. Abbildung 5.12). Dabei kommt es zu einem diffusiven Stoffaustausch mit der Gesteinsmatrix. Die Durchlässigkeit der Matrix soll so klein sein, daß der Stofftransport hier hauptsächlich durch molekulare Diffusion stattfindet.

Die Kluft wird durch einen eindimensionalen Strang repräsentiert, während in der Gesteinsmatrix nur eindimensionale Diffusion orthogonal zu Kluft berücksichtigt wird. Der Diffusionsstrom parallel zur Kluft wird vernachlässigt. Dazu gibt GILLHAM ET AL. (1984) folgende analytische Lösung an:

$$\begin{aligned}
c(x, z, t) = & c_0 \cdot \exp \left\{ \frac{n_{2D}(z-b)}{n_{1D}b} + \frac{n_{2D}^2 D_{m2D} t}{n_{1D}^2 b^2} \right\} \\
& \cdot \left[\operatorname{erfc} \left\{ \frac{z-b}{2\sqrt{D_{m2D}t}} + \frac{n_{2D}\sqrt{D_{m2D}t}}{n_{1D}b} \right\} \right. \\
& - \operatorname{H} \left(t - \frac{x+a}{v_{1D}} \right) \cdot \operatorname{erfc} \left\{ \frac{n_{2D}\sqrt{D_{m2D}}(x+a)/n_{1D}v_{1D}b + (z-b)/\sqrt{D_{m2D}}}{2\sqrt{t-(x+a)/v_{1D}}} \right. \\
& \left. \left. + \frac{n_{2D}\sqrt{D_{m2D}}}{n_{1D}b} \sqrt{t - \frac{x+a}{v_{1D}}} \right\} \right] \quad \forall -a \leq x \leq a
\end{aligned} \tag{5.7}$$

$$\begin{aligned}
c(x, z, t) = & c_0 \cdot \exp \left\{ \frac{n_{2D}(z-b)}{n_{1D}b} + \frac{n_{2D}^2 D_{m2D} t}{n_{1D}^2 b^2} \right\} \\
& \cdot \left[\operatorname{H} \left(t - \frac{x-a}{v_{1D}} \right) \cdot \operatorname{erfc} \left\{ \frac{n_{2D}\sqrt{D_{m2D}}(x-a)/n_{1D}v_{1D}b + (z-b)/\sqrt{D_{m2D}}}{2\sqrt{t-(x-a)/v_{1D}}} \right. \right. \\
& \left. \left. + \frac{n_{2D}\sqrt{D_{m2D}}}{n_{1D}b} \sqrt{t - \frac{x-a}{v_{1D}}} \right\} \right. \\
& - \operatorname{H} \left(t - \frac{x+a}{v_{1D}} \right) \cdot \operatorname{erfc} \left\{ \frac{n_{2D}\sqrt{D_{m2D}}(x+a)/n_{1D}v_{1D}b + (z-b)/\sqrt{D_{m2D}}}{2\sqrt{t-(x+a)/v_{1D}}} \right. \\
& \left. \left. + \frac{n_{2D}\sqrt{D_{m2D}}}{n_{1D}b} \sqrt{t - \frac{x+a}{v_{1D}}} \right\} \right] \quad \forall x \geq a
\end{aligned} \tag{5.8}$$

mit

$$\operatorname{H}(\alpha) = \begin{cases} 0 & \forall \alpha \leq 0 \\ 1 & \forall \alpha > 0 \end{cases} .$$

Die Lösung für die Konzentrationsverteilung in der Kluft ergibt sich, wenn $z = b$ gesetzt wird. Die hier verwendeten Symbole und ihre Bezeichnungen sind in Tabelle 5.6 (Simulationsparameter) zu finden.

5.3.2 Numerische Simulation

Der Stofftransport entlang der Kluft findet entsprechend der Annahmen für die analytische Lösung rein advektiv statt. Der Austausch mit der schwach durchlässigen Gesteinsmatrix ist dagegen rein diffusiv. Zunächst wird die Kluft mit eindimensionalen und die Gesteinsmatrix mit zweidimensionalen Elementen modelliert. Dadurch wird im Gegensatz zur analytischen Lösung ein Diffusionsstrom in der Matrix zugelassen, der nicht orthogonal zur Kluft verläuft. Aufgrund der hohen Fließgeschwindigkeit in der Kluft ist aber damit zu rechnen, daß der Stofftransport infolge Diffusion trotzdem überwiegend senkrecht zur Kluft stattfindet (KRÖHN 1991). Damit sind numerische und analytische Lösung miteinander vergleichbar.

Die numerischen Berechnungen werden aufgrund der Symmetrie der geometrischen und physikalischen Eigenschaften entsprechend der Berechnungen von BARLAG (1997) nur am halben System (Symmetrieachse SA – SA) durchgeführt (Abbildung 5.12). Für die erste gitteradaptive Berechnung wird ein in x - und z -Richtung jeweils äquidistantes Ausgangsgitter (Abbildung 5.13) verwendet. Die Simulations- und Adaptionparameter können den Tabellen 5.6 und 5.7 entnommen werden.

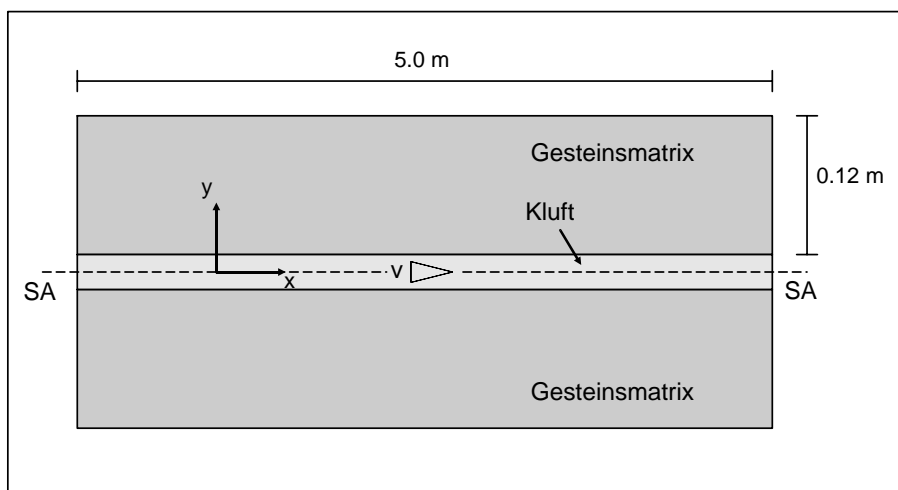


Abbildung 5.12: Systembeschreibung Kluft/Matrix-System

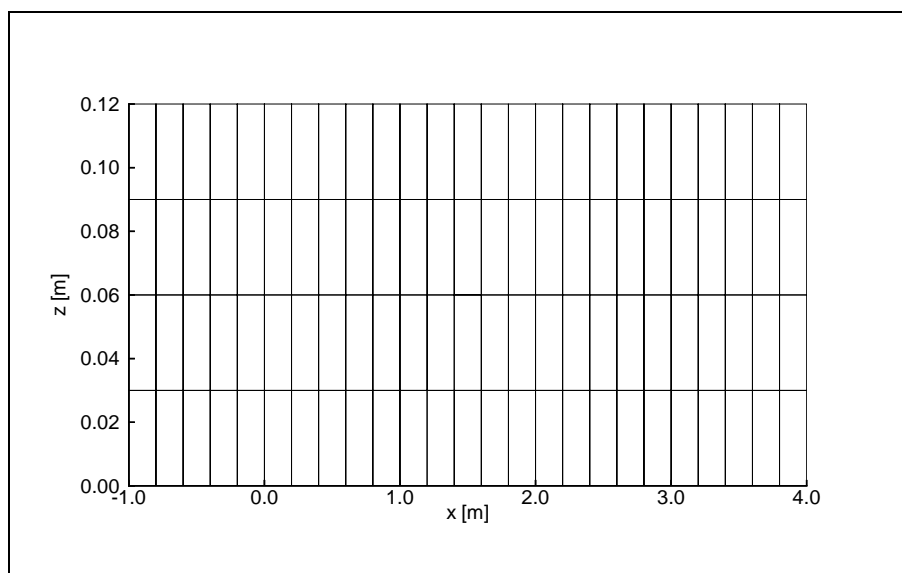


Abbildung 5.13: Ausgangsgitter Kluft/Matrix-System (1D/2D)

In den Abbildungen 5.14 (oben) für die 1D-Kluft und 5.18 (oben) für die 2D-Matrix ist eine gute Übereinstimmung von numerischer und analytischer Lösung erkennbar.

Aufgrund der Matrixdiffusion wird die advektiv durch die Kluft transportierte Anfangskonzentration c_0 (gestrichelte Linie) mit der Zeit abgebaut (Abbildung 5.14), bis, infolge des sog. 'tailing'-Effekts, die von der Matrix aufgenommene Substanz zurück in die Kluft diffundiert.

Tabelle 5.6: Simulationsparameter Kluft/Matrix-System (1D/2D)

Symbol	Bezeichnung	Wert
<i>Allgemeines</i>		
c_0	Anfangsbedingung	1.0 für $-a \leq x \leq a$ mit $a = 0.2 m$
<i>Kluft (1D)</i>		
b	halbe Kluftöffnungsweite	0.0075 m
n_{1D}	effektive Porosität	$1.0 m^3 m^{-3}$
v_{a1D}	Abstandsgeschwindigkeit	$2.5 \cdot 10^{-6} m/s$
<i>Gesteinsmatrix (2D)</i>		
n_{2D}	effektive Porosität	$0.1 m^3 m^{-3}$
D_{m2D}	molekulare Diffusion	$1.40625 \cdot 10^{-9} m^2/s$

Tabelle 5.7: Adaptionparameter Kluft/Matrix-System (1D/2D)

Adaptionsalgorithmus	1
max. Verfeinerungslevel (global)	$lev_{max} = 5$
<i>Konzentration (1D/2D)</i>	
<i>Kluft (1D)</i>	
Verfeinerungsindikator	Sprung-Indikator
Verfeinerungstoleranzen	$tol_{mit,1D}^f = 1.2, tol_{mit,1D}^g = 0.5$
max. Verfeinerungslevel (1D)	$lev_{max,1D} = 5$ (gleichmäßiges Gitter) $lev_{max,1D} = 5$ (vorverfeinertes Gitter)
<i>Gesteinsmatrix (2D)</i>	
Verfeinerungsindikator	Sprung-Indikator
Verfeinerungstoleranzen	$tol_{mit,2D}^f = 1.2, tol_{mit,2D}^g = 0.5$
max. Verfeinerungslevel (2D)	$lev_{max,2D} = 5$ (gleichmäßiges Gitter) $lev_{max,2D} = 3$ (vorverfeinertes Gitter)

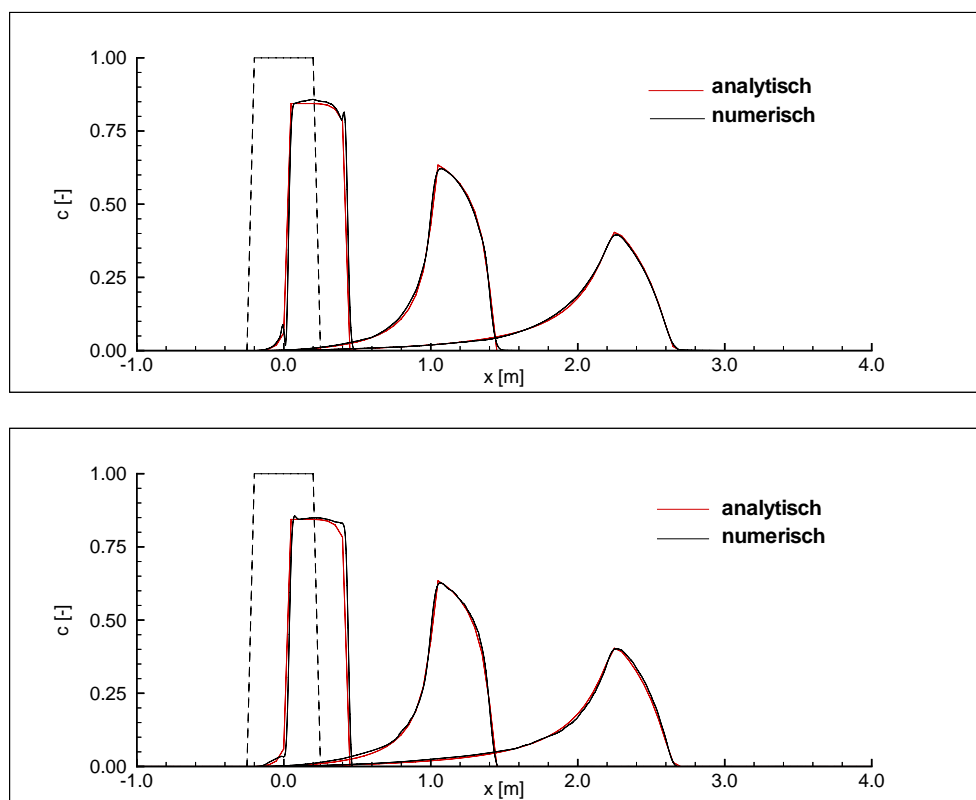


Abbildung 5.14: Konzentrationsverteilung in der 1D-Kluft zu den Zeitpunkten $t_1 = 1.0 \cdot 10^5$ s, $t_2 = 5.0 \cdot 10^5$ s und $t_3 = 1.0 \cdot 10^6$ s ('gleichmäßiges' und 'vorverfeinertes' Ausgangsgitter)

Die Wiedergabe der rechteckförmigen Anfangsverteilung der Konzentration kann nur als Trapez erfolgen, dessen Flanken um so steiler werden, je feiner das Ausgangsgitter aufgelöst wird. Ein für die Gitteradaption ausreichendes 'grobes' Ausgangsgitter führt folglich zu einer nicht korrekten Wiedergabe der Anfangskonzentration, so daß die numerische Lösung nicht mit der analytischen übereinstimmen kann.

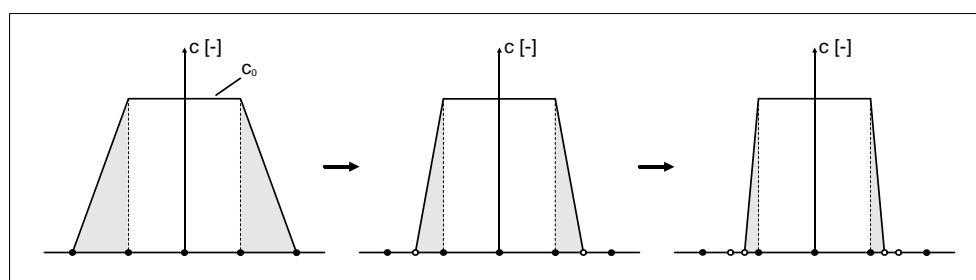


Abbildung 5.15: Anpassung der Anfangsbedingung im ersten Zeitschritt

Deshalb werden im ersten Zeitschritt die Anfangsbedingungen nach jedem Adaptionsschritt aktualisiert und so an das adaptierte Berechnungsgitter angepaßt (Abbildung 5.15).

Die Genauigkeit der Anfangsbedingung hängt dabei von der Anzahl der im ersten Zeitschritt durchgeführten gitteradaptiven Iterationen $I_{\Delta t}$ und damit vom maximalen Verfeinerungslevel lev_{max} ab.

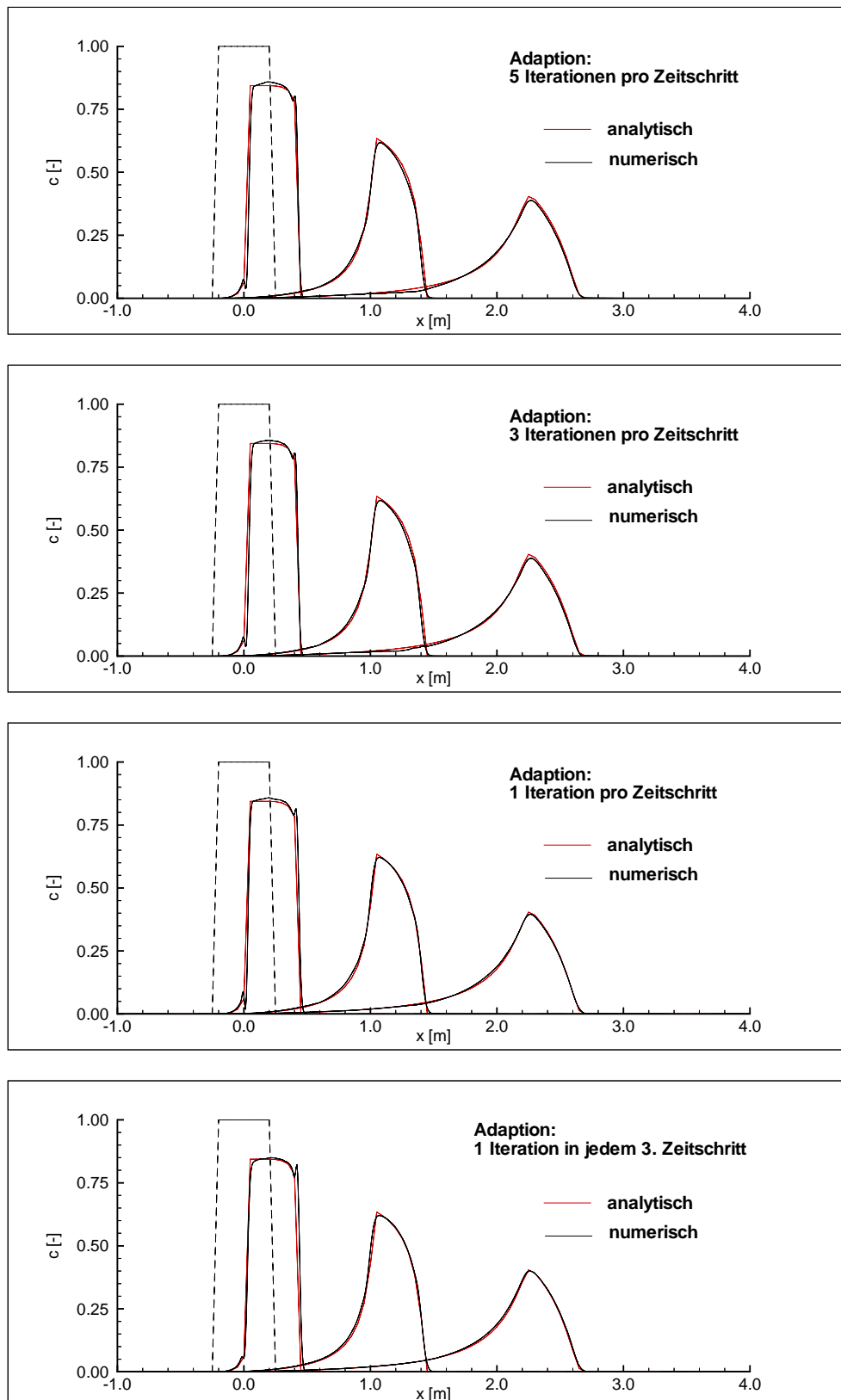


Abbildung 5.16: Konzentrationsverteilungen in der 1D-Kluft ('gleichmäßiges' Ausgangsgitter) für verschiedene $I_{\Delta t}$ (Anzahl gitteradaptive Iterationen pro Zeitschritt)

Bisher wurde, nachdem bereits im ersten Zeitschritt mit lev_{max} gitteradaptiven Iterationen ein optimal angepaßtes Berechnungsgitter erzeugt wurde, mit einer gitteradaptiven Iteration ($I_{\Delta t} = 1$) in jedem weiteren Zeitschritt eine gute Übereinstimmung zwischen numerischer und analytischer Lösung erzielt.

Tabelle 5.8: cpu-Zeit-Vergleich (normiert) für verschiedene $I_{\Delta t}$ ($t = 1.0 \cdot 10^6$ s)

	cpu-Zeit	Knoten	1D-Elemente	2D-Elemente
5 lter. pro Zeitschritt	1	15762	344	15205
3 lter. pro Zeitschritt	0.66	15797	335	15229
1 lter. pro Zeitschritt	0.22	14921	343	14260
1 lter. in jedem 3. Zeitschritt	0.09	14668	352	13942

Eine Erhöhung von $I_{\Delta t}$ führt zu keiner wesentlichen Verbesserung der numerischen Lösung (Abbildung 5.16), hat aber eine Erhöhung der Rechenzeit zur Folge, da nach jeder Anpassung des Berechnungsgitters eine numerische Berechnung der betrachteten Prozesse (hier des Stofftransports) durchgeführt wird. So führt eine Erhöhung von $I_{\Delta t} = 1$ auf $I_{\Delta t} = 5$ in dem hier betrachteten Fall zu einer fünf mal höheren Rechenzeit bei nahezu gleichbleibender Anzahl an Knoten und Elementen (Tabelle 5.8).

Eine weitere Reduzierung der Rechenzeit ergibt sich, wenn für $I_{\Delta t} = 1$ zusätzlich nur in jedem m -ten Zeitschritt (hier $m = 3$) eine Anpassung des Berechnungsgitters durchgeführt wird.

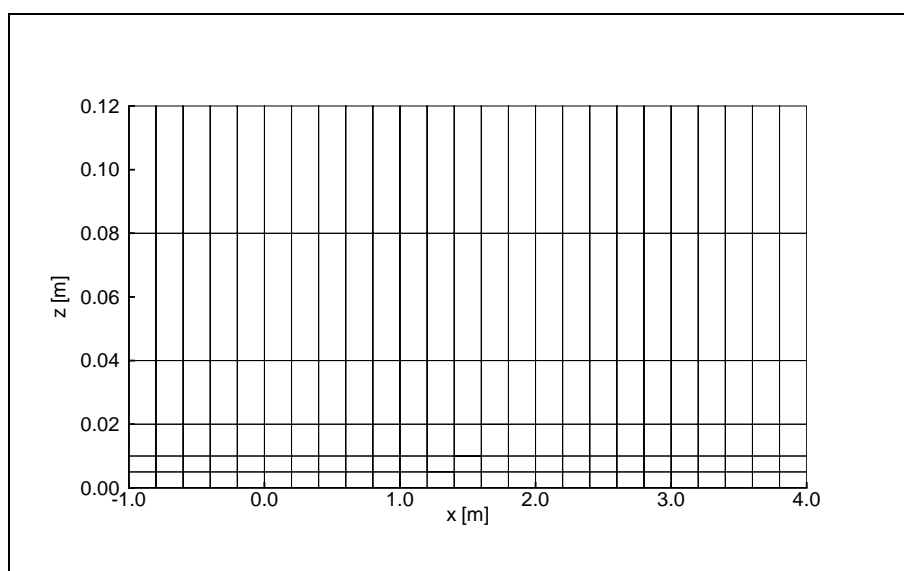


Abbildung 5.17: A priori im Kluft/Matrix-Übergangsbereich verfeinertes Ausgangsgitter

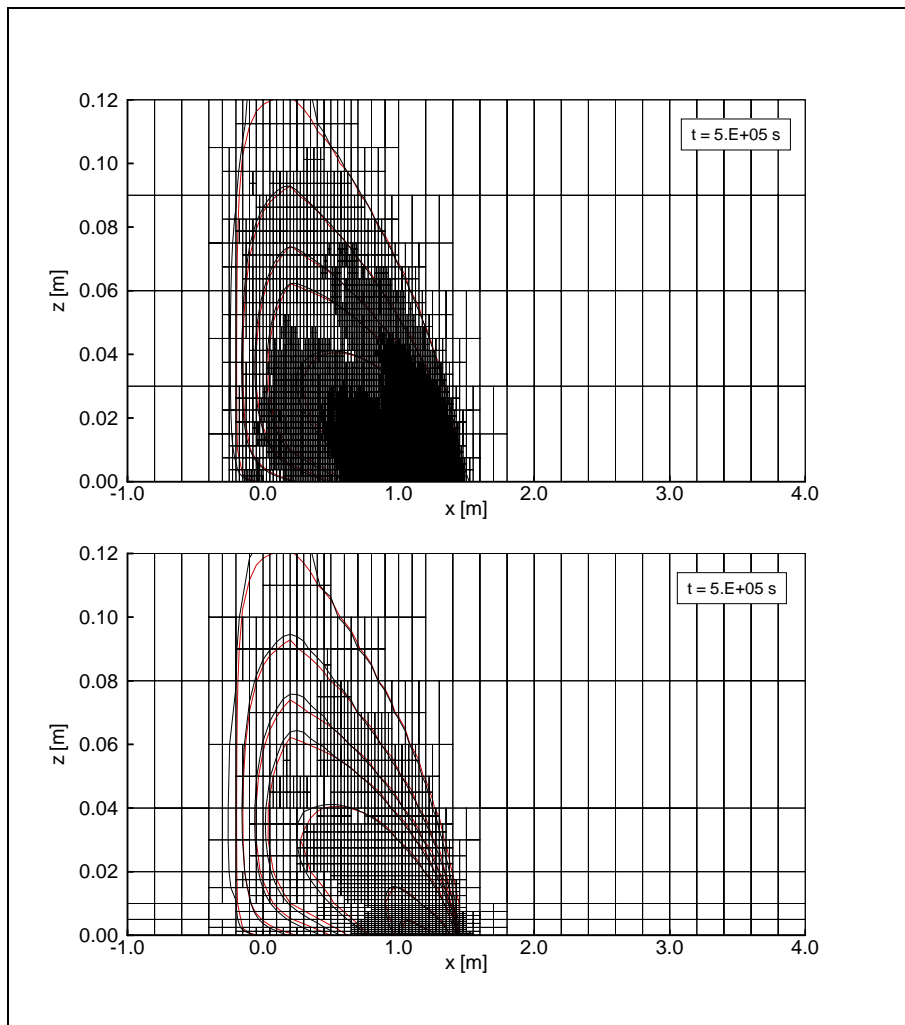


Abbildung 5.18: Konzentrationsverteilung und adaptiertes Berechnungsgitter in der 2D-Matrix ('gleichmäßiges' (oben) und 'vorverfeinertes' (unten) Ausgangsgitter)

Bisher wurde für die gitteradaptiven Berechnungen ein 'gleichmäßiges', d.h. ein in x- und z-Richtung jeweils äquidistantes, Ausgangsgitter verwendet. Da die Ausbreitungsvorgänge in z-Richtung (2D-Matrix) im Vergleich zur x-Richtung (1D-Kluft) sehr langsam ablaufen und auch nur in einem sehr schmalen Übergangsbereich stattfinden, ist hier eine entsprechend feinere Auflösung des Ausgangsgitters notwendig. Diese Auflösung reicht jedoch noch nicht aus, um die Anfangskonzentration für den Übergangsbereich korrekt wiederzugeben. Deshalb ist, um die Anfangsbedingung an ein optimales Berechnungsgitter anzupassen, sowohl für die 1D-Kluft als auch für die 2D-Matrix ein max. Verfeinerungslevel von $lev_{max,1D} = lev_{max,2D} = lev_{max} = 5$ notwendig.

Tabelle 5.9: Vergleich der adaptierten Berechnungsgitter bei 'gleichmäßigem' und 'vorverfeinertem' Ausgangsgitter

Zeit [s]	Anzahl Knoten	Anzahl 1D-Elemente	Anzahl 2D-Elemente
<i>gleichmäßiges Gitter</i>			
0.0	130	25	100
100000.0	2132	107	1936
500000.0	8485	227	8068
1000000.0	14921	343	14260
<i>vorverfeinertes Gitter</i>			
0.0	182	25	150
100000.0	1021	79	882
500000.0	2292	155	2052
1000000.0	3055	178	2751

Um, im Hinblick auf die gitteradaptive Modellierung des dreidimensionalen Kluft/Matrix-Systems (2D-Kluft, 3D-Matrix), eine Reduzierung des max. Verfeinerungslevels für die Matrix zu erreichen, ist eine Vorverfeinerung des Kluft/Matrix-Übergangsbereiches notwendig (Abbildung 5.17). Dies kann, wie hier geschehen, einerseits a priori erfolgen, andererseits ist auch in diesem Fall die Verwendung der r-Adaption denkbar, um damit die Knoten in Richtung der Kluft zu verschieben.

Aufgrund der Vorverfeinerung des Übergangsbereiches ist es nun möglich, den max. Verfeinerungslevel für die Matrix von $lev_{max,2D} = 5$ auf $lev_{max,2D} = 3$ zu reduzieren, während für die Kluft auch weiterhin $lev_{max,1D} = 5$ notwendig ist (Tabelle 5.7). Diese Vorgehensweise führt, bei ebenfalls guter Übereinstimmung von numerischer und analytischer Lösung (Abbildung 5.14 und 5.18, unten), zu einer erheblichen Reduzierung der Knoten und Elemente (Tabelle 5.9) und folglich auch der Rechenzeit.

Für die Modellierung des Stofftransports in einem dreidimensionalen Kluft/Matrix-System werden die Simulationsparameter aus Tabelle 5.6 entsprechend übertragen. Die Adaptionparameter sind der Tabelle 5.10 zu entnehmen.

Tabelle 5.10: Adaptionsparameter Kluft/Matrix-System 2D/3D

Adaptionsalgorithmus	1
max. Verfeinerungslevel (global)	$lev_{max} = 4$
Konzentration (2D/3D)	
Kluft (2D)	
Verfeinerungsindikator	Sprung-Indikator
Verfeinerungstoleranzen	$tol_{mit,2D}^f = 1.2, tol_{mit,2D}^g = 0.3$
max. Verfeinerungslevel (2D)	$lev_{max,2D} = 4$
Gesteinsmatrix (3D)	
Verfeinerungsindikator	Sprung-Indikator
Verfeinerungstoleranzen	$tol_{mit,3D}^f = 1.2, tol_{mit,3D}^g = 0.3$
max. Verfeinerungslevel (3D)	$lev_{max,3D} = 2$

Auch hier wird sowohl für die gitteradaptive Berechnung des advektiven Stofftransports in der Kluft als auch des diffusiven Stofftransports in der Matrix ein Sprung-Indikator verwendet. Die Vorverfeinerung des Ausgangsgitters (Abbildung 5.20, oben) im Übergangsbereich ermöglicht die Verwendung unterschiedlicher max. Verfeinerungslevel für die Kluft ($lev_{max,2D} = 4$) und die Matrix ($lev_{max,3D} = 2$). Die Anzahl der gitteradaptiven Iterationen pro Zeitschritt wird aufgrund der vorab durchgeführten Untersuchungen mit $I_{\Delta t} = 1$ vorgegeben.

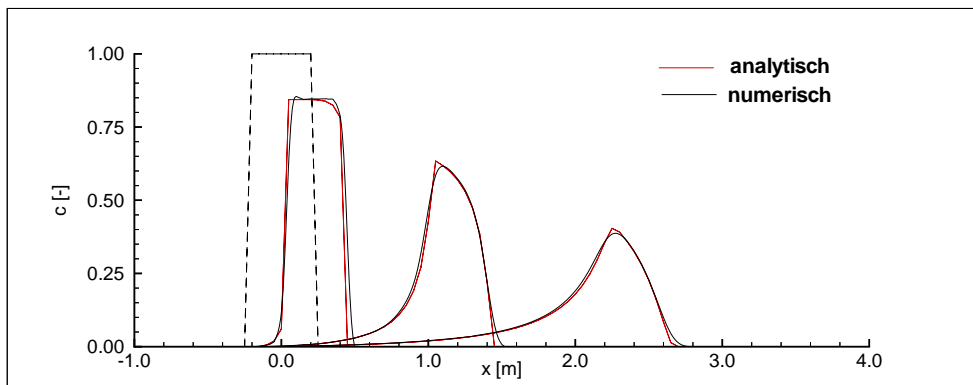


Abbildung 5.19: Konzentrationsverteilung in der 2D-Kluft zu den Zeitpunkten $t_1 = 1.0 \cdot 10^5 s$, $t_2 = 5.0 \cdot 10^5 s$ und $t_3 = 1.0 \cdot 10^6 s$ (2D/3D-Kluft/Matrix-System)

In Abbildung 5.19 ist auch hier eine gute Übereinstimmung von numerischer und analytischer Lösung zu erkennen. Auch wird die diffusive Ausbreitung des Tracers in der Matrix sehr gut wiedergegeben (Abbildung 5.20 und 5.21). Die zuletzt genannten Abbildungen stellen sowohl einen Schnitt durch die Matrix als auch die 2D-Kluft dar.

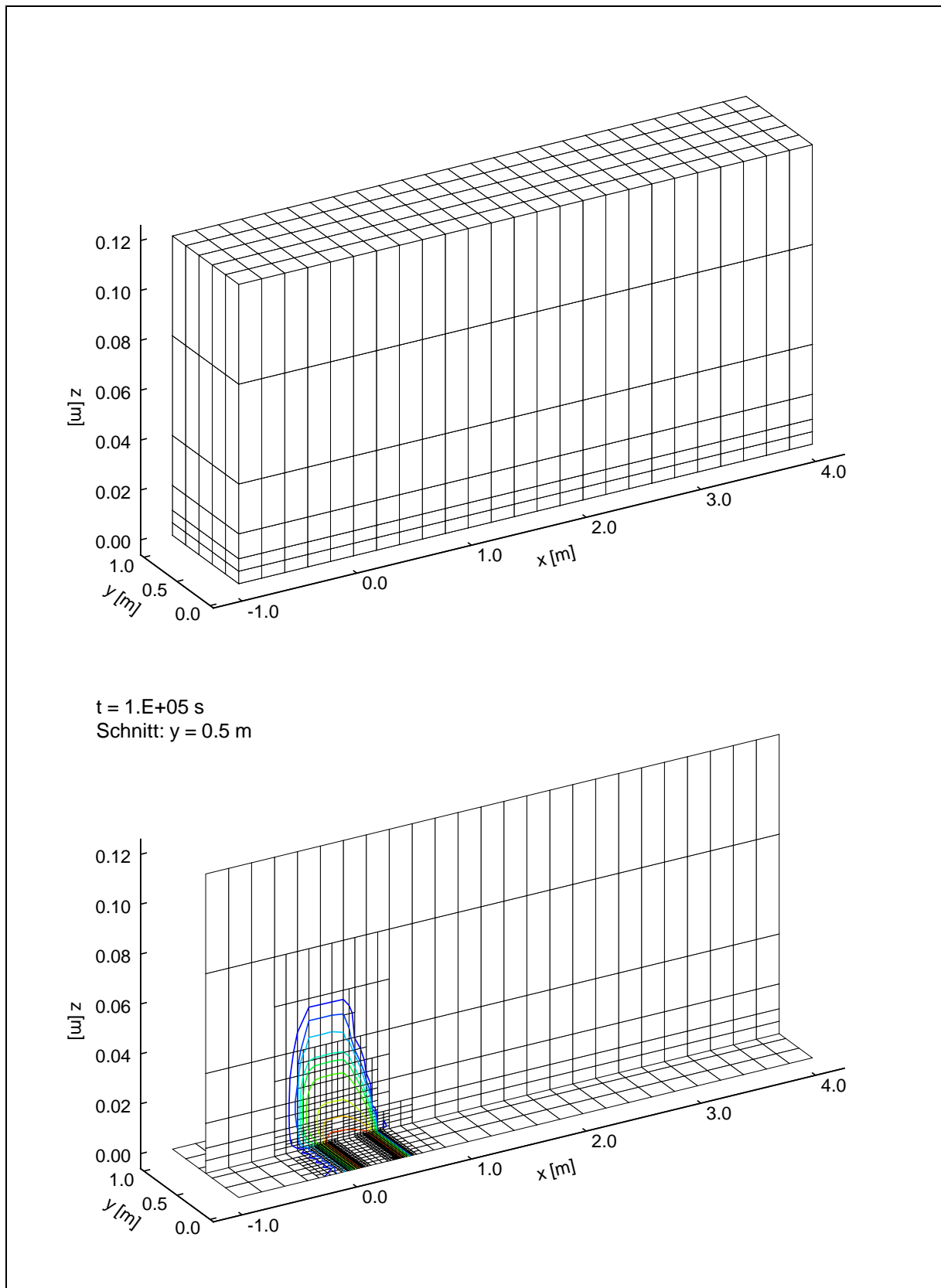


Abbildung 5.20: Ausgangsgitter und Konzentrationsverteilung (adaptiertes Berechnungsgitter) im Kluft/Matrix-System (2D/3D)

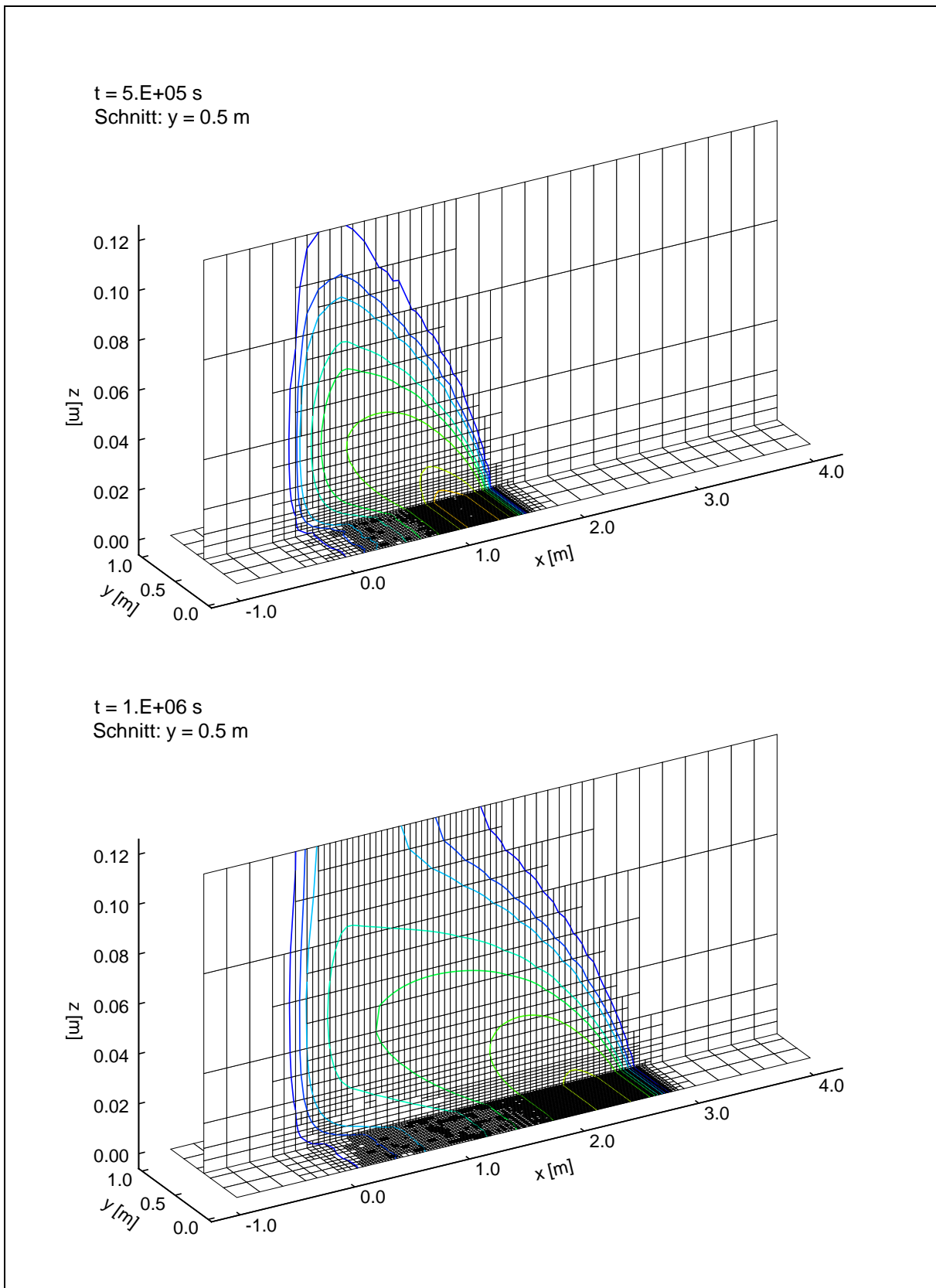


Abbildung 5.21: Konzentrationsverteilung und adaptiertes Berechnungsgitter im Kluft/Matrix-System ($2D/3D$)

5.4 Stofftransport in 2.5D-Kluftnetzwerken

Auf der französischen Seite des Rheingrabens im nördlichen Elsaß befindet sich die Geothermie-Lokation SOULTZ-SOUS-FORETS. Im Rahmen eines europäischen Hot-Dry-Rock-Projektes hat sich das Institut für Geologische Gemeinschaftsaufgaben (GGA) u.a. mit der Modellierung von Strömung, Stoff- und Wärmetransport im Kluftgestein (KOLDITZ 1997, PRIBNOW ET AL. 2001a, PRIBNOW ET AL. 2001b) beschäftigt.

Für die numerische Simulation von Tracerexperimenten, die der Erkundung dominanter Fließwege und damit der Parameteridentifikation dienen, wurden am Institut für Strömungsmechanik 2.5D-Kluftnetzwerke (ROTHER ET AL. 2000) generiert, die die Klüftung des SOULTZER Granits unter Vernachlässigung der Gesteinsmatrix abbilden (Abbildung 5.22).

Diskrete Kluftnetzwerke zur Berechnung von Strömungen und Transportprozessen im klüftigen Gestein sind, selbst bei einer geringen Anzahl an Klüften und bei Vernachlässigung der Gesteinsmatrix, auf kleinräumige Untersuchungen begrenzt, da Computerleistung und Speicherkapazität häufig nicht ausreichen, um großräumige Prozesse zu modellieren. Deshalb bieten sich hier in besonderem Maße gitteradaptive Methoden an.

Zur Darstellung der im Rahmen dieser Arbeit entwickelten Gitteradaption für 2.5D-Kluftnetzwerke, wird das von ROTHER für das GGA-Institut generierte Kluftnetzwerk, das sich über ein Gebiet von $10.0\text{ km} \times 10.0\text{ km} \times 5.0\text{ km}$ erstreckt und aus sieben Klüften besteht, verwendet. Die Simulationsparameter (Tabelle 5.11) werden zunächst frei gewählt.

Tabelle 5.11: Simulationsparameter 2.5D-Kluftnetzwerk

Symbol	Bezeichnung	Wert
<i>Allgemeines</i>		
Q_{in}, Q_{out}	Pumpraten	$1.55 \cdot 10^{-3} \text{ m}^3/\text{s}$
c_{in}	Randbedingung Transport	1.0
<i>Materialdaten</i>		
$2b$	Kluftdicke	$2.0 \cdot 10^{-04} \text{ m}$
k	spezifische Permeabilität	$3.5 \cdot 10^{-09} \text{ m}^2$
n	effektive Porosität	$1.0 \text{ m}^3 \text{ m}^{-3}$
D_m	molekulare Diffusion	$5.0 \cdot 10^{-6} \text{ m}^2/\text{s}$
α_L	longitudinale Dispersionslänge	20.0 m
α_T	transversale Dispersionslänge	2.0 m

Dies reicht jedoch aus, um die Möglichkeiten der Gitteradaption bei der Modellierung des Stofftransports in 2.5D-Kluftnetzwerken zu zeigen.

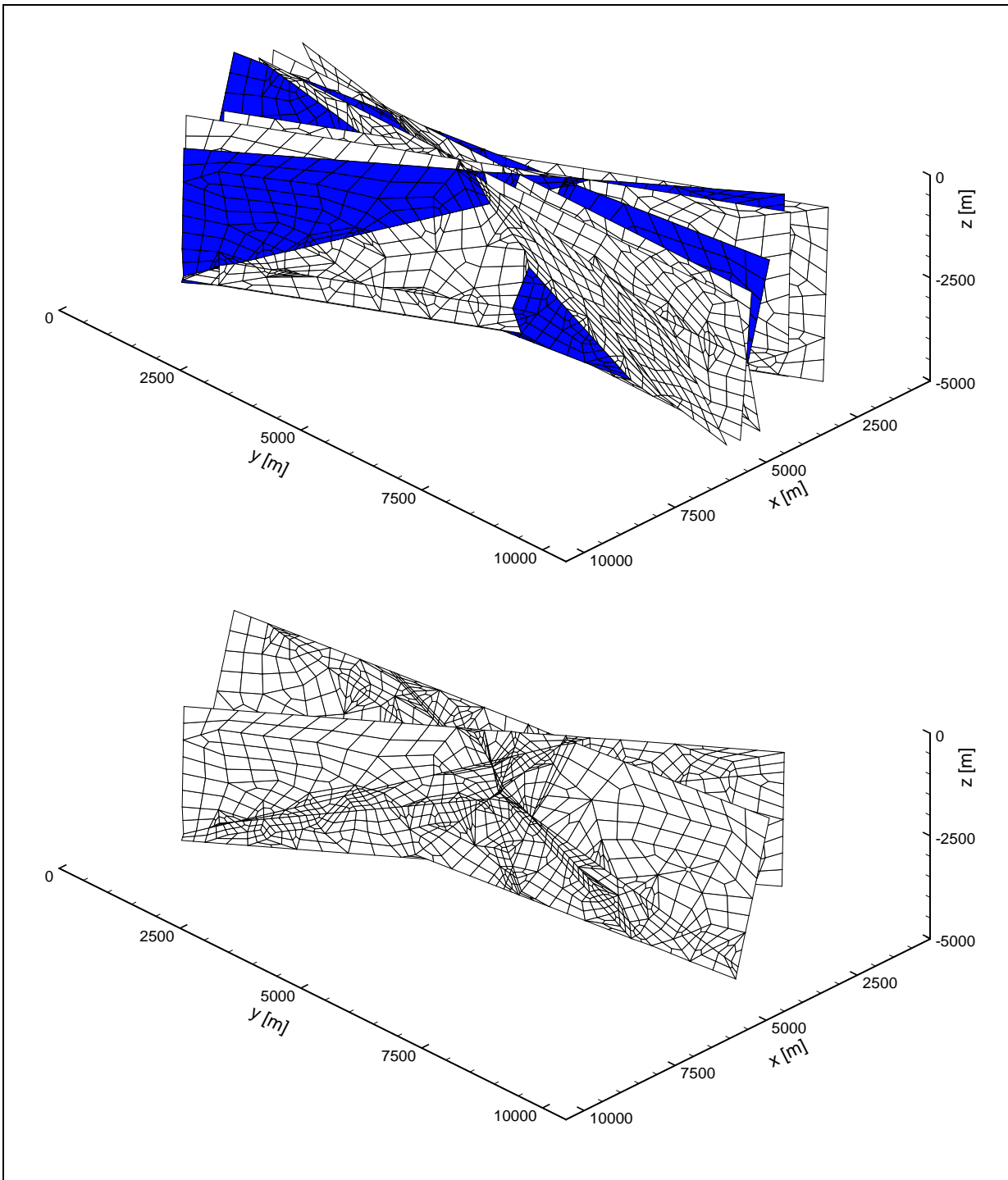


Abbildung 5.22: Ausgangsgitter für die Gitteradaption (2.5D-Kluftnetzwerk) und ausgewählte Klüfte

Tabelle 5.12: Adaptionparameter 2.5D-Kluftnetzwerk

Adaptionsalgorithmus	4 (Gitteradaption in jedem 10. Zeitschritt)
max. Verfeinerungslevel (global)	$lev_{max} = 5$
Druck (2D)	
Verfeinerungsindikator	Sprung-Indikator für Kluftnetzwerke
Verfeinerungstoleranzen	$tol_{mit}^f = 4.0, tol_{mit}^g = 0.0$
max. Verfeinerungslevel	$lev_{max,2D,p} = 5$
Konzentration (2D)	
Verfeinerungsindikator	Sprung-Indikator
Verfeinerungstoleranzen	$tol_{mit}^f = 1.2, tol_{mit}^g = 0.4$
max. Verfeinerungslevel	$lev_{max,2D,c} = 3$

Während in den vorangegangenen Beispielen die Gitteradaption jeweils nur auf eine Feldgröße angewendet wurde, wird hier bereits eine erste Kopplung der Gitteradaption für den 'Druck' und die 'Konzentration' durchgeführt. Die zugehörigen Adaptionparameter finden sich in Tabelle 5.12.

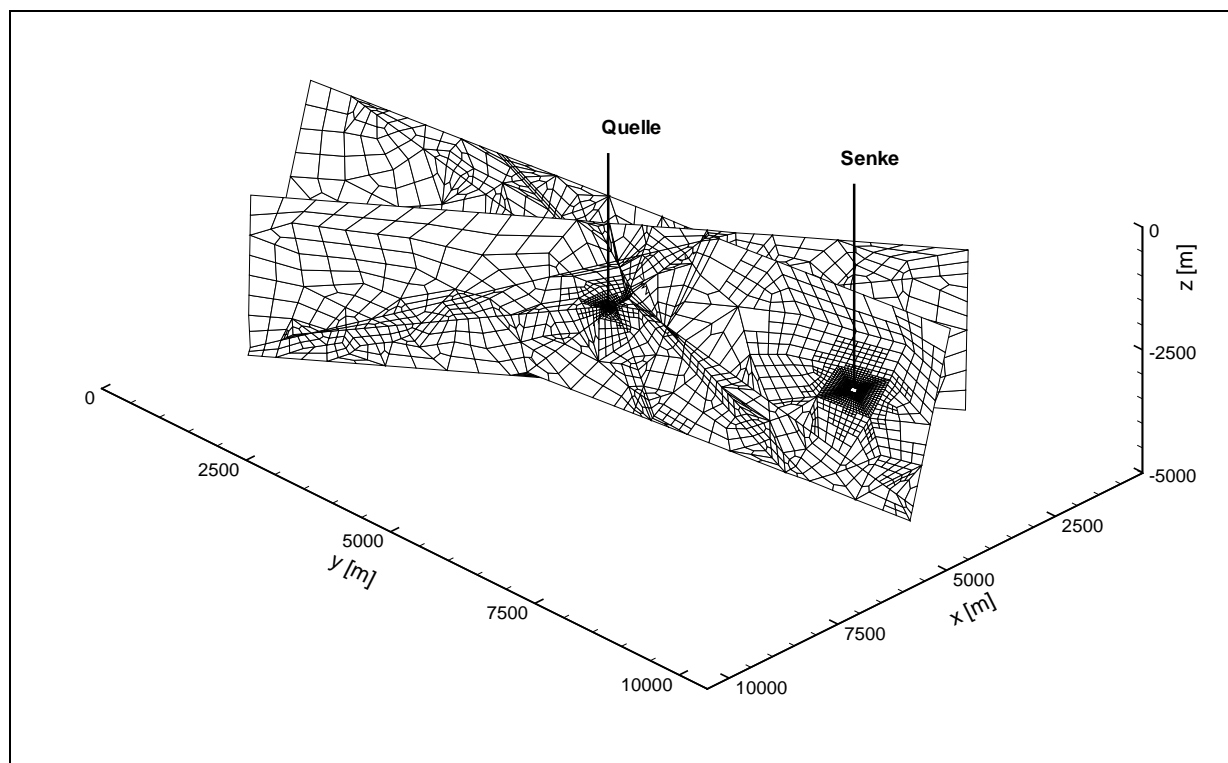


Abbildung 5.23: A posteriori an das Druckfeld angepaßtes Berechnungsgitter (ausgewählte Klüfte)

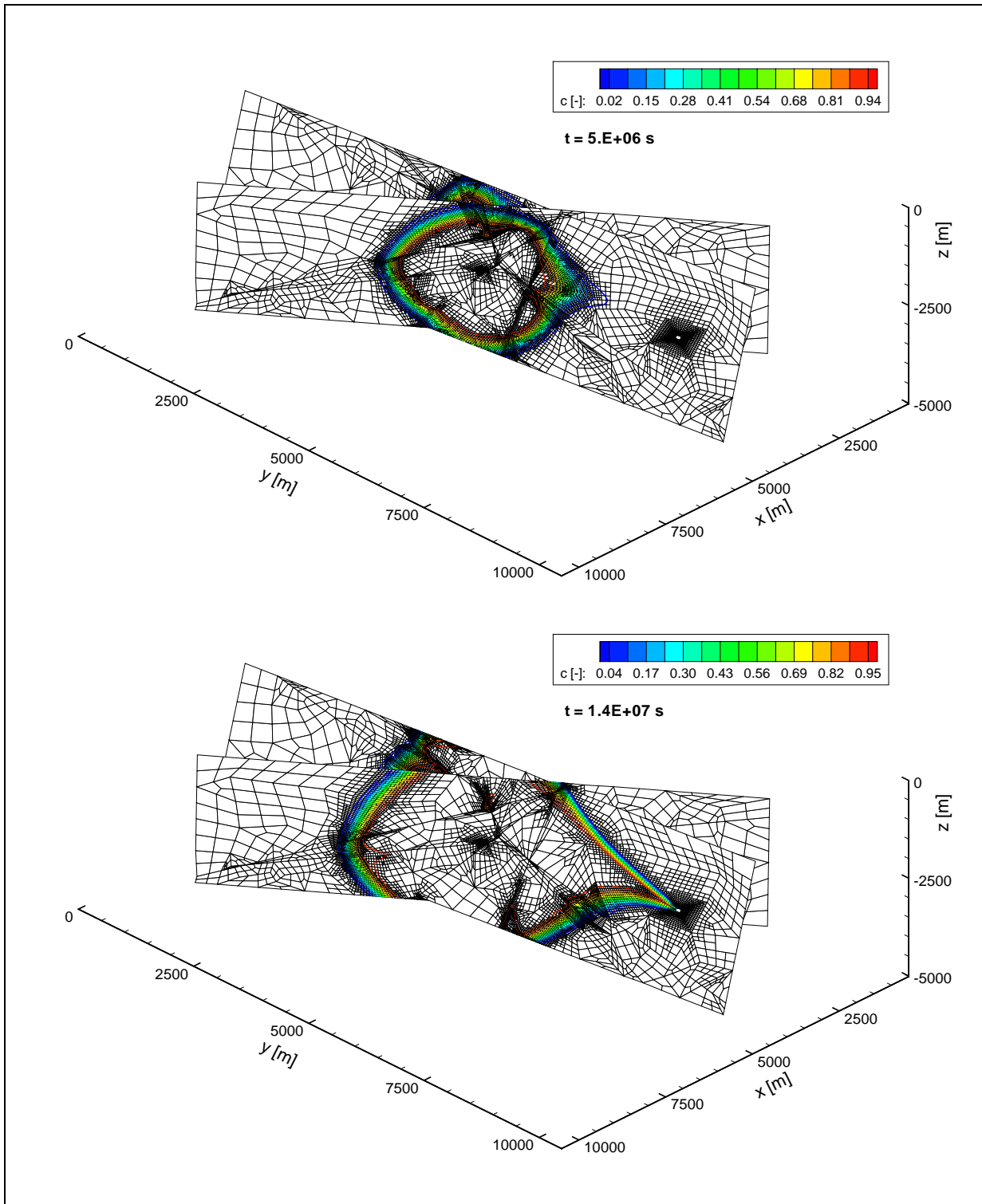


Abbildung 5.24: A posteriori an den Stofftransport angepaßtes Berechnungsgitter (ausgewählte Klüfte)

Für die gitteradaptive Berechnung ist bei Verwendung des Sprung-Indikators eine maximale Verfeinerungstiefe von $lev_{max} = 5$ vorgegeben. Um Rechenzeit einzusparen, wird Adaptionalgorithmus 4 verwendet und nur in jedem 10. Zeitschritt eine Anpassung des Berechnungsgitters durchgeführt. Die Gitteradaption erfolgt für die Feldgröße 'Druck' mit $lev_{max,p} = 5$ und für die Feldgröße 'Konzentration' mit $lev_{max,c} = 3$.

Die Quelle wird als Punkt, die Senke als Innenrand modelliert. Um eine gezielte Verfeinerung dieser Bereiche zu erreichen, wird für die gitteradaptive Berechnung des Druckfeldes (Strömungsfeldes) der speziell für Kluftnetzwerke entwickelte Sprung-Indikator verwendet. Dadurch wird eine übermäßige Verfeinerung im Bereich der Kluftverschneidungen verhindert (Abbildung 5.23). Gleichzeitig kann auf eine a priori Verfeinerung im Bereich von Quelle und Senke, wie sie am Beispiel der Brunnendublette gezeigt wurde, verzichtet werden. Allerdings bietet sich auch hier die Verwendung der r-Adaption an, um durch die Verschiebung der Knoten einerseits eine bessere Anpassung des Berechnungsgitters an das Strömungsfeld zu erzielen, andererseits Knoten und Elemente einzusparen.

Da in den strömungskritischen Bereichen auf diese Weise bereits eine gute Anpassung des Berechnungsgitters erfolgt ist, reicht für die gitteradaptive Berechnung des Stofftransports eine geringere Verfeinerungstiefe von $lev_{max,c} = 3$ aus (Abbildungen 5.24, 5.25).

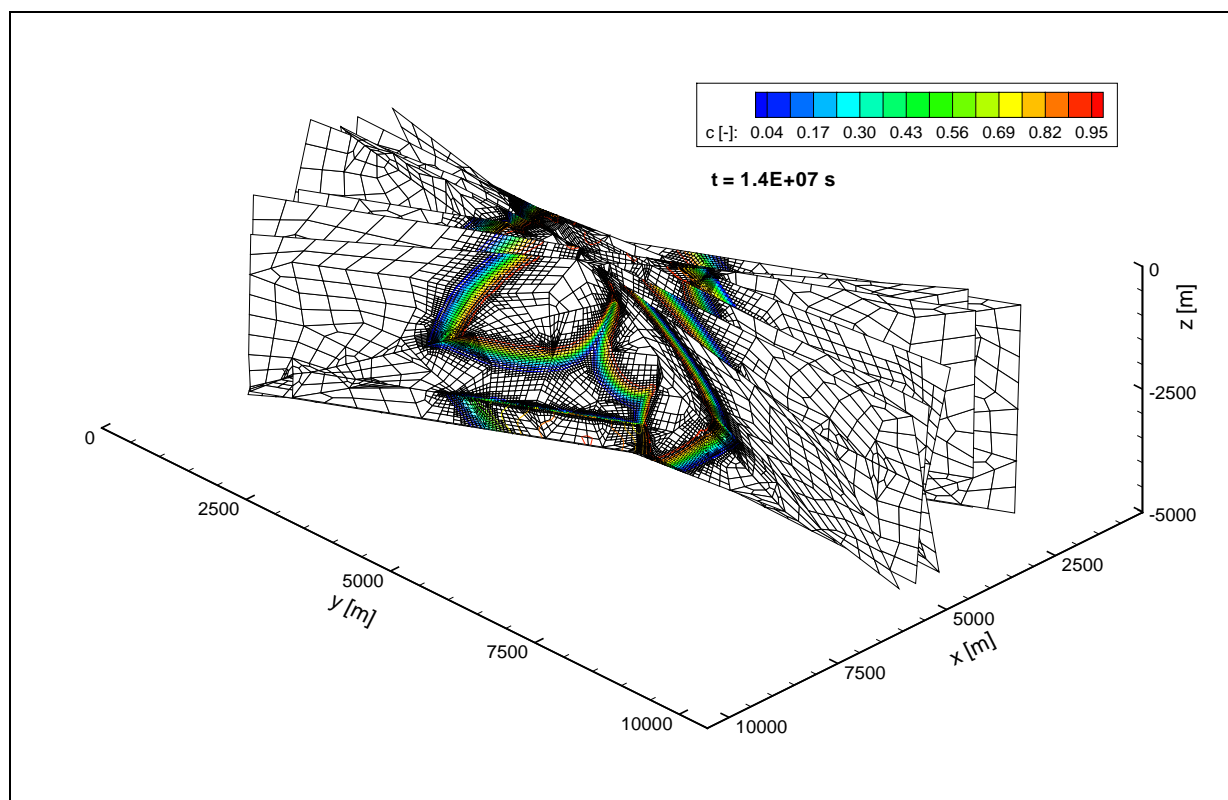


Abbildung 5.25: A posteriori an den Stofftransport angepaßtes Berechnungsgitter (gesamtes Kluftnetzwerk)

Die Funktionsfähigkeit des genannten Wärmetauschers in Soultz wurde 1997 durch einen Zirkulationstest demonstriert, bei dem über einen Zeitraum von 4 Monaten ca. 25 l/s in GPK1 (Injektionsstelle) injiziert und aus GPK2 (Extraktionsstelle) produziert wurden (vgl. Abbildung 5.28).

Im Rahmen dieses Zirkulationstests wurden außerdem eine Reihe von Tracertests durchgeführt. In einem ersten Test wurden dazu 150 kg Flourescein und 300 kg Benzolsäure mit 15 m^3 Wasser vermischt und mit einer Fließrate von $Q = 1.2\text{ l/s}$ über einen Zeitraum von 1.5 Stunden in GPK1 injiziert (BAUMGÄRTNER ET AL. 1997). Der Tracerdurchbruch in GPK2 erfolgte nach 70 bis 80 Stunden, der Maximalwert für Benzolsäure wurde nach 10 Tagen erreicht (Abbildung 5.26).

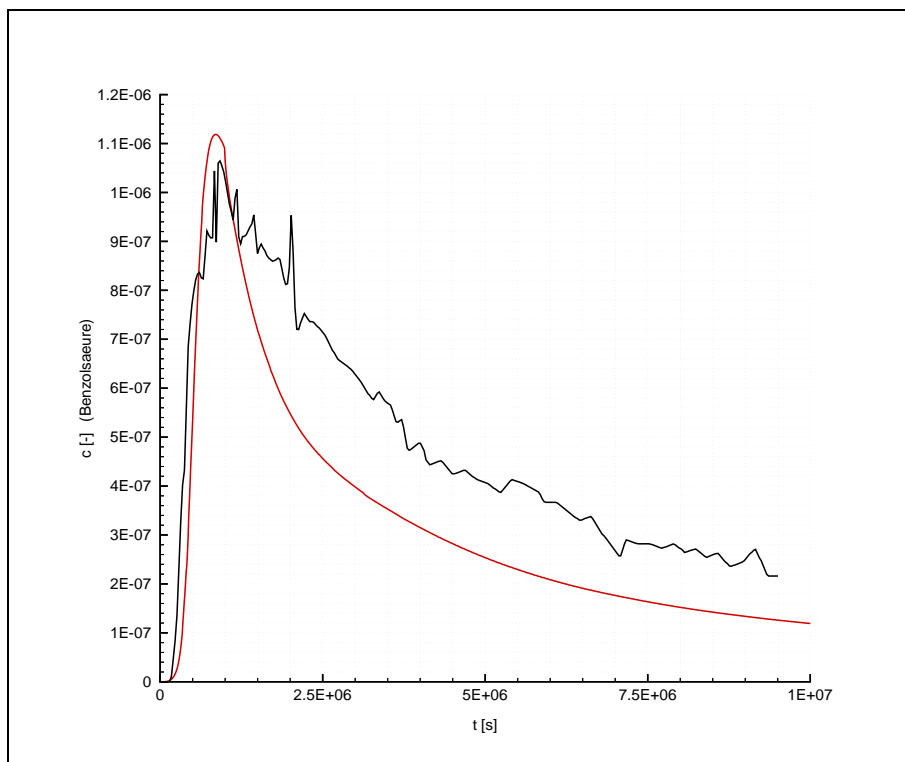


Abbildung 5.26: Gemessene (schwarz) und berechnete (rot) Durchbruchkurve in GPK2

Anhand dieses Tracertests soll das vorgestellte deterministische Modell (2.5D-Kluftnetzwerk) überprüft werden. Aufgrund der geringen geometrischen Auflösung des beschriebenen 2.5D-Kluftnetzwerkes (Abbildung 5.27) ist hier die Verwendung der Gitteradaption unausweichlich. Damit läßt sich eine gute Anpassung an die gemessene Durchbruchkurve für Benzolsäure in GPK2 erzielen (Abbildung 5.26). Die Ergebnisse dieser gitteradaptiven Berechnungen und die zugehörigen Simulationsparameter sind in PRIBNOW ET AL. (2001) zu finden.

In Abbildung 5.28, in der die Ausbreitung des Tracers (Benzolsäure) zu einem ausgewählten Zeitpunkt ($t = 239\text{ h}$) dargestellt ist, ist die automatische Gitternetzadaption (Gitteradaption) sehr gut zu erkennen. Aufgrund einer besseren Darstellbarkeit wurden hier nur drei von den insgesamt sieben Klüften berücksichtigt (vgl. Abbildung 5.27).

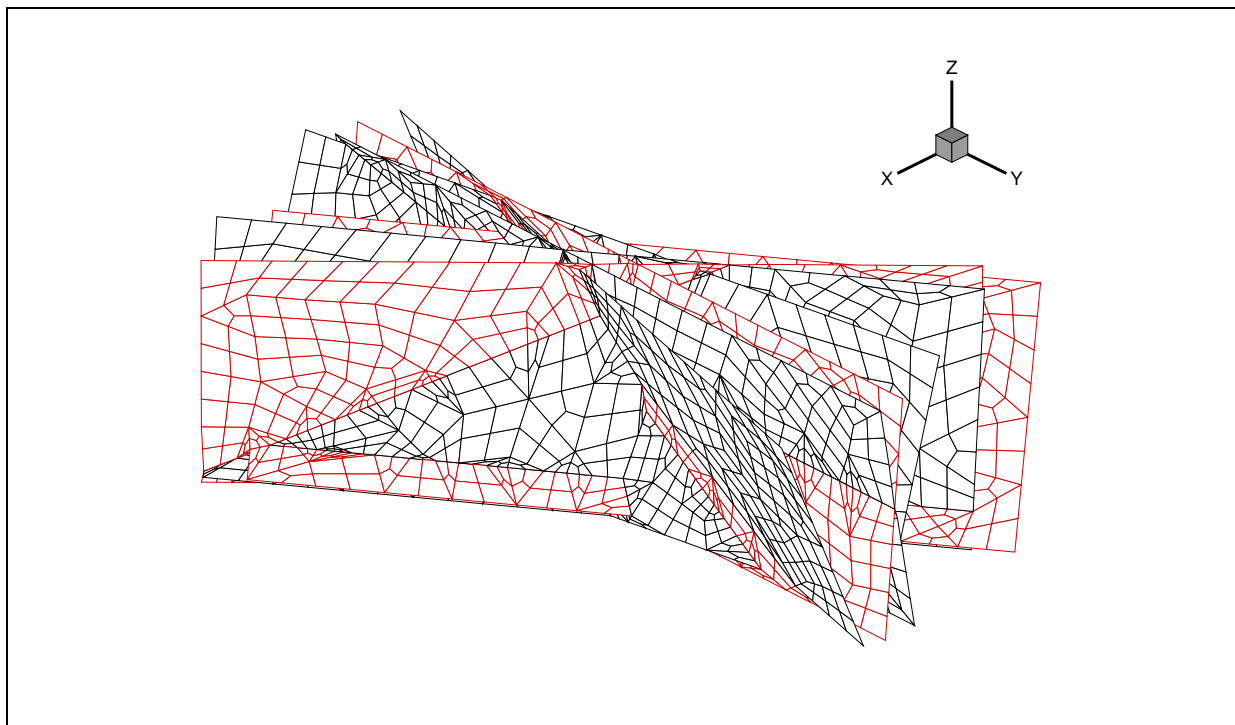


Abbildung 5.27: Ausgangsgitter für die numerische Modellierung des Tracertests mittels gitteradaptiver FEM und ausgewählte Klüfte (rot)

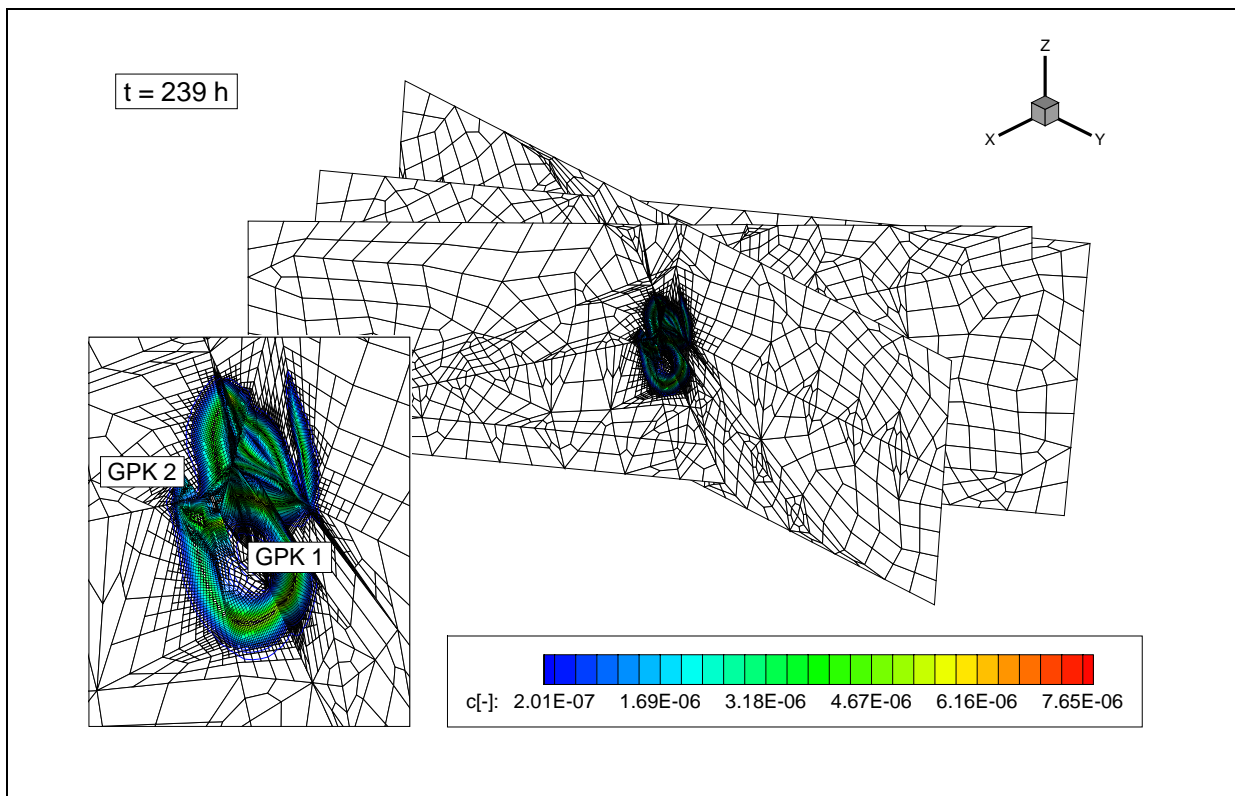


Abbildung 5.28: Konzentrationsverteilung (Benzolsäure) in den drei ausgewählten Klüften zum Zeitpunkt $t = 239 h$

Kapitel 6

Gitteradaptive Modellierung stark gekoppelter Mehrfeldprobleme in porösen Medien

Anhand mehrerer Beispiele zu dichteinduzierten Strömungen in porösen Medien werden die Möglichkeiten der *gekoppelten Gitteradaption* bei der Modellierung *stark gekoppelter Mehrfeldprobleme* dargestellt. Dazu werden im wesentlichen folgende Problemstellungen betrachtet:

- Salzwasserintrusion in gesättigten Systemen,
- Salzwasserintrusion in gesättigten/teilgesättigten Systemen (einschließlich des Transports idealer Tracer),
- Salzwasserintrusion/Thermokonvektion.

In allen Beispielen wird eine *automatische Zeitschrittsteuerung* eingesetzt, die sich am 'Iterationsfortschritt' orientiert (vgl. THORENZ 2001). Dabei wird der Zeitschritt jeweils so gewählt bzw. (automatisch) angepaßt, daß eine vorgegebene Anzahl an Iterationen zwischen den zu modellierenden Prozessen eingehalten wird.

6.1 HENRY-Problem

Das HENRY-Problem stellt den abstrahierten Fall einer Meerwasserintrusion in einen Küstenaquifer dar und wurde mittels dimensionsloser Parameter für einen zweidimensionalen Schnitt senkrecht zur Küstenlinie definiert. Die semi-analytische Lösung für die stationäre Verteilung der Salzkonzentration im Küstenaquifer wurde in Form einer Reihenentwicklung angegeben (HENRY 1960, HENRY 1964).

Das Problem des in ein Süßwasseraquifer eindringenden Salzwasserkeils hat sich zur Verifikation von Transportmodellen etabliert, die den dichteändernden Einfluß des Inhaltsstoffes 'Salz' berücksichtigen (dichteinduzierte Strömungen). Deshalb soll es auch hier der Verifikation der Gitteradaption dienen. Dazu wird zunächst eine numerische Simulation auf einem a priori sehr fein aufgelösten Ausgangsgitter ($\Delta x = \Delta z = 0.025 m$) durchgeführt, deren Ergebnisse mit aus SEGOL (1994) entnommenen analytischen Werten verglichen werden.

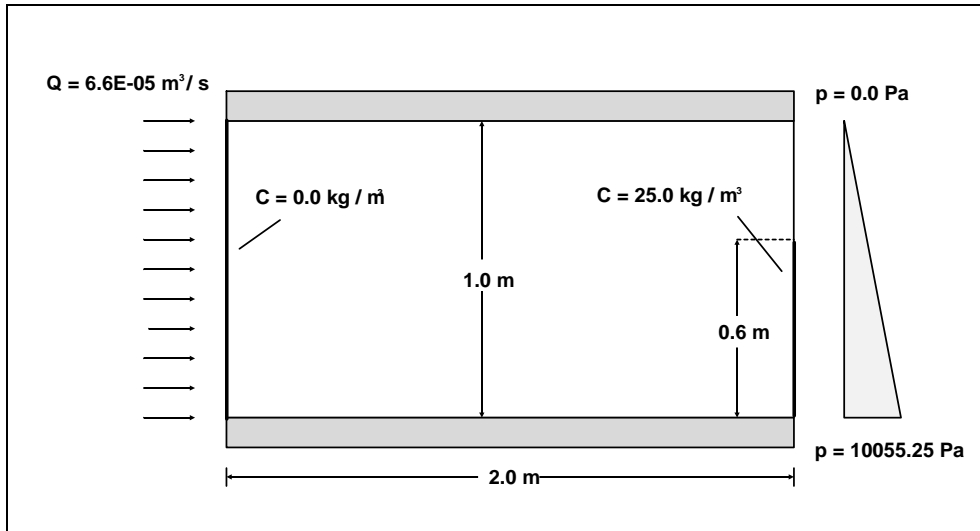


Abbildung 6.1: Untersuchungsgebiet und Randbedingungen zum HENRY-Problem

In Abbildung 6.1 sind das Untersuchungsgebiet und die zugehörigen Randbedingungen schematisch dargestellt. Auf der rechten Seite des betrachteten Vertikalschnitts wird eine dem Meerwasser entsprechende ($\rho_s = 1025.0 \text{ kg/m}^3$) hydrostatische Druckverteilung vorgegeben, während am linken Rand ein Einstrom von Frischwasser erfolgt. Die Konzentrations-Randbedingung an der rechten Seite ist nicht über den gesamten Rand vorgegeben, sondern nur bis zu einer Höhe von 0.6 m . Am linken Rand ist die Konzentration 0. Alle weiteren Simulationsparameter können der Tabelle 6.1 entnommen werden.

Tabelle 6.1: Simulationsparameter HENRY-Problem

Symbol	Parameter	Wert
g	Erdbeschleunigung	9.81 m/s^2
k	spezifische Permeabilität	$1.020408 \cdot 10^{-09} \text{ m}^2$
n	effektive Porosität	$0.35 \text{ m}^3 \text{ m}^{-3}$
μ	dyn. Viskosität	$1.0 \cdot 10^{-3} \text{ kg/(ms)}$
ρ_0	Dichte Süßwasser	1000.0 kg/m^3
ρ_s	Dichte Salzwasser	1025.0 kg/m^3
D_m	molekulare Diffusion	$6.6 \cdot 10^{-6} \text{ m}^2/\text{s}$

Da über den rechten Rand sowohl Süßwasser austritt als auch Salzwasser eintritt, ist hier eine Vorgabe der Konzentrations-Randbedingung schwierig, da die Lage des Randpunktes, an dem der Umschlag von einem Ausstrom zu einem Einstrom erfolgt, nicht von vornherein bekannt ist. Deshalb wird hier eine von THORENZ (2001) entwickelte Methode zur Bestimmung des Umschlagpunktes und damit zur Aktualisierung der Konzentrations-Randbedingung verwendet. Je nach Vorzeichen der Flüsse über den rechten Rand (Einstrom (+), Ausstrom (-)) wird der Umschlagpunkt bestimmt und die Konzentrations-Randbedingung angepaßt.

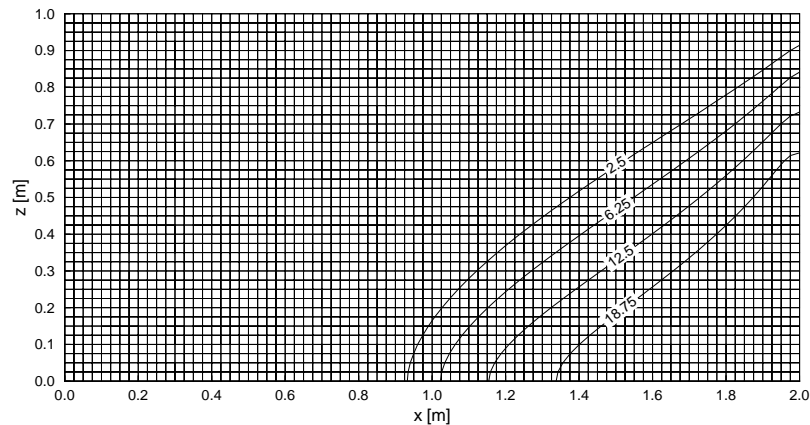


Abbildung 6.2: Ergebnisse der auf einem a priori verfeinerten Ausgangsgitter durchgeführten numerischen Berechnung (HENRY-Problem)

Die Ergebnisse dieser ersten numerischen Berechnung stimmen, nach Erreichen des stationären Zustandes, sehr gut mit den analytischen Werten von SEGOL (1994) überein (Tabelle 6.2). Deshalb werden im folgenden die Ergebnisse der gitteradaptiven Berechnungen mit den hier gewonnenen numerischen Ergebnissen, die in Abbildung 6.2 noch einmal dargestellt sind, verglichen.

Tabelle 6.2: Vergleich analytischer und numerischer Ergebnisse für das zweidimensionale HENRY-Problem (stationärer Zustand)

x [m]	z [m]	C [kg/m^3]	
		analytisch (SEGOL 1994)	numerisch (feines Gitter)
1.0	0.0	5.32	5.17
1.0	0.3	0.75	0.79
1.2	0.0	14.53	14.38
1.2	0.3	4.26	4.28
1.4	0.0	20.27	20.22
1.4	0.3	10.50	10.45
1.4	0.7	0.28	0.33
1.6	0.0	23.23	23.28
1.6	0.3	17.20	17.1
1.6	0.7	1.34	1.47
1.8	0.0	24.53	24.62
1.8	0.3	22.16	22.28
1.8	0.7	5.13	5.38

Anhand des HENRY-Problems sollen die zwei grundlegenden Adaptionsalgorithmen (1 und

2) im Hinblick auf Genauigkeit und Rechenzeitbedarf miteinander verglichen werden. Die zugehörigen Adaptionparameter können der Tabelle 6.3 entnommen werden. Das Ausgangsgitter hat eine Auflösung von $\Delta x = \Delta z = 0.1 m$. Der max. Verfeinerungslevel wird für die Feldgröße 'Konzentration' mit $lev_{max} = 2$ vorgegeben, so daß in den Bereichen, in denen eine Verfeinerung notwendig ist, die Auflösung des feinen Ausgangsgitters (Abbildung 6.2) erreicht wird. Damit sind die Ergebnisse miteinander vergleichbar.

Tabelle 6.3: Adaptionparameter HENRY-Problem

Adaptionsalgorithmus	1 und 2
max. Verfeinerungslevel	$lev_{max} = 2$
Konzentration (2D)	
Verfeinerungsindikator	Sprung-Indikator
Verfeinerungstoleranzen	$tol_{mit}^f = 2.5, tol_{mit}^g = 0.6$

In der ersten gitteradaptiven Berechnung mit Adaptionsalgorithmus 1 wird eine gute Übereinstimmung mit den Ergebnissen auf dem a priori verfeinerten Berechnungsgitter erzielt (Abbildung 6.3, oben). Gleichzeitig kann durch Einsatz der Gitteradaption die Rechenzeit erheblich reduziert werden (Tabelle 6.4); bei Verwendung des Adaptionsalgorithmus 1 um mehr als 75%. Dieser Adaptionsalgorithmus benötigt, wie bereits beschrieben, zu Beginn jedes Zeitschrittes eine erste Berechnung der betrachteten Prozesse, um, aufgrund der hieraus gewonnenen Ergebnisse, das Berechnungsgitter anzupassen.

Dagegen beginnt im Adaptionsalgorithmus 2 jeder Zeitschritt mit der Anpassung des Berechnungsgitters an die Ergebnisse des vorangegangenen Zeitschritts.

Da bei der numerischen Simulation stark gekoppelter Prozesse, wie der hier dargestellten dichteinduzierten Strömung, in jedem Zeitschritt mehrere Iterationen zwischen den betrachteten Prozessen (hier Strömung und Stofftransport) notwendig sein können, kann dadurch weitere Rechenzeit eingespart werden.

Tabelle 6.4: cpu-Zeit-Vergleich für das HENRY-Problem (normiert)

	cpu-Zeit	Knoten	2D-Elemente
A priori verfeinertes Berechnungsgitter	1	3321	4200
Adaptionsalgorithmus 1	0.23	1223	1408
Adaptionsalgorithmus 2	0.13	1217	1400

Bei der numerischen Simulation des HENRY-Problems führt dies, verglichen mit Adaptionsalgorithmus 1, bei gleicher Genauigkeit der numerischen Ergebnisse (Abbildung 6.3, unten) zu einer weiteren Rechenzeiterparnis von mehr als 40% (Tabelle 6.4).

Deshalb soll in allen folgenden numerischen Simulationen Adaptionsalgorithmus 2 verwendet werden.

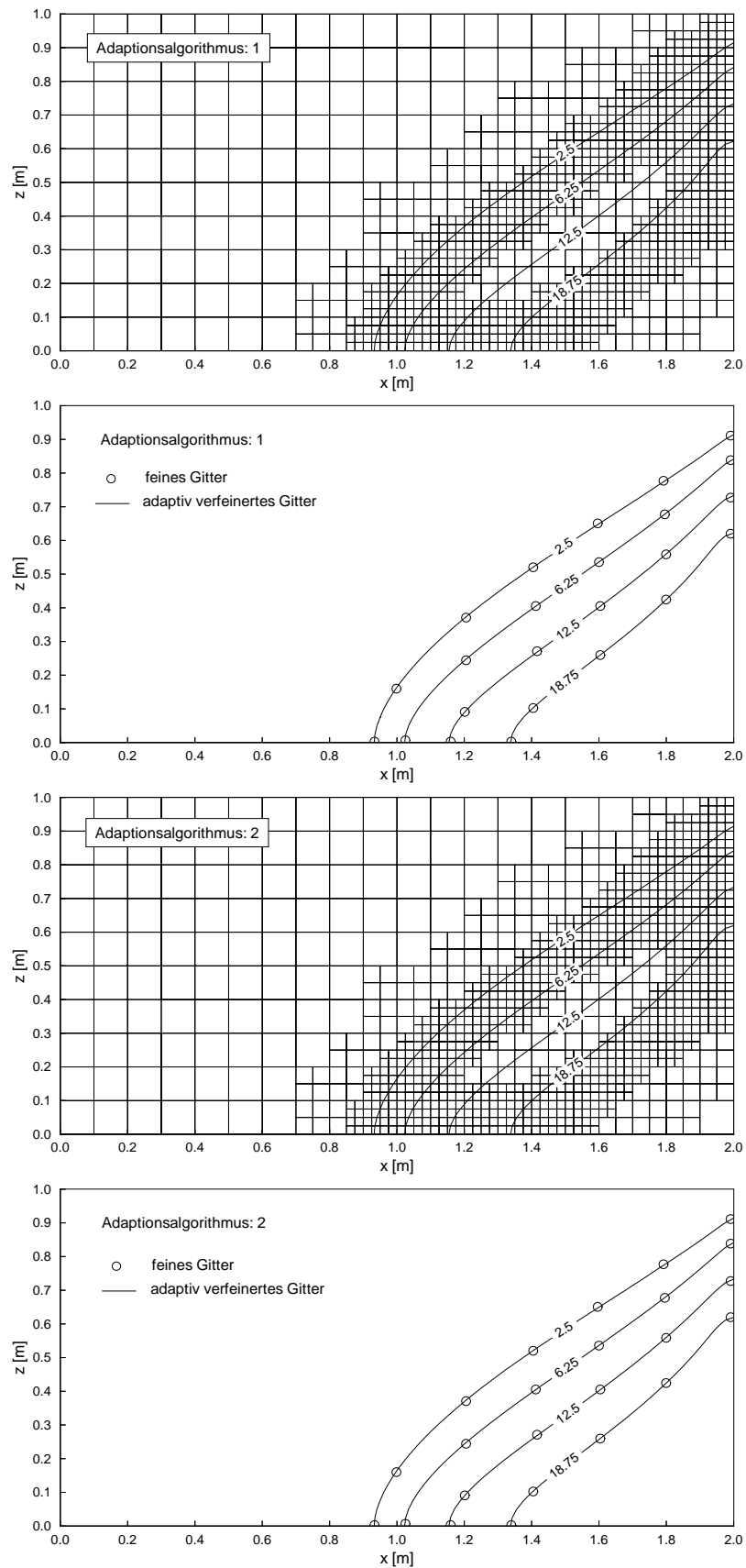


Abbildung 6.3: Vergleich der gitteradaptiven Berechnungen mit den Ergebnissen auf dem a priori verfeinerten Berechnungsgitter

6.2 Dichteinduzierte Strömungen in teilgesättigten Systemen

Ein wichtiges Kriterium bei der Entwicklung gitteradaptiver Methoden ist ein einfach zu handhabender Algorithmus, der dem Anwender, besonders im Hinblick auf die Modellierung beliebig gekoppelter Prozesse, den Zugang zu diesen Methoden erleichtert und damit die Bereitschaft erhöht, die Gitteradaption für numerische Berechnungen zu nutzen.

Im folgenden Beispiel haben THORENZ ET AL. (2000) zu einem von ihnen durchgeführten Laborversuch numerische Berechnungen angestellt. Die Modellierung dieser dichteinduzierten Strömung in einem gesättigten/teilgesättigten System wurde mit Hilfe der in dieser Arbeit entwickelten gekoppelten Gitteradaption durchgeführt.

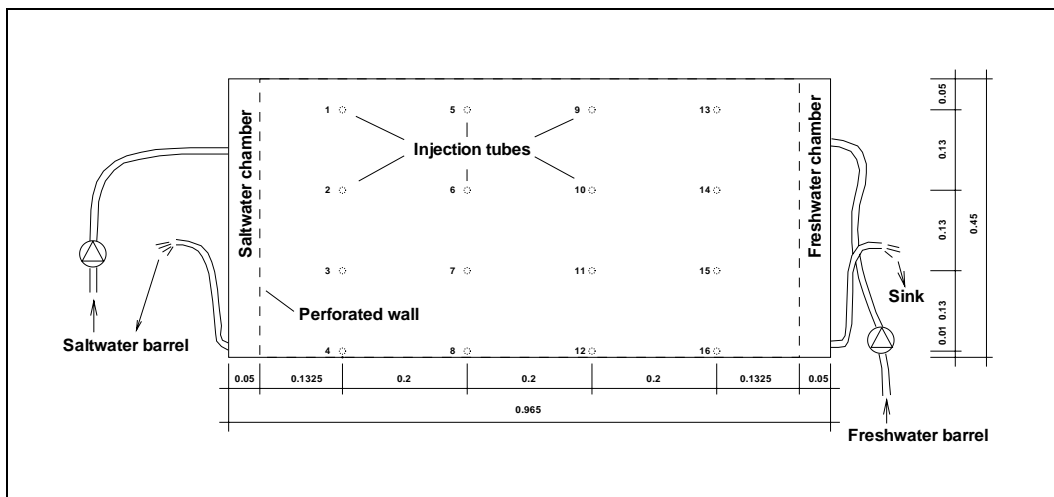


Abbildung 6.4: Laborversuch zu dichteinduzierten Strömungen in gesättigten/teilgesättigten Systemen (THORENZ ET AL. 2000)

Für den Laborversuch wurde die in Abbildung 6.4 dargestellte 'Sandbox' mit den Abmessungen 0.958 m (0.865 m) \times 0.105 m \times 0.478 m verwendet. An der rechten sowie linken Seite dieser Box befindet sich jeweils eine Kammer, die bis auf halbe Höhe einerseits mit Frisch-, andererseits mit Salzwasser gefüllt sind. Über eine perforierte Trennwand kann das Wasser in das eigentliche Untersuchungsgebiet eindringen, bis sich ein stationärer Zustand einstellt. Dieser stationäre Zustand ist gekennzeichnet durch einen gesättigten Bereich in der unteren Hälfte der Box und einem darüber liegenden teilgesättigten Bereich. Außerdem bildet sich in der unteren Hälfte, wie bereits im vorangegangenen Beispiel (HENRY-Problem) dargestellt, ein Salzwasserkeil aus.

Um das Strömungsverhalten des Fluids nach Erreichen des stationären Zustandes untersuchen zu können, wurde schließlich an 16 Stellen ein idealer Tracer in das Untersuchungsgebiet eingeleitet. Weitere Details zu diesem Versuch finden sich bei THORENZ ET AL. (2000) und THORENZ (2001).

Die numerische Simulation des Laborversuches wurde von THORENZ ET AL. (2000) unter Verwendung der gekoppelten Gitteradaption durchgeführt. Die Simulationsparameter

können der Tabelle 6.5 entnommen werden. Das Untersuchungsgebiet und die zugehörigen Randbedingungen sind in Abbildung 6.5 dargestellt. Auch hier sei für weiterführende Informationen auf die bereits zitierten Arbeiten von THORENZ verwiesen.

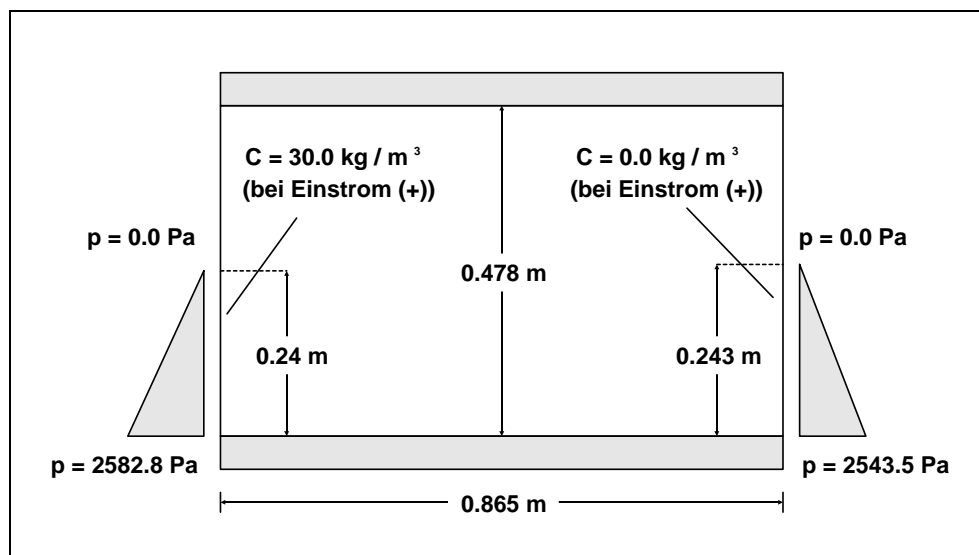


Abbildung 6.5: Untersuchungsgebiet und Randbedingungen zum Laborversuch

Tabelle 6.5: Simulationsparameter Laborversuch

Symbol	Parameter	Wert
g	Erdbeschleunigung	9.81 m/s^2
k	spezifische Permeabilität	$0.5 \cdot 10^{-10} \text{ m}^2$
S_r	res. Sättigung	0.15
S_{max}	max. Sättigung	1.0
k_r	rel. Permeabilität	$((S - S_r)/(S_{max} - S_r))^4$
n	effektive Porosität	$0.36 \text{ m}^3 \text{ m}^{-3}$
μ	dyn. Viskosität	$1.0 \cdot 10^{-3} \text{ kg/(m.s)}$
ρ_0	Dichte Süßwasser	1067.0 kg/m^3
ρ_s	Dichte Salzwasser	1097.0 kg/m^3
D_m	molekulare Diffusion (Salz)	$3.6 \cdot 10^{-9} \text{ m}^2/\text{s}$
D_m	molekulare Diffusion (Tracer)	$4.0 \cdot 10^{-10} \text{ m}^2/\text{s}$
α_L	longitudinale Dispersionslänge	$1.0 \cdot 10^{-3} \text{ m}$
α_T	transversale Dispersionslänge	$1.0 \cdot 10^{-4} \text{ m}$

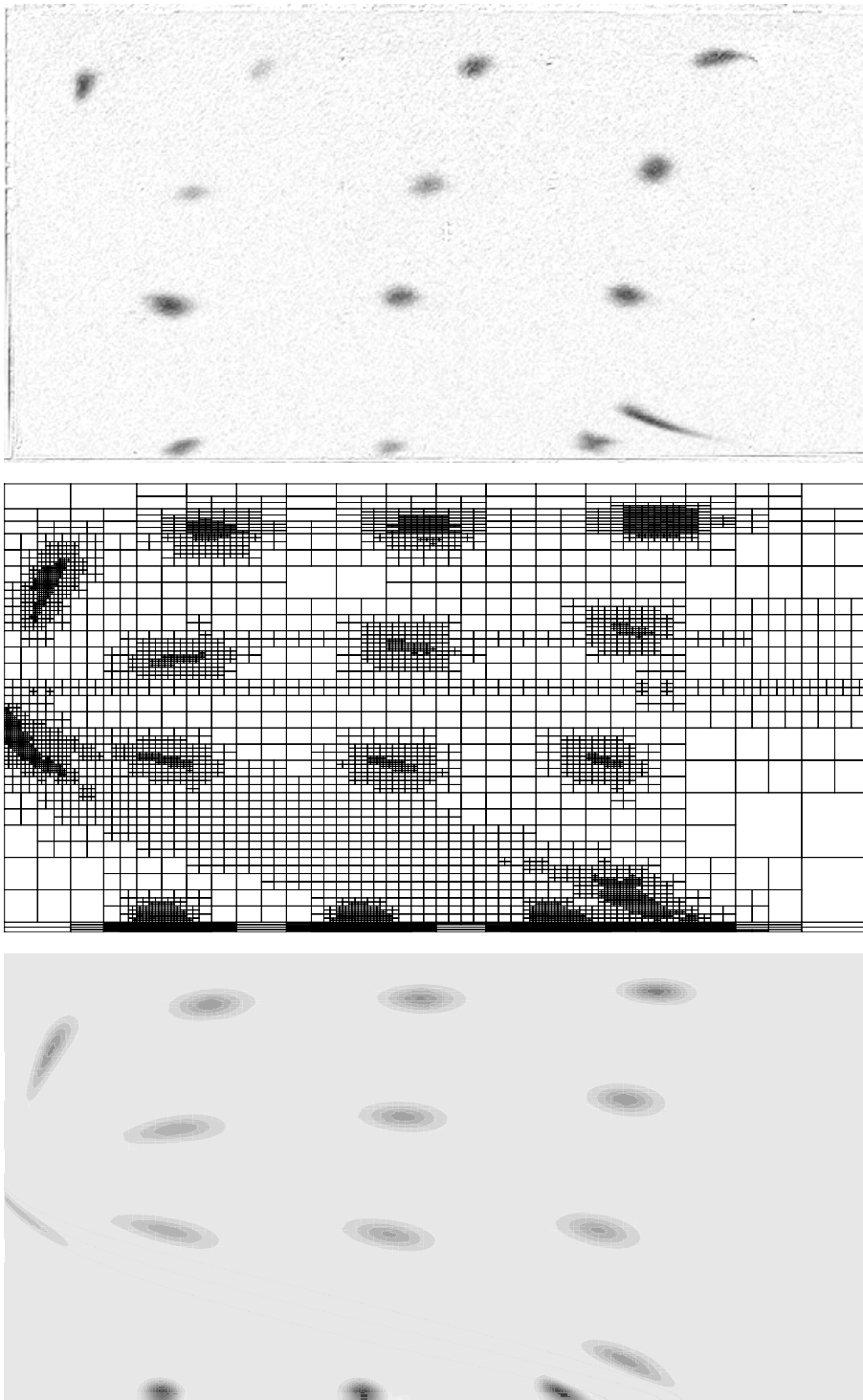


Abbildung 6.6: Ergebnisse des Laborversuches und der numerischen Simulation (THORENZ: 2000)

Die Ergebnisse der numerischen Simulation (Abbildung 6.6, unten) zeigen eine gute Übereinstimmung mit den Ergebnissen des Laborversuches (Abbildung 6.6, oben).

Die gekoppelte Gitteradaption wurde auf die Feldgrößen 'Druck', 'Sättigung', 'Salzkonzentration' und 'Konzentration des eingeleiteten Tracers' angewendet. THORENZ hat, ausgehend von einem Ausgangsgitter mit 25 Elementen, eine max. Verfeinerungstiefe von

$lev_{max} = 6$ vorgegeben. Das adaptierte Berechnungsgitter mit ca. 7000 Elementen ist in Abbildung 6.6 (mitte) dargestellt.

Sowohl die Verfeinerung im Bereich des Salzwasserkeils (vgl. HENRY-Problem) als auch des eingeleiteten Tracers ist sehr gut zu erkennen. Das Gleiche gilt für die 'Sättigung'. Hier wurde der Übergang vom gesättigten zum teilgesättigten Bereich adaptiert. Um ohne Verwendung der gekoppelten Gitteradaption entsprechende Ergebnisse zu erzielen, wäre ein 6-fach feineres Ausgangsgitter mit 102400 Elementen notwendig gewesen.

6.3 Dichteinduzierter Schadstoffeintrag in einen Grundwasserleiter

LI ET AL. (2000) betrachten den in Abbildung 6.7 dargestellten quaderförmigen Aquifer mit den Abmessungen $200.0\text{ m} \times 100.0\text{ m} \times 40.0\text{ m}$, in dessen Oberfläche sich in der Mitte eine rechteckige Grube ($40.0\text{ m} \times 20.0\text{ m} \times 5.0\text{ m}$) befindet, die bis zu einer Höhe von 1.1 m mit Salzwasser gefüllt ist. Nach dem Versagen der Abdichtung im Boden der Grube kann Salzwasser in den Grundwasserleiter infiltrieren. Dabei wird der Wasserstand in der Grube während der gesamten Simulation konstant gehalten, so daß permanent Salz nachgeliefert wird.

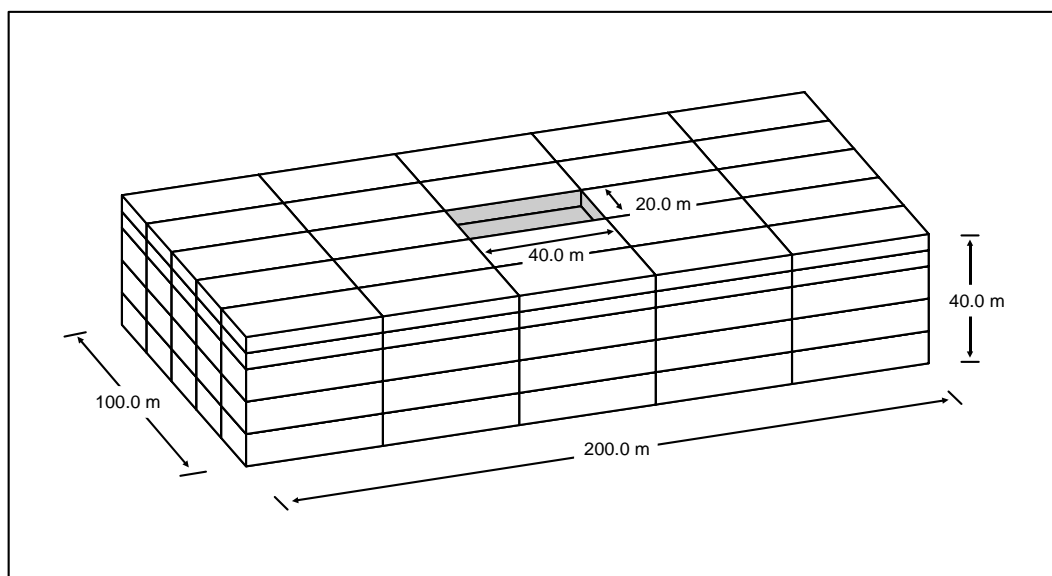


Abbildung 6.7: Untersuchungsgebiet (Dichteinduzierter Schadstoffeintrag in Grundwasserleiter) nach LI ET AL. (2000) und Ausgangsgitter für die gitteradaptive Berechnung

Als Randbedingungen haben LI ET AL. (2000) am rechten Rand eine Standrohrspiegelhöhe von $h = 38.0\text{ m}$, am linken Rand $h = 30.0\text{ m}$ und am Boden der Grube $h = 35.22\text{ m}$ vorgegeben, wodurch in diesem Prinzipbeispiel Potential- (erzwungene Konvektion) und Dichteströmung (freie Konvektion) zusammenwirken.

Mit einer Konzentrations-Randbedingung (Massenkonzentration) in der Grube von $c = 1.0$ ergibt sich mit

$$\rho_s = \rho_0(1 + \bar{\beta}_c c)$$

und

$$\rho_0 = 1000.0 \text{ kg/m}^3 \quad (\text{Süßwasser}), \quad \bar{\beta}_c = 0.2$$

eine Salzwasserdichte von $\rho_s = 1200.0 \text{ kg/m}^3$. Die Anfangskonzentration im Aquifer wurde mit $c = 0.0$ vorgegeben.

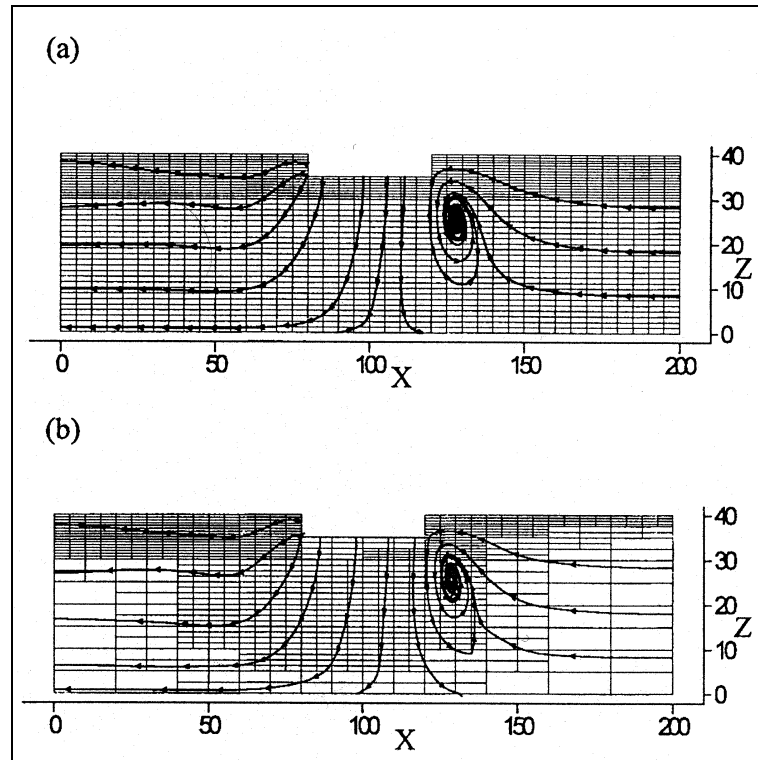


Abbildung 6.8: Ergebnisse der numerischen Berechnungen von LI ET AL. (2000) (ohne und mit Gitteradaption)

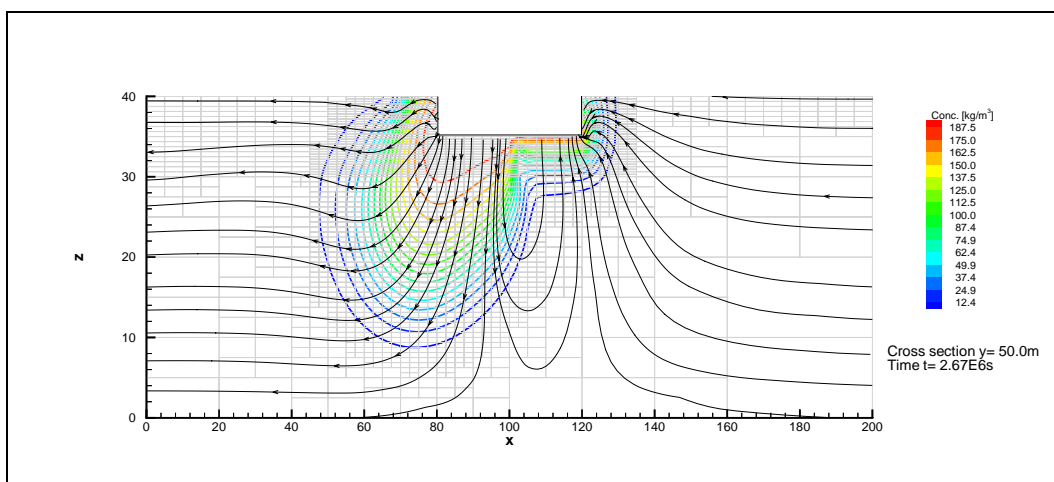


Abbildung 6.9: Konzentrationsverteilung und Stromlinien einer zweidimensionalen Vergleichsrechnung zum dichteinduzierten Schadstoffeintrag (MITTENDORF 2000)

LI ET AL. (2000) haben das Versickern des Salzwassers und die dadurch hervorgerufene dichteinduzierte Strömung im Grundwasserleiter mit Hilfe der Gitteradaption (h-Methode) numerisch simuliert. Das Ergebnis dieser dreidimensionalen gitteradaptiven Berechnung ist in Abbildung 6.8 dargestellt.

Entsprechende Berechnungen wurden von MITTENDORF (2000) durchgeführt, um die Möglichkeiten der im Rahmen der vorliegenden Arbeit entwickelten gekoppelten Gitteradaption zu demonstrieren. Die aus dem Literaturbeispiel abgeleiteten Simulationsparameter können der Tabelle 6.6 entnommen werden. Die Randbedingungen für die Standrohrspiegelhöhen wurden auf Druck-Randbedingungen übertragen.

Tabelle 6.6: Simulationsparameter Dichteinduzierter Schadstoffeintrag nach LI ET AL. (2000)

Symbol	Parameter	Wert
g	Erdbeschleunigung	9.81 m/s^2
k	spezifische Permeabilität	$2.31481 \cdot 10^{-12} \text{ m}^2$
n	effektive Porosität	$0.35 \text{ m}^3 \text{ m}^{-3}$
μ	dyn. Viskosität	$1.0 \cdot 10^{-3} \text{ kg/(ms)}$
ρ_0	Dichte Süßwasser	1000.0 kg/m^3
ρ_s	Dichte Salzwasser	1200.0 kg/m^3
$\bar{\beta}_c$	Massendichteverhältniszahl	0.2
C_{max}	maximale Konzentration	200 kg/m^3
α_L	longitudinale Dispersionslänge	5.0 m
α_T	transversale Dispersionslänge	0.5 m
D_m	molekulare Diffusion	$5.787037 \cdot 10^{-8} \text{ m}^2/\text{s}$

Wie im Literaturbeispiel wird davon ausgegangen, daß der Wasserstand in der Grube während der Simulation konstant bleibt. Als Anfangsbedingung für die Sättigung wird ein vollgesättigtes Aquifer angenommen. Die Konzentrations-Randbedingung in der Grube ist mit $C = 200.0 \text{ kg/m}^3$ vorgegeben. Die Gitteradaption wird sowohl für die Feldgröße 'Sättigung' als auch für die Feldgröße 'Konzentration' durchgeführt (Tabelle 6.7).

Eine zunächst als Vorstudie für das dreidimensionale Modell durchgeführte zweidimensionale Berechnung (Abbildung 6.9) zeigt eine gute Übereinstimmung mit den Ergebnissen von LI ET AL. (2000) (Abbildung 6.8). Deutlich erkennbar ist die Ausbildung der Konvektionszelle unterhalb der Grube.

Für die dreidimensionale gitteradaptive Berechnung wird ein max. Verfeinerungslevel von $lev_{max} = 4$ vorgegeben. Aufgrund der vorab durchgeführten Untersuchungen im Rahmen des HENRY-Problems wird, um Rechenzeit einzusparen, Adaptionalgorithmus 2 verwendet.

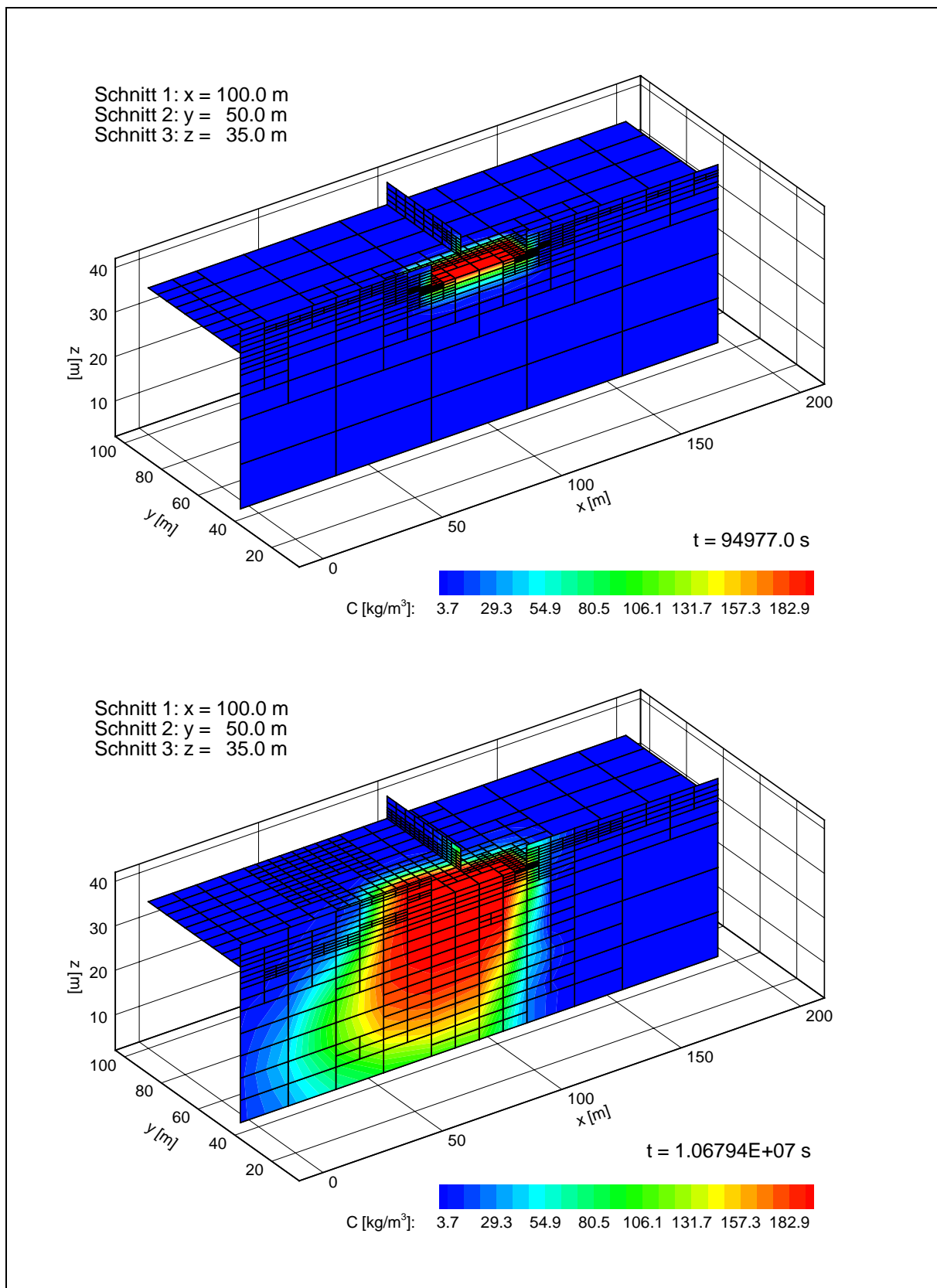


Abbildung 6.10: Adaptiertes Berechnungsgitter und Konzentrationsverteilung (Dichteinduzierter Schadstoffeintrag in Grundwasserleiter)

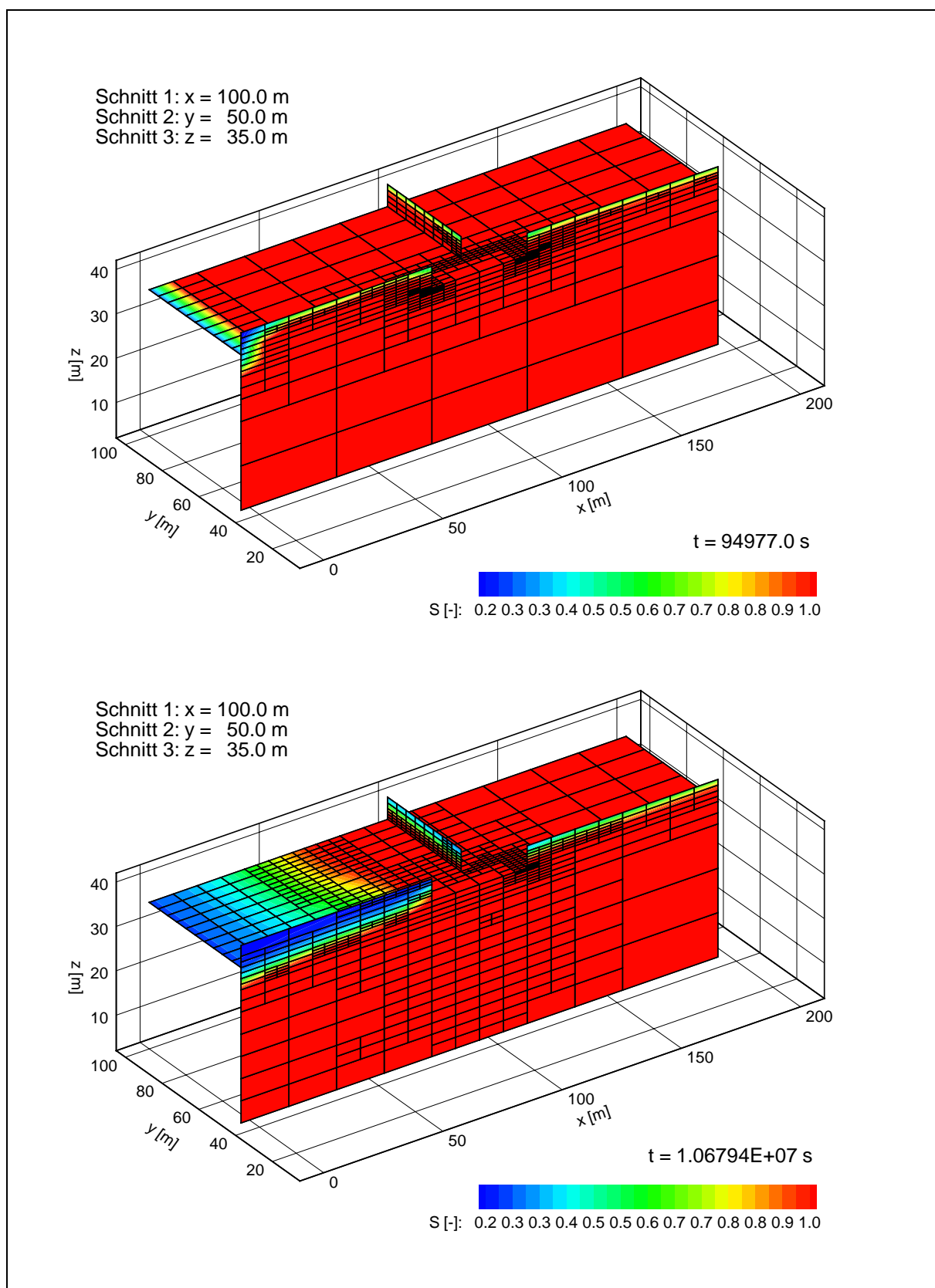


Abbildung 6.11: Adaptiertes Berechnungsgitter und Verteilung der Sättigung (Dichteinduzierter Schadstoffeintrag in Grundwasserleiter)

Die Gitteradaption wird für die Feldgröße 'Sättigung' mit $lev_{max,S} = 3$ und für die Feldgröße 'Konzentration' mit $lev_{max,C} = lev_{max} = 4$ durchgeführt (Tabelle 6.7).

Tabelle 6.7: Adaptionparameter Dichteinduzierter Schadstoffeintrag

Adaptionsalgorithmus	2
max. Verfeinerungslevel (global)	$lev_{max} = 4$
Sättigung (3D)	
Verfeinerungsindikator	Sprung-Indikator
Verfeinerungstoleranzen	$tol_{mit}^f = 3.0, tol_{mit}^g = 1.0$
max. Verfeinerungslevel	$lev_{max,S} = 3$
Konzentration (3D)	
Verfeinerungsindikator	Sprung-Indikator
Verfeinerungstoleranzen	$tol_{mit}^f = 2.5, tol_{mit}^g = 0.9$
max. Verfeinerungslevel	$lev_{max,C} = 4$

In Abbildung 6.10 ist für die Zeiten $t_1 = 94977.0 \text{ s}$ (1 Tag) und $t_2 = 1.06794 \cdot 10^7 \text{ s}$ (123 Tage) das adaptierte Berechnungsgitter und die Konzentrationsverteilung dargestellt. In Abbildung 6.11 findet sich die zugehörige Verteilung der Sättigung. In beiden Abbildungen ist die Überlagerung der Berechnungsgitter für die 'Sättigung' und die 'Konzentration' (gekoppelte Gitteradaption) sehr gut zu erkennen.

6.4 Thermohalines ELDER–Problem

ELDER (1967) hat experimentelle und numerische Studien zur thermischen Konvektion durchgeführt, die oft zur Prüfung von Simulationsprogrammen herangezogen werden. Dazu wird die Aufgabenstellung nach ELDER (1967) in der Regel auf das Problem der Salzwasserintrusion übertragen.

Die Berechnungsergebnisse des sog. ELDER–Problems ('Fingerungsproblem') sind äußerst sensitiv bezüglich der Diskretisierungsdichte des Untersuchungsgebietes (vgl. Abbildung 6.14). So erzielte KOLDITZ (1997) erst bei äquidistanten Berechnungsgittern mit 4400 Elementen konvergente Ergebnisse (Abbildung 6.12). Aufgrund dieser Sensitivität bietet sich hier die Verwendung der Gitteradaption an, so daß das Ausgangsgitter für die numerische Simulation mit nur 100 Elementen modelliert werden kann. Diese Diskretisierungsdichte reicht aus, um bei der gitteradaptiven Simulation des ELDER–Problems konvergente Ergebnisse zu erzielen (Abbildung 6.13), bei gerade einmal 1633 Elementen zum Zeitpunkt $t = 20 \text{ a}$.

Zur Formulierung einer thermohalinen Modellaufgabe haben DIERSCH & KOLDITZ (1998) das ELDER–Problem erweitert. Neben dem Konzentrationsgefälle wurde dem Modellaquifer

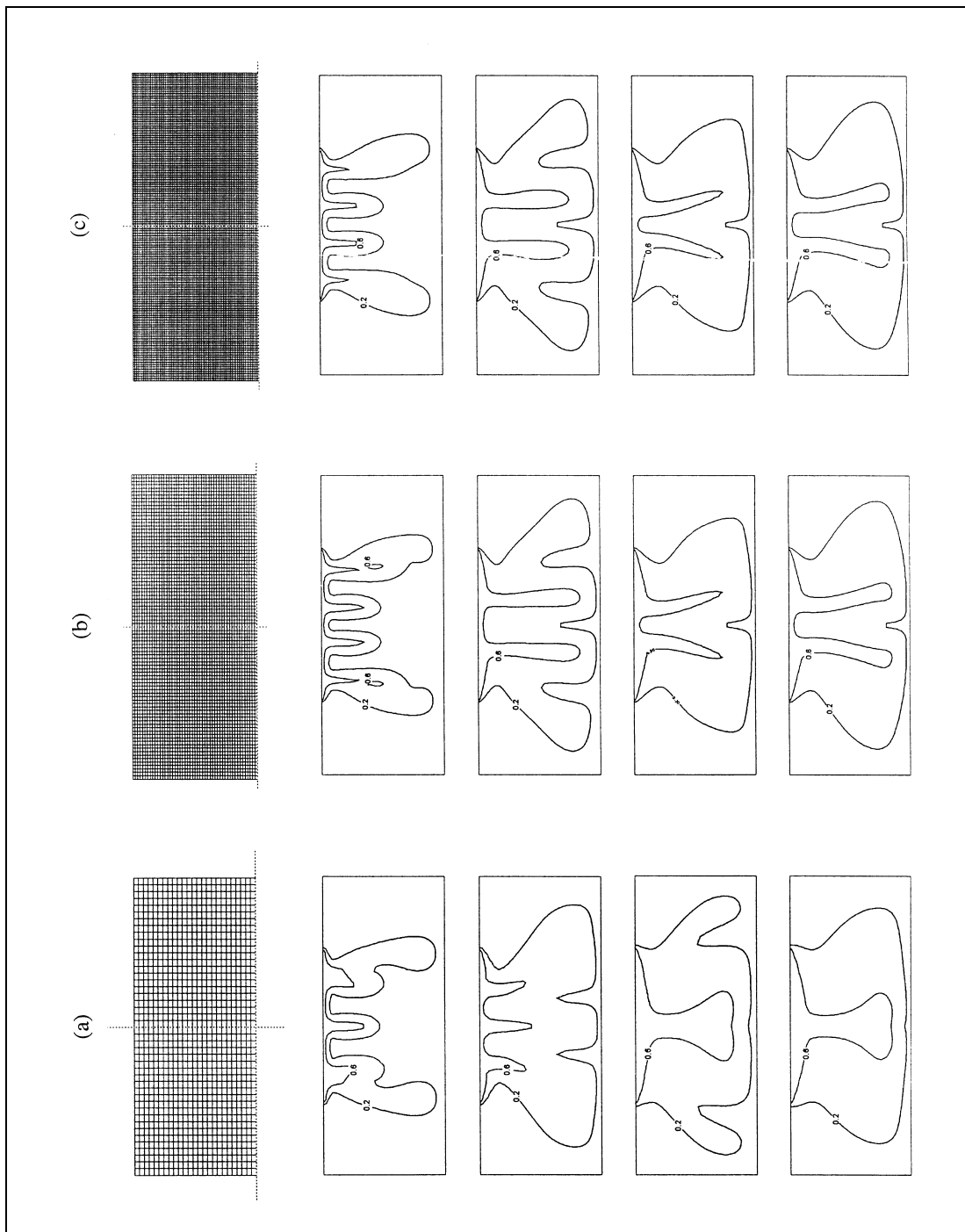


Abbildung 6.12: Diskretisierungseffekte bei der numerischen Simulation des ELDER-Problems (20 % und 60 % Isohalinen) – A priori verfeinerte Berechnungsgitter mit (a) 1100, (b) 4400 und (c) 9990 Elementen (KOLDITZ (1997))

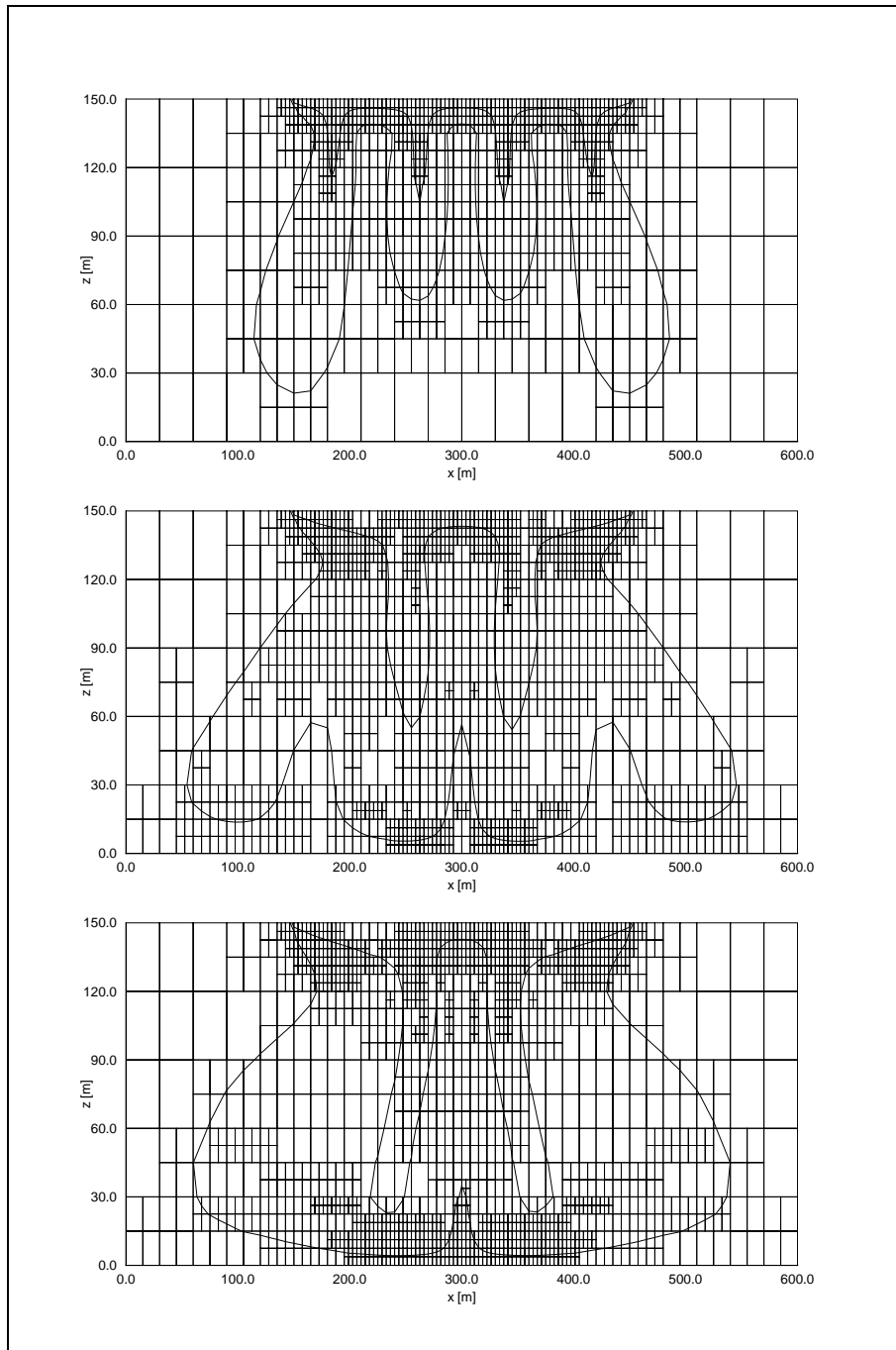


Abbildung 6.13: Simulationsergebnisse (20 % und 60 % Isohalinen) und adaptierte Berechnungsgitter für das ELDER-Problem (4, 10 und 20 Jahre)

auch ein Temperaturgradient aufgeprägt. Diese Modellaufgabe soll im folgenden in leicht modifizierter Form zur Darstellung der gekoppelten Gitteradaption verwendet werden.

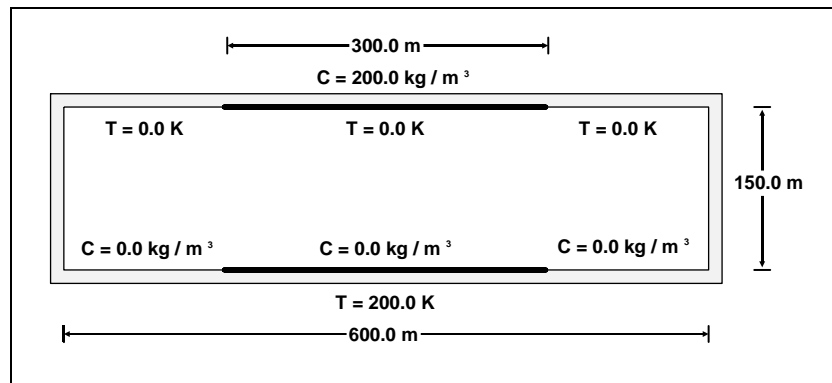


Abbildung 6.14: Untersuchungsgebiet und Randbedingungen zum thermohalinen ELDER–Problem

Tabelle 6.8: Simulationsparameter Thermohalines ELDER–Problem

Symbol	Parameter	Wert
g	Erdbeschleunigung	9.81 m/s^2
k	spezifische Permeabilität	$4.845 \cdot 10^{-13} \text{ m}^2$
n	effektive Porosität	$0.1 \text{ m}^3 \text{ m}^{-3}$
μ	dyn. Viskosität	$1.0 \cdot 10^{-3} \text{ kg/(ms)}$
ρ_0	Dichte Süßwasser	1000.0 kg/m^3
ρ_s	Dichte Salzwasser	1200.0 kg/m^3
ρ^s	Dichte Feststoff	2520.0 kg/m^3
D_m	molekulare Diffusion	$3.565 \cdot 10^{-6} \text{ m}^2/\text{s}$
c^w	spez. Wärmekapazität Fluid	$4.2 \cdot 10^3 \text{ J/(kg K)}$
c^s	spez. Wärmekapazität Feststoff	$1.0 \cdot 10^3 \text{ J/(kg K)}$
λ^w	Wärmeleitfähigkeit Fluid	0.65 J/(m s K)
λ^s	Wärmeleitfähigkeit Feststoff	1.591 J/(m s K)
ΔT	Temperaturdifferenz	200.0 K
$\bar{\beta}_c$	Massendichteverhältniszahl	0.2
C_{max}	max. Konzentration	200.0 kg/m^3
$\bar{\beta}_T$	isobarer Wärmeausdehnungskoeffizient	$5.0 \cdot 10^{-4} \text{ 1/K}$

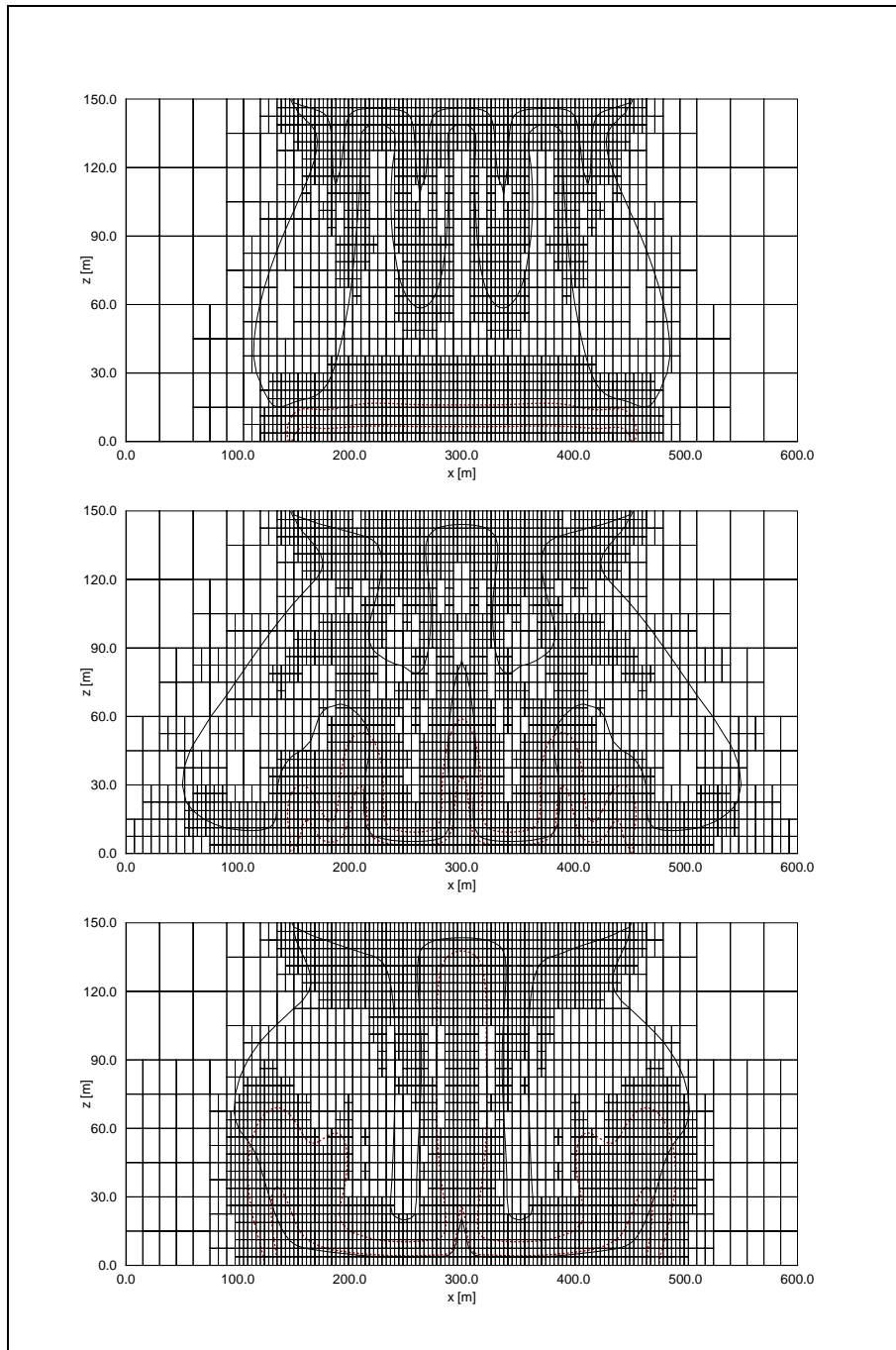


Abbildung 6.15: Simulationsergebnisse (20 % und 60 % Isohalinen und Isothermen) und adaptierte Berechnungsgitter für das thermohaline ELDER-Problem (4, 10 und 20 Jahre)

Im Unterschied zu der von DIERSCH & KOLDITZ (1998) beschriebenen Modellaufgabe wird hier die Temperatur–Randbedingung am unteren Rand des Untersuchungsgebietes nicht über den gesamten Rand vorgegeben, sondern, entsprechend der Konzentrations–Randbedingung, nur auf einer Strecke von 300.0 m (Abbildung 6.14).

Das Ausgangsgitter wird, wie bereits beim ELDER–Problem zur Salzwasserintrusion dargestellt, mit 100 Elementen diskretisiert. Die Simulationsparameter, die in Tabelle 6.8 aufgeführt sind, wurden aus DIERSCH & KOLDITZ (1998) entnommen.

Für die gitteradaptive Simulation des thermohalinen ELDER–Problems wird sowohl für die Feldgröße 'Temperatur' als auch für die Feldgröße 'Konzentration' ein max. Verfeinerungslevel von $lev_{max,C} = lev_{max,T} = lev_{max} = 3$ vorgegeben, so daß bei vollständiger Verfeinerung des Untersuchungsgebietes maximal 6400 Elemente entstehen können. Alle weiteren Adaptionparameter finden sich in Tabelle 6.9.

Tabelle 6.9: Adaptionparameter Thermohalines ELDER–Problem

Adaptionsalgorithmus	2
max. Verfeinerungslevel (global)	$lev_{max} = 3$
Temperatur (2D)	
Verfeinerungsindikator	Sprung–Indikator
Verfeinerungstoleranzen	$tol_{mit}^f = 1.2, tol_{mit}^g = 0.5$
max. Verfeinerungslevel	$lev_{max,T} = 3$
Konzentration (2D)	
Verfeinerungsindikator	Sprung–Indikator
Verfeinerungstoleranzen	$tol_{mit}^f = 1.5, tol_{mit}^g = 0.6$
max. Verfeinerungslevel	$lev_{max,C} = 3$

Salzwasserintrusion und Thermokonvektion haben gegenläufige Wirkungen. Während die mit Salz befrachtete Lösung absinkt (Abbildung 6.13), ist die erwärmte Sole bestrebt aufzusteigen. Dies führt gegenüber dem ELDER–Problem zu einer veränderten Konzentrationsverteilung des Salzes im Untersuchungsgebiet (Abbildung 6.15). Mit Hilfe der gekoppelten Gitteradaption werden auch hier konvergente Ergebnisse erzielt. Sowohl die Konzentrations– als auch die Temperaturverteilung wird durch die Gitteradaption sehr gut erfaßt. Zum Zeitpunkt $t = 20\text{ a}$ sind lediglich 3352 Elemente notwendig, um das Berechnungsgitter an die betrachteten gekoppelten Prozesse anzupassen.

Kapitel 7

Zusammenfassung und Ausblick

Im Rahmen dieser Arbeit wurde ein *gitteradaptiver Algorithmus* entwickelt, der es ermöglicht, bei der FE-Modellierung beliebig gekoppelter Prozesse (*Mehrfeldprobleme*) in geklüftet-porösen Medien das Berechnungsgitter a posteriori an alle beteiligten Feldgrößen (z.B. Druck, Sättigung, Konzentration (n Komponenten), Temperatur) gleichermaßen anzupassen. Dies erfolgte durch eine Überlagerung der jeweiligen Verfeinerungsindikatoren und damit der adaptierten Berechnungsgitter.

Damit hat der Anwender die Möglichkeit, das Startgitter für eine numerische Simulation mit einer geringen Anzahl an Elementen zu modellieren. Die Diskretisierungsdichte muß lediglich ausreichen, um die Geometrie des Modellgebietes aufzulösen; über einen evtl. Diskretisierungsfehler in der numerischen Lösung muß sich der Anwender a priori keine Gedanken machen.

Um einem Anwender aber den Zugang zu gitteradaptiven Methoden zu erleichtern, sind einfach zu handhabende Algorithmen notwendig. Dies betrifft u.a. die verwendeten Indikatoren, um auf notwendige Gitterverfeinerungen in bestimmten Regionen des Berechnungsgebietes schließen und eine Gitternetzanzpassung steuern zu können.

Aufgrund der Komplexität gekoppelter Prozesse sind möglichst einfache *heuristische Verfeinerungsindikatoren* den weitaus komplexeren (analytischen) Fehlerindikatoren vorzuziehen. Insbesondere der sog. Sprung-Indikator (Gradienten-Sprünge) hat sich hier in einer Vielzahl von Anwendungsbeispielen bewährt. Hinzu kommt, daß die bei der gitteradaptiven Simulation gekoppelter Prozesse notwendige Überlagerung von Indikatoren bei Verwendung heuristischer Verfeinerungsindikatoren einfach zu realisieren ist.

Neben der *Ingenieurzeit*, die u.a. für die Erstellung des Berechnungsgitters benötigt wird, und dem *Speicherplatzbedarf* ist aber auch die benötigte *Rechenzeit* ein wichtiges Kriterium bei der Entwicklung gitteradaptiver Algorithmen. Dies gilt insbesondere für die Modellierung *stark gekoppelter Mehrfeldprobleme*, die in der Regel in jedem Zeitschritt mehrere Iterationen zwischen den einzelnen zu modellierenden Prozessen notwendig macht. Die Entwicklung spezieller Adaptionalgorithmen führte hier zu einem erheblichen Rechenzeitgewinn.

Anhand einer Reihe von Anwendungsbeispielen wurden die Möglichkeiten des in dieser Arbeit für die Modellierung gekoppelter Prozesse entwickelten gitteradaptiven Algorithmus (*gekoppelte Gitteradaption*) dargestellt. Dazu wurden zunächst *schwach gekoppelte Mehrfeldprobleme* (Transport eines idealen Tracers in einer inkompressiblen Strömung (Grund-

wasserströmung)) in porösen und geklüftet–porösen Medien betrachtet. Es wurde einerseits auf die Anwendung der Gitteradaption im Bereich von *Singularitäten* (punktuelle Quellen und Senken) und in Kluft/Matrix–Übergangsbereichen (*gekoppelte geometrische Systeme*), andererseits auf die Besonderheiten sog. *2.5D–Kluftnetzwerke* eingegangen.

Schwerpunkt dieser Arbeit war jedoch die *gekoppelte Gitteradaption* und damit insbesondere die gitteradaptive Modellierung *stark gekoppelter Mehrfeldprobleme*, die an mehreren Beispielen zu dichteinduzierten Strömungen (Salzwasserintrusion, Thermokonvektion) in gesättigten und teilgesättigten Systemen demonstriert wurde.

In den Anwendungsbeispielen wurde deutlich, daß mit der *gekoppelten Gitteradaption* ein flexibles Instrument zur numerischen Simulation beliebig gekoppelter Prozesse zur Verfügung steht. Allerdings besteht u.a. im Hinblick auf eine weitere Reduzierung der Rechenzeit auch in Zukunft Entwicklungsbedarf. Folgende weiterführenden Arbeiten sind denkbar:

- Sowohl im Bereich von Quellen und Senken als auch in Kluft/Matrix–Übergangsbereichen bietet sich die Verwendung der *r–Adaption* (Verschiebung der Knoten) an, da sich dadurch die Anzahl der Knoten und Elemente des Berechnungsgitters nicht erhöht. Eine weitere Verbesserung der numerischen Ergebnisse in diesen Bereichen kann schließlich durch die *h–Adaption* (Verfeinerung durch Elementteilung) erzielt werden.
- Bei der in dieser Arbeit vorgestellten *gekoppelten Gitteradaption* werden die jeweiligen Verfeinerungsindikatoren und damit die adaptierten Berechnungsgitter für alle betrachteten Prozesse überlagert. Dies bedeutet für den einzelnen zu modellierenden Prozeß, daß dessen numerische Berechnung unter Umständen auf einem zu stark verfeinerten Berechnungsgitter erfolgt. Um dies zu vermeiden, ist die gitteradaptive Simulation der einzelnen miteinander gekoppelten Prozesse auf verschiedenen Berechnungsgittern denkbar, die ihrerseits in geeigneter Weise miteinander gekoppelt werden müssen (Interpolation der Ergebnisse).
- Bisher erfolgt die Verfeinerung eines Elementes durch *gleichmäßige Teilung*, wobei aus jedem *2D*–Element vier und aus jedem *3D*–Element acht neue Elemente hervorgehen. Dabei wird weder die Richtung der Grundwasserströmung noch die Richtung des Stofftransports berücksichtigt. Um die Anzahl der durch Verfeinerung entstehenden Elemente weiter zu reduzieren, bietet sich die sog. *anisotrope h–Adaption* an, bei der *2D*–Elemente richtungsabhängig (in Richtung des größten Gradienten oder des größten Gradienten–Sprungs einer Feldgröße) in zwei oder vier und *3D*–Elemente entsprechend in zwei, vier oder acht neue Elemente unterteilt werden.
- *Irreguläre Knoten* führen, trotz des vorgestellten Verfahrens zur Eliminierung dieser Knoten im Gesamtgleichungssystem, zu numerischen Ungenauigkeiten in den betreffenden Bereichen. Deshalb ist es sinnvoll, die Anzahl der *irregulären Knoten* klein zu halten oder geeignete Übergangselemente zu verwenden, um *irreguläre Knoten* gar nicht erst entstehen zu lassen.
Zur Zeit werden im Grundwassersimulator RockFlow Finite Dreiecks– und Tetraeder–Elemente realisiert, so daß in Zukunft auch Berechnungsgitter aus gemischten Elementtypen (Dreiecke/Vierecke, Tetraeder/Hexaeder) denkbar sind. Da die in dieser Arbeit vorgestellte *gekoppelte Gitteradaption* auf Vierecks– und Hexaeder–Elemente beschränkt ist, ist dann auch eine Erweiterung auf Dreiecks– und Tetraeder–Elemente

sinnvoll. Aber auch ohne Erweiterung der Gitteradaption lassen sich diese Elementtypen als *Übergangselemente zur Eliminierung der irregulären Knoten* nutzen. In dreidimensionalen Berechnungsgittern sind dann zusätzlich zu den Tetraeder-Elementen 'Pyramiden'-Elemente notwendig, um die *Konformität der Elementverknüpfungen* sicherzustellen. Vor einer weiteren Verfeinerung sind diese Elemente allerdings wieder aufzulösen.

Symbolverzeichnis

In der nachfolgenden Tabelle sind diejenigen Symbole aufgeführt, die dem Gesamtverständnis dieser Arbeit dienen. Hier nicht aufgeführte Bezeichnungen sind an entsprechender Stelle im Kontext erläutert.

Lateinische Symbole

A	$[m^2]$	Fläche eines $2D$ -Elementes
b	$[m]$	halbe Kluftöffnungsweite
c	$[kg/kg]$	Massenkonzentration
c_0	$[kg/kg]$	Anfangskonzentration (Massenkonzentration)
C	$[kg/m^3]$	Volumenkonzentration
C_0	$[kg/m^3]$	Referenzkonzentration
C_{max}	$[kg/m^3]$	maximale Volumenkonzentration
Cr	$[-]$	COURANT-Zahl
c^w	$[J/(kg K)]$	spezifische Wärmekapazität des Fluids
c^s	$[J/(kg K)]$	spezifische Wärmekapazität des Feststoffs
d	$[m]$	halber Brunnenabstand
\mathbf{D}	$[m^2/s]$	Tensor der hydrodynamischen Dispersion
\mathbf{D}_m	$[m^2/s]$	Tensor der molekularen Diffusion
\mathbf{D}_D	$[m^2/s]$	Tensor der mechanischen Dispersion
D	$[m^2/s]$	hydrodynamische Dispersion
D_m	$[m^2/s]$	molekulare Diffusion
\mathbf{D}^T	$[J/(m s K)]$	Tensor der hydrodynamischen Wärmedispersion
\mathbf{E}	$[m^2/s]$	Thermodispersionstensor
g	$[m^2/s]$	Erdbeschleunigung
\mathbf{g}	$[m^2/s]$	Vektor der Erdbeschleunigung
h	$[m]$	Standrohrspiegelhöhe
h, h_E	$[m]$	charakteristische Elementlänge
\mathbf{I}	$[-]$	Einheitstensor
$I_{\Delta t}$	$[-]$	Anzahl adaptiver Iterationen pro Zeitschritt
K_f	$[m/s]$	Durchlässigkeitskoeffizient
\mathbf{k}	$[m^2]$	Tensor der spezifischen Permeabilität
\mathbf{k}^α	$[m^2]$	Tensor der spezifischen Permeabilität (Phase α)

k_r	[–]	relative Permeabilität
k_r^α	[–]	relative Permeabilität (Phase α)
k_r^w	[–]	relative Permeabilität (benetzende Phase)
L	[m]	Länge eines 1D-Elementes
lev_{max}	[–]	maximaler Verfeinerungslevel
m	[m]	Dicke des Aquifers
n	[–]	effektive Porosität (Volumenanteil des mobilen Porenwassers)
n^α	[–]	Porenanteil der Phase α
n_E	[–]	Anzahl der Knoten eines Elementes
n_{ele}	[–]	Anzahl Elemente
n_{kno}	[–]	Anzahl Knoten
Ne	[–]	NEUMANN-Zahl
p	[Pa]	Druck
p_0	[Pa]	Referenzdruck
p_c	[Pa]	Kapillardruck
p^α	[Pa]	Druck der Phase α
p^n	[Pa]	Druck der nicht benetzenden Phase (non-wetting)
p^w	[Pa]	Druck der benetzenden Phase (wetting)
Pg	[–]	Gitter-PECLET-Zahl
Q	[m^3/s]	Volumenstrom (Pumprate)
r	[m]	Radius
R	[–]	Residuum
R_E	[–]	Residuum im Elementinnern
R_K	[–]	kantenbezogenes Residuum
S_E	[–]	Schwerpunkt eines Elementes
S_0	[$1/m$]	spezifischer Speicherkoeffizient
S_p	[$(m\ s^2)/kg$]	Speicherkoeffizient
S^α	[–]	Sättigungsgrad (Phase α)
S^w	[–]	Sättigungsgrad (benetzende Phase)
T	[K]	Temperatur
T_0	[K]	Referenztemperatur
tol^f	[–]	Verfeinerungstoleranz
tol^g	[–]	Vergrößerungstoleranz
u	[–]	Lösungsfunktion
u_h	[–]	Näherungslösung
\hat{u}_i	[–]	Knotenfreiwerte
$\hat{\mathbf{u}}$	[–]	Vektor der Knotenfreiwerte
V	[m^3]	Volumen eines 3D-Elementes
\mathbf{v}_a	[m/s]	Vektor der Abstandsgeschwindigkeiten
\mathbf{v}_f	[m/s]	Vektor der Filtergeschwindigkeiten

\mathbf{v}_a^α	$[m/s]$	Vektor der Abstandsgeschwindigkeiten (Phase α)
\mathbf{v}_f^α	$[m/s]$	Vektor der Filtergeschwindigkeiten (Phase α)

Griechische Symbole

α_L	$[m]$	longitudinale Dispersionslänge
α_T	$[m]$	transversale Dispersionslänge
α	$[-]$	Phase
β_L	$[m]$	longitudinale Thermodispersionslänge
β_T	$[m]$	transversale Thermodispersionslänge
$\bar{\beta}_p$	$[1/Pa]$	isothermer Kompressibilitätskoeffizient
$\bar{\beta}_T$	$[1/K]$	isobarer Wärmeausdehnungskoeffizient
$\bar{\beta}_c$	$[-]$	Massendichteverhältniszahl
δ_{ij}	$[-]$	KRONECKER-Symbol
η	$[-]$	Fehlerestimator (globaler Fehlerschätzer)
η_i	$[-]$	Fehlerindikator (lokaler Fehlerschätzer)
η_E	$[-]$	Verfeinerungsindikator
θ	$[-]$	Kollokationsstelle (Zeitwichtungsfaktor)
λ^s	$[J/(m\ s\ K)]$	Wärmeleitfähigkeit Feststoff
λ^w	$[J/(m\ s\ K)]$	Wärmeleitfähigkeit Fluid
μ	$[kg/(m\ s)]$	dynamische Viskosität
μ^w	$[kg/(m\ s)]$	dynamische Viskosität der benetzenden Phase
ρ	$[kg/m^3]$	Dichte
ρ_0	$[kg/m^3]$	Referenzdichte, Süßwasserdichte
ρ_s	$[kg/m^3]$	Salzwasserdichte
ρ^α	$[kg/m^3]$	Dichte der Phase α
ρ^w	$[kg/m^3]$	Dichte der benetzenden Phase
ρ^s	$[kg/m^3]$	Dichte Feststoff
ρ^w	$[kg/m^3]$	Dichte Fluid
τ	$[-]$	Tortuosität
ϕ_i	$[-]$	Wichtungsfunktionen
Φ	$[-]$	Vektor der Wichtungsfunktionen
ω_i	$[-]$	Ansatzfunktionen
ω	$[-]$	Vektor der Ansatzfunktionen

Literatur

- Babuška, I., W. C. Rheinboldt (1978). Error Estimates for Adaptive Finite Element Computations. *SIAM J. Numer. Anal.* 15(4), 736 – 754.
- Babuška, I., A. Miller (1981). A Posteriori Error Estimates and Adaptive Techniques for the Finite Element Method. Technical report, Inst. f. Physic. Sci. and Tech., University of Maryland. Tech. Note BN-968.
- Barlag, C. (1997). Adaptive Methoden zur Modellierung von Stofftransport im Kluffgestein. Dissertation, Institut für Strömungsmechanik und Elektronisches Rechnen im Bauwesen, Universität Hannover. Bericht Nr. 52.
- Bastian, P. (1994). Parallele Adaptive Mehrgitterverfahren. Dissertation, Institut für Computeranwendungen, Universität Stuttgart. Bericht NN94/1.
- Baumgärtner, J., R. Jung, A. Gerard, R. Baria, T. Gandy, T. Tran-Viet (1997). Erste Ergebnisse eines Langzeitzirkulationsexperiments im Hot-Dry-Rock Versuchsfeld Soultz-sous-Forêts, Elsass. SOCOMINE Report, Soultz, France.
- Berger, M. J., J. Olinger (1984). Adaptive Mesh Refinement for Hyperbolic Partial Differential Equations. *Journal of Computational Physics* 53, 484 – 512.
- Bieterman, M., I. Babuška (1982). The Finite Element Method for Parabolic Equations, I. A Posteriori Error Estimation, II. A Posteriori Error Estimation and Adaptive Approach. *Numerische Mathematik* 40, 339 – 406.
- Braun, C. (1993). Simulation von Zweiphasenströmungen im Untergrund mit Hilfe einer adaptiven Finite-Element-Formulierung. Diplomarbeit, Institut für Wasserbau, Universität Stuttgart.
- Brooks, A. N., T. J. R. Hughes (1982). Streamline Upwind/Petrov-Galerkin Formulations for Convection Dominated Flows with Particular Emphasis on the Incompressible Navier-Stokes Equations. *Computer Methods in Applied Mechanics and Engineering* 32, 199–259.
- Devloo, P., J. T. Oden, T. Strouboulis (1987). Implementation of an Adaptive Refinement Technique for the SUPG Algorithm. *Computer Methods in Applied Mechanics and Engineering* 61, 339–358.
- Diersch, H.-J. G., O. Kolditz (1998). Coupled groundwater flow and transport: 2. Thermohaline and 3D convection systems. *Advances in Water Resources* 21, 401–425.
- Elder, J. W. (1967). Transient convection in a porous medium. *Journal of Fluid Mechanics* 27(3), 609 – 623.
- Gillham, R. W., E. A. Sudicky, J. A. Cherry, E. O. Frind (1984). An Advection-Diffusion Concept for Solute Transport in Heterogeneous Unconsolidated Geological Deposits. *Water Resources Research* 20(3), 369–378.

- Gropp, W. D. (1980). A Test of Moving Mesh Refinement for 2D Scalar Hyperbolic Problems. *SIAM Journal of Scientific and Statistical Computing* 1(2), 191–197.
- Gropp, W. D. (1987). Local Uniform Mesh Refinement with Moving Grids. *SIAM Journal of Scientific and Statistical Computing* 8(3), 292–304.
- Grossmann, C., H.-G. Roos (1992). *Numerik partieller Differentialgleichungen*. B. G. Teubner, Stuttgart.
- Habbar, A., O. Kolditz, W. Zielke (1998). Schadstoffrückhaltevermögen des klüftigen Tonsteins und seine Eignung als geologische Barriere für Deponien. Technischer Bericht, Institut für Strömungsmechanik und Elektronisches Rechnen im Bauwesen, Universität Hannover.
- Habbar, A. (2001). Direct and inverse modelling of reactive transport processes in porous and fractured media. Dissertation, Institut für Strömungsmechanik und Elektronisches Rechnen im Bauwesen, Universität Hannover. in Vorbereitung.
- Helmig, R. (1993). Theorie und Numerik der Mehrphasenströmungen in geklüftetporösen Medien. Dissertation, Institut für Strömungsmechanik und Elektronisches Rechnen im Bauwesen, Universität Hannover. Bericht Nr. 34.
- Henry, H. R. (1960). Salt Intrusion into Coastal Aquifers. Ph. d. thesis, Columbia University.
- Henry, H. R. (1964). Interfaces Between Salt Water and Fresh Water in Coastal Aquifers. *US Geological Survey Water-Supply Paper* (1613-C), C35–C70.
- Hoopes, J. A., D. R. F. Harleman (1967). Wastewater Recharge and Dispersion in Porous Media. *ASCE Journal of the Hydraulics Division* 93(HY5), 51–71.
- Huyakorn, P. S., P. F. Andersen, O. Gueven, F. J. Molz (1986). A Curvilinear Finite Element Model for Simulating Two-Well Tracer Tests and Transport in Stratified Aquifers. *Water Resources Research* 22(5), 663–678.
- John, V. (1994). A Comparison of Some Error Estimators for Convection–Diffusion Problems on a Parallel Computer. Technical report, Institut für Analysis und Numerik, Otto-von-Guericke-Universität Magdeburg. Preprint Nr. 12.
- Johnson, C. (1990). Adaptive Finite Element Methods for Diffusion and Convection Problems. *Computer Methods in Applied Mechanics and Engineering* 82, 301–322.
- Kaiser, R., W. Zielke (1996). Fehlerindikatoren für die adaptive Netzgenerierung zur Lösung der Transportgleichung. Technischer Bericht, Institut für Strömungsmechanik und Elektronisches Rechnen im Bauwesen, Universität Hannover.
- Kaiser, R. (1996). *Flow to Well in a Confined Aquifer (Theis' problem)*. In: Kolditz, O., Zielke, W., ROCKFLOW – Benchmarks and Examples in Subsurface Hydrology, Institut für Strömungsmechanik und Elektronisches Rechnen im Bauwesen.
- Kaiser, R., O. Kolditz, W. Zielke (1998). Automatic Grid Adaptation for Subsurface Fluid Flow Problems – Application to Fractured-porous Reservoirs. In *Proceedings of the XII. International Conference on Computational Methods in Water Resources*, pp. 125–132. Chersonese, Crete, Greece, June 15–19, 1998.
- Kaiser, R., T. Rother, O. Kolditz (1999). Modelling of Flow in Fractured Aquifers using Automatic Grid Adaptation. In *Proceedings of the XXVIII IAHR congress, CD-ROM*, pp. 29. Graz, Austria, August 22–27, 1999.

- Kaiser, R., O. Kolditz, W. Zielke (2000). Automatic grid adaptation for multidimensional coupled processes in subsurface hydrosystems. In *Groundwater Updates, International Symposium 2000 on Groundwater (IAHR)*, pp. 339–344. Sonic City, Omiya, Japan, May 8–10, 2000.
- Kaiser, R., T. Rother, O. Kolditz, W. Zielke (2000). Automatic Grid Adaptation for Modeling Coupled Flow and Transport Processes in Fractured Aquifers. In *Proceedings of the XIII International Conference on Computational Methods in Water Resources*, pp. 279–283. Calgary, Alberta, Canada, June 25–29, 2000.
- Kasper, H., O. Kolditz, T. Taniguchi, G. Kosakowski, W. Zielke (1996). Modelling of Subsurface Flow and Transport in Fractured Rock – Hexahedral Mesh Generation of Convex Composite Domain. In *Numerical Methods in Engineering '96, Proceedings of the second ECCOMAS Conference on Numerical Methods in Engineering*. Paris, September 09–13, 1996.
- Kinzelbach, W. (1992). *Numerische Methoden zur Modellierung des Transports von Schadstoffen im Grundwasser*. Band 21, Schriftenreihe Wasser – Abwasser, 2. Auflage. R. Oldenbourg Verlag, München, Wien.
- Kolditz, O. (1990). Zur Modellierung und Simulation geothermischer Transportprozesse in untertägigen Zirkulationssystemen. Dissertation, Akademie der Wissenschaften der DDR, Berlin.
- Kolditz, O. (1994). *Benchmarks for Numerical Groundwater Simulations*. In: Diersch, H.-J., FEFLOW Manual, WASY – Gesellschaft für wasserwirtschaftliche Planung und Systemforschung, Berlin.
- Kolditz, O. (1997). *Strömung, Stoff- und Wärmetransport im Kluftgestein*. Gebr. Borntraeger, Berlin, Stuttgart.
- Kolditz, O., A. Habbar, R. Kaiser, H. Kasper, M. Schulze-Ruhfus, T. Rother, C. Thorenz, W. Zielke (1998). Software Concept of Simulating Coupled Processes in Subsurface Hydrosystems. In *Proceedings of the third International Conference on Hydroinformatics*, pp. 613 – 618. Copenhagen, Denmark, August 24–26, 1998.
- Kosakowski, G. (1996). Modellierung von Strömungs- und Transportprozessen in geklüfteten Medien: Vom natürlichen Kluftsystem zum numerischen Gitternetzwerk. Dissertation, VDI Verlag GmbH, Düsseldorf. Fortschr. Ber. VDI Reihe 7, Nr. 304.
- Krause, K. (1996). Stoff- und Wärmetransport in porösen und geschichteten Medien – Anwendungsbeispiele für Brunnendubletten. Studienarbeit, Institut für Strömungsmechanik und Elektronisches Rechnen im Bauwesen, Universität Hannover.
- Kröhn, K.-P. (1991). Simulation von Transportvorgängen im klüftigen Gestein mit der Methode der Finiten Elemente. Dissertation, Institut für Strömungsmechanik und Elektronisches Rechnen im Bauwesen, Universität Hannover. Bericht Nr. 29.
- Lege, T. (1995). Modellierung des Kluftgesteins als geologische Barriere für Deponien. Dissertation, Institut für Strömungsmechanik und Elektronisches Rechnen im Bauwesen, Universität Hannover. Bericht Nr. 45.
- Li, M.-H., H. P. Cheng, G. T. Yeh (2000). Solving 3D Subsurface Flow and Transport with Adaptive Multigrid. *Journal of Hydrologic Engineering* 5(1), 74–81.
- Manzini, G., A. Rosella (1994). The Adaptive Mesh Refinement Method Applied to 2D Flows in Porous Media. In *Proceedings of the 8th Conference of the European*

- Consortium for Mathematics in Industry (ECMI '94)*. Kaiserslautern, September 06–10, 1994.
- Mittendorf, K. (2000). Modellierung dichteinduzierter Strömung in porösen Medien mittels gitteradaptiver Finite-Elemente-Methoden. Diplomarbeit, Institut für Strömungsmechanik und Elektronisches Rechnen im Bauwesen, Universität Hannover.
- Pepper, D. W., D. E. Stephenson (1995). An Adaptive Finite-Element Model for Calculating Subsurface Transport of Contaminant. *Groundwater* 33(3), 486–496.
- Pribnow, D. F. C., R. Jung, R. Wiedler, J. Baumgärtner, R. Baria, A. Gérard, A. Genter, G. Homeier, H. Tenzer (2001). Mining heat from deep granitic basement in Soultz, Part 1: Performance. *J. Geophys. Res.*, in Vorbereitung.
- Pribnow, D. F. C., O. Kolditz, T. Rother, R. Kaiser, C. Clauser, L. Aquilina (2001). Mining heat from deep granitic basement in Soultz, Part 2: Prediction. *J. Geophys. Res.*, in Vorbereitung.
- Rank, E. (1985). A-posteriori-Fehlerabschätzungen und adaptive Netzverfeinerung für Finite-Element- und Randintegralelement-Methoden. Dissertation, Technische Universität München. Mitteilungen aus dem Institut für Bauingenieurwesen I, Heft 16.
- Richards, L. A. (1931). Capillary Conduction of Liquids through Porous Media. *Physics* (1), 318–333.
- Rother, T., O. Kolditz, T. Taniguchi (2000). Grid Generation of Fractured-Porous Aquifers. In *Proceedings of the 7th Int. Conf. on Numerical Grid Generation in Computational Field Simulations*, pp. 1081 – 1089. Whistler, British Columbia, Canada, September 25–28, 2000.
- Rust, W. (1991). Mehrgitterverfahren und Netzadaption für lineare und nichtlineare statische Finite-Elemente-Berechnungen von Flächentragwerken. Dissertation, Institut für Baumechanik und Numerische Mechanik, Universität Hannover. Bericht F91/2.
- Scheidegger, A. E. (1961). General Theory of Dispersion in Porous Media. *Journal of Geophysical Research* 66(10), 3273–3278.
- Schulze-Ruhfus, M. (1996). Adaptive Verfeinerung und Vergrößerung gekoppelter 1D/2D/3D-Elemente. Diplomarbeit, Institut für Strömungsmechanik und Elektronisches Rechnen im Bauwesen, Universität Hannover.
- Segol, G. (1994). *Classic Groundwater Simulations – Proving and Improving Numerical Models*. PTR Prentice Hall, Englewood Cliffs, New Jersey.
- Shao, H. (1994). Simulation von Strömungs- und Transportvorgängen in geklüfteten porösen Medien mit gekoppelten Finite-Element- und Rand-Element-Methoden. Dissertation, Institut für Strömungsmechanik und Elektronisches Rechnen im Bauwesen, Universität Hannover. Bericht Nr. 37.
- Stein, E., S. Ohnimus, B. Seifert, R. Mahnken (1994). Adaptive Finite-Element Diskretisierungen von Flächentragwerken. *Bauingenieur* 69, 53–62.
- Tang, D. H., E. O. Frind, E. A. Sudicky (1981). Contaminant Transport in Fractured Porous Media: Analytical Solution for a Single Fracture. *Water Resources Research* 17(3), 555–564.

- Theis, C. V. (1935). The Relation Between the Lowering of the Piezometric Surface and the Rate and Duration of Discharge of a Well Using Groundwater Storage. *Transactions AGU (Amer. Geophys. Union)* 16, 519–524.
- Thiele, K. (1999). Adaptive Finite Volume Discretisation of Density Driven Flows in Porous Media. Dissertation, Institut für Angewandte Mathematik, Universität Erlangen–Nürnberg.
- Thorenz, C. (1995). Problemangepasste Netzgenerierung zur numerischen Simulation von Migrationsproblemen im Grundwasser. Diplomarbeit, Institut für Strömungsmechanik und Elektronisches Rechnen im Bauwesen, Universität Hannover.
- Thorenz, C., G. Kosakowski, O. Kolditz, B. Berkowitz (2000). An Experimental and Numerical Investigation of Saltwater Movement in Coupled Saturated / Partially-Saturated Systems. *submitted to Water Resources Research*.
- Thorenz, C. (2001). Model Adaptive Simulation of Multiphase and Density Driven Flow in Fractured and Porous Media. Dissertation, Institut für Strömungsmechanik und Elektronisches Rechnen im Bauwesen, Universität Hannover. in Vorbereitung.
- Trompert, R. A., J. G. Verwer, J. G. Blom (1993). Computing Brine Transport in Porous Media with an Adaptive-grid Method. *International Journal of Numerical Methods in Fluids* 16, 43–63.
- Wolfsberg, A. V., D. L. Freyberg (1994). Efficient Simulation of Single Species and Multispecies Transport in Groundwater with Local Adaptive Grid Refinement. *Water Resources Research* 30(11), 2979 – 2991.
- Wollrath, J. (1990). Ein Strömungs- und Transportmodell für klüftiges Gestein und Untersuchungen zu homogenen Ersatzsystemen. Dissertation, Institut für Strömungsmechanik und Elektronisches Rechnen im Bauwesen, Universität Hannover. Bericht Nr. 28.

Liste der bisher erschienenen Institutsberichte

- 01/1970 **Holz, K.-P.** *Ergänzung des Verfahrens finiter Elemente durch Ecksingularitäten zur verbesserten Berechnung schiefwinkliger Platten.* Dissertation, Techn. Univ. Hannover, 1970
- 02/1971 **Ehlers, K.-D.** *Berechnung instationärer Grund- und Sickerwasserströmungen mit freier Oberfläche nach der Methode finiter Elemente.* Dissertation, Techn. Univ. Hannover, 1971
- 03/1971 **Meissner, U.** *Berechnung von Schalen unter großen Verschiebungen und Verdrehungen bei kleinen Verzerrungen mit Hilfe finiter Dreieckselemente.* Dissertation, Techn. Univ. Hannover, 1971
- 04/1972 **Grotkop, G.** *Die Berechnung von Flachwasserwellen nach der Methode der finiten Elemente.* Dissertation, Techn. Univ. Hannover, Sonderdruck aus dem Jahresbericht 1971 d. SFB 79, H. 2, 1972
- 05/1973 **Schulze, K.-W.** *Eine problemorientierte Sprache für die Dynamik offener Gerinne.* Dissertation, Techn. Univ. Hannover, Mitteil. d. SFB 79, Heft 1, 1973
- 06/1977 **Beyer, A.** *Die Berechnung großräumiger Grundwasserströmungen mit Vertikalstruktur mit Hilfe der Finite-Element-Methode.* Dissertation, Fortschrittberichte der VDI-Zeitschriften, Reihe 4, Nr. 34, 1977
- 07/1977 **Ebeling, H.** *Berechnung der Vertikalstruktur wind- und gezeitenerzeugter Strömungen nach der Methode der finiten Elemente.* Dissertation, Fortschrittberichte der VDI-Zeitschriften, Reihe 4, Nr. 32, 1977
- 08/1977 **Gärtner, S.** *Zur Berechnung von Flachwasserwellen und instationären Transportprozessen mit der Methode der finiten Elemente.* Dissertation, Fortschrittberichte der VDI-Zeitschriften, Reihe 4, Nr. 30, 1977
- 09/1977 **Herrling, B.** *Eine hybride Formulierung in Wasserständen zur Berechnung von Flachwasserwellen mit der Methode finiter Elemente.* Dissertation, Fortschrittberichte der VDI-Zeitschriften, Reihe 4, Nr. 37, 1977
- 10/1979 **Hennlich, H.-H.** *Aeroelastische Stabilitätsuntersuchung von Linientragwerken.* Dissertation, Fortschrittberichte der VDI-Zeitschriften, Reihe 4, Nr. 49, 1979
- 11/1979 **Kaločay, E.** *Zur numerischen Behandlung der Konvektions-Diffusions-Gleichung im Hinblick auf das inverse Problem.* Dissertation, Univ. Hannover, 1979
- 12/1980 **Januszewski, U.** *Automatische Eichung für ein- und zweidimensionale, hydrodynamisch-numerische Flachwassermodelle.* Dissertation, Univ. Hannover, Fortschrittberichte der VDI-Zeitschriften, Reihe 4, Nr. 58, 1980
- 13/1982 **Carbonel Huamán, C.A.A.** *Numerisches Modell der Zirkulation in Auftriebsgebieten mit Anwendung auf die nordperuanische Küste.* Dissertation, Univ. Hannover, 1982
- 14/1985 **Tuchs, M.** *Messungen und Modellierung am Deep Shaft.* Dissertation, Univ. Hannover, 1984
- 15/1985 **Theunert, F.** *Zum lokalen Windstau in Ästuarien bei Sturmfluten – Numerische Untersuchungen am Beispiel der Unterelbe.* Dissertation, Univ. Hannover, 1984

- 16/1985 **Perko, H.-D.** *Gasausscheidung in instationärer Rohrströmung.* Dissertation, Univ. Hannover, 1984
- 17/1985 **Crotogino, A.** *Ein Beitrag zur numerischen Modellierung des Sedimenttransports in Verbindung mit vertikal integrierten Strömungsmodellen.* Dissertation, Univ. Hannover, 1984
- 18/1985 **Rottmann-Söde, W.** *Ein halbanalytisches FE-Modell für harmonische Wellen zur Berechnung von Wellenunruhen in Häfen und im Küstenvorfeld.* Dissertation, Univ. Hannover, 1985
- 19/1985 **Nitsche, G.** *Explizite Finite-Element-Modelle und ihre Naturanwendungen auf Strömungsprobleme in Tidegebieten.* Dissertation, Univ. Hannover, 1985
- 20/1985 **Vera Muthre, C.** *Untersuchungen zur Salzausbreitung in Ästuarien mit Taylor'schen Dispersionsmodellen.* Dissertation, Univ. Hannover, 1985
- 21/1985 **Schaper, H.** *Ein Beitrag zur numerischen Berechnung von nichtlinearen kurzen Flachwasserwellen mit verbesserten Differenzenverfahren.* Dissertation, Univ. Hannover, 1985
- 22/1986 **Urban, C.** *Ein Finite-Element-Verfahren mit linearen Ansätzen für stationäre zweidimensionale Strömungen.* Dissertation, Univ. Hannover, 1986
- 23/1987 **Heyer, H.** *Die Beeinflussung der Tidedynamik in Ästuarien durch Steuerung – Ein Beitrag zur Anwendung von Optimierungsverfahren in der Wasserwirtschaft.* Dissertation, Univ. Hannover, 1987
- 24/1987 **Gärtner, S.** *Zur diskreten Approximation kontinuumsmechanischer Bilanzgleichungen.* Institutsbericht, davon 4 Abschnitte als Habilitationsschrift angenommen, Univ. Hannover, 1987
- 25/1988 **Rogalla, B.U.** *Zur statischen und dynamischen Berechnung geometrisch nichtlinearer Linientragwerke unter Strömungs- und Wellenlasten.* Dissertation, Univ. Hannover, 1988
- 26/1990 **Lang, G.** *Zur Schwebstoffdynamik von Trübungszonen in Ästuarien.* Dissertation, Univ. Hannover, 1990
- 27/1990 **Stittgen, M.** *Zur Fluid-Struktur-Wechselwirkung in flexiblen Offshore-Schlauchleitungen.* Dissertation, Univ. Hannover, 1990
- 28/1990 **Wollrath, J.** *Ein Strömungs- und Transportmodell für klüftiges Gestein und Untersuchungen zu homogenen Ersatzsystemen.* Dissertation, Univ. Hannover, 1990
- 29/1991 **Kröhn, K.-P.** *Simulation von Transportvorgängen im klüftigen Gestein mit der Methode der Finiten Elemente.* Dissertation, Univ. Hannover, 1991
- 30/1991 **Lehfeldt, R.** *Ein algebraisches Turbulenzmodell für Ästulare.* Dissertation, Univ. Hannover, 1991
- 31/1991 **Prüser, H.-H.** *Zur mathematischen Modellierung der Interaktion von Seegang und Strömung im flachen Wasser.* Dissertation, Univ. Hannover, 1991
- dito **Schröter, A.** *Das numerische Seegangmodell BOWAM2 1990 – Grundlagen und Verifikationen – .* Univ. Hannover, 1991
- 32/1992 **Leister, K.** *Anwendung numerischer Flachwassermodelle zur Bestimmung von Wasserlinien.* Dissertation, Univ. Hannover, 1992
- 33/1993 **Ramthun, B.** *Zur Druckstoßsicherung von Fernwärmenetzen und zur Dynamik von Abnehmeranlagen.* Dissertation, Univ. Hannover, 1993
- 34/1993 **Helmig, R.** *Theorie und Numerik der Mehrphasenströmungen in geklüftet-porösen Medien.* Dissertation, Univ. Hannover, 1993

- 35/1994 **Plüß, A.** *Netzbearbeitung und Verfahrensverbesserungen für Tidemodelle nach der Finiten Element Methode.* Dissertation, Univ. Hannover, 1994
- 36/1994 **Nöthel, H.** *Statistisch-numerische Beschreibung des Wellen- und Strömungsgeschehens in einem Bühnenfeld.* Dissertation, Univ. Hannover, 1994
- 37/1994 **Shao, H.** *Simulation von Strömungs- und Transportvorgängen in geklüfteten porösen Medien mit gekoppelten Finite-Element- und Rand-Element-Methoden.* Dissertation, Univ. Hannover, 1994
- 38/1994 **Stengel, T.** *Änderungen der Tidedynamik in der Deutschen Bucht und Auswirkungen eines Meeresspiegelanstiegs.* Dissertation, Univ. Hannover, 1994
- 39/1994 **Schubert, R.** *Ein Softwaresystem zur parallelen interaktiven Strömungssimulation und -visualisierung.* Dissertation, Univ. Hannover, 1994
- 40/1994 **Alm, W.** *Zur Gestaltung eines Informationssystems im Küsteningenieurwesen.* Dissertation, Univ. Hannover, 1994
- 41/1994 **Benali, H.** *Zur Kopplung von FEM- und CAD-Programmen im Bauwesen über neutrale Datenschnittstellen.* Dissertation, Univ. Hannover, 1994
- 42/1995 **Schröter, A.** *Nichtlineare zeitdiskrete Seegangssimulation im flachen und tieferen Wasser.* Dissertation, Univ. Hannover, 1995
- 43/1995 **Blase, Th.** *Ein systemtechnischer Ansatz zur Modellierung von Hydraulik, Stofftransport und reaktionskinetischen Prozessen in Kläranlagen.* Dissertation, Univ. Hannover, 1995
- 44/1995 **Malcherek, A.** *Mathematische Modellierung von Strömungen und Stofftransportprozessen in Ästuaren.* Dissertation, Univ. Hannover, 1995
- 45/1995 **Lege, T.** *Modellierung des Kluftgesteins als geologische Barriere für Deponien.* Dissertation, Univ. Hannover, 1995
- 46/1996 **Arnold, H.** *Simulation dammbruchinduzierter Flutwellen.* Dissertation, Univ. Hannover, 1996
- 47/1996 **Kolditz, O.** *Stoff- und Wärmetransport im Kluftgestein.* Habilitation, Univ. Hannover, 1996
- 48/1996 **Hunze, M.** *Numerische Modellierung reaktiver Strömungen in oberflächenbelüfteten Belebungsbecken.* Dissertation, Univ. Hannover, 1996
- 49/1996 **Wollschläger, A.** *Ein Random-Walk-Modell für Schwermetallpartikel in natürlichen Gewässern.* Dissertation, Univ. Hannover, 1996
- 50/1997 **Feist, M.** *Entwurf eines Modellierungssystems zur Simulation von Oberflächengewässern.* Dissertation, Univ. Hannover, 1997
- 51/1997 **Hinkelmann, R.** *Parallelisierung eines Lagrange-Euler-Verfahrens für Strömungs- und Stofftransportprozesse in Oberflächengewässern.* Dissertation, Univ. Hannover, 1997
- 52/1997 **Barlag, C.** *Adaptive Methoden zur Modellierung von Stofftransport im Kluftgestein.* Dissertation, Univ. Hannover, 1997
- 53/1997 **Saberi-Haghighi, K.** *Zur Ermittlung der verformungsabhängigen Windbelastung bei Hängedächern.* Dissertation, Univ. Hannover, 1997
- 54/1998 **Krüger, A.** *Physikalische Prozesse im Nachklärbecken – Modellbildung und Simulation.* Dissertation, Univ. Hannover, 1998
- 55/1998 **Wolters, A. H.** *Zur Modellierung des instationären thermohydraulischen Betriebsverhaltens von Fernwärmeanlagen.* Dissertation, Univ. Hannover, 1998

- 56/1999 **Jankowski, J. A.** *A non-hydrostatic model for free surface flows.* Dissertation, Univ. Hannover, 1999
- 57/1999 **Kopmann, R.** *Mehrdimensionale Effekte in dimensionsreduzierten Gewässergütemodellen.* Dissertation, Univ. Hannover, 1999
- 58/1999 **Kahlfeld, A.** *Numerische Seegangmodellierung als Bestandteil einer funktionellen Hafenplanung.* Dissertation, Univ. Hannover, 1999
- 59/1999 *Festschrift zum 60. Geburtstag von Prof. Dr.-Ing. Werner Zielke.* Univ. Hannover, 1999
- 60/2000 **Kolditz, O., Zielke, W., Wriggers, P., Dürbaum, H.-J., Wallner, M.** *3. Workshop Kluft-Aquifere - Gekoppelte Prozesse in Geosystemen.* Univ. Hannover, 2000
- 61/2001 **Malcherek, A.** *Hydromechanik der Fließgewässer.* Habilitation, Univ. Hannover, 2001
- 62/2001 **Thorenz, C.** *Model Adaptive Simulation of Multiphase and Density Driven Flow in Fractured and Porous Media.* Dissertation, Univ. Hannover, 2001
- 63/2001 **Kaiser, R.** *Gitteradaption für die Finite-Elemente-Modellierung gekoppelter Prozesse in geklüftet-porösen Medien.* Dissertation, Univ. Hannover, 2001
- 64/2001 **Rother, T.** *Geometric Modelling of Geo-Systems.* Dissertation, Univ. Hannover, 2001
- 65/2001 **Habbar, A.** *Direkte und inverse Modellierung reaktiver Transportprozesse in klüftig-porösen Medien.* Dissertation, Univ. Hannover, 2001