

Strömung in geklüftet porösen Medien

Dissertation

zur Erlangung des Doktorgrades
der Naturwissenschaften

vorgelegt beim Fachbereich 12
der Johann Wolfgang Goethe-Universität
in Frankfurt am Main

von

Sabine Stichel
aus Darmstadt

Frankfurt 2014

D30

vom Fachbereich 12 der

Johann Wolfgang Goethe-Universität als Dissertation angenommen.

Dekan: Prof. Dr. Thorsten Theobald

1. Gutachter: Prof. Dr. Gabriel Wittum
2. Gutachter: Prof. Dr. Alfio Grillo
3. Gutachter: Prof. Dr. Gillian Queisser

Datum der Disputation: 22.09.2014

STRÖMUNG IN GEKLÜFTET PORÖSEN MEDIEN

Abstrakt

Die Simulation von Strömung in geklüftet porösen Medien ist von entscheidender Bedeutung in Hinblick auf viele hydrogeologische Anwendungsgebiete, wie beispielsweise der Vorbeugung einer Grundwasserverschmutzung in der Nähe einer Mülldeponie oder einer Endlagerstätte für radioaktive Abfälle, der Förderung fossiler Brennstoffe oder der unterirdischen Speicherung von Kohlendioxid. Aufgrund ihrer Beschaffenheit und insbesondere der großen Permeabilität innerhalb der Klüfte, stellen diese bevorzugte Transportwege dar und können das Strömungsprofil entscheidend beeinflussen. Allerdings stellt die anisotrope Geometrie der Klüfte in Zusammenhang mit den enormen Sprüngen in Parametern wie der Permeabilität auf kleinstem Raum große Anforderungen an die numerischen Verfahren.

Deswegen werden in dieser Arbeit zwei Ansätze zur Modellierung der Klüfte verfolgt. Ein niederdimensionaler Ansatz motiviert durch die anisotrope Geometrie mit sehr geringer Öffnungsweite und sehr langer Erstreckung der Klüfte und ein volldimensionaler Ansatz, der alle Vorgänge innerhalb der Kluft auflöst. Es werden die Ergebnisse dieser Ansätze für Benchmark-Probleme untersucht, mit dem Ergebnis, dass nur bei sehr dünnen Klüften der numerisch günstigere niederdimensionale Ansatz zufriedenstellende Ergebnisse liefert. Weiterhin wird ein Kriterium eingeführt, dass während der Laufzeit anhand von Eigenschaften der Kluft und Strömungsparametern angibt, ob der niederdimensionale Ansatz ausreichende Gültigkeit besitzt. Es wird ein dimensionsadaptiver Ansatz präsentiert, der dann entsprechend dieses Kriteriums einen Wechsel zum volldimensionalen Modell durchführt. Die Ergebnisse zeigen, dass so wesentlich genauere Ergebnisse erzielt werden können, ohne dass eine volle Auflösung in jedem Fall und über den gesamten Rechenzeitraum erforderlich ist.

Stichworte

Dichte-getriebene Strömung, poröses Medium, Kluft, Dimensions-Adaptivität

Danksagung

Diese Arbeit entstand während meiner Tätigkeit als wissenschaftliche Mitarbeiterin am Goethe-Zentrum für Wissenschaftliches Rechnen (G-CSC) der Universität Frankfurt. Ohne die Unterstützung vieler Personen wäre diese Arbeit nicht möglich gewesen:

Zuallererst möchte ich mich bei meinem Doktorvater, Prof. Dr. Gabriel Wittum, bedanken, der mir die Gelegenheit zur Promotion gegeben hat und mich stets unterstützt hat.

Ganz besonders bedanke ich mich bei meinen Kollegen Dr. Dmitrij Logashenko, Dr. Alfio Grillo und Sebastian Reiter. Mit ihnen habe ich während der gesamten Zeit sehr eng zusammengearbeitet, und das obwohl geographisch große Strecken zu überwinden waren. Ohne diese drei wäre vieles nicht möglich gewesen. Zahlreiche Diskussionen, gemeinsame Projekte und jede Menge hilfreiche Ratschläge haben mir großen Spaß und großen Fortschritt gebracht. Insbesondere möchte ich Dmitrij für die Unterstützung bei sämtlichen technischen Fragen danken, Alfio für die langen, fruchtbaren Diskussionen und Sebastian für die Erstellung der Software zur Geometrie-Erzeugung.

Von ganzem Herzen bedanke ich mich auch bei Dr. Ivo Muha, der mir bei jeglicher Art von Problemen zur Seite stand, immer für Diskussionen und Anregungen offen war und mich immer unterstützt hat.

Weiterhin möchte ich mich bei allen (aktuellen und ehemaligen) Mitarbeitern des G-CSC für die Zusammenarbeit bedanken. Vor allem sind hierbei noch Dr. Arne Nägel, Andreas Vogel und Dr. Michael Lampe zu nennen, die mir vielfach mit fachlichem Wissen zur Seite standen.

Schließlich gilt mein Dank dem Bundesministerium für Wirtschaft und Technologie für die Finanzierung dieser Arbeit im Rahmen des A-Dur Projektes (Förderkennzeichen 02E10568).

Inhaltsverzeichnis

1	Einleitung	1
2	Modell	6
2.1	Hydrogeologischer Hintergrund	6
2.1.1	Grundwasser	6
2.1.2	Poröse Medien	7
2.1.3	Klüfte	7
2.1.4	Transportvorgänge im Grundwasser	9
2.2	Strömungsmodell	10
2.2.1	Thermohaline Strömung	10
2.2.2	Forchheimer Korrektur	13
2.2.3	Niederdimensionales Modell	17
2.2.4	Anfangs- und Randbedingungen	21
3	Numerik	24
3.1	Diskretisierung	24
3.1.1	Zeit-Diskretisierung	24
3.1.2	Finite-Volumen-Verfahren	25
3.2	Lösungsverfahren	29
3.2.1	Nichtlineare Gleichungssysteme: Newton-Verfahren	30
3.2.2	Lineare Gleichungssysteme: Klassische iterative Verfahren	31
3.2.3	Lineare Gleichungssysteme: Mehrgitterverfahren	33
3.2.4	Lineare Gleichungssysteme: Krylow-Unterraum-Verfahren	36
4	Problemangepasste Anwendung der Numerik	39
4.1	d -dimensionaler Ansatz	39
4.2	$(d - 1)$ -dimensionaler Ansatz	41
4.3	Dimensions-Adaptivität	45
4.3.1	Dimensions-adaptives Mehrgitterverfahren	45
4.3.2	Dimensions-adaptives Gitter	48
5	Software	50
5.1	UG	50
5.1.1	Allgemeines	50
5.1.2	Niederdimensionale Elemente	51
5.1.3	Spezielle Verfeinerung für Kluftelemente	54
5.2	d^3f	55
5.2.1	Allgemeines	57
5.2.2	Erweiterung von $d^{\beta}f$ für geklüftete Medien	57
5.2.3	Gittertransfer in $d^{\beta}f$	60
5.3	Gitter-Erzeugung	64

5.3.1	Grundlegendes für die Gitter-Erzeugung	65
5.3.2	Blender	66
5.3.3	ProMesh	67
6	Auswahl und Analyse von Benchmark-Problemen	69
6.1	Geklüftetes Henry-Problem	69
6.1.1	Einfluss der geometrischen Lage der Kluft	70
6.1.2	Einfluss der Kluft-Dicke	72
6.1.3	Wirbelbildung	74
6.1.4	Einfluss der Forchheimer-Korrektur	76
6.2	Geklüftetes Henry-Problem in 3D	78
6.2.1	Wirbelbildung	79
6.3	Geklüftetes Elder-Problem	82
7	Gültigkeit des $(d - 1)$-dimensionalen Modells	87
7.1	Vergleich zwischen d - und $(d - 1)$ -dimensionalem Modell	87
7.1.1	Geklüftetes Henry-Problem	87
7.1.2	Geklüftetes Henry-Problem in 3D	93
7.1.3	Geklüftetes Elder-Problem	95
7.2	Bedingung für die Gültigkeit des $(d - 1)$ -dimensionalen Modells	97
7.2.1	Aufstellung eines Kriteriums	97
7.2.2	Untersuchung des Gittertransfers mit Hilfe des aufgestellten Kriteriums	100
7.2.3	Validierung des aufgestellten Kriteriums	105
8	Diskussion	112

1 Einleitung

Aufgrund ihrer elementaren Bedeutung für unser Überleben, ist die Frage nach sauberem Trinkwasser stets von enormem Interesse. Obwohl ca. 70% der Erdoberfläche mit Wasser bedeckt ist, sind nur 2.53% des globalen Wasservorrats Süßwasser und für die Trinkwasserversorgung geeignet. Davon sind zusätzlich rund zwei Drittel in den polaren Eiskappen und Gletschern fest gebunden und deswegen nicht nutzbar ([Hölting, 1996]). Aus diesem Grund spielt das Grundwasser, das Wasser unter der Erdoberfläche, eine so bedeutende Rolle für die Trinkwasserversorgung überall auf der Welt. So wird z.B. in Deutschland 72% des Trinkwassers durch Grundwasser gestellt, in Österreich sind es sogar 99% ([Schmoll et al., 2006]).

Wegen ihrer umfangreichen Grundwasservorkommen und deren günstigen Erschließungsmöglichkeiten, sind momentan vor allem Lockergesteine, wie z.B. Sand und Kies, von wichtiger wirtschaftlicher Bedeutung. Während diese z.B. im norddeutschen Flachland weit verbreitet sind, werden jedoch in der gesamten Bundesrepublik Deutschland 53,4% des Landes, also mehr als die Hälfte, durch Festgesteine, wie z.B. Tonschiefer, Kalkstein und Sandstein, eingenommen, in Hessen sind es sogar ca. 85% ([Hölting, 1996]). In solchen Festgesteinen bilden (Trenn-)Fugen, sogenannte Klüfte, die hydraulisch wirksamen Räume.

Solche geklüfteten Gesteine stehen heutzutage in Hinblick auf verschiedene Anwendungsgebiete mehr denn je im Mittelpunkt des Interesses, dazu zählen (vgl. u.a. [Berkowitz, 2002]):

- die Nutzung als nachhaltige Grundwasserressource in Hinblick auf die Trinkwasserversorgung,
- die Migration gelöster Schadstoffe durch geologische Schichten,
- die Förderung von fossilen Brennstoffen, z.B. die Ausbeutung von Erdöl- und Erdgaslagerstätten,
- die Nutzung als Energiespeicher und Wärmequelle (geothermische Energie),
- die Nutzung als Deponieraum oder als Endlager für gefährliche (nukleare und toxische) Abfälle,
- die Ablagerung von Kohlendioxid durch Verpressung in unterirdische Speicher oder entleerte Erdölreservoirs.

In allen Fällen ist es wichtig die Fluidbewegung (Wasser oder Kohlenstoff) in geklüfteten Medien erfassen zu können. Dabei werden die Strömungs- und Transportverhältnisse in Kluftgrundwasserleitern auf der einen Seite durch eine meist gut durchlässige Kluft und auf der anderen Seite durch eine meist entscheidend weniger durchlässige Gesteinsmatrix bestimmt, die so oft als Speicher fungiert. Demnach wird durch das Vorhandensein von Klüften die Permeabilität des Gesamtgesteins deutlich erhöht und gleichzeitig eine Strömung von Flüssigkeit und damit u.a. auch ein Transport von Schadstoffen über weite Strecken und mit relativ hoher Geschwindigkeit ermöglicht.

Wie auch in vielen anderen Bereichen, hat das wissenschaftliche Rechnen auch in diesem Anwendungsgebiet stark an Bedeutung gewonnen. Dabei geht es darum eine Situation oder einen

ablaufenden Prozess zu simulieren. Dies kann Experimente ersetzen, die sich als zu aufwendig oder auch unmöglich darstellen auf Grund ihrer Größe (zu klein, zu groß), der Schnelligkeit oder Dauer des Prozessablaufs (zu schnell, zu langsam, zu langer Zeitraum) oder weil manche Experimente gar zu gefährlich oder zu teuer wären. In solchen Fällen wird zuallererst ein Modell erstellt, das den Prozess beschreibt. Dazu müssen Vereinfachungen vorgenommen werden. Die Schwierigkeit hierbei liegt darin, das Modell ausreichend weit zu vereinfachen um es in einer lösbaren Form vorliegen zu haben, ohne dabei zu viele Informationen zu verlieren. Das Modell wird dann mithilfe einer mathematischen Formulierung, die in der Regel aus Differentialgleichungen besteht, beschrieben. Da diese Gleichungen in der Regel nicht analytisch zu lösen sind, werden sie mithilfe der Numerik und Informatik in ein Computerprogramm übertragen und damit gelöst. Die Lösung ist dann das simulierte Verhalten des Prozesses.

Während die Modellierung und Simulation von Strömungs- und Transportprozessen in porösen Medien an sich schon die Kombination vieler effizienter Techniken des wissenschaftlichen Rechnens benötigt, wird durch die Klüfte noch ein zusätzlicher Schwierigkeitsgrad eingeführt: Zum einen durch ihre sehr anisotrope Geometrie - sie sind in der Regel nur einige Millimeter oder Zentimeter dick, können sich aber über Kilometer erstrecken, zum anderen durch die in den Klüften meist um Größenordnungen höhere Permeabilität, die zu drastischen Änderungen der Strömungsverhältnisse auf sehr kleinem Raum führt. Sie numerisch zu handhaben ist eine große Herausforderung und aufgrund ihres großen Einflusses und der wesentlichen Bedeutung für aktuelle Probleme, gibt es vielzählige Arbeiten, die sich mit der Behandlung von geklüftet porösen Medien beschäftigen, von denen hier nur einige beispielhaft erwähnt werden sollen.

Die Strömungs- und Transportprozesse in geklüfteten Medien spielen sich auf sehr unterschiedlichen räumlichen und zeitlichen Skalen ab: von einzelnen Porenräumen und Mikroklüften auf der Mikroskala, über Einzelklüfte ($\mu m - mm$) und Kluftnetzwerke ($mm - m$) bis hin zu Aquiferstrukturen ($100m - km$) und Reservoirien (mehrere km) (vgl. [Neunhäuserer, 2003, Kobus et al., 1996]). Darauf aufbauend ergeben sich unterschiedliche Modellansätze, je nachdem, an welcher Skala der Betrachter interessiert ist. So werden subskalige Heterogenitäten wie kleine Kluftsysteme mithilfe von Homogenisierung in effektive Modelle überführt. Dies können entweder Einkontinuum-Modelle sein (vgl. u.a. [Long et al., 1982]), in denen das gesamte Gestein durch einen Block repräsentiert wird, oder Zwei- oder Mehrkontinuum-Modelle (vgl. u.a. [Barenblatt et al., 1960], [Warren und Root, 1963], [Douglas und Arbogast, 1990]), in denen beispielsweise Klüfte und angrenzende Gesteinsmatrizen jeweils ein Kontinuum bilden. Heterogenitäten in der Größenordnung der Modellskala, wie die großen und dominanten Kluftnetzwerke, müssen explizit modelliert werden (vgl. z.B. [Kolditz, 1997]). Weiterhin existieren Ansätze, die diskrete Kluftnetzwerke betrachten und dabei die Gesteinsmatrix ignorieren (vgl. u.a. [Schwartz et al., 1983], [Smith und Schwartz, 1984], [Cacas et al., 1990]). [Therrien und Sudicky, 1996] zeigten jedoch, dass Strömung und Transport entweder durch die Vorgänge in den Klüften oder durch die Vorgänge in der Gesteinsmatrix kontrolliert sein können und dass deshalb eine explizite und gekoppelte Beschreibung der Prozesse in beiden Gebieten notwendig ist. Weiterhin ist auch eine Modellierung als diskrete linienartige Kluft oder als Kluftnetzwerk, das sich aus verschiedenen häufig stochastisch generierten Kluftebenen zusammensetzt, in Gebrauch (vgl. u.a. [Bogdanov et al., 2003], [Neumann, 2005], [Adler und Thovert, 1999]).

Der Fokus dieser Arbeit liegt nun auf der expliziten Betrachtung der Strömung in einer Einzelkluft gekoppelt mit der Strömung im umgebenden Medium. Obwohl es einige wenige Benchmark-Probleme gibt, die eine analytische oder semi-analytische Lösung erlauben (vgl. z.B. [Tang et al., 1981]), müssen für die Untersuchung von mehr realistischen Problemen geeignete mathematische Modellformulierungen und spezielle numerische Verfahren entwickelt werden, für deren Validierung aussagekräftige Benchmark-Probleme, wie sie u.a. in [Diersch und Kolditz, 2005] zu finden sind, benötigt werden.

Es werden dabei verschiedene physikalische Aspekte, wie die Stabilität der Strömung (vgl. [Murphy, 1979], [Graf und Therrier, 2009]), der Einfluss der Heterogenität auf die Dichte-getriebene Strömung in Schichten mit kleiner Permeabilität (vgl. [Sharp und Shi, 2009]), Dichte-abhängige Strömung in diskontinuierlichen diskreten Klüften (vgl. [Graf und Therrier, 2005], [Graf und Therrier, 2007], [Shikaze et al., 1998]), und das Zusammenspiel zwischen Diffusion und Konvektion in geklüfteten Medien (vgl. [Grisak und Pickens, 1980], [Grisak und Pickens, 1981]) untersucht. Ebenso werden numerische Faktoren, wie beispielsweise die Gitterkonvergenz bei der Betrachtung von Dichte-abhängiger Strömung in diskret geklüfteten Medien untersucht (vgl. [Graf und Degener, 2011]).

Aufgrund der Kluftgeometrie mit ihrer großen Anisotropie scheint eine Betrachtung, bei der Klüfte als Objekte niederer Dimensionalität behandelt werden, naheliegend (vgl. z.B. [Reichenberger et al., 2006], [Hoteit und Firoozabadi, 2008], [Simmons et al., 2001], [Shikaze et al., 1998], [Graf und Therrier, 2007]). Klüfte können dabei beispielsweise als Interface zwischen zwei porösen Medien aufgefasst werden, wobei das Gitter so passend sein kann, dass die Gitterknoten der Kluft und des Mediums exakt übereinstimmen (vgl. z.B. [Martin et al., 2005], [Froh et al., 2008]), oder das Gitter auf dem Interface unabhängig von dem restlichen Gitter ist (vgl. [D'Angelo und Scotti, 2012], [Fumagalli und Scotti, 2011], [Fumagalli und Scotti, 2012]). Andere Modellansätze lassen die Klüfte und die darauf gültigen Gleichungen durch eine Mittelung entlang der Vertikalen entstehen (vgl. [Grillo et al., 2010b], [Angot et al., 2009], [Martinez-Landa und Carrera, 2006], [Sorek et al., 2001]). Dieser letzte Ansatz soll auch in dieser Arbeit verfolgt werden.

Obwohl die Behandlung der Klüfte als niederdimensionale Objekte naheliegend und sehr effektiv ist, bleibt stets die Frage, inwieweit die Gültigkeit eines solchen Ansatzes im Vergleich zur aufwändigeren volldimensionalen Behandlung angenommen werden kann. Vergleiche zwischen voll- und niederdimensionaler Kluftmodellierung wurden bereits in [Neunhäuserer, 2003] unternommen und zeigten insbesondere bei langsamen Systemen mit einer Klüftung quer zur Hauptströmungsrichtung deutliche Auswirkungen des volldimensionalen Ansatzes auf die approximierten Lösungen. Allerdings erlaubt dort der niederdimensionale Ansatz keine Freiheitsgrade innerhalb der Kluft und ein vertikaler Gradient in der Kluft wird vernachlässigt, wodurch am Interface zwischen Kluft und Medium keine Flusserhaltung gewährleistet werden kann.

In der hier vorliegenden Arbeit soll dieser Aspekt nun genauer untersucht werden. Dazu werden zwei verschiedene Modellansätze zur Grundlage genommen. Bei dem einen Ansatz hat die Kluft die gleiche geometrische Dimension wie das sie umgebende Medium und wird im folgenden als *d-dimensional* Ansatz bezeichnet, wobei $d = 2$ in 2D und $d = 3$ in 3D ist. Im zweiten Ansatz wird die Kluft durch eine $(d - 1)$ -dimensionale Hyperfläche approximiert und

er wird deswegen als $(d - 1)$ -dimensional bezeichnet. Dabei wird zunächst angenommen, dass die Kluft, genauso wie das sie umgebende Medium durch ein poröses Medium charakterisiert werden kann. Die Kluft ist also gefüllt und es finden die gleichen Transportvorgänge statt, die jedoch durch unterschiedliche Stoffeigenschaften, insbesondere eine deutlich höhere Permeabilität in der Kluft gekennzeichnet sind. Die Modellgleichungen für diesen Ansatz entstehen durch eine Mittelung des vollen Modells über die Kluftdicke (vgl. [Grillo et al., 2010b]). Das volldimensionale Modell liefert eine genauere Lösung und seine Gültigkeit ist allgemein anerkannt, da es vielfach in Simulationen ohne Klüfte eingesetzt wird (vgl. z.B. [Johannsen et al., 2002], [Johannsen et al., 2006]). Allerdings ist der numerische Aufwand, der geleistet werden muss, deutlich größer: Zum einen sind die Rechengitter komplexer und enthalten mehr Freiheitsgrade, zum anderen muss aufgrund der ungünstigen Geometrie einer Kluft, charakterisiert durch ihre geringe Dicke und ihre enorme Länge, mit Schwierigkeiten des numerischen Lösers gerechnet werden. Diese können zwar durch eine genauere Auflösung überwunden werden, welche jedoch zu einem enormen Anstieg an Speicherbedarf und Rechenzeit führt. Auf der anderen Seite steht das niederdimensionale Modell, das deutlich weniger numerischen Aufwand benötigt, bei dem jedoch durch die niederdimensionale Approximation Informationen verloren gehen.

In dieser Arbeit soll nun untersucht werden, inwieweit das niederdimensionale Modell als gute Approximation des volldimensionalen Modells angesehen werden kann und unter welchen Umständen eine volldimensionale Betrachtung der Klüfte erforderlich ist um das Fließverhalten richtig wiederzugeben und zu verstehen. Gleichzeitig werden numerische Verfahren eingeführt, die den Aufwand bei der Benutzung des volldimensionalen Modells reduzieren sollen. Dabei soll eine Dimensions-Adaptivität eingesetzt werden, die die Genauigkeit des volldimensionalen Modells beibehält, jedoch an bestimmten Stellen auf die niederdimensionale Approximation zurückgreift und so Rechenzeit einspart. Um die Gültigkeit des niederdimensionalen Ansatzes zu untersuchen, werden die Ergebnisse aus Simulationen mit beiden Modellen miteinander verglichen und die gemachte Abweichung evaluiert. Auf diesen Erkenntnissen aufbauend, wird ein Kriterium eingeführt, das die Gültigkeit des niederdimensionalen Modells abhängig von durch das Problem gegebenen (gesteinsspezifischen) Parametern und den aktuellen Strömungsverhältnissen in der Kluft angibt. Dieses Kriterium wird dann anhand von vielfältigen Testrechnungen validiert.

Die Arbeit ist dabei folgendermaßen aufgebaut: In Kapitel 2 wird zunächst eine kurze Erläuterung des hydrogeologischen Hintergrunds gegeben und die wichtigsten Begriffe eingeführt. Im folgenden werden die Modellgleichungen, sowohl des voll- als auch des niederdimensionalen Modells, erläutert, außerdem wird das Modell um eine Forchheimer-Korrektur erweitert um auch größeren Geschwindigkeiten in den Klüften gerecht werden zu können. Kapitel 3 und 4 stellen die numerischen Verfahren vor, die zur Lösung der Modellgleichungen benötigt werden. Dabei gibt Kapitel 3 einen Überblick über die verwendeten bekannten Verfahren und Kapitel 4 zeigt die Anwendung auf das hier vorgestellte Problem und führt neue Verfahren ein, die eine dimensionsadaptive Handhabung der Klüfte ermöglichen. In Kapitel 5 wird dann die Software vorgestellt, die zur Lösung des Problems verwendet wird. Dabei wird jeweils zunächst ein Überblick über die bereits vorhandene Struktur gegeben und dann die für diese Arbeit geleisteten Erweiterungen erläutert.

In Kapitel 6 werden Benchmark-Probleme eingeführt und es wird dabei untersucht, welchen Einfluss die Klüfte abhängig von verschiedenen Parametern auf das Strömungsverhalten haben. Die Hauptergebnisse dieser Arbeit werden in Kapitel 7 vorgestellt. Hier werden zunächst die Vergleiche zwischen voll- und niederdimensionalen Modellen evaluiert und dann wird aufbauend auf den gemachten Erkenntnissen das Kriterium für die Gültigkeit des niederdimensionalen Modells eingeführt und anhand von Testrechnungen validiert. Kapitel 8 schließt die Arbeit mit einer kurzen Zusammenfassung und Diskussion.

2 Modell

In diesem Kapitel soll zunächst der hydrogeologische Hintergrund etwas genauer erklärt und die entscheidenden Begriffe und Aspekte eines geklüfteten porösen Grundwasserleiters erläutert werden. Im nächsten Schritt, in Abschnitt 2.2, werden dann die Modellgleichungen eingeführt, die die Strömung und den Transport beschreiben.

2.1 Hydrogeologischer Hintergrund

Die *Hydrogeologie*, als Teilgebiet der Geologie, beschäftigt sich mit dem Grundwasser und den Faktoren, die Einfluss auf das Grundwasser haben. Zu den wesentlichen Aufgabengebieten gehören die Erkundung und Absicherung von Grundwasservorräten, die Ermittlung von Grundwasserneubildung, das Grundwassermanagement, die Sanierung von Grundwasserkontamination und nicht zuletzt auch die Modellierung von Grundwasserströmung und Transport im Grundwasser. Die nachfolgenden Abschnitte sind eine unvollständige Zusammenfassung der entscheidenden Passagen der Grundlagenwerke [Höiting, 1996],[Busch et al., 1993] und [Bear, 1979]. In diesen können auch weitergehende Informationen nachgeschlagen werden.

2.1.1 Grundwasser

Unterirdisches Wasser ist alles Wasser unterhalb der Erdoberfläche, wobei man zwischen zwei Bereichen unterscheidet. Der unmittelbar unterhalb der Erdoberfläche beginnende Bereich oberhalb des Grundwasserspiegels enthält in seinen Hohlräumen sowohl Luft als auch Wasser und wird deshalb als *ungesättigte* Zone bezeichnet. Der sich daran anschließende Bereich, in dem ausnahmslos alle zusammenhängenden Hohlräume mit Wasser gefüllt sind, nimmt die *gesättigte* Zone ein. Als *Grundwasser* wird das Wasser in der gesättigten Zone bezeichnet.

Ein *Grundwasserleiter* oder *Aquifer* (aus dem Lateinischen: aqua = Wasser; ferra = tragend) ist ein Gesteinskörper, in dem sich Grundwasser aufhält. In der Regel wird er durch einen weiteren, wasserundurchlässigen Gesteinskörper (z.B. Ton) begrenzt. Liegt die Grundwasseroberfläche innerhalb des Grundwasserleiters, so spricht man von einem *ungespannten* oder *freien* Grundwasserleiter. Andernfalls, bei einem *gespannten* Grundwasserleiter, kann das Grundwasser, z.B. bei Abdeckung durch eine undurchlässige Schicht, nicht so hoch steigen, wie es seinem hydrostatischen Druck entsprechen würde.

Man unterscheidet zwischen *Poren-, Kluft- und Karst-Grundwasserleitern*. Im ersten Fall handelt es sich um feinkörnige Sedimente, deren Porenraum durch die Zwischenräume zwischen den Körnern gebildet wird, wie es z.B. bei Kies, Sand oder Sandstein der Fall ist. In kompakten Gesteinen, wie z.B. Granit, kann das Wasser nur in (mikroskopischen) Rissen effektiv zirkulieren, man spricht von *Kluft-Grundwasserleitern*. *Karst-Grundwasserleiter*, wo das Wasser in größeren Hohlräumen (Kavitäten) fließen kann, kommen vor allem in Kalkgesteinen vor und sind eher selten anzutreffen.

2.1.2 Poröse Medien

Ein Gesteinskörper kann als ein *poröses Medium* aufgefasst werden. Dieses ist ein Körper, der aus mehreren Phasen besteht, wobei die feste Phase als Feststoff-Matrix bezeichnet wird. Die übrigen Phasen, also Flüssigkeiten oder Gase, bilden den Porenraum. Charakterisiert wird ein poröses Medium durch seine *Porosität* ϕ . Diese dimensionslose skalare Größe stellt das Verhältnis von Hohlraumvolumen zu Gesamtvolumen dar.

Um nicht die komplette Porenskala auflösen zu müssen, bietet für hinreichend große Untersuchungsgebiete der Kontinuumansatz eine geeignete Approximation, indem die Homogenisierbarkeit des Gesteins vorausgesetzt wird und so mittlere Parameterwerte, z.B. für die Porosität, benutzt werden können. In diesem Zusammenhang soll auch der Begriff des *REV* (engl.: representative elementary volume) erwähnt werden. Dieses ist das kleinste Volumen, das als repräsentativ für das poröse Medium angesehen werden kann. Es muss zum einen groß sein im Vergleich zu charakteristischen Abmessungen der Heterogenitäten des Untergrunds (z.B. der Porengröße), so dass Fluktuationen mikroskopischer Größen vernachlässigbar sind. Zum anderen muss es aber auch klein sein im Vergleich zu charakteristischen Abmessungen des Betrachtungsgebiets, so dass lokale Variabilitäten der makroskopischen Größen erfassbar sind. Die Bestimmung eines REV kann sehr schwer sein, manchmal ist sie sogar unmöglich, insbesondere, wenn das Medium stark geklüftet ist (siehe 2.1.3 und vgl. auch [Kröhn, 1991]).

Neben der Porosität ist auch die *Permeabilität* K eine vom Material abhängige gesteinspezifische Größe. Sie beschreibt das hydraulische Vermögen, Grundwasser zu leiten, also die "Durchlässigkeit" des Materials. Über die Höhe der Durchlässigkeit entscheiden Größe, Form und Konnektivität der Hohlräume (vgl. [Busch et al., 1993]) und sie ist unabhängig von den Fluideigenschaften des die Poren füllenden Mediums. Weiterhin wird die *Tortuosität* T zur Beschreibung der Eigenschaften poröser Materialien benötigt. Sie gibt den Grad der Gewundenheit der Transportwege in den Poren an und ist definiert als das quadrierte Verhältnis $T = (\frac{l_e}{l})^2 > 1$ der effektiven Weglänge l_e in den Poren zum kürzesten Abstand l im porösen Medium ([Gratwohl, 1998]).

Ein poröses Medium wird als *homogen* in Bezug auf eine Größe (Porosität, Permeabilität, ...) bezeichnet, wenn diese unabhängig von ihrer Position ist. Ist dies nicht der Fall, spricht man von einem *heterogenen* Medium. Ein poröses Medium ist *isotrop* in Bezug auf eine tensorielle Größe, wenn diese unabhängig von der Richtung ist, ansonsten ist es *anisotrop*. Anisotropie und Heterogenität können vor allem auch durch Klüfte hervorgerufen werden.

2.1.3 Klüfte

Klüfte sind sekundäre Hohlräume, d.h. sie sind später entstanden als das sie umgebende Gestein. Sie treten nahezu in allen Gesteinen auf und können als feine Trennflächen im Gestein beschrieben werden. Ursachen für die Klüftbildung können sein (vgl. z.B. [Kolditz, 1997],[Hölting, 1996]):

- geologisch: unterschiedliche Sedimentation (Ablagerung), wodurch Schicht- und Bankungsfugen entstehen, oder Erosion (Abtragung z.B. durch Fließgewässer)

- tektonisch: Zerrung, Verwerfung, Schieferung, Zerbrechen von Gesteinsschichten
- vulkanisch: bei Vulkaniten durch Abkühlung entstandene Klüfte
- chemisch: durch Lösungen entstandene Klüfte (Lösungsfugen), (chemische) Verwitterung
- thermophysikalisch: Absonderung (innere Zergliederung), (physikalische) Verwitterung

Dabei ist die hier benutzte Aufteilung nicht eindeutig, da z.B. die Schieferung auch auf die Absonderung zurückzuführen ist.

Klüfte werden charakterisiert durch ihre Größe, Dichte, Orientierung, Dicke und durch die Konnektivität zueinander ([National Research Council, 1996]). Der letzte Punkt ist insbesondere deswegen wichtig, weil auch Gebiete, die sehr geklüftet wirken, nicht unbedingt sehr durchlässig sein müssen, wenn die Klüfte nicht gut verbunden sind. Die Größenordnung von Klüften variiert dabei über viele Längen von Klüften im Mikrobereich bis hin zu über weite Entfernungen durchhaltenden systematischen Hauptklüften. Oftmals enthalten die Gesteine wenige Hauptklüfte, einige kleinere Klüfte mit oft geringem Abstand und viele sehr kleine Hintergrundklüfte. Trotz ihrer häufigen Erstreckung über Kilometer, sind Klüfte meist nur Millimeter oder Zentimeter dick.

Klüfte sind häufig in bestimmte Richtungen angeordnet, den Kluft- oder Störungszonen, die Ausdruck der richtungsgebundenen tektonischen Beanspruchung sind. Quer zur Hauptrichtung treten Neben- oder Querklüfte auf. Diese sind meist kürzer und klaffen weniger.

Man unterscheidet systematische Klüfte, die eine ungefähr planare Geometrie haben, relativ lang und regulär verteilt sind (typischerweise fast parallel in gleichmäßigen Abständen), und unsystematische. Letztere sind gewöhnlich kurz, gekrümmt und ungleichmäßig angeordnet. Unsystematische Klüfte treffen aufeinander, aber schneiden keine anderen Klüfte, sondern hören dann auf und enden normalerweise gegen systematische Klüfte.

Die Klüfte können dabei entweder offen sein oder sie sind gefüllt durch Mineralisationen bzw. Erosionsmaterial (z.B. feinsandige Tone, sog. Kluftletten). Bei offenen Klüften wird die Grundwasserströmung durch die Öffnungsweite der Klüfte und die Beschaffenheit (Rauheit) der Kluftwandung bestimmt. Bei gefüllten Klüften hängt die Strömung von der Kornverteilung und der Porosität des Füllmaterials ab, hier ist die Kluft selbst auch wieder ein poröses Medium.

Zur experimentellen Bestimmung der Klüftungsverhältnisse im Untergrund gibt es verschiedene Ansätze (vgl. [Berkowitz, 2002]). Am einfachsten werden an Aufschlüssen, also an Stellen, wo der unverhüllte Gesteinsuntergrund zu Tage tritt, wie z.B. in Steinbrüchen oder an Steilufern, Klaffweiten und Kluftabstände gemessen, um so Verteilungen angeben zu können. Es werden aber auch Bohrkerne auf Klüftungscharakteristika durchbohrter Gesteinsabfolgen ausgewertet. Desweiteren wird auch versucht, Klüfte durch geophysikalische Messungen mit hydraulischen Tests und Tracer Tests im Bohrloch selbst zu identifizieren und zu quantifizieren. Neben dem Problem, dass in der Regel nur die Größenordnung eines Wertes bestimmt werden kann, ist vor allem eine mögliche räumliche Abweichung schwierig zu bestimmen. Die Frage nach der Repräsentativität der gemessenen Werte für das Umfeld bleibt offen und es können nur Vermutungen angestellt werden. In den meisten Fällen werden dann um die Kluftparameter zu beschreiben Wahrscheinlichkeitsverteilungen angegeben, die auf solchen Messungen beruhen.

Laut [Dietrich et al., 2005] bestehen 53,4% der deutschen und 75% der weltweiten Erdoberfläche aus Kluft- und Karstaquiferen. In Hinblick auf Grundwassererschließungen und den Schutz des Grundwassers ist es also von entscheidender Bedeutung Kenntnisse über geklüftetes Gestein zu besitzen. Die Bedeutung der Klüfte liegt dabei vor allem darin, dass sie durch starke Unterschiede in den Materialeigenschaften Diskontinuitäten im Felsgestein darstellen und die um Größenordnungen höhere Permeabilität sie zu bevorzugten Transportwegen macht. Außerdem spielen sie eine entscheidende Rolle in Hinblick auf Migration und Anreicherung.

2.1.4 Transportvorgänge im Grundwasser

Neben der reinen Strömung des Grundwassers ist es vor allem wichtig die Transportvorgänge zu kennen um z.B. eine Aussage über Schadstoffausbreitung machen zu können. In diesem Abschnitt werden nun kurz die wesentlichen Transportvorgänge beschrieben. Nähere Informationen können den Werken [Kinzelbach und Rausch, 1995], [Langguth und Voigt, 2004] entnommen werden; eine detaillierte mathematisch-physikalische Herleitung der Prozesse ist in [Bear, 1972], [Bear, 1979] zu finden.

Advektion Als Advektion wird der Transport im Wasser gelöster Stoffe mit der Strömung des Grundwassers bezeichnet. Die Advektion wird beeinflusst durch die Beschaffenheit des porösen Mediums, da sie nur entlang verbundener Porenräume stattfinden kann. Deswegen findet der Transport mit der Abstandsgeschwindigkeit statt, welche angibt mit welcher mittleren Geschwindigkeit ein Teilchen eine Wegstrecke durchläuft, wobei die Wegstrecke die direkte Verbindung zwischen zwei Punkten ist, die tatsächliche Weglänge jedoch in der Regel deutlich länger ist.

Molekulare Diffusion Die molekulare Diffusion beschreibt einen Konzentrationsausgleichenden Durchmischungs-Vorgang. Dieser beruht auf der Brownschen Molekularbewegung und führt in abgeschlossenen Systemen ohne äußere Kräfte zur vollständigen Durchmischung. Die molekulare Diffusion wird üblicherweise durch die Fick'schen Gesetze beschrieben.

Die Diffusion ist ebenso wie die Advektion abhängig von der Beschaffenheit des porösen Mediums, die die Länge des Fließweges beeinflusst. Deswegen wird die molekulare Diffusionskonstante mit der Tortuosität korrigiert.

Dispersion Neben der Advektion führt die Strömung des Grundwassers auch zur Dispersion, die eine Verbreiterung der Verteilung ausgelöst durch einen Konzentrationsgradienten beschreibt. Grund für die korngerüstbedingte Dispersion ist die Beschaffenheit des porösen Mediums. So führen unterschiedliche Porengrößen, ein ungleichförmiges Geschwindigkeitsprofil innerhalb einer Pore und das Korngerüst an sich zu Geschwindigkeitsfluktuationen. Diese ermöglichen eine häufig deutlich schnellere Verbreitung gelöster Stoffe als die Diffusion. Auf größeren Skalen kommt zusätzlich, ausgelöst durch Inhomogenitäten im Aquifer, noch die Makrodispersion hinzu, wenn gelöste Substanzen entlang unterschiedlicher Fließwege unterschiedlich schnell transportiert werden.

Da die Dispersion oftmals untrennbar von der Diffusion ist, werden die beiden Prozesse meist zusammengefasst als *Hydrodynamische Dispersion* mit Hilfe des Diffusions-Dispersionstensors betrachtet und in Analogie zur Diffusion mit den Fick'schen Gesetzen beschrieben.

Wärmeleitung Aufgrund eines Temperaturgradienten kommt es zu einem Wärmefluss, was auch Wärmediffusion oder Konduktion genannt wird. Dabei fließt die Wärme nach dem 2. Hauptsatz der Thermodynamik in Richtung niedrigerer Temperatur. Die mathematische Beschreibung dieses Vorgangs erfolgt mit dem Fourier'schen Gesetz.

2.2 Strömungsmodell

In diesem Kapitel wird das in dieser Arbeit verwendete Modell zur Beschreibung von Strömungs- und Transportvorgängen in porösen Medien angegeben. Dabei wird die Strömung von Wasser und der Transport darin gelöster Lauge betrachtet. Eine Strömung, die ausschließlich oder zum wesentlichen Teil durch Dichteunterschiede angetrieben wird, bezeichnet man als *Dichtegetriebene Strömung*. Dabei können lokale Dichteunterschiede sowohl von Laugenkonzentrations- als auch von Temperaturunterschieden erzeugt werden, weswegen unterschieden wird zwischen dem Fall bei konstanter Temperatur, bezeichnet als *haline Strömung*, und dem Fall, in dem die Temperatur variiert und neben Konzentrations- auch Temperaturunterschiede die Strömung antreiben, bezeichnet als *thermohaline Strömung*. Typische Fälle, in denen solche Strömungen auftreten, sind u.a. das Eindringen von Meerwasser in küstennahe Grundwasserleiter, der Sickerwasserzufluss von kontaminiertem Wasser aus Deponien oder geothermisch aktive Bereiche. Zur Modellierung und Simulation haliner und thermohaliner Strömung existieren vielfältige Arbeiten (vgl. u.a. [Diersch und Kolditz, 2005], [Diersch und Kolditz, 1998], [Grillo et al., 2010a], [Johannsen et al., 2002], [Schincariol et al., 1997], [Simmons et al., 2001]).

Für den Fall der halinen Strömung werden für die Betrachtung von geklüfteten Medien zwei verschiedene Modelle eingeführt, die sich in der Darstellung der Kluft unterscheiden. Im d -dimensionalen Modell, haben Kluft \mathcal{F} und umgebendes Medium \mathcal{M} dieselbe Dimension und es gelten in beiden Bereichen dieselben Gleichungen. Bei der zweiten Methode, dem $(d - 1)$ -dimensionalen Modell, wird die Kluft durch eine Hyperfläche \mathcal{S} approximiert und die Gleichungen in \mathcal{F} werden über die Kluftbreite gemittelt (vgl. [Grillo et al., 2010b]).

In Abschnitt 2.2.1 wird nun zunächst das Strömungsmodell für die thermohaline Strömung in d Dimensionen angegeben (vgl. dazu [Johannsen, 2004], [Grillo et al., 2010b]). In Abschnitt 2.2.2 wird für dieses Modell eine quadratische Korrektur der Geschwindigkeit eingeführt, die den Geltungsbereich des Modells erweitert. In 2.2.3 wird dann die Ableitung eines niederdimensionalen Modells für die haline Strömung in geklüfteten Medien dargestellt. Abschnitt 2.2.4 beschäftigt sich mit Anfangs- und Randbedingungen für die zuvor eingeführten Modelle.

2.2.1 Thermohaline Strömung

Sei $\Omega \subset \mathbb{R}^d$ (mit $d = 2$ oder $d = 3$) das betrachtete Gebiet. Die Teilmenge $\mathcal{F} \subset \Omega$ beschreibt eine Kluft bzw. ein Kluftnetzwerk in Ω , das \mathcal{F} umgebende Medium wird mit $\mathcal{M} := \Omega \setminus \mathcal{F}$ bezeichnet. Dabei sind sowohl die Kluft \mathcal{F} , als auch das sie umgebende Medium \mathcal{M} poröse

Medien, wobei das poröse Medium in der Kluft deutlich durchlässiger ist als das im restlichen Medium, also $K_f \gg K_m$. Der Index $\alpha \in \{f, m\}$ gibt hierbei und im folgenden an, ob eine Größe in der Kluft oder im Medium definiert ist.

Nun wird der Fall einer inkompressiblen 1-Phasen-Strömung eines 2-komponentigen Fluids betrachtet. Dabei werden die zwei Komponenten hier durch Wasser und eine Salzlösung gegeben, wobei die letztere eine Mischung aus Wasser und Salz ist. Die Dichte ϱ der Flüssigkeit hängt dabei ab vom Mischungsverhältnis und ändert sich wie die Viskosität μ in Abhängigkeit von Konzentrations- und Temperatur-Gradienten.

Es wird angenommen, dass gesättigte Verhältnisse vorherrschen, die flüssige Phase also den gesamten Porenraum ausfüllt. Dann entspricht die Porosität ϕ dem Volumenanteil der flüssigen Phase und der Volumenanteil der festen Phase ist gegeben durch $(1 - \phi)$. Für die feste Phase wird angenommen, dass sie nicht-deformierbar, statisch und nicht absorbierend ist, also kein Massenaustausch zwischen fester und flüssiger Phase stattfindet. Außerdem wird angenommen, dass Kluft und Medium durch ein ideales Interface getrennt sind, also Masse und Impuls innerhalb der flüssigen Phase ohne weitere physikalische Vorgänge zwischen Kluft und Medium ausgetauscht werden können.

Die Modellgleichungen ergeben sich dann aus den Erhaltungs-Gleichungen von Masse, Impuls und Energie. Dabei sagt die Kontinuitätsgleichung für die Masse aus, dass die Änderung der gesamten Masse im Gebiet nur durch Zu- bzw. Abflüsse oder durch Quellen bzw. Senken entstehen kann. Abgeleitet aus dem Kontinuumsmodell der Strömungsmechanik ergibt sich dann folgendes System (vgl. z.B. [Diersch und Kolditz, 2005], [Oldenburg und Pruess, 1998], [Holstad, 2001], [Grillo et al., 2010a], [Grillo et al., 2011], [Grillo et al., 2012], [Stichel et al., 2012]):

Gesamtmassen-Erhaltung der flüssigen Phase:

$$\partial_t(\phi_\alpha \varrho_\alpha) + \nabla \cdot (\varrho_\alpha \mathbf{q}_\alpha) = Q \quad (2.1)$$

Salzmassen-Erhaltung der flüssigen Phase:

$$\partial_t(\phi_\alpha \varrho_\alpha \omega_\alpha) + \nabla \cdot (\varrho_\alpha \omega_\alpha \mathbf{q}_\alpha + \mathbf{J}_\alpha) = Q_S \quad (2.2)$$

Energieerhaltung:

$$\partial_t[(\phi_\alpha \varrho_\alpha C_{\alpha\ell} + (1 - \phi_\alpha) \varrho_{\alpha s} C_{\alpha s}) \Theta_\alpha] + \nabla \cdot (\varrho_\alpha C_{\alpha\ell} \Theta_\alpha \mathbf{q}_\alpha + \boldsymbol{\psi}_\alpha) = Q_T \quad (2.3)$$

Dabei beschreibt ϕ_α die Porosität, ϱ_α die Massendichte der flüssigen Phase, ω_α den Massenbruch des Salzwassers, \mathbf{q}_α die Abstandsgeschwindigkeit ($\mathbf{q}_\alpha := \phi_\alpha \mathbf{v}_\alpha$, wobei \mathbf{v}_α die Geschwindigkeit der flüssigen Phase angibt), \mathbf{J}_α den Massenfluss des Salzwassers, Θ_α die Temperatur, $\boldsymbol{\psi}_\alpha$ den Wärmetransport, $\varrho_{\alpha s}$ die Massendichte der festen Phase und $C_{\alpha\ell}$ und $C_{\alpha s}$ sind die Wärmekapazitäten der flüssigen (ℓ) bzw. der festen (s) Phase.

Außerdem geben Q , Q_S und Q_T Quellen bzw. Senken an.

Für den Fluss \mathbf{q}_α wird zunächst die Gültigkeit des *Darcy-Gesetzes* angenommen:

$$\mathbf{q}_\alpha = -\frac{\mathbf{K}_\alpha}{\mu} (\nabla p_\alpha - \varrho_\alpha \mathbf{g}) \quad (2.4)$$

wobei \mathbf{K}_α der Permeabilitätstensor ist, μ die Viskosität und g die Gravitationsbeschleunigung. Dieses ist eine von Henry Darcy ursprünglich empirisch ermittelte Gleichung der Strömungsmechanik (siehe [Darcy, 1856]). Sie stellt aber auch eine spezielle Lösung der Navier-Stokes-Gleichung durch Homogenisierung dar oder eine spezielle Lösung der makroskopischen Impulserhaltungsgleichung unter den Voraussetzungen, dass die Trägheitskräfte vernachlässigbar sind und der Spannungstensor nur aus dem hydrostatischen Druck besteht. Zu beachten ist, dass das Darcy-Gesetz nur gültig für einen langsamen, viskosen Fluss ist. Da die meisten Grundwasserbewegungen laminar sind, kann meist die Gültigkeit des Darcy-Gesetzes vorausgesetzt werden. In der Gegenwart von Klüften sollte dies allerdings genau hinterfragt werden, da dort die Geschwindigkeiten oft deutlich größer sind (vgl. [Sahimi, 1995], [Bear, 1972]). Dieses Thema wird in Abschnitt 2.2.2 noch genauer erläutert und eine alternative Berechnung der Geschwindigkeit mittels einer Forchheimer-Korrektur vorgeschlagen.

Der Massenfluss \mathbf{J}_α wird durch das *Erste Fick'sche-Gesetz* beschrieben

$$\mathbf{J}_\alpha = -\varrho_\alpha \mathbf{D}_\alpha \nabla \omega_\alpha \quad (2.5)$$

wonach er proportional zum Konzentrationsgradienten ist. Dabei beschreibt \mathbf{D}_α den Diffusions-Dispersionstensor. Dieser ergibt sich aus

$$\mathbf{D}_\alpha(\mathbf{q}) = \mathbf{D}_\alpha^d + \mathbf{D}_\alpha^{md}(\mathbf{q}), \quad (2.6)$$

wobei der Diffusionstensor \mathbf{D}_α^d gegeben ist durch $\mathbf{D}_\alpha^d = D_\alpha^d \mathbf{T}$ mit molekularer Diffusion D_α^d und Tortuosität \mathbf{T} . Der Tensor der mechanischen Dispersion \mathbf{D}_α^{md} ist darin gegeben durch die *Bear-Scheidegger-Dispersion* (vgl. [Scheidegger, 1961], [Bear, 1972])

$$(\mathbf{D}_\alpha^{md})_{ij}(\mathbf{q}_\alpha) = a_\alpha^T \|\mathbf{q}_\alpha\| \delta_{ij} + (a_\alpha^L - a_\alpha^T) \frac{\mathbf{q}_{\alpha i} \mathbf{q}_{\alpha j}}{\|\mathbf{q}_\alpha\|} \quad (2.7)$$

Dabei ist δ_{ij} das Kronecker-Delta und $\|\cdot\|$ die euklidische Norm im \mathbb{R}^d . a_α^L und a_α^T geben die transversalen und die longitudinalen Dispersionslängen an.

Der nicht-konvektive Wärmetransport oder die Wärmestromdichte ψ_α wird mit dem *Fourier'schen Gesetz* beschrieben:

$$\psi_\alpha = -\Lambda_\alpha \nabla \Theta_\alpha \quad (2.8)$$

Hierbei gibt Λ_α die Wärmeleitfähigkeit an.

Die Massendichte ϱ_α wird als Funktion der Temperatur und des Massenbruchs geschrieben (vgl. [Oldenburg und Pruess, 1998])

$$\varrho_\alpha = \varrho(\omega_\alpha, \Theta_\alpha) := \frac{\varrho^{pW}(\Theta_\alpha) \varrho^{pB}(\Theta_\alpha)}{\varrho^{pB}(\Theta_\alpha) - [\varrho^{pB}(\Theta_\alpha) - \varrho^{pW}(\Theta_\alpha)] \omega_\alpha}, \quad (2.9)$$

wobei

$$\varrho^{pB}(\Theta_\alpha) := \varrho_r^{pB} e^{[-\beta^B(\Theta_\alpha - \Theta_r)]} \quad (2.10)$$

$$\varrho^{pW}(\Theta_\alpha) := \varrho_r^{pW} e^{[-\beta^W(\Theta_\alpha - \Theta_r)]}. \quad (2.11)$$

Dabei sind β^B und β^W die (konstanten) Wärmeausdehnungs-Koeffizienten von Wasser und Salzwasser und ϱ_r^{pB} und ϱ_r^{pW} sind die konstanten Dichten ausgewertet bei einer Referenztemperatur Θ_r .

Die Viskosität μ kann wie die Dichte ϱ von ω und Θ abhängen. In dieser Arbeit wurde jedoch ausschließlich mit konstanter Viskosität gerechnet.

Haline Strömung Bei konstanter Temperatur Θ fallen Gleichungen (2.3) und (2.8) weg und die haline Strömung wird beschrieben durch

$$\partial_t(\phi_\alpha \varrho_\alpha) + \nabla \cdot (\varrho_\alpha \mathbf{q}_\alpha) = 0 \quad (2.12)$$

$$\partial_t(\phi_\alpha \varrho_\alpha \omega_\alpha) + \nabla \cdot (\varrho_\alpha \omega_\alpha \mathbf{q}_\alpha + \mathbf{J}_\alpha) = 0 \quad (2.13)$$

mit \mathbf{q}_α aus Gleichung (2.4) und \mathbf{J}_α aus Gleichung (2.5). Dabei wurde hier zusätzlich angenommen, dass es keine Quellen oder Senken gibt, wie es bei den in dieser Arbeit betrachteten Beispielen der Fall ist.

Eine vielfach verwendete Näherung dieser Gleichungen ist die *Boussinesq-Approximation* [Boussinesq, 1903], [Oberbeck, 1879]. Sie vernachlässigt die expliziten Dichteabhängigkeiten, einzig der explizite Auftriebsterm in (2.4) wird beibehalten. Diese Vereinfachung wird allerdings im Rahmen dieser Arbeit nicht verwendet, da die volle Behandlung der Nichtlinearität fehlt und so zwar das Gleichungssystem vereinfacht wird, jedoch auch die Ergebnisse teils sehr unterschiedlich ausfallen können (vgl. [Johannsen, 2003]).

2.2.2 Forchheimer Korrektur

Da in Klüften meist sehr hohe Geschwindigkeiten auftreten und die Strömung turbulent werden kann (vgl. auch [Kohl et al., 1997], [Qian et al., 2005]), ist es fraglich, ob die Gültigkeit des Darcy-Gesetzes, wie sie in Abschnitt 2.2.1 vorausgesetzt wurde, tatsächlich angenommen werden kann. Auch die in dieser Arbeit gemachten Beobachtungen zur Bildung von Wirbeln in der Kluft (vgl. Abschnitt 6.1.3), legen nahe, diesen Punkt näher zu untersuchen.

Mithilfe der *Reynolds-Zahl* Re , die das Verhältnis von Trägheits- zu Zähigkeitskräften beschreibt, lässt sich bestimmen, ob ein Fluss laminar (bei kleinen Geschwindigkeiten) oder turbulent (bei größeren Geschwindigkeiten) ist:

$$Re = \frac{\varrho_c q_c L_c}{\mu_c}. \quad (2.14)$$

Dabei weist der Index c auf einen charakteristischen Wert hin und L_c gibt eine representative Länge des porösen Mediums an. Hierfür sind in der Literatur unterschiedliche Werte zu finden, wie beispielsweise $L_c = K^{1/2}$ (vgl. u.a. [Spena und Vacca, 2001]), wobei für Klüfte auch die Kluftdicke ε eine angemessene Größe zu sein scheint. Da in dieser Arbeit die Klüfte durch ein poröses Medium gefüllt sind, kann die Reynolds-Zahl auch folgendermaßen angegeben werden (vgl. [Bear und Bachmat, 1990]):

$$Re = \frac{\varrho_c q_c / \phi_c \sqrt{(K_c / \phi_c) T_c}}{\mu_c}. \quad (2.15)$$

Kritische Reynolds-Zahlen für den Übergang von laminaren zu turbulenten Kluftströmungen sind u.a. in [Louis, 1967] zu finden. In Abschnitt 2.2.1 wurde bereits erwähnt, dass die Gültigkeit des Darcy-Gesetzes an langsame Geschwindigkeiten und kleine Reynolds-Zahlen gebunden ist. So hat sich gezeigt, dass das Darcy-Gesetz gültig ist, solange die Reynolds-Zahl einen Wert zwischen 1 und 10 nicht überschreitet (vgl. [Bear, 1979]). Für poröse Medien kann die Gültigkeit des Darcy-Gesetzes auch durch folgende Bedingung angegeben werden (vgl. [Bear und Bachmat, 1990]):

$$St \leq 1, \quad \text{und} \quad Re\sqrt{Da} < 1, \quad (2.16)$$

wobei die Strouhalzahl St gegeben ist durch

$$St := \frac{L_c}{\tau_c(q_c/\phi_c)} \quad (2.17)$$

mit charakteristischer Zeitskala τ_c , und die Darcyzahl Da durch

$$Da := \frac{(K_c/\phi_c)T_c}{L_c^2}. \quad (2.18)$$

In den meisten Grundwasser-Strömungen gilt $\sqrt{Da} \ll 1$ und $St \leq 1$ (vgl. [Bear und Bachmat, 1990]), so dass auch bei größeren Reynolds-Zahlen das Darcy-Gesetz noch Gültigkeit besitzen kann.

In [Hölting, 1996] wurde bemerkt, dass bei einem anisotropen Kluftnetz die Strömungs-Geschwindigkeiten auf engem Raum wechseln, die kritischen Werte meist überschritten werden und die Strömung turbulent wird. Es wurde jedoch auch beobachtet, dass wenn die Klüftung intensiver ist, so dass der Gesteinsaufbau einem Porengrundwasserleiter gleicht, auch in Kluftgesteinen laminarer Fluss möglich ist. Ebenso sind die Klüftungsverhältnisse in tektonisch stark beanspruchten Schichtfolgen, in denen außerdem Gesteine mit kompetenten Eigenschaften (hart und spröde), wie z.B. Sandsteine, Quarzite, Kalksteine und Magmatite, vorherrschen, so, dass laminares Fließen möglich ist. Folglich kann es im Kluftgrundwasserleiter immer wechselnde strömungsmechanische Verhältnisse geben.

Nun gibt es in der Literatur verschiedene Ansätze, die für größere Reynolds-Zahlen, $Re > a$ ($a \in \{1, 10\}$), eine Alternative zum Darcy-Gesetz liefern (vgl. [Forchheimer, 1901], [Brinkman, 1947]). So berücksichtigt die *Forchheimer-Gleichung* für den Druckverlust in der Strömung neben den Druckverlusten aus der dynamischen Viskosität auch den Druckverlust aus Turbulenz (vgl. [Forchheimer, 1901], [Spena und Vacca, 2001], [Diersch und Kolditz, 2005]). Diese lautet

$$(1 + Aq)\mathbf{q} = -\frac{\mathbf{K}}{\mu}(\nabla p - \rho\mathbf{g}), \quad (2.19)$$

wobei $q := \sqrt{\mathbf{q} \cdot \mathbf{q}}$ die Euklidische Norm der Geschwindigkeit angibt und die rechte Seite der Gleichung genau der Darcy-Geschwindigkeit $\mathbf{q}_D := -\mathbf{K}/\mu(\nabla p - \rho\mathbf{g})$ entspricht. Außerdem ist $A \geq 0$ der Forchheimer-Koeffizient, wobei der Fall $A = 0$ den Fall beschreibt, in dem die Forchheimer-Korrektur mit der Darcy-Geschwindigkeit übereinstimmt. A hängt dabei durch ρ

und μ implizit vom Massenbruch ω ab.

Zum besseren Verständnis, wie diese Gleichung zustande kommt, wird hier die Herleitung aus [Grillo et al., 2013] (siehe auch [Schneider, 2013]) rekapituliert und dazu werden die dissipativen Aspekte der Strömung betrachtet. Unter Vernachlässigung der Trägheitskräfte lauten die Impulserhaltungsgleichungen für die gesamte flüssige Phase und für die Salzlauge (vgl. z.B. [Hassanizadeh, 1986])

$$\rho \boldsymbol{\lambda} = [\nabla p - \rho \mathbf{g}], \quad (2.20)$$

$$\boldsymbol{\lambda}_r = \nabla y, \quad (2.21)$$

Dabei ist y das chemische Potential der Salzlauge relativ zu dem von Wasser. $\boldsymbol{\lambda}$ und $\boldsymbol{\lambda}_r$ sind dissipative Kraftdichten, die den Impulsaustausch zwischen flüssiger und fester Phase bzw. zwischen der Salzlauge und den anderen Bestandteilen der Mischung beschreiben. Sie müssen so bestimmt werden, dass die Clausius-Duhem Ungleichung erfüllt ist

$$\mathcal{D} = -\phi \rho \boldsymbol{\lambda} \cdot \mathbf{v} - \phi \rho \omega \boldsymbol{\lambda}_r \cdot \mathbf{u} \geq 0, \quad (2.22)$$

die aussagt, dass die Dissipation nicht negativ sein darf. Dabei ist \mathbf{u} die Geschwindigkeit der Salzlösung relativ zur Geschwindigkeit der flüssigen Phase \mathbf{v} .

Nun wird angenommen, dass die folgende Darstellung möglich ist (vgl. [Eringen, 1980]), die sicherstellen soll, dass $\boldsymbol{\lambda}$ für verschwindende Geschwindigkeiten \mathbf{v} ebenfalls verschwindet und keine gekoppelten Phänomene auftreten:

$$\boldsymbol{\lambda} := -\boldsymbol{\Lambda}(\omega, \mathbf{v})\mathbf{v} \quad (2.23)$$

Dabei ist $\boldsymbol{\Lambda}$ eine positiv definite Tensorfunktion zweiter Ordnung. Um nun einen Ausdruck für die Abstandsgeschwindigkeit \mathbf{q} zu erhalten, wird Gleichung (2.23) in (2.20) eingesetzt:

$$\rho \boldsymbol{\Lambda}(\omega, \mathbf{q}/\phi)\mathbf{q} = -\phi[\nabla p - \rho \mathbf{g}]. \quad (2.24)$$

Unter Annahme von Isotropie gilt $\rho \boldsymbol{\Lambda} = \rho \Lambda \mathbf{I}$ und die skalare Funktion $\rho \Lambda$ hängt nur von der Norm q von \mathbf{q} ab. Wie in [Bennethum und Giorgi, 1997] vorgeschlagen, wird folgendermaßen erweitert

$$\rho \boldsymbol{\Lambda}(\omega, \mathbf{q}/\phi) = \rho \Lambda(\omega, q/\phi)\mathbf{I} = (a + bq)\mathbf{I}, \quad (2.25)$$

Dabei hängen die Koeffizienten a und b von dem porösen Medium ab, in dem die Strömung stattfindet, und sollten experimentell bestimmt werden (vgl. [Bennethum und Giorgi, 1997], [Hassanizadeh und Gray, 1988]). Folglich müssen hier unterschiedliche Werte in Kluft und Medium angenommen werden.

Einsetzen von (2.25) in (2.24) ergibt

$$\left(1 + \frac{b}{a}q\right)\mathbf{q} = -\frac{\mathbf{K}}{\mu}(\nabla p - \rho \mathbf{g}) \quad (2.26)$$

wobei die Notation

$$\frac{\phi}{a} = \frac{K}{\mu} \quad (2.27)$$

mit Permeabilität K und Viskosität μ benutzt wurde. Der Koeffizient b wird durch

$$b = \phi \varrho \beta \quad (2.28)$$

definiert, wobei β einen experimentell zu bestimmenden Parameter darstellt. Nun wird Gleichung (2.28) eingesetzt in (2.26) und man erhält

$$\left(1 + \frac{\varrho \beta K}{\mu} q\right) \mathbf{q} = -\frac{\mathbf{K}}{\mu} (\nabla p - \varrho \mathbf{g}). \quad (2.29)$$

Die dimensionslose Größe

$$F := \frac{\varrho \beta K}{\mu} q = Aq \quad (2.30)$$

heißt auch *Forchheimer-Zahl*. Sie beschreibt das Verhältnis von Flüssig-Fest-Interaktion zu Strömungswiderstand (vgl. [Zeng und Grigg, 2006]). Damit ergibt sich die Forchheimer-Gleichung (2.19).

Nun soll ein expliziter Ausdruck für die Abstandsgeschwindigkeit \mathbf{q} bestimmt werden. Dazu wird die Euklidische Norm von beiden Seiten der Forchheimer-Gleichung (2.19) gezogen:

$$(1 + Aq)q = q_D. \quad (2.31)$$

Ein Lösen dieser quadratischen Gleichung unter Ausschluss der unphysikalischen Ergebnisse, ergibt

$$q = \frac{-1 + \sqrt{1 + 4Aq_D}}{2A}. \quad (2.32)$$

Dieses Ergebnis kann in (2.19) eingesetzt werden und es ergibt sich:

$$\mathbf{q} = f(A, q_D) \mathbf{q}_D \quad \text{mit} \quad f(A, q_D) := \frac{2}{1 + \sqrt{1 + 4Aq_D}}. \quad (2.33)$$

Die neue Geschwindigkeit berechnet sich also als eine (quadratische) Korrektur aus der Darcy-Geschwindigkeit multipliziert mit einem Faktor $f(A, q_D)$, der abhängig ist vom Forchheimer-Koeffizient A und der Norm der Darcy-Geschwindigkeit q_D . Für diesen gilt

$$0 < f(A, q_D) \leq 1 \quad (2.34)$$

und er zeigt das folgende Verhalten:

$$Aq_D \rightarrow \infty \quad \Rightarrow \quad f \rightarrow 0 \quad (2.35)$$

$$Aq_D \rightarrow 0 \quad \Rightarrow \quad f \rightarrow 1 \quad (2.36)$$

Hieraus wird klar, dass die Größe der Korrektur abhängig von dem Produkt Aq_D . Dies wiederum impliziert das Vorhandensein eines kritischen Wertes $A_{\text{crit}}(q_D)$, ab dem eine Korrektur überhaupt erst sichtbar wird.

In Abb. 2.1 ist das Verhalten der Approximation der Reibungskraft insbesondere für große Geschwindigkeiten dargestellt. Für kleine Geschwindigkeiten liefert bereits das Darcy-Gesetz sehr gute Näherungen und es findet kaum eine Korrektur statt. In der Abbildung ist klar der lineare Zusammenhang zu erkennen, den das Darcy-Gesetz zwischen Geschwindigkeit und Reibung annimmt und es wird ersichtlich, dass durch die Verwendung des Darcy-Gesetzes die Geschwindigkeit überschätzt werden kann. Die quadratische Approximation mit der Forchheimer-Korrektur führt zu einer besseren Approximation der Reibungskraft. Die Korrektur verringert die Geschwindigkeit im Vergleich zur Darcy-Geschwindigkeit, was auch aus Gleichungen (2.33) und (2.34) ersichtlich ist. Dabei gilt: Je größer die Darcy-Geschwindigkeit, desto größer ist die Korrektur.

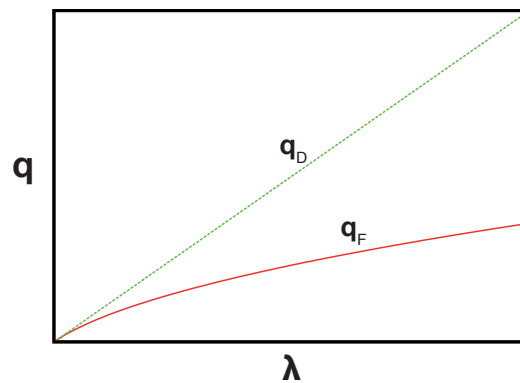


Abbildung 2.1: Approximation der Reibungskraft mit der Darcy-Geschwindigkeit q_D und der mit Forchheimer korrigierten Geschwindigkeit q_F .

Eine Untersuchung des Einflusses der Forchheimer-Korrektur für verschiedene Werte von A wird in Kapitel 6.1.4 anhand des dort betrachteten Test-Beispiels vorgenommen.

2.2.3 Niederdimensionales Modell

In diesem Abschnitt wird eine konstante Temperatur angenommen, also die haline Strömung betrachtet. Dafür wird ein $(d - 1)$ -dimensionales Modell hergeleitet, bei dem die Kluft durch eine Hyperfläche $\hat{\mathcal{S}}$ approximiert wird und die Gleichungen in \mathcal{F} über die Kluftbreite gemittelt werden. Diese Mittelungstechnik wird auch für viele andere Probleme, wie beispielsweise [Angot et al., 2009], [Bastian et al., 2000a], [Bastian et al., 2000b], [Martinez-Landa und Carrera, 2006], [Sorek et al., 2001], benutzt und basiert auf Arbeiten von Bear ([Bear et al., 1993], [Bear, 1972], [Bear und Bachmat, 1990] und [Bear, 1977]).

Um gleich den in Abschnitt 2.2.2 erweiterten Gültigkeitsbereich auch hier zur Verfügung zu haben, wird der Fluss nicht mit dem Darcy-Gesetz sondern mit der Forchheimer Korrektur beschrieben. Die gesamte Herleitung des hier vorgestellten gemittelten Modells ist in [Grillo et al., 2010b], [Reiter et al., 2013b] und [Schneider und Fein, 2004] und insbesondere mit Forchheimer-Korrektur in [Grillo et al., 2013] nachzulesen.

Zunächst wird eine Variablentransformation durchgeführt und Gleichungen (2.12), (2.13), (2.5) und (2.33) so umformuliert, dass anstelle des Massenbruchs ω_α , die Salzmassen-Konzentration

$c_\alpha := \varrho_\alpha \omega_\alpha$ die Unbekannte ist. Dies liefert den Vorteil, dass Produkte von Fluktuationen und Nichtlinearitäten, wie in (2.9), eingespart werden, die bei der Mittelung sehr aufwändig zu behandeln sind. Mit dieser Variablentransformation ergibt sich

$$\varrho_\alpha = \varrho(c_\alpha) = \varrho^{pW} + \varrho' c_\alpha \quad \text{mit} \quad \varrho' := \frac{\varrho^{pB} - \varrho^{pW}}{\varrho^{pB}} \quad (2.37)$$

und damit folgendes System:

$$\partial_t(\phi_\alpha \varrho(c_\alpha)) + \nabla \cdot (\varrho(c_\alpha) \mathbf{q}_\alpha) = 0, \quad (2.38)$$

$$\partial_t(\phi_\alpha c_\alpha) + \nabla \cdot (c_\alpha \mathbf{q}_\alpha + \mathbf{J}_\alpha) = 0, \quad (2.39)$$

$$\mathbf{q}_\alpha = f(A_\alpha, q_{\alpha D}) \mathbf{q}_{\alpha D}, \quad \mathbf{q}_{\alpha D} = -\frac{\mathbf{K}_\alpha}{\mu_\alpha} (\nabla p_\alpha - \varrho(c_\alpha) \mathbf{g}) \quad (2.40)$$

$$\mathbf{J}_\alpha = -\left(\frac{\varrho^{pW}}{\varrho^{pW} + \varrho' c_\alpha} \mathbf{D}_\alpha \right) \nabla c_\alpha. \quad (2.41)$$

Es wird angenommen, dass die Kluft \mathcal{F} ein sehr dünnes d -dimensionales Gebiet beschreibt, das

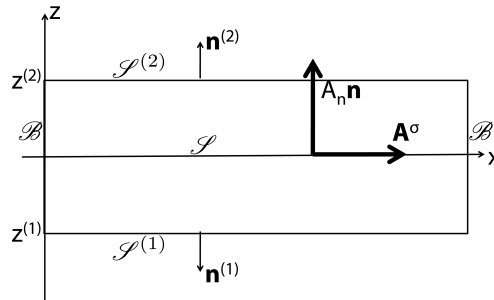


Abbildung 2.2: Schema einer planaren d -dimensionalen Kluft im Mittelungsprozess.

durch zwei parallele Platten, $\mathcal{S}^{(1)}$ und $\mathcal{S}^{(2)}$, begrenzt ist (vgl. Abb. 2.2). Der seitliche Rand von \mathcal{F} , in 3D ein umlaufendes Band, wird mit \mathcal{B} bezeichnet, so dass sich der gesamte Rand der Kluft zu $\partial \mathcal{F} = \mathcal{B} \cup \mathcal{S}^{(1)} \cup \mathcal{S}^{(2)}$ ergibt. Die Seitenflächen $\mathcal{S}^{(1)}$ und $\mathcal{S}^{(2)}$ werden definiert durch

$$\mathcal{S}^{(k)} : z - z^{(k)} = 0, \quad (k = 1, 2). \quad (2.42)$$

Dabei ist z die Koordinatenachse der Referenzkluft aus Abb. 2.2. Die mittlere Kluftebene, \mathcal{S} , liegt dann bei $z = 0$. Die Kluftbreite wird gegeben durch $\varepsilon := z^{(2)} - z^{(1)}$ und muss die Bedingung $\ell \ll \varepsilon \ll L$ erfüllen, wobei ℓ und L die charakteristischen Längen der Poren- und der Makroskala in Ω sind.

Die Mittelung eines in \mathcal{F} gegebenen Feldes Φ entlang der Kluftdicke ist (vgl. [Bear, 1979])

$$\langle \Phi \rangle(t, x, y) := \frac{1}{\varepsilon} \int_{-\varepsilon/2}^{+\varepsilon/2} \Phi(t, x, y, z) dz. \quad (2.43)$$

mit den folgenden Eigenschaften für ein skalares Feld Φ und ein Vektorfeld \mathbf{A}

$$\langle \Phi \mathbf{A} \rangle = \langle \Phi \rangle \langle \mathbf{A} \rangle + \langle \tilde{\Phi} \tilde{\mathbf{A}} \rangle, \quad (2.44)$$

$$\langle \partial_t \Phi \rangle = \partial_t \langle \Phi \rangle, \quad (2.45)$$

$$\langle \nabla \cdot \mathbf{A} \rangle = \nabla^\sigma \cdot \langle \mathbf{A}^\sigma \rangle + \frac{A_n^{(2)} + A_n^{(1)}}{\varepsilon}, \quad (2.46)$$

wobei $\tilde{\Phi} := \Phi - \langle \Phi \rangle$ und $\tilde{\mathbf{A}} := \mathbf{A} - \langle \mathbf{A} \rangle$ die Fluktuationen angeben und die Kluftdicke in Ort und Zeit konstant angenommen wurde. \mathbf{A}^σ ist die Projektion von \mathbf{A} auf die mittlere Kluftebene \mathcal{S} , ∇^σ der tangentielle Anteil des ∇ -Operators, und es gilt $A_n^{(k)} = \mathbf{A}^{(k)} \cdot \mathbf{n}^{(k)}$ ($k = 1, 2$) mit $\mathbf{A}^{(k)}$ der Restriktion von \mathbf{A} auf $\mathcal{S}^{(k)}$, und dem Normalenvektor $\mathbf{n}^{(k)}$ von $\mathcal{S}^{(k)}$.

Zunächst liefert die Anwendung dieser Mittelung auf die Massendichte der flüssigen Phase

$$\langle \varrho_f(c_f) \rangle = \varrho^{pW} + \varrho' \bar{c}_f = \varrho(\bar{c}_f) = \varrho_f(\langle c_f \rangle). \quad (2.47)$$

Dabei und im folgenden wird die gemittelte Konzentration mit $\bar{c}_f = \langle c_f \rangle$, die Dichte mit $\bar{\varrho}_f = \varrho(\bar{c}_f)$ und der gemittelte Druck mit $\bar{p}_f = \langle p_f \rangle$ bezeichnet. Mit der Notation ($\alpha \in \{f, m\}$, $k = 1, 2$)

$$Q_{\alpha n}^{(k)} := \varrho_\alpha^{(k)} q_{\alpha n}^{(k)}, \quad (2.48)$$

$$P_{\alpha n}^{(k)} := c_\alpha^{(k)} q_{\alpha n}^{(k)} + J_{\alpha n}^{(k)}, \quad (2.49)$$

können dann die gemittelten Modell-Gleichungen so geschrieben werden

$$\partial_t(\phi_f \bar{\varrho}_f) + \nabla^\sigma \cdot (\bar{\varrho}_f \langle \mathbf{q}_f^\sigma \rangle + \langle \tilde{\varrho}_f \tilde{\mathbf{q}}_f^\sigma \rangle) + \frac{Q_{fn}^{(2)} + Q_{fn}^{(1)}}{\varepsilon} = 0, \quad (2.50)$$

$$\partial_t(\phi_f \bar{c}_f) + \nabla^\sigma \cdot (\bar{c}_f \langle \mathbf{q}_f^\sigma \rangle + \langle \tilde{c}_f \tilde{\mathbf{q}}_f^\sigma \rangle + \langle \mathbf{J}_f^\sigma \rangle) + \frac{P_{fn}^{(2)} + P_{fn}^{(1)}}{\varepsilon} = 0, \quad (2.51)$$

wobei

$$\langle \mathbf{q}_f^\sigma \rangle = \langle f(A_f, q_{fD}) \mathbf{q}_{fD}^\sigma \rangle, \quad (2.52)$$

$$\langle \mathbf{J}_f^\sigma \rangle = - \left\langle \left(\frac{\varrho^{pW}}{\varrho^{pW} + \varrho' c_f} \mathbf{D}_f \right) \nabla^\sigma c_f \right\rangle. \quad (2.53)$$

Bei Vernachlässigung von mechanischer Makrodispersion (vgl. [Bear, 1979]) in der Kluft, können auch die Terme $\langle \tilde{c}_f \tilde{\mathbf{q}}_f^\sigma \rangle$ und $\langle \tilde{\varrho}_f \tilde{\mathbf{q}}_f^\sigma \rangle$ vernachlässigt werden.

Um jetzt das $(d-1)$ -dimensionale Modell formulieren zu können, werden die Seitenflächen $\mathcal{S}^{(1)}$ und $\mathcal{S}^{(2)}$ aufeinander gelegt, so dass sie mit der mittleren Kluftebene \mathcal{S} zusammenfallen. Entsprechend wird \mathcal{B} zu einer geschlossenen Linie, dem Umriss von \mathcal{S} , bezeichnet mit $\hat{\mathcal{B}} = \mathcal{B} \cap \mathcal{S}$. Die mittlere Kluftebene \mathcal{S} repräsentiert jetzt die $(d-1)$ -dimensionale Kluft. $\hat{\mathcal{S}}^{(1)}$ und $\hat{\mathcal{S}}^{(2)}$ sind die beiden Seiten von \mathcal{S} , die geometrisch nicht von \mathcal{S} zu unterscheiden sind, aber zur Beschreibung der Unstetigkeiten auf \mathcal{S} benötigt werden. So werden auf ihnen die Größen $Q_{fn}^{(k)}$ und $P_{fn}^{(k)}$ ausgewertet, deren Summen, $(Q_{fn}^{(1)} + Q_{fn}^{(2)})$ and $(P_{fn}^{(1)} + P_{fn}^{(2)})$, die Bedeutung

von ‘‘Sprüngen’’ des Flusses haben. Weil auch die Werte von Konzentration und Druck auf $\mathcal{S}^{(1)}$, $\mathcal{S}^{(2)}$, und in \mathcal{F} in der Regel unterschiedlich sind, gibt es an jedem Punkt von \mathcal{S} drei Freiheitsgrade

$$\hat{c}_m^{(1)} \neq \bar{c}_f \neq \hat{c}_m^{(2)}, \quad \hat{p}_m^{(1)} \neq \bar{p}_f \neq \hat{p}_m^{(2)}. \quad (2.54)$$

wobei $\hat{c}_m^{(k)}$ und $\hat{p}_m^{(k)}$ die Werte für Konzentration und Druck auf $\mathcal{S}^{(k)}$ ($k = 1, 2$) sind (und für Kluft und Medium übereinstimmen, so dass wieder Stetigkeit auf dem Rand gilt).

Mit den oben genannten Approximationen lassen sich die Gleichungen des $(d-1)$ -dimensionalen Modells für die Kluft, repräsentiert durch \mathcal{S} , in den Variablen c_f und p_f so schreiben

$$\partial_t(\phi_f \varepsilon \bar{\varrho}_f) + \nabla^\sigma \cdot (\varepsilon \bar{\varrho}_f \langle \mathbf{q}_f^\sigma \rangle) + (\hat{Q}_{fn}^{(2)} + \hat{Q}_{fn}^{(1)}) = 0, \quad (2.55)$$

$$\partial_t(\phi_f \varepsilon \bar{c}_f) + \nabla^\sigma \cdot (\varepsilon \bar{c}_f \langle \mathbf{q}_f^\sigma \rangle + \varepsilon \langle \mathbf{J}_f^\sigma \rangle) + (\hat{P}_{fn}^{(2)} + \hat{P}_{fn}^{(1)}) = 0, \quad (2.56)$$

mit $\langle \mathbf{q}_f^\sigma \rangle$ und $\langle \mathbf{J}_f^\sigma \rangle$ aus Gleichungen (2.52) und (2.53) und Approximationen $\hat{Q}_{fn}^{(k)}$ und $\hat{P}_{fn}^{(k)}$ ($k = 1, 2$) des Flusses $Q_{fn}^{(k)}$ und $P_{fn}^{(k)}$ analog zu Gleichungen (2.78) und (2.79).

Das d -dimensionale Modell (2.12) und (2.13) ist jedoch in den Variablen ω_α und p_α formuliert. Deswegen werden die hier erhaltenen Gleichungen wieder umformuliert, indem die Konzentration durch den Massenbruch $\hat{\omega}_m : \hat{\mathcal{M}} = \Omega \setminus \mathcal{S} \rightarrow [0, 1]$ im Medium und einen ‘‘äquivalenten’’ Massenbruch $\hat{\omega}_f : \mathcal{S} \rightarrow [0, 1]$ in der Kluft ersetzt wird.

$$\hat{\omega}_f := \frac{\bar{c}_f}{\bar{\varrho}_f} = \frac{\bar{c}_f}{\varrho^{pW} + \varrho' \bar{c}_f}, \quad \hat{\omega}_m := \frac{\hat{c}_m}{\varrho^{pW} + \varrho' \hat{c}_m}, \quad (2.57)$$

Damit ergibt sich das $(d-1)$ -dimensionale Modell für die Kluft zu

$$\partial_t(\phi_f \varepsilon \varrho(\hat{\omega}_f)) + \nabla^\sigma \cdot (\varepsilon \varrho(\hat{\omega}_f) \langle \mathbf{q}_f^\sigma \rangle) + (\hat{Q}_{fn}^{(2)} + \hat{Q}_{fn}^{(1)}) = 0, \quad (2.58)$$

$$\partial_t(\phi_f \varepsilon \varrho(\hat{\omega}_f) \hat{\omega}_f) + \nabla^\sigma \cdot (\varepsilon \varrho(\hat{\omega}_f) \hat{\omega}_f \langle \mathbf{q}_f^\sigma \rangle + \varepsilon \langle \mathbf{J}_f^\sigma \rangle) + (\hat{P}_{fn}^{(2)} + \hat{P}_{fn}^{(1)}) = 0, \quad (2.59)$$

mit

$$\langle \mathbf{q}_f^\sigma \rangle = f(A_f, \hat{q}_{fD}) \langle \mathbf{q}_{fD}^\sigma \rangle \quad \text{mit} \quad \langle \mathbf{q}_{fD}^\sigma \rangle = -\frac{\mathbf{K}_f}{\mu} [\nabla^\sigma \bar{p}_f - \varrho(\hat{\omega}_f) \mathbf{g}^\sigma], \quad (2.60)$$

$$\langle \mathbf{J}_f^\sigma \rangle = -\varrho(\hat{\omega}_f) \mathbf{D}_f \nabla^\sigma \hat{\omega}_f. \quad (2.61)$$

und Approximationen $\hat{Q}_{fn}^{(k)}$ und $\hat{P}_{fn}^{(k)}$ ($k = 1, 2$) gegeben durch Gleichungen (2.78) und (2.79). Im umgebenden Medium $\hat{\mathcal{M}} = \Omega \setminus \mathcal{S}$ gelten die Gleichungen

$$\partial_t(\phi_m \varrho(\hat{\omega}_m)) + \nabla \cdot (\varrho(\hat{\omega}_m) \hat{\mathbf{q}}_m) = 0, \quad (2.62)$$

$$\partial_t(\phi_m \varrho(\hat{\omega}_m) \hat{\omega}_m) + \nabla \cdot (\varrho(\hat{\omega}_m) \hat{\omega}_m \hat{\mathbf{q}}_m + \hat{\mathbf{J}}_m) = 0, \quad (2.63)$$

mit

$$\hat{\mathbf{q}}_m = f(A_m, \hat{q}_{mD}) \hat{\mathbf{q}}_{mD} \quad \text{mit} \quad \hat{\mathbf{q}}_{mD} = -\frac{\mathbf{K}_m}{\mu_m} [\nabla \hat{p}_m - \varrho(\hat{\omega}_m) \mathbf{g}], \quad (2.64)$$

$$\hat{\mathbf{J}}_m = -\varrho(\hat{\omega}_m) \mathbf{D}_m \nabla \hat{\omega}_m. \quad (2.65)$$

Zusätzlich müssen noch Übergangsbedingungen definiert werden, die garantieren, dass der Fluss zwischen Kluft und Medium stetig ist. Diese werden im Abschnitt 2.2.4 erläutert.

2.2.4 Anfangs- und Randbedingungen

Um das Gleichungssystem eindeutig lösen zu können, ist es notwendig für den Massenbruch eine *Anfangsbedingung*, z.B. einen konstanten Wert oder eine Verteilung, anzugeben. Der hydrostatische Druck als zweite Anfangsbedingung wird dann auf der Basis der angegebenen Konzentrationsverteilung berechnet (vgl. [Schneider und Birtler, 2004]).

Bei den *Randbedingungen* muss zwischen drei verschiedenen unterschieden werden: Randbedingungen am *äußeren Rand* des Gebiets und Randbedingungen an *inneren Rändern* zwischen Kluft und umgebendem Medium. Dabei wird der letzte Fall noch einmal dadurch unterschieden, welcher Modellansatz verwendet wird, also ob die Kluft d - oder $(d - 1)$ -dimensional modelliert wird.

Zunächst zu den äußeren Randbedingungen. Diese werden abhängig von dem betrachteten Problem gewählt. Typische Randbedingungen für ein Randstück $\Gamma \in \partial\Omega$ sind dabei für den Massenbruch

- *Dirichlet-Randbedingung*:

$$\omega_\alpha(\mathbf{x}, t) = \omega_\Gamma(\mathbf{x}, t) \quad \text{für } \mathbf{x} \in \Gamma \quad (2.66)$$

- *Neumann-0-Randbedingung*:

$$\partial_n \omega_\alpha(\mathbf{x}, t) = 0 \quad \text{für } \mathbf{x} \in \Gamma \quad (2.67)$$

Für die Druckgleichung gibt es neben Dirichlet- und Neumann-0-Randbedingungen für den Druck (analog zu (2.66) und (2.67)) zusätzlich noch Bedingungen für den Fluss:

- *Fluss-Randbedingung*: Beschreibt einen (für $f(\mathbf{x}, t) = \text{const.}$ konstanten) Fluss \mathbf{q}_α in Normalenrichtung

$$\varrho \mathbf{n} \cdot \mathbf{q}_\alpha = f(\mathbf{x}, t) \quad \text{für } \mathbf{x} \in \Gamma \quad (2.68)$$

Für $f(\mathbf{x}, t) < 0$ wird ein Einfluss, für $f(\mathbf{x}, t) > 0$ ein Ausfluss vorgegeben.

- *Geschwindigkeits-Randbedingung*: Beschreibt eine (für $f(\mathbf{x}, t) = \text{const.}$) konstante Geschwindigkeit \mathbf{q}_α in Normalenrichtung

$$\mathbf{n} \cdot \mathbf{q}_\alpha = f(\mathbf{x}, t) \quad \text{für } \mathbf{x} \in \Gamma \quad (2.69)$$

Natürlich ist es auch möglich noch andere Randbedingungen für den äußeren Rand festzulegen, die jedoch für diese Arbeit nicht relevant sind. In jedem Fall ist es wichtig, auf eine konsistente Wahl der Randbedingungen zu achten, da sonst ein unphysikalisches Verhalten der Lösung möglich ist.

Nun werden die *inneren Ränder* $\partial\mathcal{F} = \mathcal{B} \cup \mathcal{S}^{(1)} \cup \mathcal{S}^{(2)}$ (vgl. Abb. 2.2) betrachtet, die den Übergang zwischen Kluft und Medium beschreiben.

Für den Fall der d -dimensionalen Darstellung der Kluft werden dieselben Gleichungen (2.12) und (2.13) (bzw. (2.1)–(2.3) für den thermohalinen Fall) sowohl in der Kluft als auch im Medium gelöst. An den inneren Rändern zwischen Kluft und Medium wird in diesem Fall Stetigkeit angenommen:

$$\omega_f = \omega_m \quad \text{auf } \partial\mathcal{F} \quad (2.70)$$

$$p_f = p_m \quad \text{auf } \partial\mathcal{F} \quad (2.71)$$

$$\Theta_f = \Theta_m \quad \text{auf } \partial\mathcal{F}. \quad (2.72)$$

Weiterhin muss der Fluss über den Rand stetig sein:

$$\mathbf{q}_f \cdot \mathbf{n} = \mathbf{q}_m \cdot \mathbf{n} \quad \text{auf } \partial\mathcal{F} \quad (2.73)$$

$$\mathbf{J}_f \cdot \mathbf{n} = \mathbf{J}_m \cdot \mathbf{n} \quad \text{auf } \partial\mathcal{F} \quad (2.74)$$

$$\boldsymbol{\psi}_f \cdot \mathbf{n} = \boldsymbol{\psi}_m \cdot \mathbf{n} \quad \text{auf } \partial\mathcal{F}, \quad (2.75)$$

wobei \mathbf{n} die äußere Normale an $\partial\mathcal{F}$ darstellt.

Für die in dieser Arbeit vorgestellten Rechnungen wurden nur die eben beschriebenen Randbedingungen an den inneren Rändern verwendet, wobei es auch durchaus möglich ist, z.B. am kurzen Ende der Kluft Neumann-0-Randbedingungen anzunehmen. Dies würde bedeuten, dass das Ende der Kluft undurchlässig ist, was auch im $(d-1)$ -dimensionalen Fall angenommen wird. Ebenso sind aber auch noch andere Randbedingungen denkbar (vgl. z.B. [Berkowitz, 1989]).

Für den Fall der $(d-1)$ -dimensionalen Darstellung der Kluft werden in der Kluft die gemittelten Gleichungen (2.58) und (2.59) gelöst, während im Medium die vollen Gleichungen (2.62) und (2.63) gelöst werden. Um garantieren zu können, dass der Fluss über den Rand zwischen Kluft und Medium stetig ist, ist es erforderlich die folgenden Bedingungen am Rand zwischen Kluft und Medium einzuführen. An den langen Seiten bedeutet das (analog zu Gleichungen (2.73), (2.74)):

$$\hat{Q}_{fn}^{(k)} = \hat{Q}_{mn}^{(k)}, \quad \text{auf } \mathcal{S}^{(k)} \quad (k = 1, 2) \quad (2.76)$$

$$\hat{P}_{fn}^{(k)} = \hat{P}_{mn}^{(k)}, \quad \text{auf } \mathcal{S}^{(k)} \quad (k = 1, 2) \quad (2.77)$$

wobei $\hat{Q}_{mn}^{(k)} = \varrho(\hat{\omega}_m^{(k)})\hat{q}_{mn}^{(k)}$, und $\hat{P}_{mn}^{(k)} = \varrho(\hat{\omega}_m^{(k)})\hat{\omega}_m^{(k)}\hat{q}_{mn}^{(k)} + \hat{J}_{mn}^{(k)}$ und

$$\hat{Q}_{fn}^{(k)} = \varrho(\hat{\omega}_m^{(k)})\hat{q}_{fn}^{(k)}, \quad (2.78)$$

$$\hat{P}_{fn}^{(k)} = \varrho(\hat{\omega}_m^{(k)})\omega_{\text{upwind}}^{(k)}\hat{q}_{fn}^{(k)} + \hat{J}_{fn}^{(k)}, \quad (2.79)$$

Dabei wird $\omega_{\text{upwind}}^{(k)}$ eingeführt um den Fluss gemäß eines Upwind-Verfahrens zu bestimmen und so die Konvektion konsistent beschreiben zu können. Es ist $\omega_{\text{upwind}}^{(k)} = \hat{\omega}_m^{(k)}$, wenn $\hat{q}_{fn}^{(k)} < 0$, oder

$\omega_{\text{upwind}}^{(k)} = \hat{\omega}_f$, wenn $\hat{q}_{fn}^{(k)} \geq 0$. Außerdem gilt

$$\hat{q}_{fn}^{(k)} = f(A_f, \hat{q}_{fD}^{(k)}) \hat{q}_{fDn}^{(k)}, \quad \hat{q}_{fDn}^{(k)} = -\frac{K_f}{\mu} \left[\frac{\hat{p}_m^{(k)} - \bar{p}_f}{\varepsilon/2} - (\varrho(\hat{\omega}_m^{(k)}) - \varrho(\hat{\omega}_f)) \mathbf{g} \cdot \mathbf{n}^{(k)} \right] \quad (2.80)$$

$$\hat{j}_{fn}^{(k)} = -\varrho(\hat{\omega}_m^{(k)}) D_f \frac{\hat{\omega}_m^{(k)} - \hat{\omega}_f}{\varepsilon/2}, \quad (2.81)$$

wobei die Gradienten in Normalenrichtung durch eine finite Differenz approximiert wurden und die Stetigkeit von Druck und Massenbruch an den zwei Seiten von \mathcal{S} garantieren (analog zu Gl. (2.70) und (2.71)). In der Approximation der Geschwindigkeit in Normalenrichtung (Gleichung (2.80)) wird außerdem folgende Substitution vorgenommen

$$\varrho(\hat{\omega}_f^{(k)}) \mathbf{g} \cdot \mathbf{n}^{(k)} \mapsto (\varrho(\hat{\omega}_m^{(k)}) - \varrho(\hat{\omega}_f)) \mathbf{g} \cdot \mathbf{n}^{(k)}. \quad (2.82)$$

Dies wird eingeführt um künstlichen Geschwindigkeiten, die aus unphysikalischen Sprüngen des Drucks an den kurzen Enden $\hat{\mathcal{B}}$ entstehen, vorzubeugen (vgl. [Grillo et al., 2010b], [Grillo et al., 2012], [Stichel et al., 2012]).

An den kurzen Enden $\hat{\mathcal{B}}$ wird angenommen, dass die Kluft undurchlässig ist (vgl. dazu [Angot et al., 2009]):

$$\langle \mathbf{q}_f^\sigma \rangle = \mathbf{0} \quad \text{auf } \hat{\mathcal{B}} \quad (2.83)$$

$$\langle \mathbf{J}_f^\sigma \rangle = \mathbf{0} \quad \text{auf } \hat{\mathcal{B}}. \quad (2.84)$$

3 Numerik

Um den Rahmen dieser Arbeit nicht zu sprengen, werden in diesem Kapitel ausschließlich die in dieser Arbeit benötigten numerischen Verfahren kurz vorgestellt. Für weitere Hintergrundinformationen, sowie andere numerische Ansätze wird auf die einschlägige Fachliteratur verwiesen. Dennoch soll dieses Kapitel einen Überblick über die verwendeten Methoden geben. Dabei wird zunächst die Diskretisierung (Abschnitt 3.1) sowohl im Ort als auch in der Zeit eingeführt. Anschließend werden numerische Lösungsverfahren (Abschnitt 3.2) zur Lösung des entstandenen Gleichungssystems aufgeführt. Der Inhalt dieser beiden Abschnitte ist eine Zusammenfassung aus verschiedener Grundlagenliteratur, wie z.B. [Hackbusch, 1996] und [Hackbusch, 1993]. Zu Beginn der einzelnen Unter-Abschnitte sind die entsprechenden Werke vermerkt.

3.1 Diskretisierung

Die Diskretisierung ist dazu da, aus einem unendlichen, kontinuierlichen Problem, ein endliches, diskretes Problem zu erzeugen um es numerisch behandeln zu können. Es wird eine Separation der räumlichen und zeitlichen Koordinaten verwendet und zwischen der Orts- und der Zeit-Diskretisierung unterschieden.

3.1.1 Zeit-Diskretisierung

Nach der Orts-Diskretisierung ergibt sich ein System gewöhnlicher Differentialgleichungen. Lösungsmethoden hierfür sind u.a. in [Hairer und Wanner, 1996] zu finden. Betrachtet wird die Gleichung

$$\frac{\partial u(t)}{\partial t} = F(t, u(t)) \quad (3.1)$$

Für das Zeitintervall $[0, T]$ wird die (nicht notwendigerweise äquidistante) Unterteilung

$$0 = t^0 < \dots < t^n < \dots < t^{N_T} = T \quad (3.2)$$

mit Zeitpunkten t^n und Zeitschrittweiten $\tau^n := t^{n+1} - t^n$ (für $0 \leq n < N_T$) verwendet.

Die Gleichung (3.1) wird dann im Teilintervall $[t^n, t^{n+1}]$ mit einem *Einschrittverfahren* diskretisiert. Dieses kann *explizit* sein, gegeben durch

$$u(t^{n+1}) = u(t^n) + \tau^n \phi(t^n, u(t^n)) \quad (3.3)$$

mit Verfahrensfunktion ϕ , oder *implizit*, gegeben durch

$$u(t^{n+1}) = u(t^n) + \tau^n \phi(t^n, u(t^n), u(t^{n+1})). \quad (3.4)$$

Mögliche einfache Einschrittverfahren sind beispielsweise

- das *explizite Euler-Verfahren* mit $\phi(t^n, u(t^n)) := F(t^n, u(t^n))$

- das *implizite Euler-Verfahren* mit $\phi(t^n, u(t^n), u(t^{n+1})) := F(t^{n+1}, u(t^{n+1}))$.

Definition 3.1. Ein Einschrittverfahren mit fester Schrittweite $h := \tau^n$ ist *konsistent* von der Ordnung p , falls für alle $t \geq t^0$ gilt

$$\tau_h(t, u) = \mathcal{O}(h^p)$$

mit dem *lokalen Diskretisierungsfehler* $\tau_h(t, u) := \frac{u(t+h) - u(t)}{h} - \phi$.

Definition 3.2. Ein Einschrittverfahren mit fester Schrittweite $h := \tau^n$ ist *konvergent*, falls gilt

$$\lim_{h \rightarrow 0} e_h(t^n) = 0 \quad \text{für } 0 \leq n < N_T$$

mit dem *globalen Diskretisierungsfehler* $e_h(t^n) := u_h(t^n) - u(t^n)$, wobei $u(t^n)$ die exakte Lösung ist.

Für die Rechnungen in dieser Arbeit wurde das implizite Euler-Verfahren verwendet. Es ist konsistent erster Ordnung und in unserem Fall A-stabil, was bedeutet, dass sein Stabilitätsgebiet die komplette linke Halbebene der komplexen Zahlenebene enthält.

3.1.2 Finite-Volumen-Verfahren

Als Orts-Diskretisierung wird ein *Finite-Volumen-Verfahren*, genauer gesagt, ein Knotenzentriertes Finite-Volumen-Verfahren (engl. vertex-centered finite-volume method), das ein Verfahren zur Diskretisierung von Erhaltungsgleichungen darstellt, gewählt. Ebenso wie auch eine Finite-Elemente-Diskretisierung kann es auf beliebigen Geometrien mit strukturierten oder unstrukturierten Gittern verwendet werden und liefert ein robustes Schema. Außerdem wird eine lokale Flussserhaltung gewährleistet (die Methode ist lokal konservativ), was bei der Betrachtung von Strömungen (wie in dieser Arbeit) von großer Bedeutung ist.

Die Theorie dieses Abschnitts ist im wesentlichen aus [Hackbusch, 1989] und [Frolkovič, 1998b] übernommen. Für nähere Informationen sei aber auch auf [Bank und Rose, 1987], [Bey, 1998] und [Michev, 1996] verwiesen.

Betrachtet wird die elliptische Differentialgleichung

$$\begin{aligned} Lu(\mathbf{x}) &= f(\mathbf{x}) & \text{für } \mathbf{x} \in \Omega \\ u(\mathbf{x}) &= g(\mathbf{x}) & \text{für } \mathbf{x} \in \partial\Omega \end{aligned} \quad (3.5)$$

auf einem beschränkten Gebiet $\Omega \subset \mathbb{R}^d$ mit Differentialoperator L der Ordnung 2 gegeben durch

$$L = \sum_{|\alpha| \leq 1} \sum_{|\beta| \leq 1} (-1)^{|\beta|} D^\beta a_{\alpha\beta}(\mathbf{x}) D^\alpha \quad (3.6)$$

mit Multiindizes α und β . Da nicht von der Existenz einer klassischen Lösung $u \in C^2(\Omega) \cap C(\bar{\Omega})$ des Problems (3.5) ausgegangen werden kann, wird die sogenannte *Variationsformulierung* oder *schwache Formulierung* betrachtet:

$$\text{Suche } u \in H_0^1(\Omega) \quad \text{mit} \quad l(u, v) = F(v) \quad \forall v \in C_0^\infty(\Omega) \quad (3.7)$$

wobei die Bilinearform $l(u, v)$ gegeben ist durch

$$l(u, v) := \sum_{|\alpha| \leq 1} \sum_{|\beta| \leq 1} \int_{\Omega} a_{\alpha\beta} D^{\alpha} u(\mathbf{x}) D^{\beta} v(\mathbf{x}) d\mathbf{x} \quad (3.8)$$

und das Funktional $F(v)$ durch

$$F(v) := \int_{\Omega} f(\mathbf{x}) v(\mathbf{x}) d\mathbf{x}. \quad (3.9)$$

Die Lösung $u \in H_0^1(\Omega)$ wird dabei auch *schwache Lösung* des Problems genannt. Ist $u \in C^2(\Omega) \cap C(\bar{\Omega})$ eine klassische Lösung des Problems (3.5), dann ist u auch eine Lösung der Variationsformulierung.

Definition 3.3. Sei V ein Hilbertraum. Eine Bilinearform $l(\cdot, \cdot)$ heißt stetig (oder beschränkt), falls ein C_S existiert, sodass

$$|l(u, v)| \leq C_S \|u\|_V \|v\|_V \quad \forall u, v \in V \quad (3.10)$$

Definition 3.4. Sei V ein Hilbertraum. Eine Bilinearform $l(\cdot, \cdot)$ heißt V -elliptisch, falls sie auf $V \times V$ stetig ist und eine Zahl $C_E > 0$ existiert, sodass

$$l(v, v) \geq C_E \|v\|_V^2 \quad \forall v \in V \quad (3.11)$$

Satz 3.1. Ist die Bilinearform $l(\cdot, \cdot)$ $H_0^1(\Omega)$ -elliptisch, so existiert genau eine Lösung $u \in H_0^1(\Omega)$ des Problems (3.7). Sie erfüllt

$$\|u\|_{H_0^1(\Omega)} \leq \frac{1}{C_E} \|f\|_{H^{-1}(\Omega)} \quad (3.12)$$

Beweis. siehe [Hackbusch, 1996]. □

Nun soll das unendlich dimensionale Problem in ein endlich dimensionales überführt werden. Dazu wird der Raum $H_0^1(\Omega)$ durch die endlich dimensionalen Räume $V_{\mathcal{T}}, V_B \subset H_0^1(\Omega)$ ersetzt und es wird folgendes Problem betrachtet

$$\text{Suche } u \in V_{\mathcal{T}} \quad \text{mit} \quad l(u, v) = F(v) \quad \forall v \in V_B. \quad (3.13)$$

Für die Lösung des Problems und die Definition dieser Räume wird das Gebiet $\Omega \subset \mathbb{R}^d$ zunächst durch ein zulässiges konformes Gitter \mathcal{T}_{Ω} überdeckt. Dieses besteht in 2D aus Dreiecken und Vierecken und in 3D aus Tetraedern, Pyramiden, Prismen und Hexaedern. Die (endliche) Menge Ω_h von Gitter-Punkten $\mathbf{x}_i \in \Omega$ von \mathcal{T}_{Ω} sind die Eckpunkte der Elemente $e \in \mathcal{T}_{\Omega}$. Dabei bezeichnet $N := |\Omega_h|$ deren gesamte Anzahl und I ($I < N$) die Anzahl innerer Gitterpunkte, also der Gitterpunkte, die nicht auf $\partial\Omega$ liegen.

Weiterhin werden folgende Indexmengen definiert:

- $\Lambda^e := \{i : 1 \leq i \leq N, \mathbf{x}_i \in e\}$ die Indizes der Eckpunkte zum Element e
- $\Lambda_i := \{j : 1 \leq j \leq N, \mathbf{x}_j \text{ ist Nachbar zu } \mathbf{x}_i\}$ die Indizes der Nachbarknoten zu \mathbf{x}_i
- $\Lambda_i^e := \Lambda^e \cap \Lambda_i$ die Nachbarn zu \mathbf{x}_i im Element e .
- $\Lambda_i^b := \{j \in \Lambda_i, \mathbf{x}_j \in \partial\Omega\}$ die Indizes der Nachbarknoten zu \mathbf{x}_i , die auf dem Rand liegen

Für die Finite-Volumen-Diskretisierung wird nun zusätzlich ein *duales Gitter* eingeführt. Dazu wird um jeden Knotenpunkt \mathbf{x}_i ($i = 1, \dots, N$) eine Box B_i gelegt (vgl. Abb. 3.1).

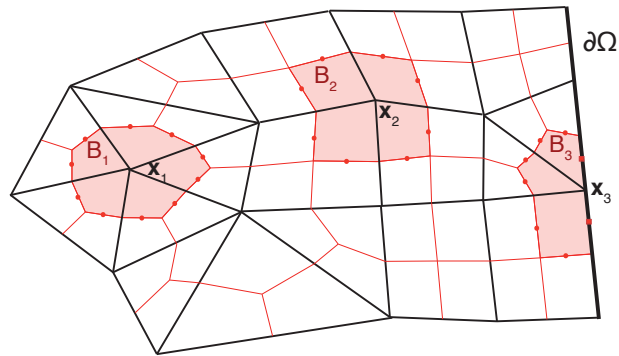


Abbildung 3.1: Diskretisierungs-Gitter über Ω . Schwarze Linien: Gitter, rote Linien: duales Gitter. In rot eingefärbt sind die Boxen B_i zu Gitterpunkten \mathbf{x}_i ($i = 1, 2, 3$, Nummerierung nur zur Illustration) und rote Punkte entsprechen den zugehörigen Integrationspunkten.

Allgemein muss ein Boxen-Netz auf einem Gitter folgende Bedingungen erfüllen:

1. $\mathbf{x}_i \in B_i$ und $\mathbf{x}_j \notin B_i$ für $\mathbf{x}_i, \mathbf{x}_j \in \Omega_h$ ($i, j = 1, \dots, N, i \neq j$)
2. B_i und B_j ($i, j = 1, \dots, N, i \neq j$) schneiden sich höchstens an ihren Rändern
3. $\bigcup_{i=1}^N \overline{B_i} = \overline{\Omega}$
4. $B_i \subset \bigcup_{i \in \Lambda^e} e$ und $B_i \cap e = \emptyset$ wenn $i \notin \Lambda^e$ ($i = 1, \dots, N$)

Die Boxen B_i werden nun als Polygone gewählt. Dabei werden sie in 2D so konstruiert, dass ihr Rand Γ_i die von \mathbf{x}_i ausgehenden Kanten in ihrem Mittelpunkt \mathbf{x}_{ij} ($i = 1, \dots, N, j \in \Lambda_i$) schneidet und in jedem zugehörigen Element e mit $i \in \Lambda^e$ aus zwei Geraden besteht, die \mathbf{x}_{ij} mit einem gemeinsamen Punkt \mathbf{x}^e in e verbinden, bezeichnet mit Γ_{ij}^e . Für Gitterknoten, die am Rand liegen, sind die Ränder noch nicht komplett, dort werden zusätzlich noch die Knoten \mathbf{x}_i mit den Kantenmittelpunkten \mathbf{x}_{ij} (für $j \in \Lambda_i^b$) verbunden, was als Randsegment Γ_{ij}^b bezeichnet wird.

Je nach Wahl des Punktes \mathbf{x}^e ergeben sich unterschiedliche Finite-Volumen Diskretisierungen mit unterschiedlichen Eigenschaften. Für diese Arbeit werden die *baryzentrischen* Finite-Volumen gewählt, bei denen \mathbf{x}^e durch den Schwerpunkt von e gegeben ist. Das duale Gitter wird also dadurch erzeugt, dass Kantenmittelpunkte mit Elementschwerpunkten verbunden werden. Diese Wahl ist ohne weitere Anforderungen an \mathcal{T}_Ω zu stellen anwendbar. Dabei wird jedes Element $e \in \mathcal{T}_\Omega$ in mehrere (z.B. drei bei Dreiecken) Teile geteilt.

In 3D werden die Randflächen Γ_{ij}^e dadurch erzeugt, dass vier Punkte mit Geraden verbunden werden und die dadurch umgebene Fläche Γ_{ij}^e definiert. Diese Punkte sind der Kantenmittelpunkt \mathbf{x}_{ij} , der Elementschwerpunkt \mathbf{x}^e von e und die beiden Schwerpunkte der Seitenflächen, die \mathbf{x}_i und \mathbf{x}_j enthalten.

Der gesamte Rand der Box B_i ist dann gegeben durch

$$\Gamma_i := \bigcup_{e: i \in \Lambda^e} \bigcup_{j \in \Lambda_i^e} \Gamma_{ij}^e \quad (i = 1, \dots, N)$$

bzw. für Randpunkte \mathbf{x}_i (mit $i \in I + 1, \dots, N$) durch

$$\Gamma_i \cup \Gamma_i^B \quad \text{mit} \quad \Gamma_i^B := \bigcup_{j \in \Lambda_i^b} \Gamma_{ij}^b \quad (i = I + 1, \dots, N)$$

Nach der Diskretisierung der räumlichen Gebiete, Ω durch \mathcal{T}_Ω und $[0, T]$ durch $\{t^n : n = 0, \dots, N_T\}$ (wie in Abschnitt 3.1.1), können die Unbekannten u_i^n durch

$$u_i^n \approx u(\mathbf{x}_i, t^n), \quad i = 1, \dots, N; n = 0, \dots, N_T \quad (3.14)$$

approximiert werden. Wenn möglich, wird dabei kürzer $u_i := u_i^n$ geschrieben.

Als Ansatzraum wird nun der Finite-Elemente Raum $V_{\mathcal{T}} \subset H_0^1(\Omega)$ gewählt, der aus stückweise linearen, global stetigen Funktionen mit Basisfunktionen $\Phi_i \in V_{\mathcal{T}}$, sogenannten *Hutfunktionen*, besteht.

$$\Phi_i(\mathbf{x}_j) = \begin{cases} 1 & \text{für } j = i \\ 0 & \text{für } j \neq i \end{cases} \quad \text{für } i, j = 1, \dots, N; \mathbf{x}_j \in \Omega_h \quad (3.15)$$

Damit lässt sich die Lösung zu einem bestimmten Zeitpunkt $t = t^n$ interpolieren durch

$$u^n = u^n(\mathbf{x}) := \sum_{i \in \Lambda^e} u_i^n \Phi_i(\mathbf{x}), \quad \mathbf{x} \in \Omega. \quad (3.16)$$

Der Testraum $V_B \subset H_0^1(\Omega)$ besteht aus stückweise konstanten Funktionen über dem Boxengitter $B := \{B_i : i = 1, \dots, N, \mathbf{x}_i \in \Omega_h\}$ mit Basis

$$\Phi_i^B := \begin{cases} 1 & \text{auf } B_i \\ 0 & \text{sonst} \end{cases}$$

Nun soll eine Konvektions-Diffusions-Gleichung betrachtet werden, wie sie z.B. auch durch Gleichung (2.2) gegeben ist, mit Differentialoperator

$$L = -\operatorname{div} \mathbf{D}(\mathbf{x}) \nabla \quad (3.17)$$

wobei $\mathbf{D} = \{D_{ij}\}_{i,j=1}^d$ und $D_{ij}(\mathbf{x}) \geq D_0 > 0$ ($i, j = 1, \dots, d$) für alle $\mathbf{x} \in \Omega$ ist, so dass Elliptizität garantiert wird.

Zur Bestimmung der Bilinearform wird das Skalarprodukt $\langle Lu^B, \Phi_i^B \rangle$ für $\Phi_i^B \in V_B$ ($i = 1, \dots, N$) betrachtet:

$$\int_{\Omega} -\operatorname{div}(\mathbf{D}(\mathbf{x}) \nabla u^B \cdot \Phi_i^B) \, d\mathbf{x} = \int_{B_i} -\operatorname{div}(\mathbf{D}(\mathbf{x}) \nabla u^B \cdot \Phi_i^B) \, d\mathbf{x} \quad (3.18)$$

$$= \int_{\Gamma_i} -\mathbf{D}(\mathbf{x}) \nabla(u^B \Phi_i^B) \cdot \mathbf{n}(\mathbf{x}) \, ds \quad (3.19)$$

wobei $\mathbf{n}(\mathbf{x})$ die äußere Normale an Γ_i darstellt.

Die Finite-Volumen-Lösung $u^B = \sum u_{h,i}^B \Phi_i \in V_{\mathcal{T}}$, wird dann bestimmt durch den Koeffizientenvektor \mathbf{u}_h^B als die Lösung des hier linearen Gleichungssystems mit I Gleichungen und positiv definiten Matrix \mathbf{L}_h^B :

$$\mathbf{L}_h^B \mathbf{u}_h^B = \mathbf{f}_h^B \quad (3.20)$$

mit ($i, j = 1, \dots, I$):

$$f_{h,j}^B := \int_{B_j} f(\mathbf{x}) \, d\mathbf{x} = \int_{\Omega} \Phi_j^B f \, d\mathbf{x} \quad (3.21)$$

$$L_{h,ij}^B = - \int_{\Gamma_i} \mathbf{D}(\mathbf{x}) \nabla(\Phi_j \Phi_i^B) \cdot \mathbf{n}(\mathbf{x}) \, ds \quad (3.22)$$

Allgemein ergibt sich für die Lösung eines Gleichungssystems $\mathbf{L}\mathbf{u} = \mathbf{f}$ auf Ω mit r Gleichungen ($\mathbf{u}, \mathbf{f} \in \mathbb{R}^r$, $\mathbf{L} \in \mathbb{R}^{r \times r}$) und geeigneten Randbedingungen ein diskretes Gleichungssystem $\mathbf{L}_h \mathbf{u}_h = \mathbf{f}_h$ mit $\mathcal{N} := N \cdot r$ Unbekannten.

3.2 Lösungsverfahren

In diesem Abschnitt werden verschiedene Methoden vorgestellt, die zur Lösung der gewonnenen diskreten Modell-Gleichungen dienen. Da diese nicht-linear sind, wird zunächst eine Newton-Iteration (vgl. Abschnitt 3.2.1) angewendet. Zur Lösung des darin entstehenden linearen Systems stehen uns verschiedene Ansätze zur Verfügung. In Abschnitt 3.2.2 werden klassische iterative Verfahren vorgestellt, in Abschnitt 3.2.3 das Mehrgitter-Verfahren und in Abschnitt 3.2.4 Krylow-Unterraum-Verfahren.

Für die Behandlung der halinen Grundwasserströmung hat es sich als sehr praktikabel erwiesen, für die Lösung des in jedem Schritt des Newton-Verfahrens entstehenden linearen Systems ein BiCGStab-Verfahren zu verwenden. Dieses wird beschleunigt durch die Vorkonditionierung mit einem Mehrgitter-Verfahren, in dem ein ILU-Glätter benutzt wird.

3.2.1 Nichtlineare Gleichungssysteme: Newton-Verfahren

Die Gleichung (bzw. das Gleichungssystem), das aus der Diskretisierung entsteht, ist zumeist nicht-linear. Zur Lösung werden iterative Verfahren benötigt, die die Lösung als Grenzwert einer Folge von Näherungen liefern. Dazu gehören z.B. das *Fixpunktverfahren* oder das *Newton-Verfahren*, welches hier verwendet wird. Für eine ausführliche Erläuterung sei hier beispielsweise auf [Deuffhard und Hohmann, 2002] verwiesen.

Zunächst wird in jedem Zeitschritt t^n die zu lösende Gleichung $\mathbf{L}_h \mathbf{u}_h = \mathbf{f}_h$ auf die Form

$$F(t^n, \mathbf{u}_h^n, \mathbf{u}_h^{n+1}) = 0 \quad (3.23)$$

gebracht. Die Newton-Iteration ist gegeben durch

$$\mathbf{x}_{m+1} = \mathbf{x}_m - \mathbf{J}_{\mathbf{x}_m} (F(t^n, \mathbf{u}_h^n, \mathbf{x}_m))^{-1} F(t^n, \mathbf{u}_h^n, \mathbf{x}_m) \quad (3.24)$$

mit der Jacobi-Matrix $\mathbf{J}_{\mathbf{x}_m} (F(t^n, \mathbf{u}_h^n, \mathbf{x}_m))$ von $F(t^n, \mathbf{u}_h^n, \mathbf{x}_m)$.

Satz 3.2. Sei $D \subset \mathbb{R}^N$ offen und konvex und $F(\mathbf{x}) \equiv F(t^n, \mathbf{u}_h^n, \mathbf{x}) : D \rightarrow \mathbb{R}^N$ eine stetige differenzierbare Funktion mit invertierbarer Jacobi-Matrix $\mathbf{J}_{\mathbf{x}}(F)$ für alle $\mathbf{x} \in D$. Es gelte für ein $\omega \geq 0$ die Lipschitz-Bedingung

$$\|\mathbf{J}_{\mathbf{x}}(\mathbf{x})^{-1}(\mathbf{J}_{\mathbf{x}}(\mathbf{x} + s\mathbf{v}) - \mathbf{J}_{\mathbf{x}}(\mathbf{x}))\mathbf{v}\| \leq s\omega\|\mathbf{v}\|^2$$

für alle $s \in [0, 1]$, $\mathbf{x} \in D$ und $\mathbf{v} \in \mathbb{R}^N$, so dass $\mathbf{x} + \mathbf{v} \in D$. Ferner existiere eine Lösung $\mathbf{x}^* \in D$ und ein Startwert $\mathbf{x}_0 \in D$ derart, dass

$$\rho := \|\mathbf{x}^* - \mathbf{x}_0\| < \frac{2}{\omega} \quad \text{und} \quad B_\rho(\mathbf{x}^*) \subseteq D.$$

Dann bleibt die durch das Newton-Verfahren definierte Folge $\{\mathbf{x}_m\}$ für $m > 0$ in der offenen Kugel $B_\rho(\mathbf{x}^*)$ und konvergiert gegen die dort eindeutige Lösung \mathbf{x}^* :

$$\|\mathbf{x}_m - \mathbf{x}^*\| < \rho \quad \text{für } m > 0 \quad \text{und} \quad \lim_{m \rightarrow \infty} \mathbf{x}_m = \mathbf{x}^*.$$

Die Konvergenzgeschwindigkeit lässt sich wie folgt abschätzen:

$$\|\mathbf{x}_{m+1} - \mathbf{x}^*\| < \frac{\omega}{2} \|\mathbf{x}_m - \mathbf{x}^*\|^2.$$

Beweis. siehe [Deuffhard und Hohmann, 2002] □

Nun muss in jedem Zeitschritt t^n das lineare System $\mathbf{J}_{\mathbf{x}_m} (F(t^n, \mathbf{u}_h^n, \mathbf{x}_m))^{-1} F(t^n, \mathbf{u}_h^n, \mathbf{x}_m)$ berechnet werden. Es gilt also allgemein $\mathbf{A}^{-1}\mathbf{b}$ mit $\mathbf{A} \in \mathbb{R}^{N \times N}$ und $\mathbf{b} \in \mathbb{R}^N$ zu berechnen, was dadurch gemacht wird, dass das Gleichungssystem $\mathbf{A}\mathbf{x} = \mathbf{b}$ gelöst wird und so $\mathbf{A}^{-1}\mathbf{b} = \mathbf{x}$ gilt.

3.2.2 Lineare Gleichungssysteme: Klassische iterative Verfahren

Betrachtet wird die diskrete lineare Gleichung

$$\mathbf{Ax} = \mathbf{b} \quad \mathbf{A} \in \mathbb{R}^{\mathcal{N} \times \mathcal{N}}, \mathbf{x} \in \mathbb{R}^{\mathcal{N}}, \quad (3.25)$$

die beispielsweise während eines Newtonschritts zu lösen ist. Damit dieses Gleichungssystem für alle $\mathbf{b} \in \mathbb{R}^{\mathcal{N}}$ lösbar ist, wird die Regularität von \mathbf{A} vorausgesetzt. Die Darstellung der Verfahren ist im wesentlichen aus [Meister, 2011] und [Hackbusch, 1993] übernommen, wo auch weiterführende Informationen gefunden werden können.

Ein *direktes* Lösungsverfahren, das nach endlich vielen Rechenoperationen die exakte Lösung berechnet hat, ist meist mit großem Rechenaufwand und Speicherbedarf verbunden. Deswegen werden zumeist *iterative* Methoden verwendet. Dabei wird die Lösung schrittweise angenähert, indem eine Rechenvorschrift

$$\mathbf{x}_{m+1} := \Phi(\mathbf{x}_m, \mathbf{b}) \quad \text{für } m = 0, 1, \dots \quad (3.26)$$

mit gewähltem Startvektor $\mathbf{x}_0 \in \mathbb{R}^{\mathcal{N}}$ wiederholt ausgeführt wird.

Definition 3.5. Ein *Iterationsverfahren* ist gegeben durch die (lineare oder nichtlineare) Abbildung $\Phi : \mathbb{R}^{\mathcal{N}} \times \mathbb{R}^{\mathcal{N}} \rightarrow \mathbb{R}^{\mathcal{N}}$.

Definition 3.6. Ein Iterationsverfahren Φ heißt *konsistent* zum Gleichungssystem (3.25), wenn für alle $\mathbf{b} \in \mathbb{R}^{\mathcal{N}}$ gilt: Jede Lösung \mathbf{x}^* von (3.25) ist ein Fixpunkt des Iterationsverfahrens:

$$\Phi(\mathbf{x}^*, \mathbf{b}) = \mathbf{x}^*$$

Definition 3.7. Ein Iterationsverfahren Φ heißt *konvergent*, wenn für alle $\mathbf{b} \in \mathbb{R}^{\mathcal{N}}$ ein vom Startwert \mathbf{x}_0 unabhängiger Grenzwert

$$\mathbf{x}^*(\mathbf{b}) = \lim_{m \rightarrow \infty} \mathbf{x}_m = \lim_{m \rightarrow \infty} \Phi(\mathbf{x}_{m-1}, \mathbf{b})$$

der Iterierten existiert.

Definition 3.8. Ein Iterationsverfahren Φ heißt *linear*, wenn $\Phi(\mathbf{x}, \mathbf{b})$ in \mathbf{x} und \mathbf{b} linear ist, d.h. wenn es Matrizen \mathbf{M} und \mathbf{N} gibt, so dass

$$\Phi(\mathbf{x}, \mathbf{b}) = \mathbf{M}\mathbf{x} + \mathbf{N}\mathbf{b}$$

Satz 3.3. Ein lineares Iterationsverfahren ist genau dann konsistent, wenn gilt:

$$\mathbf{M} = \mathbf{I} - \mathbf{N}\mathbf{A}$$

Beweis. s. [Hackbusch, 1993] □

Satz 3.4. Ein lineares Iterationsverfahren ist genau dann konvergent, wenn der Spektralradius der Iterationsmatrix \mathbf{M} die Bedingung $\rho(\mathbf{M}) < 1$ erfüllt.

Beweis. s. [Hackbusch, 1993] □

Satz 3.5. Sei Φ ein konsistentes und konvergentes lineares Iterationsverfahren. Dann sind \mathbf{A} und \mathbf{N} regulär und die Iterierten \mathbf{x}_m konvergieren gegen die eindeutige Lösung $\mathbf{x} = \mathbf{A}^{-1}\mathbf{b}$

Beweis. s. [Hackbusch, 1993] □

Nun wird \mathbf{A} aufgespalten in $\mathbf{A} = \mathbf{W} - \mathbf{R}$ mit \mathbf{W} regulär. Damit gilt

$$\mathbf{Ax} = \mathbf{b} \quad \Leftrightarrow \quad \mathbf{Wx} = \mathbf{Rx} + \mathbf{b},$$

woraus das konsistente Iterationsverfahren

$$\mathbf{Wx}^{m+1} = \mathbf{Rx}^m + \mathbf{b}$$

gewonnen werden kann.

Jacobi-Verfahren. Das Jacobi-Verfahren ergibt sich für

$$\mathbf{W} := \mathbf{D} := \text{diag}(\mathbf{A}) \quad \text{und} \quad \mathbf{R} := \mathbf{D} - \mathbf{A}.$$

Das Jacobi-Verfahren ist genau dann wohldefiniert, wenn $a_{ii} \neq 0$ für alle $i = 1, \dots, \mathcal{N}$.

Satz 3.6. Seien \mathbf{A} und $2\mathbf{D} - \mathbf{A}$ positiv definit mit $2\mathbf{D} > \mathbf{A} > 0$. Dann konvergiert das Jacobi-Verfahren:

$$\rho(\mathbf{M}^{Jac}) = \|\mathbf{M}^{Jac}\|_{\mathbf{A}} < 1$$

Beweis. s. [Hackbusch, 1993] □

Gauß-Seidel-Verfahren. Das Gauß-Seidel-Verfahren ergibt sich für

$$\mathbf{W} := \mathbf{D} - \mathbf{E} \quad \text{und} \quad \mathbf{R} := \mathbf{F},$$

wobei \mathbf{D} den Diagonalanteil von \mathbf{A} bezeichnet, \mathbf{E} die strikte untere Dreiecksmatrix und \mathbf{F} die strikte obere Dreiecksmatrix.

Damit das Gauß-Seidel-Verfahren wohldefiniert ist, muss die Indexmenge angeordnet sein und $a_{ii} \neq 0$ für alle $i = 1, \dots, \mathcal{N}$. Es hängt von der Anordnung der Indizes ab.

Satz 3.7. Sei $\mathbf{A} > 0$ positiv definit. Dann konvergiert das Gauß-Seidel-Verfahren:

$$\rho(\mathbf{M}^{GS}) \leq \|\mathbf{M}^{GS}\|_{\mathbf{A}} < 1$$

Beweis. s. [Hackbusch, 1993] □

ILU-Verfahren. Die sogenannte LU-Zerlegung $\mathbf{A} = \mathbf{LU}$ (engl. **l**ower **u**pper), also eine Zerlegung in obere und untere Dreiecksmatrizen, ist für schwach-besetzte Matrizen \mathbf{A} sehr ungeeignet, da die Matrizen \mathbf{L} und \mathbf{U} dabei deutlich mehr Nichtnullelemente enthalten als \mathbf{A} . Dies wird bei der ILU-Zerlegung (engl. **i**ncomplete), also einer unvollständigen Zerlegung in $\mathbf{A} = \mathbf{LU} - \mathbf{R}$, vermieden. Die ILU-Iteration ergibt sich nun mit

$$\mathbf{W} := \mathbf{LU} \quad \text{und} \quad \mathbf{R} := \mathbf{R}$$

Allerdings ist die Existenz der Zerlegung nicht immer gesichert, es gilt jedoch

Satz 3.8. Sei \mathbf{A} eine M-Matrix und das Muster der ILU-Zerlegung der Graph dieser Matrix. Dann existiert die ILU-Zerlegung.

Beweis. s. [Hackbusch, 1993] □

Satz 3.9. Sei \mathbf{A} eine M-Matrix. Dann konvergiert das ILU-Verfahren

$$\rho(\mathbf{M}^{ILU}) < 1$$

Beweis. s. [Hackbusch, 1993] □

3.2.3 Lineare Gleichungssysteme: Mehrgitterverfahren

Der Inhalt dieses Kapitels ist im wesentlichen an [Hackbusch, 1993] angelehnt. Für weiterführende Informationen sei darauf und auch auf [Hackbusch, 1985] verwiesen.

Mehrgitterverfahren bilden eine Klasse von Methoden zur effizienten Lösung von großen linearen Gleichungssystemen $\mathbf{Ax} = \mathbf{b}$ mit einer dünnbesetzten Matrix \mathbf{A} . Sie gehören zu den schnellsten Iterationen, da die Konvergenzrate unabhängig von der Schrittweite h ist.

Die in Abschnitt 3.2.2 vorgestellten Verfahren dämpfen die hochfrequenten, schnell oszillierenden Anteile des Fehlers stark und die niederfrequenten schwach. Dabei wird der hochfrequente Fehler reduziert und es entsteht ein glatterer Fehler, weswegen man von den beschriebenen Verfahren auch als *Glätter* spricht. Um nun ein Verfahren zu konstruieren, das den gesamten Fehler reduziert, wird die Idee benutzt, dass man eine glatte Funktion auf einem gröberen Gitter gut annähern kann. Der "glattere" Fehler wird also auf ein gröberes Gitter *restringiert*, wo er wegen der gröberen Gitterstruktur wieder als hochfrequent anzusehen ist. Er kann also erneut geglättet und auf ein noch gröberes Gitter transferiert werden. Dies wird solange gemacht, bis man beim größten Gitter ankommt. Dort kann das Gleichungssystem dann aufgrund der kleineren Dimension ohne großen numerischen Aufwand exakt, z.B. mit einer Gauß-Elimination, gelöst werden. Anschließend wird die errechnete Korrektur sukzessive auf die feineren Gitter *prolongiert*. Auf dem feinsten Level kann dann die Lösung korrigiert werden. Das ganze wird als *Grobgitterkorrektur* bezeichnet.

Das Mehrgitterverfahren besteht also aus zwei Komponenten, dem Glätter, der zunächst die hochfrequenten Anteile des Fehlers reduziert, und der Grobgitterkorrektur, mit der dann auch die niederfrequenten Anteile reduziert werden. Gute Konvergenzraten werden dabei erst durch eine geeignete Kombination der beiden Komponenten erreicht. Abhängig von der Wahl des

Glätters kann das Gleichungssystem mit einem Rechenaufwand der Ordnung $\mathcal{O}(\mathcal{N})$ gelöst werden.

Betrachtet wird eine das Gebiet Ω approximierende Gitterhierarchie Ω_ℓ ($\ell \in \{0, \dots, L\}$), wobei L der Anzahl an Gitterleveln entspricht, mit Gitterweite h_ℓ und $h_0 > \dots > h_\ell > \dots > h_L$. Dabei entspricht also Ω_0 dem größten Gitter und Ω_L dem feinsten. Seien nun V_ℓ die zugehörigen Ansatzräume. Der Gittertransfer wird dabei folgendermaßen bewerkstelligt:

Die *Prolongation* von $\Omega_{\ell-1}$ auf Ω_ℓ ist eine lineare, injektive Abbildung

$$\mathbf{p}_{\ell-1}^\ell : V_{\ell-1} \rightarrow V_\ell \quad \ell \in \{1, \dots, L\},$$

die vom groben auf das feine Gitter abbildet. Als Prolongation bietet sich die stückweise lineare (1D) bzw. bilineare (2D) Interpolation zwischen den Gitterpunkten von $\Omega_{\ell-1}$ an. Letztere kann durch den folgenden Stern

$$\mathbf{p} = \frac{1}{4} \begin{bmatrix} 1 & 2 & 1 \\ 2 & 4 & 2 \\ 1 & 2 & 1 \end{bmatrix} \quad (3.27)$$

ausgedrückt werden. Daneben sind auch Prolongationen höherer Ordnung oder auch matrix-abhängige Prolongationen in Gebrauch (siehe dazu [Hackbusch, 1993] und [Hackbusch, 1985]). Die *Restriktion* von Ω_ℓ auf $\Omega_{\ell-1}$ ist eine lineare, surjektive Abbildung

$$\mathbf{r}_{\ell-1}^{\ell-1} : V_\ell \rightarrow V_{\ell-1} \quad \ell \in \{1, \dots, L\},$$

die Feingitterfunktionen in Grobgitterfunktionen abbildet. Als Restriktion wird üblicherweise die Adjungierte der Prolongation gewählt:

$$\mathbf{r} := \mathbf{p}^T \quad (3.28)$$

Weiterhin wird eine Hierarchie von Gleichungssystemen benötigt. Durch die Diskretisierung (und evtl. Linearisierung mit einem Newton-Verfahren) wurde ein lineares Gleichungssystem auf dem feinsten Gitter erstellt. Daraus können dann beispielsweise mit dem *Galerkin-Produkt*

$$\mathbf{A}_{\ell-1} := \mathbf{r}_{\ell-1}^{\ell-1} \mathbf{A}_\ell \mathbf{p}_{\ell-1}^\ell \quad (3.29)$$

sukzessive die Grobgittermatrizen erzeugt werden oder alternativ können auf den gröberen Gittern ebenfalls die Gleichungssysteme durch die Diskretisierung bestimmt werden.

Mehrgitter-Algorithmus. Seien nun \mathbf{S}_ℓ die Glättungsoperationen auf Ω_ℓ . Dann lässt sich der Algorithmus eines Mehrgitterverfahrens zur Lösung von $\mathbf{A}_L \mathbf{x}_L = \mathbf{b}_L$ auf dem feinsten Gitterlevel Ω_L folgendermaßen darstellen:

Ausgehend von einem beliebigen Startwert $\mathbf{x}_L^{(0)} \in V_L$ werden Iterierte $\mathbf{x}_L^{(i)}$ bestimmt durch die Vorschrift $\mathbf{x}_L^{(i+1)} = \text{mgm}(L, \mathbf{x}_L^{(i)}, \mathbf{b}_L)$. Dabei wird die Grobgitterlösung dadurch gegeben, dass $\text{mgm}(0, \cdot, \mathbf{g}_0)$ die exakte Lösung $\mathbf{v}_0 = \text{mgm}(\ell = 0, \cdot, \mathbf{g}_0) = \mathbf{A}_0^{-1} \mathbf{g}_0$ berechnet.

Für $1 \leq \ell \leq L$ wird $\text{mgm}(\ell, \mathbf{x}_\ell^{(i)}, \mathbf{b}_\ell)$ rekursiv definiert durch:
 $\text{mgm}(\ell, \mathbf{x}_\ell^{(i)}, \mathbf{b}_\ell) =: \mathbf{x}_\ell^{(i+1)}$ und

1. $\bar{\mathbf{x}}_\ell := \mathbf{S}_\ell^{\nu_1} \mathbf{x}_\ell^{(i)}$ Vorglätten
 2. $\mathbf{d}_\ell := \mathbf{A}_\ell \bar{\mathbf{x}}_\ell - \mathbf{b}_\ell$ Berechnen des Defekts
 3. $\mathbf{d}_{\ell-1} := \mathbf{r}_\ell^{\ell-1} \mathbf{d}_\ell$ Restriktion des Defekts
 4. $\mathbf{v}_{\ell-1}^{(0)} := 0$ Defektgleichung.
- Für $z = 1$ bis $z = \gamma$ wird iteriert: $\mathbf{v}_{\ell-1}^{(z)} := \text{mgm}(\ell - 1, \mathbf{v}_{\ell-1}^{(z-1)}, \mathbf{d}_{\ell-1})$
5. $\mathbf{v}_\ell := \mathbf{p}_{\ell-1}^\ell \mathbf{v}_{\ell-1}^{(\gamma)}$ Prolongation der Lösung auf das feine Gitter
 6. $\tilde{\mathbf{x}}_\ell := \bar{\mathbf{x}}_\ell - \mathbf{v}_\ell$ Korrektur
 7. $\mathbf{x}_\ell^{(i+1)} := \mathbf{S}_\ell^{\nu_2} \tilde{\mathbf{x}}_\ell$ Nachglätten

Dabei geben ν_1 und ν_2 die Anzahl der Glättungsschritte an. Meist gilt dabei $\nu_1 + \nu_2 \leq 4$. Der Parameter γ bestimmt den Zyklus des Mehrgitterverfahrens (vgl. Abb. 3.2). Für $\gamma = 1$ erhält man den sogenannten *V-Zyklus*. Dies ist normalerweise die effektivste Wahl. In bestimmten Situationen wählt man auch $\gamma = 2$, den *W-Zyklus*, da der V-Zyklus nicht überall konvergiert. Andere Werte für γ kommen praktisch nicht vor.

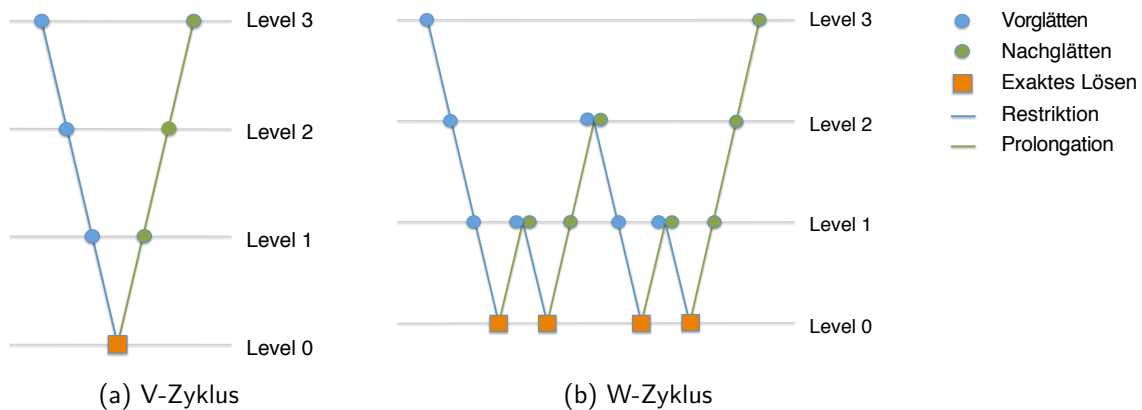


Abbildung 3.2: Möglichkeiten des Mehrgitterzyklus: V- und W-Zyklus.

Für den Nachweis der Konvergenz des Mehrgitterverfahrens werden die Approximations- und die Glättungseigenschaft benötigt.

Definition 3.9. Eine Hierarchie von Gleichungssystemen mit Matrizen \mathbf{A}_ℓ erfüllt die *Approximations-*

mationseigenschaft, wenn es eine Konstante $C_A \in \mathbb{R}$ unabhängig vom Gitterlevel ℓ gibt mit

$$\|\mathbf{A}_\ell^{-1} - \mathbf{p}_{\ell-1}^\ell \mathbf{A}_{\ell-1}^{-1} \mathbf{r}_\ell^{\ell-1}\| \leq \frac{C_A}{\|\mathbf{A}_\ell\|} \quad \text{für } \ell \in \{1, \dots, L\}, \quad (3.30)$$

Definition 3.10. Sei eine Hierarchie von Gleichungssystemen mit Matrizen \mathbf{A}_ℓ gegeben. Eine Iteration \mathcal{S}_ℓ erfüllt die *Glättungseigenschaft*, wenn es eine Funktion $\eta(\nu)$ unabhängig vom Gitterlevel ℓ gibt mit

$$\|\mathbf{A}_\ell \mathbf{S}_\ell^\nu\| \leq \eta(\nu) \|\mathbf{A}_\ell\| \quad \text{für } \nu \geq 1 \text{ und } \ell \in \{1, \dots, L\}, \quad (3.31)$$

$$\lim_{\nu \rightarrow \infty} \eta(\nu) = 0 \quad (3.32)$$

Mit diesen beiden Eigenschaften lässt sich eine Aussage über die Konvergenz des Zweigitterverfahrens machen.

Satz 3.10. *Es gelte die Approximationseigenschaft und die Glättungseigenschaft. Dann konvergiert das Zweigitterverfahren unabhängig von h und es ist*

$$\|\mathbf{T}_2(\nu, 0)\| = \|(\mathbb{I} - \mathbf{p}_0^1 \mathbf{A}_0^{-1} \mathbf{r}_1^0 \mathbf{A}_1) \mathbf{S}_1^\nu\| \leq \zeta < 1 \quad \forall \nu = \nu_1 + \nu_2 > \nu_0 \quad (3.33)$$

Beweis.

$$\|\mathbf{T}_2(\nu, 0)\| \leq \|\mathbf{A}_1^{-1} - \mathbf{p}_0 \mathbf{A}_0^{-1} \mathbf{r}_1\| \cdot \|\mathbf{A}_1 \mathbf{S}_1^\nu\| \leq \frac{C_A}{\|\mathbf{A}_1\|} \cdot \eta(\nu) \|\mathbf{A}_1\| = C_A \eta(\nu)$$

□

Die Konvergenz des Mehrgitterverfahrens kann unter einigen weiteren Annahmen aus der Konvergenz des Zweigitterverfahrens geschlossen werden (vgl. hierzu [Hackbusch, 1993]).

3.2.4 Lineare Gleichungssysteme: Krylow-Unterraum-Verfahren

Eine weitere Möglichkeit zur Lösung linearer Gleichungssysteme wird durch die Krylow-Unterraum-Verfahren gegeben (vgl. [Meister, 2011] und [Barrett et al., 1993]).

Definition 3.11. Eine *Krylow-Unterraum-Methode* ist eine Methode zur Lösung des linearen Gleichungssystems

$$\mathbf{A} \mathbf{x} = \mathbf{b} \quad \text{mit } \mathbf{A} \in \mathbb{R}^{\mathcal{N} \times \mathcal{N}} \text{ regulär, } \mathbf{b} \in \mathbb{R}^{\mathcal{N}} \quad (3.34)$$

durch Berechnungen von Näherungslösungen $\mathbf{x}_m \in \mathbf{x}_0 + K_m$ unter Berücksichtigung der Bedingung

$$(\mathbf{b} - \mathbf{A} \mathbf{x}_m) \perp L_m,$$

wobei $\mathbf{x}_0 \in \mathbb{R}^{\mathcal{N}}$ ein beliebiger Startvektor und K_m, L_m m -dimensionale Unterräume des $\mathbb{R}^{\mathcal{N}}$ sind und die Orthogonalität \perp durch das euklidische Skalarprodukt $\langle \cdot \rangle_2$ gegeben ist. Dabei wird K_m durch den *Krylow-Unterraum*

$$K_m = K_m(\mathbf{A}, \mathbf{r}_0) = \text{span}\{\mathbf{r}_0, \mathbf{A} \mathbf{r}_0, \dots, \mathbf{A}^{m-1} \mathbf{r}_0\}$$

mit $\mathbf{r}_0 = \mathbf{b} - \mathbf{A}\mathbf{x}_0$ dargestellt.

Sei nun zunächst \mathbf{A} symmetrisch positiv definit. Die Lösung der Gleichung (3.34) ist äquivalent zur Lösung des quadratischen Minimierungsproblems

$$F(\mathbf{x}) = \min_{\mathbf{y} \in \mathbb{R}^{\mathcal{N}}} F(\mathbf{y}) \quad \text{mit} \quad F(\mathbf{y}) := \frac{1}{2} \langle \mathbf{A}\mathbf{y}, \mathbf{y} \rangle_2 - \langle \mathbf{b}, \mathbf{y} \rangle_2. \quad (3.35)$$

Nun wird ein *Abstiegsverfahren* konstruiert, indem mit vorgegebener Folge von Suchrichtungen $\{\mathbf{p}_m\}_{m \in \mathbb{N}_0}$ aus $\mathbb{R}^{\mathcal{N}} \setminus \{0\}$ die folgende Iterationsvorschrift ausgeführt wird

$$\mathbf{x}_{m+1} = \mathbf{x}_m + \lambda_m \mathbf{p}_m \quad \text{mit} \quad \lambda_m = \frac{\langle \mathbf{r}_m, \mathbf{p}_m \rangle_2}{\langle \mathbf{A}\mathbf{p}_m, \mathbf{p}_m \rangle_2} \quad (3.36)$$

Der Vektor $\mathbf{r}_m := \mathbf{b} - \mathbf{A}\mathbf{x}_m = -\nabla F(\mathbf{x}_m)$, der dem negativen Gradienten entspricht, wird dabei als *Residuenvektor* bezeichnet.

Beim *Gradientenverfahren* wird nun gerade die Richtung des stärksten Abfalls von $F(\cdot)$ im Punkt \mathbf{x}_m als Suchrichtung $\mathbf{p}_m = \mathbf{r}_m$ gewählt. Dieses Verfahren ist global konvergent, jedoch sehr langsam, da das Konvergenzverhalten stark oszillatorisch ist. Die Konvergenzgeschwindigkeit hängt dabei stark von der Kondition der Matrix ab.

Die Idee des *Verfahrens der konjugierten Gradienten*, oder kurz *CG-Verfahren* (engl. conjugate gradient, ursprünglich von [Hestenes und Stiefel, 1952]), wählt nun immer eine Richtung aus, die konjugiert zu allen vorangehenden Richtungen ist.

Definition 3.12. Sei $\mathbf{A} \in \mathbb{R}^{\mathcal{N} \times \mathcal{N}}$. Vektoren $\mathbf{p}_0, \dots, \mathbf{p}_m \in \mathbb{R}^{\mathcal{N}}$ heißen paarweise *konjugiert* oder *A-orthogonal*, falls

$$\langle \mathbf{p}_i, \mathbf{p}_j \rangle_{\mathbf{A}} := \langle \mathbf{A}\mathbf{p}_i, \mathbf{p}_j \rangle_2 = 0 \quad \forall i, j \in \{0, \dots, m\} \text{ und } i \neq j$$

Das CG-Verfahren berechnet nun zu vorgegebenem Startwert $\mathbf{x}_0 \in \mathbb{R}^{\mathcal{N}}$ mit $\mathbf{r}_0 := \mathbf{p}_0 := \mathbf{b} - \mathbf{A}\mathbf{x}_0$ die Vorschrift

$$\lambda_m = \frac{\|\mathbf{r}_m\|_2^2}{\langle \mathbf{A}\mathbf{p}_m, \mathbf{p}_m \rangle_2} \quad (3.37)$$

$$\mathbf{x}_{m+1} = \mathbf{x}_m + \lambda_m \mathbf{p}_m, \quad \mathbf{r}_{m+1} = \mathbf{r}_m - \lambda_m \mathbf{A}\mathbf{p}_m \quad (3.38)$$

$$\beta_m = \frac{\|\mathbf{r}_{m+1}\|_2^2}{\|\mathbf{r}_m\|_2^2}, \quad \mathbf{p}_{m+1} = \mathbf{r}_{m+1} + \beta_m \mathbf{p}_m \quad (3.39)$$

solange bis $\|\mathbf{r}_m\|_2 = 0$. Die Iteration endet spätestens nach \mathcal{N} Iterationen mit der exakten Lösung.

Dieses Verfahren ist sehr effektiv, wenn die Koeffizientenmatrix symmetrisch positiv definit ist, da nur eine begrenzte Anzahl an Vektoren gespeichert werden muss. Allerdings kann insbesondere die Symmetrie bei vielen Beispielen, wie auch bei der Konvektions-Diffusionsgleichung, nicht gewährleistet werden.

Deswegen versucht man Verfahren zu finden, die auch auf unsymmetrische Probleme angewen-

det werden können. Dies ist für das *BiCG-Verfahren* (vgl. [Fletcher, 1976]) der Fall. Durch die simultane Betrachtung der Gleichungssysteme $\mathbf{A}\mathbf{x} = \mathbf{b}$ und $\mathbf{A}^T\mathbf{x} = \mathbf{b}$ werden zwei CG-ähnliche Sequenzen von Vektoren generiert, die gemeinsam orthogonalisiert („bi-orthogonal“) werden. Dieses Verfahren ist sinnvoll, wenn die Matrix nicht symmetrisch und nicht singulär ist. Nachteile des Verfahrens sind, dass Oszillationen im Konvergenzverhalten auftreten können und dass ein Abbruch der Methode ohne die Lösung möglich ist. Außerdem benötigt das BiCG-Verfahren in jedem Iterationsschritt eine Multiplikation nicht nur mit der Koeffizientenmatrix sondern auch mit ihrer Transponierten.

Eine Weiterentwicklung des Bi-CG-Verfahrens ergibt das *CGS-Verfahren* (engl. conjugate gradient squared, vgl. [Sonneveld, 1989]). Hierbei werden die beiden Vektorsequenzen durch Multiplikation mit dem gleichen von \mathbf{A} abhängigen Polynom berechnet, wodurch der Zugriff auf die Matrix \mathbf{A}^T entfällt. Dadurch wird das Konvergenzverhalten schneller als beim BiCG-Verfahren sein, es treten jedoch auch die Instabilitäten wesentlich deutlicher auf.

Das *BiCGStab-Verfahren* (engl. BiConjugate Gradient Stabilized, [Van der Vorst, 1992]) ist nun eine stabilisierte Variante des BiCG-Verfahrens, die ein schnelleres und glatteres Konvergenzverhalten als dieses aufweist. Es werden gezielt unterschiedliche Polynome bei der Definition der Suchrichtungen und Residuenvektoren betrachtet, womit bei jeder Iteration ein zusätzlicher Freiheitsgrad zur Verfügung steht, der zur Minimierung des Residuums genutzt wird.

Das BiCGStab-Verfahren berechnet nun zu vorgegebenem Startwert $\mathbf{x}_0 \in \mathbb{R}^N$ und $\epsilon > 0$ mit $\mathbf{r}_0 := \mathbf{p}_0 := \mathbf{b} - \mathbf{A}\mathbf{x}_0$ die Vorschrift

$$\alpha_m = \frac{\langle \mathbf{r}_m, \mathbf{r}_0 \rangle_2}{\langle \mathbf{A}\mathbf{p}_m, \mathbf{r}_0 \rangle_2}, \quad \mathbf{s}_m = \mathbf{r}_m - \alpha_m \mathbf{A}\mathbf{p}_m, \quad \omega_m = \frac{\langle \mathbf{A}\mathbf{s}_m, \mathbf{s}_m \rangle_2}{\langle \mathbf{A}\mathbf{s}_m, \mathbf{A}\mathbf{s}_m \rangle_2} \quad (3.40)$$

$$\mathbf{x}_{m+1} = \mathbf{x}_m + \alpha_m \mathbf{p}_m + \omega_m \mathbf{s}_m, \quad \mathbf{r}_{m+1} = \mathbf{s}_m - \omega_m \mathbf{A}\mathbf{s}_m \quad (3.41)$$

$$\beta_m = \frac{\alpha_m \langle \mathbf{r}_{m+1}, \mathbf{r}_0 \rangle_2}{\omega_m \langle \mathbf{r}_m, \mathbf{r}_0 \rangle_2}, \quad \mathbf{p}_{m+1} = \mathbf{r}_m + \beta_m (\mathbf{p}_m - \omega_m \mathbf{A}\mathbf{p}_m) \quad (3.42)$$

solange bis $\|\mathbf{r}_m\|_2 < \epsilon$.

Bei allen diesen Verfahren hängt die Konvergenzgeschwindigkeit von der Kondition $\kappa(\mathbf{A}) := \|\mathbf{A}\|_2 \|\mathbf{A}^{-1}\|_2$ der Matrix ab. Deswegen wird versucht das Gleichungssystem so zu transformieren, dass die Lösung immer noch die gleiche ist, allerdings die Matrix besser konditioniert ist. Eine solche Transformationsmatrix wird *Vorkonditionierer* genannt.

In dieser Arbeit wurde ein Mehrgitterverfahren als Vorkonditionierer des BiCGStab-Verfahrens gewählt.

4 Problemangepasste Anwendung der Numerik

In diesem Abschnitt soll die Numerik genauer für das betrachtete Problem erläutert werden. Da die entscheidende Schwierigkeit in der Behandlung des vorliegenden Problems in der Handhabung der Klüfte liegt, stellt diese auch einen zentralen Punkt dar.

Für die Modellierung der Klüfte werden zunächst zwei unterschiedliche Ansätze verfolgt. Im ersten werden die Klüfte komplett aufgelöst und d -dimensional betrachtet. Die Finite-Volumen-Diskretisierung der zugrunde liegenden Modellgleichungen wird in Abschnitt 4.1 aufgeführt, es werden die entstehenden Integrale und ihre Approximationen angegeben. Demgegenüber steht der zweite Ansatz, in dem die Klüfte $(d-1)$ -dimensional betrachtet werden. Die Diskretisierung für diesen Fall ist in Abschnitt 4.2 zu finden.

Aufgrund der anisotropen Kluftgeometrie, die numerisch sehr ungünstige Gitterelemente mit einem schlechten Seitenverhältnis hervorruft, können im d -dimensionalen Fall Probleme in der Konvergenz des linearen Löser auftreten. Um dem entgegen zu wirken, war bisher eine sehr hohe Auflösung gefolgt von enormem Speicher- bzw. Rechenaufwand erforderlich. In Abschnitt 4.3.1 soll nun ein Mehrgitterverfahren vorgestellt werden, das in der Grobgitterkorrektur auf Approximationen aus dem $(d-1)$ -dimensionalen Modell zurückgreift und so auch bei einer geringeren Auflösung Konvergenz erlaubt.

Abschließend wird in Abschnitt 4.3.2 noch eine Methode motiviert, die abhängig von den lokalen Gegebenheiten entweder das d - oder das $(d-1)$ -dimensionale Modell für die Klüfte verwendet und die Klüfte nur auflöst, wenn die Auflösung tatsächlich wichtige aussagekräftige Informationen liefert, die aus dem $(d-1)$ -dimensionalen Modell nicht gewonnen werden können.

4.1 d -dimensionaler Ansatz

Im d -dimensionalen Modell hat die Kluft dieselbe Dimension wie das sie umgebende Medium und es werden die Gleichungen (2.12) und (2.13) sowohl in der Kluft \mathcal{F} als auch im Medium \mathcal{M} gelöst. Für die Diskretisierung unter Anwendung der Finite-Volumen-Methode wird über die Kontroll-Volumen integriert (siehe Kapitel 3.1). Dabei ergeben sich für jede Box B_i ($i = 1, \dots, N$) und jedes Zeitintervall $(t^{n-1}, t^n) \subset (0, T)$ die folgenden Integrale. Die Darstellung in diesem Abschnitt beruht hierbei auf den Arbeiten von [Frolkovič, 1998b], [Frolkovič et al., 1997] und [Thiele, 1999].

$$\int_{B_i} (\phi_\alpha \varrho_\alpha)(t^n) \, d\mathbf{x} - \int_{B_i} (\phi_\alpha \varrho_\alpha)(t^{n-1}) \, d\mathbf{x} + \int_{t^{n-1}}^{t^n} \int_{\Gamma_i} \varrho_\alpha \mathbf{q}_\alpha \cdot \mathbf{n} \, ds \, dt = 0 \quad (4.1)$$

$$\int_{B_i} (\phi_\alpha \varrho_\alpha \omega_\alpha)(t^n) \, d\mathbf{x} - \int_{B_i} (\phi_\alpha \varrho_\alpha \omega_\alpha)(t^{n-1}) \, d\mathbf{x} + \int_{t^{n-1}}^{t^n} \int_{\Gamma_i} (\varrho_\alpha \omega_\alpha \mathbf{q}_\alpha + \mathbf{J}_\alpha) \cdot \mathbf{n} \, ds \, dt = 0 \quad (4.2)$$

Die Approximation der Integrale unter Benutzung des impliziten Euler-Verfahrens (3.1.1) führt auf die diskreten Gleichungen

$$|B_i| \phi_{\alpha i} (\varrho_{\alpha i}^n - \varrho_{\alpha i}^{n-1}) + \tau^n \sum_{j \in \Lambda_i} \sum_{e \in \Lambda_{ij}} |\Gamma_{ij}^e| \varrho_{\alpha ij}^e \mathbf{q}_{\alpha ij}^e \cdot \mathbf{n}_{ij}^e = 0 \quad (4.3)$$

$$|B_i| \phi_{\alpha i} (\varrho_{\alpha i}^n \omega_{\alpha i}^n - \varrho_{\alpha i}^{n-1} \omega_{\alpha i}^{n-1}) + \tau^n \sum_{j \in \Lambda_i} \sum_{e \in \Lambda_{ij}} |\Gamma_{ij}^e| (\varrho_{\alpha ij}^e \mathbf{q}_{\alpha ij}^e \mathcal{K}_{ij}^e + \mathbf{J}_{\alpha ij}^e) \cdot \mathbf{n}_{ij}^e = 0 \quad (4.4)$$

wobei mit $\omega_{\alpha i} := \omega_{\alpha}(\mathbf{x}_i)$ und $\varrho_{\alpha i} := \varrho(\omega_{\alpha i})$ der Wert am Knoten \mathbf{x}_i und mit $\omega_{\alpha ij}^e := \omega_{\alpha}(\mathbf{x}_{ij}^e)$ und $\varrho_{\alpha ij}^e := \varrho(\omega_{\alpha ij}^e)$ der Wert am Integrationspunkt \mathbf{x}_{ij}^e bezeichnet wird. Dabei wird \mathcal{K}_{ij}^e abhängig von dem gewünschten *Upwind-Verfahren* gewählt

- kein upwind:

$$\mathcal{K}_{ij}^e := \omega_{\alpha ij}^e = \frac{1}{2}(\omega_{\alpha i} + \omega_{\alpha j})$$

- volles upwind:

$$\mathcal{K}_{ij}^e := \begin{cases} \omega_{\alpha i} & \text{falls } \mathbf{q}_{\alpha ij}^e \cdot \mathbf{n}_{ij}^e \geq 0 \\ \omega_{\alpha j} & \text{falls } \mathbf{q}_{\alpha ij}^e \cdot \mathbf{n}_{ij}^e < 0 \end{cases}$$

- partielles upwind:

$$\mathcal{K}_{ij}^e := \begin{cases} \frac{1}{2}(\omega_{\alpha i} + \omega_{\alpha j}) & \text{falls } |P_{ij}^e| \leq 2 \\ \omega_{\alpha i} \left(\frac{1}{2} + \frac{|P_{ij}^e|/2-1}{P_{ij}^e} \right) + \omega_{\alpha j} \left(\frac{1}{2} - \frac{|P_{ij}^e|/2-1}{P_{ij}^e} \right) & \text{falls } |P_{ij}^e| > 2 \end{cases}$$

wobei P_{ij}^e die *lokale Peclet-Zahl* beschreibt, gegeben durch

$$P_{ij}^e := \frac{|\Gamma_{ij}^e| \mathbf{q}_{\alpha ij}^e \cdot \mathbf{n}_{ij}^e}{d_{ij}^e} \quad (4.5)$$

mit lokaler Diffusion $d_{ij}^e = \left(\sum_{k \in \Lambda_i^e} |\Gamma_{ik}^e| \mathbf{n}_{ik}^e \right) \cdot \mathbf{D}_{ij}^e \cdot \nabla \Phi_j(\mathbf{x}_{ij}^e)$ und den Hutfunktionen Φ_j (Gleichung (3.15)).

Dabei ist das volle Upwind-Schema dann sinnvoll zu verwenden, wenn die Strömung im gesamten Gebiet über das gesamte Zeitintervall stark konvektionsdominiert ist. Der Konvektionsterm ist dabei abhängig von der Richtung der Geschwindigkeit und es wird für die Konzentration der Wert an dem Knoten der in negativer Geschwindigkeitsrichtung liegt, gewählt. Bei der halinen Strömung, wo die Geschwindigkeit sehr variieren kann, kann das volle Upwinding allerdings auch zu sogenannten künstlichen Diffusionen führen. Dabei kann es sinnvoller sein, z.B. ein partielles Upwinding (vgl. auch [Ikeda, 1983] und [Patankar, 1980]) zu wählen, das kein upwinding benutzt, wenn die lokale Peclet-Zahl klein genug ist (feines Gitter, kleine lokale Geschwindigkeiten,...), und andernfalls die Standard-Interpolation. Dadurch wird die Veränderung minimal gehalten und so ein genaueres Ergebnis erzielt.

In dieser Arbeit wird überwiegend ein partielles Upwinding verwendet, einzig bei Untersuchungen

zur Forchheimer-Korrektur (vgl. Abschnitt 2.2.2) hat sich ein volles Upwinding als angebrachter gezeigt.

Wie auch schon durch die Upwind-Verfahren, sollte bei der Anwendung der Diskretisierung beachtet werden, dass möglichst wenig numerische Fehler entstehen. Wenn für Konzentration und Druck dieselben Ansatzfunktionen (beispielsweise bilinear) benutzt werden, ist die Approximation der Geschwindigkeit $\mathbf{q}_{\alpha ih}^e$ nicht konsistent, da ∇p und $\varrho \mathbf{g}$ dann zu unterschiedlichen Klassen gehören (linear bzw. bilinear). So kann es vor allem zu künstlichen Geschwindigkeiten kommen, die selbst in dem Fall auftreten, wenn die Geschwindigkeit eigentlich verschwindet, wodurch eine unrealistische Salzverteilung zustande kommen kann. Um dieses Problem zu beheben wurde eine *konsistente Geschwindigkeits-Approximation* eingeführt (vgl. [Voss und Souza, 1987], [Frolkovič und Knabner, 1996] and [Frolkovič, 1998a]). Dabei wird die Berechnung auf einem Referenzelement \tilde{e} ausgeführt. Mit der Jacobimatrix der Transformation \mathbf{J} ergibt sich für die Geschwindigkeit $\tilde{\mathbf{q}}$ auf dem Referenzelement

$$\tilde{\mathbf{q}} = \mathbf{J}^{-1}(-\tilde{\nabla} \tilde{p} + \tilde{\varrho} \tilde{\mathbf{g}}) \quad (4.6)$$

Für den 2D-Fall ist die Approximation gegeben durch (vgl. [Frolkovič und Knabner, 1996])

$$\tilde{\varrho} \tilde{\mathbf{g}} = \begin{pmatrix} \partial_\xi (\int \tilde{\varrho} d\xi) \tilde{g}_\xi \\ \partial_\eta (\int \tilde{\varrho} d\eta) \tilde{g}_\eta \end{pmatrix}. \quad (4.7)$$

Für Dreiecke (und in 3D für Tetraeder) wurde in [Frolkovič, 1998a] auch folgende Approximation vorgeschlagen

$$\tilde{\mathbf{q}} := -\nabla(\tilde{p} + \tilde{h}) + \tilde{h}_y \mathbf{e}_y \quad (4.8)$$

mit

$$h = h(y, z) := \int_{z_0}^z \tilde{\varrho}(y, \theta) g d\theta, \quad h_y = h_y(y, z) := \int_{z_0}^z \partial_y \tilde{\varrho}(y, \theta) g d\theta \quad (4.9)$$

wobei $\mathbf{x} := (y, z) \in \mathbb{R}^2$, $\mathbf{g} := (0, -g)$, $\mathbf{e}_y := (1, 0)$ und die Funktion h auf den Approximationsraum von \tilde{p} und die Funktion h_y auf den Raum von $\tilde{\omega}$ projiziert wird.

Dabei liefert (4.8) die bessere Approximation. Für eine ausführlichere Darstellung sei auf die oben genannten Arbeiten verwiesen.

4.2 $(d - 1)$ -dimensionaler Ansatz

Bei diesem Ansatz wird die Kluft durch eine Hyperfläche niederer Dimensionalität approximiert. Dieser Ansatz ist wegen der langgestreckten, dünnen Kluftgeometrie sehr naheliegend, allerdings werden spezifische Effekte, die in der Kluft auftreten können, vernachlässigt. In vielen in der Literatur verbreiteten Ansätzen werden dabei auch Gradienten in der Kluft senkrecht zur Kluftausdehnung vernachlässigt (vgl. u.a. [Martin et al., 2005], [Reichenberger et al., 2006] oder [D'Angelo und Scotti, 2012]). Der in dieser Arbeit verfolgte Ansatz ermöglicht jedoch auch eine Approximation des Gradienten in Normalenrichtung.

Es sollen die Gleichungen (2.58) und (2.59) in der Kluft \mathcal{F} zusammen mit (2.62) und (2.63) im Medium \mathcal{M} gelöst werden. Dazu wird die Diskretisierung, wie sie in [Grillo et al., 2010b], [Reiter et al., 2013b] und [Reiter et al., 2013a] eingeführt und in [Grillo et al., 2013] für die Forchheimer-Korrektur angepasst wurde, benutzt.

Zunächst wird angenommen, dass die Klüfte \mathcal{S} stückweise planar sind und für jedes Element $e \in \mathcal{T}_\Omega$ der Schnitt $e \cap \mathcal{S}$ entweder leer ist oder nur aus Ecken, ganzen Seiten und ganzen Kanten von e besteht. Nun wird \mathcal{S} durch das $(d-1)$ -dimensionale Gitter $\mathcal{T}_\mathcal{S} := \{e \cap \mathcal{S} : e \in \mathcal{T}_\Omega, e \cap \mathcal{S} \text{ ist Seite von } e\}$ überdeckt.

Für die Diskretisierung müssen nun auch die Kontroll-Volumen speziell definiert werden. Sei

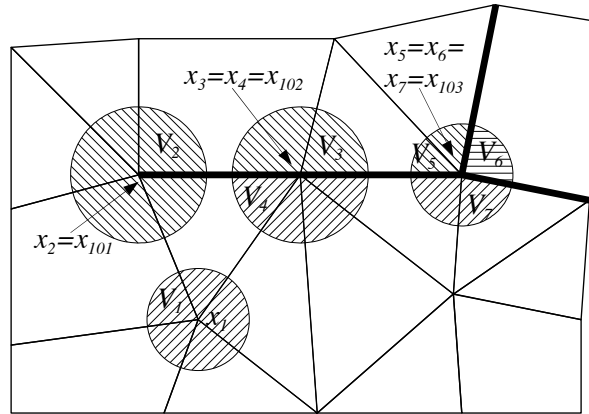


Abbildung 4.1: Nummerierung der Gitterknoten in einem Teilgebiet des Gitters mit $N = 100$. Die dicken Linien stellen die Klüfte \mathcal{F} dar.

$\mathcal{S}_h := \Omega_h \cap \mathcal{S}$ und $N_f := |\mathcal{S}_h|$. Da an jedem Punkt $\mathbf{x} \in \mathcal{S}_h$ mehrere Werte benötigt werden, wird eine spezielle Nummerierung der Gitterpunkte eingeführt, so dass mehrere Indizes zu einem \mathbf{x} gehören. So können die Freiheitsgrade anstelle von geometrischen Positionen diesen Indizes zugeordnet werden. Dazu wird für jeden Gitterpunkt $\mathbf{x} \in \Omega_h$ eine Kugel $V(\mathbf{x}) := \{\mathbf{y} : \|\mathbf{y} - \mathbf{x}\|_2 < \frac{1}{2} \text{dist}(\mathbf{x}, \mathcal{T}_\Omega)\}$ definiert mit dem minimalen Abstand $\text{dist}(\mathbf{x}, \mathcal{T}_\Omega)$ von \mathbf{x} zu den Kanten (bzw. Seiten) der Elemente $e \in \mathcal{T}_\Omega$, die \mathbf{x} nicht enthalten. Diese Kugeln werden von den Klüften \mathcal{S} in disjunkte, offene Teilmengen geteilt (vgl. Abb. 4.1). Für jedes $\mathbf{x} \in \Omega_h$ werden diese mit $V_1, \dots, V_{N'}$ mit $N' \geq N = |\Omega_h|$ bezeichnet. Dabei ist zu beachten, dass für $\mathbf{x} \in \Omega_h \setminus \mathcal{S}_h$ oder $\mathbf{x} \in \mathcal{S}_h \cap \hat{\mathcal{B}}$ die Kugel $V(\mathbf{x})$ von \mathcal{S} nicht geschnitten wird, also $V(\mathbf{x})$ in einen Teil geteilt wird. Nun beinhaltet also jedes \bar{V}_i genau ein $\mathbf{x} \in \Omega_h$, welches mit \mathbf{x}_i bezeichnet wird. Zusätzlich werden die Indizes $N' + 1, \dots, N' + N_f$ für alle Punkte aus \mathcal{S}_h vergeben, so dass $\mathcal{S}_h = \{\mathbf{x}_{N'+1}, \mathbf{x}_{N'+N_f}\}$.

Für die Definition der Kontrollvolumina werden analog zu Kapitel 3.1.2 folgende Indextmengen definiert

- Die Indizes der Eckpunkte zum Element e :

$$\Lambda^e := \begin{cases} \{i : 1 \leq i \leq N', \mathbf{x}_i \in e, V_i \cap e \neq \emptyset\} & \text{für } e \in \mathcal{T}_\Omega \\ \{i : N' \leq i \leq N' + N_f, \mathbf{x}_i \in e\} & \text{für } e \in \mathcal{T}_\mathcal{S} \end{cases}$$

- Die Verbindung zwischen zur Kluft und zum Medium gehörenden Freiheitsgraden am Punkt $\mathbf{x}_i \in \mathcal{S}_h$:

$$\hat{\Lambda}_i := \begin{cases} \{j : N' < j \leq N' + N_f, \mathbf{x}_i = \mathbf{x}_j\} & \text{für } i \leq N' \\ \{j : 1 \leq j \leq N', \mathbf{x}_i = \mathbf{x}_j\} & \text{für } i > N' \end{cases}$$

Für $i \leq N'$ gilt somit $|\hat{\Lambda}_i| \leq 1$.

- $\Lambda_i^e := \begin{cases} \Lambda^e \setminus \{i\} & \text{für } i \in \Lambda^e \\ \emptyset & \text{sonst} \end{cases}$

Damit gibt $\Lambda_i := \bigcup_{e \in \mathcal{T}_\Omega} \Lambda_i^e$ alle Nachbarn von \mathbf{x}_i an.

Jetzt können die Kontrollvolumina B_i für $1 \leq i \leq N'$ mit Randsegmenten $\Gamma_{ij}^e := e \cap \partial B_i \cap \partial B_j$ für $j \leq N'$ definiert werden. Zusätzlich werden noch $\Gamma_{ij}^e := e \cap \partial B_i \cap \mathcal{S}$ für $j \in \hat{\Lambda}_i$ und $\Gamma_{i0}^e := e \cap \partial B_i \cap \partial \Omega$ definiert. Damit ergibt sich der gesamte Rand von B_i zu

$$\Gamma_i = \bigcup_{e \in \Lambda^e} \bigcup_{j \in \Lambda_i^e \cup \hat{\Lambda}_i \cup \{0\}} \Gamma_{ij}^e \quad (4.10)$$

Auf \mathcal{S} werden $(d - 1)$ -dimensionale Kontrollvolumina S_i ($i > N'$) definiert:

$$S_i := \bigcup_{j \in \hat{\Lambda}_i} \bigcup_{e \in \mathcal{T}_\Omega: j \in \Lambda^e} \Gamma_{ji}^e. \quad (4.11)$$

Für $e \in \mathcal{T}_\mathcal{S}$ werden dann die Randsegmente σ_{ij}^e von S_i analog zu Γ_{ij}^e als $\sigma_{ij}^e := e \cap \partial S_i \cap \partial S_j$ für $i, j > N'$ definiert und σ_{i0}^e beschreibt den Schnitt von $e \cap \partial S_i$ mit der Kante der Kluft.

Integration über jede Box B_i (siehe 3.1) und jedes Zeitintervall $(t^{n-1}, t^n) \subset (0, T)$ ergibt für die Gleichungen im Medium (2.62) und (2.63) mit $\varrho_\alpha^n := \varrho(\hat{\omega}_\alpha^n)$:

$$\int_{B_i} (\phi_m \varrho_m)(t^n) d\mathbf{x} - \int_{B_i} (\phi_m \varrho_m)(t^{n-1}) d\mathbf{x} + \int_{t^{n-1}}^{t^n} \sum_{e, j \in \Gamma_{ij}^e} \varrho_m \hat{\mathbf{q}}_m \cdot \mathbf{n}_{ij}^e ds dt = 0 \quad (4.12)$$

$$\int_{B_i} (\phi_m \varrho_m \hat{\omega}_m)(t^n) d\mathbf{x} - \int_{B_i} (\phi_m \varrho_m \hat{\omega}_m)(t^{n-1}) d\mathbf{x} + \int_{t^{n-1}}^{t^n} \sum_{e, j \in \Gamma_{ij}^e} (\varrho_m \hat{\omega}_m \hat{\mathbf{q}}_m + \hat{\mathbf{J}}_m) \cdot \mathbf{n}_{ij}^e ds dt = 0 \quad (4.13)$$

Die Summation läuft dabei über alle $e \in \mathcal{T}_\Omega$ mit $i \in \Lambda^e$ und $j \in \Lambda_i^e \cup \hat{\Lambda}_i \cup \{0\}$. Die Summanden mit $i \in \Lambda^e$ und $j \in \Lambda_i^e \cup \{0\}$ hängen nur von $\hat{\omega}_m^n$ und \hat{p}_m^n ab und werden approximiert wie in Abschnitt 4.1 (Gleichungen (4.3) und (4.4)), wobei, wie dort beschrieben, die konsistente Geschwindigkeit für $\hat{\mathbf{q}}_m$ und ein Upwind-Verfahren für den Konvektionsterm $\varrho_m^n \hat{\omega}_m^n \hat{\mathbf{q}}_m$ benutzt werden.

Die Knoten am Interface zur Kluft mit $j \in \hat{\Lambda}_i$ benötigen jedoch eine gesonderte Betrachtung:

$$- \int_{\Gamma_{ij}^e} \varrho_m^n \hat{\mathbf{q}}_m \cdot \mathbf{n}_{ij}^e \, ds = \int_{\Gamma_{ij}^e} \hat{Q}_{fn}^{(k)} \, ds \approx |\Gamma_{ij}^e| \hat{Q}_{fn}^{(k)}(\hat{p}_{mi}^n, \bar{p}_{fj}^n; \hat{\omega}_{mi}^n, \hat{\omega}_{fj}^n) \quad (4.14)$$

$$- \int_{\Gamma_{ij}^e} (\hat{\omega}_m^n \varrho_m^n \hat{\mathbf{q}}_m + \hat{\mathbf{J}}_m) \cdot \mathbf{n}_{ij}^e \, ds = \int_{\Gamma_{ij}^e} \hat{P}_{fn}^{(k)} \, ds \approx |\Gamma_{ij}^e| \hat{P}_{fn}^{(k)}(\hat{p}_{mi}^n, \bar{p}_{fj}^n; \hat{\omega}_{mi}^n, \hat{\omega}_{fj}^n), \quad (4.15)$$

wobei die Approximationen algebraische Funktionen von $\hat{\omega}_{mh}^n$, \hat{p}_{mh}^n , $\hat{\omega}_{fh}^n$ and \bar{p}_{fh}^n sind. Für die Gleichungen in der Kluft (2.58) und (2.59) ergibt sich bei Integration über die Boxen S_i und Multiplikation mit ε

$$\begin{aligned} & \int_{S_i} \varepsilon(\phi_f \varrho_f)(t^n) \, d\mathbf{x} - \int_{S_i} \varepsilon(\phi_f \varrho_f)(t^{n-1}) \, d\mathbf{x} \\ & + \int_{t^{n-1}}^{t^n} \sum_{e,j} \int_{\sigma_{ij}^e} \varepsilon \varrho_f^n \langle \mathbf{q}_f^\sigma \rangle \cdot \mathbf{n}_{ij}^e \, dl + \int_{t^{n-1}}^{t^n} \int_{S_i} (\hat{Q}_{fn}^{(2)} + \hat{Q}_{fn}^{(1)}) \, ds = 0, \end{aligned} \quad (4.16)$$

$$\begin{aligned} & \int_{S_i} \varepsilon(\phi_f \varrho_f \hat{\omega}_f)(t^n) \, d\mathbf{x} - \int_{S_i} \varepsilon(\phi_f \varrho_f \hat{\omega}_f)(t^{n-1}) \, d\mathbf{x} \\ & + \int_{t^{n-1}}^{t^n} \sum_{e,j} \int_{\sigma_{ij}^e} \varepsilon(\varrho_f \hat{\omega}_f \langle \mathbf{q}_f^\sigma \rangle + \langle \hat{\mathbf{J}}_f^\sigma \rangle) \cdot \mathbf{n}_{ij}^e \, ds + \int_{t^{n-1}}^{t^n} \int_{S_i} (\hat{P}_{fn}^{(2)} + \hat{P}_{fn}^{(1)}) \, ds = 0, \end{aligned} \quad (4.17)$$

wobei die Summation über alle $e \in \mathcal{T}_{\mathcal{D}}$ mit $i \in \Lambda^e$ und $j \in \Lambda_i^e \cup \hat{\Lambda}_i \cup \{0\}$ läuft.

Da die σ_{ij}^e Segmente von Punkten (für $d = 2$) bzw. Geraden (für $d = 3$) darstellen, können Gleichungen (4.16) und (4.17) analog, jedoch in $d - 1$ Dimensionen, zu Gleichungen (4.12) und (4.13) approximiert werden (siehe Abschnitt 4.1). Dabei wird ebenfalls die konsistente Geschwindigkeit und ein Upwind-Verfahren benutzt.

Bei Verwendung der Forchheimer Korrektur müssen bei der Approximation auch die Werte von $f(A_f, \hat{q}_{fD}^{(k)})$ an den Integrationspunkten (Mitte der σ_{ij}^e) bekannt sein. Diese werden approximiert durch $f(A_f, \hat{q}_{fD}^{(k)}) \approx f(A_f, \hat{q}_{fD}^{(k)})$ mit $\hat{q}_{fD}^{(k)} := \sqrt{\langle \hat{\mathbf{q}}_{fD}^\sigma \rangle \cdot \langle \hat{\mathbf{q}}_{fD}^\sigma \rangle + (\hat{q}_{fDn,i}^{(k)} + \hat{q}_{fDn,j}^{(k)})^2/4}$, wobei $\hat{q}_{fDn,i}^{(k)}$ und $\hat{q}_{fDn,j}^{(k)}$ Werte von $\hat{q}_{fDn}^{(k)}$ (2.80) an den Punkten \mathbf{x}_i und \mathbf{x}_j sind.

Die Integrale über $\hat{Q}_{fn}^{(k)}$ und $\hat{P}_{fn}^{(k)}$ werden approximiert durch

$$\int_{S_i} \hat{Q}_{fn}^{(k)} ds \approx \sum_{j \in \hat{\Lambda}_i} \sum_{e: j \in \Lambda^e, \mathbf{n}_{j_i}^e = -\mathbf{n}^{(k)}} |\Gamma_{ji}^e| \hat{Q}_{fn}^{(k)}(\hat{p}_{mj}^n, \hat{p}_{fi}^n; \hat{\omega}_{mj}^n, \hat{\omega}_{fi}^n), \quad (4.18)$$

$$\int_{S_i} \hat{P}_{fn}^{(k)} ds \approx \sum_{j \in \hat{\Lambda}_i} \sum_{e: j \in \Lambda^e, \mathbf{n}_{j_i}^e = -\mathbf{n}^{(k)}} |\Gamma_{ji}^e| \hat{P}_{fn}^{(k)}(\hat{p}_{mj}^n, \hat{p}_{fi}^n; \hat{\omega}_{mj}^n, \hat{\omega}_{fi}^n). \quad (4.19)$$

Die Beiträge (4.18) und (4.19) zu (4.16) und (4.17) entsprechen genau den Beiträgen (4.14) und (4.15) zu (4.12) und (4.13), wodurch sichergestellt wird, dass die Diskretisierung konservativ ist.

4.3 Dimensions-Adaptivität

In den vorangehenden Abschnitten wurden zwei Modell-Ansätze vorgestellt, die sich in der unterschiedlichen Repräsentation der Kluft unterscheiden. Der entscheidende Vorteil der d -dimensionalen Darstellung der Kluft, bei der die Kluft in gleicher Form wie das sie umgebende Medium behandelt wird, ist es, dass die Kluft komplett aufgelöst wird und damit auch eventuell auftretende Effekte in der Kluft mit modelliert werden. Der Nachteil dieser Methode ist auf die Kluftgeometrie zurückzuführen. Diese fordert numerisch schwer zu handhabende Elemente mit sehr ungünstigem Seitenverhältnis, wodurch es zu Konvergenzproblemen des linearen Löser kommen kann. Gleichzeitig stellt sie auch hohe Ansprüche an die Gitter-Erzeugung und erfordert zumeist eine sehr hohe Auflösung.

Der $(d-1)$ -dimensionale Fall versucht genau die Schwierigkeiten, die durch die Kluftgeometrie entstehen, zu umgehen, indem die Kluft durch eine Hyperfläche approximiert wird. Dadurch wird nicht zwangsläufig eine so hohe Auflösung benötigt und auch die auf das Seitenverhältnis zurückzuführenden Probleme im linearen Löser können vermieden werden. Jedoch werden bei diesem Ansatz mögliche in der Kluft auftretende Effekte, wie z.B. die Bildung von Wirbeln (siehe dazu auch Kapitel 6.1.3), vernachlässigt und so können in manchen Fällen von der Realität abweichende Ergebnisse entstehen.

Da beide Ansätze ihre Vor- und Nachteile haben, die zum Teil in genauem Gegensatz zueinander stehen, sollen hier die beiden Ansätze so kombiniert werden, dass die Vorteile aus beiden Ansätzen ausgenutzt werden.

4.3.1 Dimensions-adaptives Mehrgitterverfahren

Zunächst soll versucht werden den möglichen Problemen des numerischen Löser beim d -dimensionalen Ansatz nachzukommen, indem ein Mehrgitterverfahren (vgl. Kapitel 3.2.3) eingeführt wird, bei dem die Klüfte auf den feinen Gittern d -dimensional aufgelöst sind, jedoch auf den groben Gittern, auf denen die geometrische Anisotropie deutlicher zu Tage tritt, nur $(d-1)$ -dimensional modelliert werden. Durch die Verwendung des $(d-1)$ -dimensionalen Ansatzes in der Grobgitterkorrektur, kann eine bessere Konvergenz auch auf größeren Gittern erzielt werden, die resultierende Lösung entspricht jedoch der Lösung des d -dimensionalen Problems, da

das gleiche feine Gitter benutzt wird. Die Verwendung von Mehrgitterverfahren als numerische Mehrskalenlöser ist bereits aus anderen Bereichen bekannt. Da sie selbst eine Mehrskalentechnik benutzen, können sie gut mit Mehrskalenansätzen in der Modellierung und Diskretisierung kombiniert werden (vgl. z.B. [Neuss et al., 2001], [Eberhardt und Wittum, 2005]). Die Idee der hier vorgestellten Methode wurde bereits in [Grillo et al., 2010b], [Grillo et al., 2012], [Stichel et al., 2012], [Reiter et al., 2013b] und [Grillo et al., 2013] erwähnt und in [Stichel, 2013] genauer dargestellt.

Sei also eine Gitterhierarchie Ω_ℓ ($\ell \in \{0, \dots, L\}$) gegeben, die durch reguläre, konforme und anisotrope Verfeinerung aus einem Grobgitter Ω_0 mit n_F geometrisch aufgelösten Klüften (vgl. Kapitel 5.3.1), wobei sich kreuzende Klüfte hier als eine Kluft angesehen werden, entstanden ist. Dabei wurde die anisotrope Verfeinerung so vorgenommen, dass das Seitenverhältnis der Kluftenelemente in jedem Verfeinerungsschritt verbessert wurde (vgl. dazu Kapitel 5.1.3). Auf dem feinsten Gitter Ω_L sind alle n_F Klüfte \mathcal{F}_i ($i = 1, \dots, n_F$) d -dimensional. Auf jedem anderen Gitter Ω_ℓ ($\ell \in \{0, \dots, L-1\}$) wird das Seitenverhältnis der Elemente überprüft. Ist dieses kleiner als der vorgegebene Referenzwert, der in *UG* mit *DEGENERATED_SIZE* bezeichnet wird, wird das Element als $(d-1)$ -dimensional angesehen (siehe dazu Kapitel 5.1.2). Dabei werden, wenn auch nur ein Element in einer Kluft \mathcal{F}_i auf dem Gitter Ω_ℓ als $(d-1)$ -dimensional markiert wurde, alle Elemente in dieser Kluft auf diesem Gitter als $(d-1)$ -dimensional markiert. Dies geschieht deswegen, damit eine Kluft auf einem Gitterlevel nicht unterschiedliche Dimensionalitäten hat, was zusätzliche Annahmen und Überlegungen nach sich ziehen würde, da noch Übergangsbedingungen an den Grenzen zwischen verschiedenen dimensionalen Elementen innerhalb einer Kluft definiert werden müssten. Diese Problemstellung soll hier jedoch nicht weiter diskutiert werden.

Wenn nun eine Kluft \mathcal{F}_i auf einem Gitter Ω_ℓ nicht als $(d-1)$ -dimensional behandelt werden soll, also wenn alle Elemente dieser Kluft als d -dimensional markiert sind, ist die Kluft selbst d -dimensional und erfährt keine weitere spezielle Behandlung. Umgekehrt ist eine Kluft \mathcal{F}_i auf einem Gitter Ω_ℓ $(d-1)$ -dimensional, wenn alle ihre Elemente als $(d-1)$ -dimensional markiert sind. Dabei ist es leicht ersichtlich, dass, wenn eine Kluft auf einem Gitter Ω_l mit $0 \leq l < L$ als $(d-1)$ -dimensional behandelt wird, diese Kluft auf allen Gittern Ω_ℓ mit $\ell \leq l$ ebenfalls $(d-1)$ -dimensional ist. Das feinste Gitter, auf dem eine Kluft \mathcal{F}_i $(d-1)$ -dimensional ist, definiert das Überganglevel

$$L_{DEG}(\mathcal{F}_i) := \max\{\ell : \mathcal{F}_i \text{ ist } (d-1)\text{-dimensional auf } \Omega_\ell\} \quad (4.20)$$

Dabei ist es entscheidend wichtig, dass $L_{DEG}(\mathcal{F}_i) < L$ für alle Klüfte \mathcal{F}_i ($i = 1, \dots, n_F$) ist, so dass die simulierte Lösung der Lösung des d -dimensionalen Problems entspricht, also die gleiche ist, die man bei Benutzung des normalen d -dimensionalen Ansatzes erhalten würde. Für jede Kluft \mathcal{F}_i wird in der Gitter-Erzeugung auf den Gittern Ω_ℓ ($\ell \in \{0, \dots, L_{DEG}(\mathcal{F}_i) - 1\}$) die anisotrope Verfeinerung für die Elemente dieser Kluft verwendet um eine Verbesserung des Seitenverhältnisses in jedem Verfeinerungsschritt zu gewährleisten. Danach ist eine weitere anisotrope Verfeinerung nicht unbedingt notwendig und es ist wichtiger, dass die Kluft \mathcal{F}_i auf den Gittern Ω_ℓ ($\ell \in \{L_{DEG}(\mathcal{F}_i) + 1, \dots, L\}$) mit jedem Verfeinerungsschritt genauer aufgelöst

wird.

Zur vereinfachten Darstellung wird nun angenommen, dass sich nur eine Kluft \mathcal{F} im Gebiet Ω befindet ($n_F = 1$). Auf den Gittern Ω_ℓ ($\ell \in \{0, \dots, L_{DEG}(\mathcal{F})\}$) wird nun die $(d - 1)$ -dimensionale Diskretisierung aus Abschnitt 4.2 gemäß Gleichungen (2.58) und (2.59) in der Kluft \mathcal{F} und Gleichungen (2.62) und (2.63) im Medium \mathcal{M} ausgeführt. Auf den Gittern Ω_ℓ ($\ell \in \{L_{DEG}(\mathcal{F}) + 1, \dots, L\}$) wird im gesamten Gebiet Ω , also sowohl in der Kluft \mathcal{F} als auch im Medium \mathcal{M} , die d -dimensionale Diskretisierung aus Abschnitt 4.1 gemäß Gleichungen (2.12) und (2.13) ausgeführt. Nun findet zwischen den Leveln $L_{DEG}(\mathcal{F})$ und $L_{DEG}(\mathcal{F}) + 1$ in der Kluft \mathcal{F} ein Dimensionsübergang statt, der durch eine spezielle Wahl von Restriktion und Prolongation durchgeführt wird. Da die Kluft auf den groben Gittern Ω_ℓ ($\ell \in \{0, \dots, L_{DEG}(\mathcal{F})\}$), auf denen die $(d - 1)$ -dimensionale Diskretisierung zur Assemblierung benutzt wird, dennoch geometrisch aufgelöst ist und die Gitterknoten exakt denen der d -dimensionalen Darstellung entsprechen, ist es hier auch möglich, die Standard-Transferoperatoren zu benutzen.

Es konnte zunächst beobachtet werden, dass die $(d - 1)$ -dimensionale Approximation, die auf den größeren Gittern verwendet wird, eine gute Approximation darstellt und das Konvergenzverhalten dadurch nicht negativ beeinflusst wird. So wird beispielsweise bei Berechnung des Experiments 1 aus Kapitel 6.1 unter Verwendung des dimensions-adaptiven Mehrgitterverfahrens die gleiche Konvergenzrate erreicht wie bei Verwendung des Standard geometrischen Mehrgitterverfahrens, das auf allen Gitterleveln d -dimensional rechnet.

Es bleibt anzumerken, dass für die hier eingeführte dimensions-adaptive Methode zwar die Grobgitter sehr anisotrop sein können, allerdings das feine Gitter nicht mehr allzu anisotrop sein darf. Falls es zu anisotrop ist, konvergiert auch das dimensions-adaptive Mehrgitterverfahren nicht. In so einem Fall kann auf das $(d - 1)$ -dimensionale Modell zurückgegriffen werden. Mittels des in Abschnitt 7.2.1 eingeführten Kriteriums kann dann überprüft werden, ob diese Vereinfachung gemacht werden darf oder ob das so berechnete Verhalten zu stark vom eigentlichen abweicht. Falls dies der Fall ist, muss das Gitter verbessert werden, was z.B. durch feinere Auflösung mit anisotroper Verfeinerung erreicht werden kann.

Falls jedoch durch die anisotrope Verfeinerung der Kluftelemente das Seitenverhältnis der Kluftelemente auf den feineren Gitterleveln ausreichend verbessert wurde, kann mit dem dimensions-adaptiven Mehrgitterverfahren eine Verbesserung der Konvergenz erreicht werden. Hierfür wird ein Testbeispiel betrachtet, das so konstruiert wurde, dass die Elemente im Medium alle ein optimales Seitenverhältnis von 1 : 1 haben. Das Seitenverhältnis der Kluftelemente auf dem größten Gitter beträgt dabei 1 : 250 und auf dem feinsten 1 : 62.5. Dabei ist die Kluft auf dem feinsten Level mit 8 Schichten an Elementen aufgelöst. Die Parameter sind an das Henry-Beispiel aus Kapitel 6 angelehnt und die Permeabilität in der Kluft ist sehr viel größer als die im umgebenden Medium, $K_f = 10^6 \cdot K_m$. Während beim Standard geometrischen Mehrgitterverfahren eine durchschnittliche Konvergenzrate von 0.89 erreicht wird, erreicht das dimensions-adaptive Mehrgitterverfahren eine durchschnittliche Konvergenzrate von 0.68.

Naheliegender ist auch eine alternative Berechnung mit einem *algebraischen Mehrgitterverfahren* (AMG) (vgl. z.B. [Ruge und Stüben, 1987]) zu erwägen. Dieses hat den Vorteil, dass die geometrischen Gegebenheiten nicht verwendet werden, da das AMG grobe Gitter und Operatoren zum

Gittertransfer allein auf Grundlage der Matrixeinträge definiert. Aufgrund der Zeit, die für die Konstruktion davon benötigt wird, ist ein AMG jedoch bereits meist langsamer als ein klassisches geometrisches Mehrgitterverfahren. Für das hier betrachtete Beispiel konnte mit dem getesteten filternden algebraischen Mehrgitterverfahren (vgl. [Nägel, 2010]) zudem keine Einstellung gefunden werden, bei der dieses mit weniger als 50% der Anzahl der Feingitterknoten auf dem größten Gitterlevel eine vergleichbare Konvergenzrate erreichte. Es war zwar möglich gröbere Gitter zu konstruieren, allerdings konvergierte das Verfahren dann nicht mehr. Im Gegensatz dazu bestand das größte Gitterlevel bei den betrachteten geometrischen Mehrgitterverfahren nur aus ca. 1% der Feingitterknoten, weswegen diese deutlich weniger Rechenzeit in Anspruch genommen haben.

4.3.2 Dimensions-adaptives Gitter

Das dimensions-adaptive Mehrgitterverfahren aus dem letzten Abschnitt ist sehr gut geeignet um die Gitter relativ grob zu halten und trotzdem die Klüfte voll aufgelöst betrachten zu können. Dennoch besitzen Rechengitter, die d -dimensionale Klüfte beinhalten, deutlich mehr Gitterknoten als welche mit ausschließlich $(d - 1)$ -dimensional approximierten Klüften, was insbesondere in 3D spürbar zu Tage tritt. Dieses Mehr an Gitterknoten resultiert in einem größeren Speicherbedarf und längeren Rechenzeiten. Außerdem bleibt nicht zu vergessen, dass oftmals die Generierung dieser Gitter sich als schwieriger und komplexer herausstellt, da mehr Anforderungen an das Gitter gestellt werden. Deswegen sollten in Hinblick auf ein Geringhalten der numerischen Kosten $(d - 1)$ -dimensionale Kluftdarstellungen so oft wie möglich verwendet werden.

Auf der einen Seite zeigen Vergleiche zwischen d - und $(d - 1)$ -dimensionaler Modellierung (vgl. Kapitel 7.1), dass in Fällen in denen die Klüfte sehr dünn sind, der $(d - 1)$ -dimensionale Ansatz sehr gute Ergebnisse liefert. Zusätzlich ist auch leicht ersichtlich, dass, wenn das (ein)-strömende Salzwasser (noch) nicht in der unmittelbaren Nähe einer Kluft ist, diese Kluft nicht aufgelöst werden muss. Auf der anderen Seite zeigen Vergleiche für dickere Klüfte, dass das $(d - 1)$ -dimensionale Modell nicht immer in der Lage ist das richtige Verhalten der Strömung zu simulieren.

Deswegen wird hier die Idee eines dimensions-adaptiven Ansatzes verfolgt, der es ermöglicht während der Laufzeit der Simulation zwischen d - und $(d - 1)$ -dimensionalen Modellansätzen zu wechseln. Dabei sollte dieser Wechsel von den aktuellen Strömungsverhältnissen und der Beschaffenheit der Kluft abhängen.

Dabei werden drei grundlegende Punkte für diesen Ansatz benötigt:

- zwei (oder mehr) Rechengitter, d - und $(d - 1)$ -dimensional,
- Transferoperatoren, die die Lösung, also die Werte der Unbekannten ω und p an den Gitterknoten, zwischen den beiden Gittern übertragen,
- eine Bedingung, wann dieser Wechsel zwischen den beiden Gitter ausgeführt wird.

An die Gitter wird zunächst die Anforderung gestellt, dass die Klüfte nur mit Dreieckselementen enden. Andere mögliche Enden für die Klüfte (vgl. Abschnitt 5.1.2 oder 5.1.3), werden hier

zunächst nicht unterstützt um die Transfer-Abbildung möglichst einfach zu halten.

Die Transferoperatoren werden in Abschnitt 5.2.3 näher erläutert. Als Bedingung für den Wechsel, sollte eine Bedingung, die die Gültigkeit des $(d - 1)$ -dimensionalen Modells angibt, gewählt werden. Diese wird in Abschnitt 7.2 aufgestellt und diskutiert.

Mit dieser Methode kann dann über die gesamte Laufzeit gesehen insgesamt Rechenzeit eingespart werden, während gleichzeitig der durch die $(d - 1)$ -dimensionale Approximation gemachte Fehler gering gehalten wird. So wird in Kapitel 7.2.2 an Testbeispielen das Ergebnis dieser Methode im Vergleich zu den d - und $(d - 1)$ -dimensionalen Modellen gezeigt. Für das eine Beispiel (vgl. Abb. 7.16) ist mit der dimensions-adaptiven Methode die relative Abweichung zum d -dimensionalen Modell kleiner als 10% im Gegensatz zu bis zu 65% unter Benutzung des $(d - 1)$ -dimensionalen Modells. Gleichzeitig wird nur für etwa ein Drittel der Laufzeit der d -dimensionale Ansatz verwendet, in der übrigen Zeit wird mit ca. 94% weniger Gitterknoten in der Kluft und mit entsprechender Zeitersparnis gerechnet.

5 Software

Dieses Kapitel widmet sich der Software, die verwendet wurde um die in Kapitel 2.2 aufgestellten Modellgleichungen mit den in Kapitel 3 und 4 erläuterten numerischen Methoden zu lösen. Abschnitt 5.1 beschäftigt sich dabei mit dem Softwarepaket *UG* und Abschnitt 5.2 mit der darauf basierenden Applikation *d^{3f}*. Dabei wird zum einen ein Überblick über die zugrunde liegenden Softwarepakete gegeben und zum anderen erläutert, welche Erweiterungen und Anpassungen im Rahmen dieser Arbeit vorgenommen wurden. Abschnitt 5.3 stellt dann noch kurz die zur Gitter-Erzeugung verwendete Software, insbesondere das Programm *ProMesh*, vor.

5.1 UG

In diesem Abschnitt werden sehr kurz die wesentlichen Aspekte des Softwarepakets *UG* vorgestellt. Abschnitt 5.1.1 gibt dabei kurz einen allgemeinen Überblick über vorhandene Strukturen, während sich die Abschnitte 5.1.2 und 5.1.3 mit den für diese Arbeit benötigten Erweiterungen befassen. Für ausführlichere Erläuterungen und Informationen über *UG* sei auf [Bastian und Wittum, 1994], [Lang und Wittum, 2005], [Bastian et al., 2000a] und [Lemke et al., 2013] verwiesen. In dieser Arbeit wurde mit der Version *UG* 3.8 gearbeitet.

5.1.1 Allgemeines

UG ist eine Abkürzung für „unstrukturierte Gitter“. Es handelt sich dabei um ein flexibles Problem-unabhängiges Softwaretool zur numerischen Lösung partieller Differentialgleichungen. Dabei werden numerische Methoden von besonderer Effizienz für ein weites Anwendungsspektrum benutzt (vgl. [Bastian et al., 2000a]):

- Unstrukturierte Gitter in zwei und drei Raumdimensionen, die essentiell für die Beschreibung von komplexen Geometrien sind
- Adaptivität durch lokale Verfeinerung dieser Gitter, was die Anzahl der Knoten für eine gewünschte Genauigkeit der Lösung minimiert
- Mehrgitterverfahren zur schnellen Lösung der entstehenden Gleichungssysteme
- Parallelität zur zuverlässigen und schnellen Berechnung großer Probleme auf Parallelrechnern

Der Aufbau von *UG* besteht aus mehreren Schichten, wobei die unterste Schicht durch die *UG library* dargestellt wird. Sie beinhaltet geometrische und algebraische Datenstrukturen und ihre Komponenten sind unabhängig von der letztendlich zu lösenden Differentialgleichung. Zu diesen Komponenten gehören der Gitter-Manager (*gm*), numerische Algorithmen (*np*), Visualisierungs-Verfahren (*graph*) und eine Benutzeroberfläche (*ui*).

Die Grundlage der parallelen Programmierung von *UG* wird durch *DDD* (vgl. [Birken, 1998]) geliefert, was komplett von der *UG library* getrennt ist. Eine einfache Kompilierungsoption ermöglicht dem Benutzer zwischen sequentiell und parallelem *UG* zu wechseln.

Um dann mit *UG* arbeiten zu können und eine spezielle Differentialgleichung lösen zu können, müssen benutzerdefiniert eine Problemklasse (*problem class library*) und eine Applikation (*application level*) aufgestellt werden. In der Problemklasse werden Diskretisierung, Fehlerschätzer und problemangepasste Verfahren implementiert. In der Applikation werden dann das Rechengebiet, Anfangs- und Randbedingungen und eventuelle Koeffizientenfunktionen definiert.

Aufgrund dieses Aufbaus ist *UG* in vielen verschiedenen Anwendungsbereichen einsetzbar und die Struktur des Programms ermöglicht die Einbindung verschiedener Diskretisierungen. Dabei nimmt meist die *ug library* ca. 80 bis 90% des gesamten Quellcodes ein, wodurch es dem Benutzer ermöglicht wird, sich schneller mit problem-spezifischen Aspekten zu beschäftigen. Aufgrund der Struktur von *UG* ist außerdem der Aufwand für die Parallelisierung neuer Applikationen nur gering.

Für viele verschiedene Probleme stehen die entsprechenden Problemklassen bereits in *UG* zur Verfügung. Dazu gehören beispielsweise eine Diffusions-Konvektionsgleichung (*sc*), inkompressible Navier-Stokes Gleichungen (*ns*, vgl. [Gordner et al., 2007]) und die Simulation von Kristallzucht (*crystal*, vgl. [Logashenko et al., 2006]).

In dieser Arbeit wird die Problemklasse und Applikation d^3f (vgl. [Fein, 1999b]) benutzt, die in Abschnitt 5.2 noch detailliert beschrieben wird.

5.1.2 Niederdimensionale Elemente

Für die in Abschnitt 4.2 vorgestellte Diskretisierung von $(d - 1)$ -dimensionalen Klüften werden auch spezielle Rechengitter benötigt (vgl. Abschnitt 5.3). Dabei wird in der Diskretisierung vorausgesetzt, dass zusätzliche Freiheitsgrade an den Kluft-Knoten vorhanden sind. Für eine einfache Umsetzung in *UG* ohne Effizienzverluste, dadurch dass an allen Gitterknoten mehrere Fälle überprüft werden müssen, wird für jeden dieser zusätzlichen Freiheitsgrade ein zusätzlicher Knoten verwendet. Um diese zusätzlichen Knoten in das restliche Gitter einzubeziehen, werden sogenannte *degenerierte Elemente* eingeführt (vgl. [Stichel et al., 2012] und detaillierter [Reiter et al., 2013a]). Diese sind die Grenzfälle der normalen Gitterelemente, in denen die Abbildung vom Referenzelement in genau einem Parameter singular wird. Bei diesen Elementen liegen also mehrere Knoten auf einem geometrischen Punkt, so dass das Element eine Dicke von 0 hat (vgl. Abb. 5.1). Dies können in 2D Vierecke oder Dreiecke sein, die einer Kante entsprechen. In 3D werden in erster Linie Prismen und Pyramiden verwendet, die zu einem Dreieck degenerieren, aber auch die Benutzung von Hexaedern, die zu einem Viereck degenerieren, ist denkbar. Wie viele Knoten auf einem geometrischen Punkt liegen, hängt davon ab, ob sich dieser Punkt am Rand der Kluft (1 oder 2, abhängig davon, ob es sich um ein degeneriertes Dreieck oder Viereck handelt), in der Mitte eines geraden Stückes der Kluft (3) oder an einer Kreuzung (> 3 , abhängig davon wie viele Klüfte hier zusammen kommen) befindet (vgl. Abb. 5.1b). Die Anzahl der benötigten Knoten an einem Punkt wird dabei durch die Anforderungen der gewählten Diskretisierung (vgl. Kapitel 4.2) bestimmt. So werden beispielsweise an einem Punkt in der Mitte eines geraden Stückes der Kluft genau drei Freiheitsgrade benötigt, da einer für den Mittelwert und die anderen beiden für die Werte an den Interfaces zum benachbarten Medium nötig sind. Diese drei Freiheitsgrade werden jetzt durch Einfügen von zwei degenerierten Elementen durch die dabei, zusätzlich zu dem Knoten in der Mitte, entstehenden zwei Knoten erreicht. Die zuvor

nur aus einer Hyperfläche bestehende Kluft, die jedoch bereits einer Vereinigung von Kanten im Gitter entsprach (vgl. dazu Abschnitt 5.3.1 und Abb. 5.1a), wurde nun also zu zwei Schichten von Elementen "aufgeblasen", wobei ihre Dicke immer noch 0 geblieben ist. Durch diese

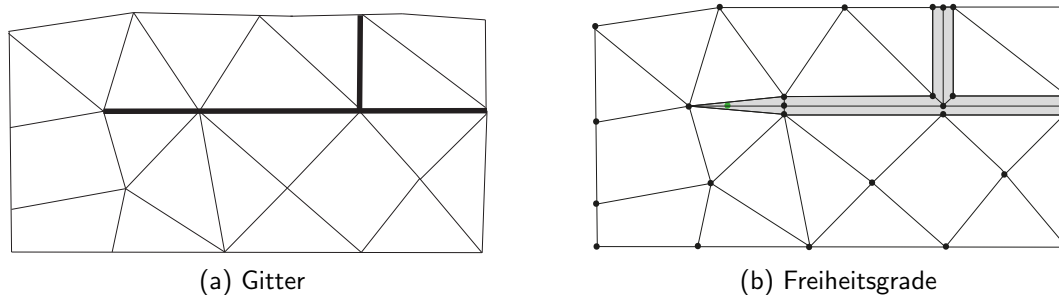


Abbildung 5.1: Niederdimensionale Kluftdarstellung: (a) Gitter ist an Kluft (dicke Linie) angepasst. (b) Degenerierte Elemente (grau) werden eingefügt um zusätzliche Freiheitsgrade zu erzeugen. Kluftenden können mit degenerierten Dreiecken oder degenerierten Vierecken dargestellt werden. Bei Vierecken ergibt sich noch ein zusätzlicher Freiheitsgrad (grün).

zwei Schichten können die verschiedenen Kluftfreiheitsgrade topologisch voneinander getrennt werden, auch wenn sie geometrisch auf einem Punkt liegen. Die Seiten, die die degenerierten Elemente mit den darum liegenden voll-dimensionalen Gitterelementen gemein haben, geben die inneren Ränder zwischen Kluft und Medium an.

Für die Verwendung von degenerierten Elementen muss in *UG* in der Datei *config.h* die Option

```
#define WITH_DEGENERATED_ELEM
#define DEGENERATED_SIZE 0.1
```

festgelegt werden. Die Auswahl von *DEGENERATED_SIZE* gibt die Grenze für das Seitenverhältnis an. Ist das Seitenverhältnis eines Elements schlechter als dieser Wert, ist es degeneriert.

Da für eine d -dimensional modellierte Kluft auf groben Gittern die Elementform oft numerisch sehr ungünstig ist, wurde in Abschnitt 4.3.1 ein Verfahren vorgeschlagen, bei dem auch auf d -dimensionalen Elementen eine $(d - 1)$ -dimensionale Diskretisierung verwendet wird. Für dessen Umsetzung ist es notwendig, dass die Struktur der Gitter in der Gitterhierarchie, auf denen die $(d - 1)$ -dimensionale Diskretisierung verwendet werden soll, die gleiche ist wie die eines Gitters, das eine $(d - 1)$ -dimensionale Kluft beinhaltet. Zunächst wird bei der Erzeugung des Grobgitters die d -dimensionale Kluft auch d -dimensional aufgelöst, was bedeutet, dass die Kluftdicke tatsächlich durch das Gitter aufgelöst ist. Dabei ist jedoch zu beachten, dass die Kluft aus exakt zwei Schichten von Elementen besteht (vgl. Abschnitt 5.3.1), die um die Kluftdicke ϵ aufzulösen jeweils eine Breite von $\epsilon/2$ haben. Diese zwei Schichten von Elementen können nun analog zu den 2 Schichten degenerierter Elemente gesehen werden, die im $(d - 1)$ -dimensionalen Fall vorhanden sind. Auf dem Grobgitter besitzen also ein Gitter mit einer d - und ein Gitter

mit einer $(d - 1)$ -dimensionalen Kluft die gleiche Anzahl an Knoten und folglich die gleiche Anzahl an Freiheitsgraden. Der einzige Unterschied ist die Dicke der Kluft im Gitter, die im d -dimensionalen Fall genau ϵ und im $(d - 1)$ -dimensionalen Fall genau 0 ist.

Um jetzt unterscheiden zu können, ob die im Gitter aufgelöste Kluft d - oder $(d - 1)$ -dimensional behandelt wird, wird eine Markierung der Elemente eingeführt. Beim Laden des Gitters in *UG* wird während des Einfügens der Elemente (Funktion *InsertElement* in *ug/gm/ugm.c*) für jedes Element das Seitenverhältnis überprüft. Liegt dieses unter einer vorgegebenen Grenze, definiert durch *DEGENERATED_SIZE*, so bekommt das Element eine Markierung, die es als niederdimensionales Element auszeichnet. Auf diese Art und Weise gibt es dann zwei Arten von niederdimensionalen Elementen, nämlich die tatsächlich degenerierten Elemente, bei denen mindestens eine Seite (in 2D bei Dreiecken eine, bei Vierecken zwei) die Länge Null hat, als auch Elemente, bei denen mindestens eine Seitenlänge gegen Null geht, da die Dicke der Kluft im Vergleich zu ihrer Länge so klein ist, und die deswegen als niederdimensional aufgefasst werden. Dabei hat sich für die Wahl des Wertes von *DEGENERATED_SIZE* 0.1 experimentell als gute Wahl herausgestellt. Dieser Wert sollte grundsätzlich relativ klein gewählt werden, damit nicht zu viele Elemente in diese Kategorie fallen. Gleichzeitig muss er jedoch auch groß genug gewählt werden, damit die Elemente, die nicht markiert werden, auch tatsächlich Elemente sind, die keine numerischen Schwierigkeiten bereiten.

Durch Verfeinerung neu entstehende Elemente bekommen zunächst die selbe Markierung wie ihr sogenanntes *Father-Element*, also das Element, aus dem sie bei der Verfeinerung hervorgegangen sind. Nach jedem Verfeinerungsschritt, der durch sein anisotropes Vorgehen das Seitenverhältnis der als niederdimensional markierten, jedoch nicht tatsächlich degenerierten, Klufterelemente verbessert, sollte dieses erneut berechnet und durch Vergleich mit *DEGENERATED_SIZE* bestimmt werden, ob es sich immer noch um ein niederdimensional zu behandelndes Element handelt. Wenn das Seitenverhältnis nun die vorgegebene Grenze nicht mehr unterschreitet, kann die Markierung des Elementes als niederdimensional entfernt werden. Dabei ist jedoch darauf zu achten, dass alle Elemente einer Kluft auf einem Gitterlevel gleich behandelt werden und die gleiche Dimension haben. Es sind also entweder alle oder keine Elemente einer Kluft auf einem Gitterlevel niederdimensional, da es ansonsten zu Problemen am Übergang zwischen niederdimensionalen und nicht niederdimensionalen Elementen innerhalb der Kluft kommen kann. Hierfür wären noch zusätzliche Übergangsbedingungen einzuführen, die die Stetigkeit an diesen Stellen garantieren. Für zukünftige Betrachtungen ist jedoch auch die gemischt-dimensionale Betrachtung einer Kluft auf einem Gitterlevel zu untersuchen, was z.B. bei Klüften mit nicht konstanter Kluftdicke sinnvoll ist. Darauf wird hier allerdings nicht weiter eingegangen.

Sobald nun ab einem bestimmten Gitterlevel die niederdimensionale Markierung eines Elements entfernt wurde, wird es ausschließlich als volldimensionales Element behandelt. Bei weiterer Verfeinerung wird keine anisotrope Verfeinerungsroutine mehr benutzt und die Kluftdicke wird so mit zusätzlichen Schichten an Elementen aufgelöst.

Die Markierung eines Elements als niederdimensional, das Flag *NEWEL*, ist nun für alle Elemente gesetzt. Diese Markierung wird dann an verschiedenen Stellen im Code abgefragt. So wird z.B. eine spezielle anisotrope Verfeinerung für degenerierte Elemente benötigt (s. dazu Abschnitt 5.1.3), die auf sämtlichen als niederdimensional markierten Elementen ausgeführt

wird. Bei der Assemblierung des Defekts und der Steifigkeitsmatrix der Diskretisierung wird eine Schleife über alle Elemente, inklusive der degenerierten, ausgeführt. Dort entscheidet die Markierung darüber, welche Diskretisierung auf dem jeweiligen Element angewendet wird. So werden alle Elemente mit niederdimensionaler Markierung mit dem Verfahren aus 4.2 diskretisiert und alle Elemente ohne diese Markierung mit dem aus 4.1. Auf diese Weise ist dann auch ein dimensions-adaptives Mehrgitterverfahren, wie in Abschnitt 4.3 beschrieben, realisiert.

Die wichtigsten Kommandos, die im Zusammenhang mit den hier beschriebenen Elementen benutzt werden können bzw. sollen, werden in Abschnitt 5.2.2 erläutert.

5.1.3 Spezielle Verfeinerung für Kluftelemente

Geklüftete Medien benötigen für die Verfeinerung spezielle Regeln. So sollten nicht nur die Bereiche um die Klüfte herum besser aufgelöst werden, als Bereiche, in denen keine Klüfte vorkommen, sondern die Kluftelemente an sich benötigen auch eine spezielle Verfeinerung. Dies hat zwei Gründe: Zum einen dürfen Elemente, die niederdimensional sind oder als solche aufgefasst werden, nur anisotrop verfeinert werden, damit die Kluft stets aus zwei Schichten von Elementen besteht, da genau dafür die Diskretisierung aus 4.2 ausgelegt ist. Zum anderen soll durch die Verfeinerung das Seitenverhältnis von d -dimensionalen Kluftelementen verbessert werden. Um dies zu ermöglichen, müssen bestimmte Regeln bei der Verfeinerung der als niederdimensional markierten Elemente eingehalten werden (vgl. dazu auch Abb. 5.2):

1. niederdimensionale Elemente werden immer ausschließlich anisotrop verfeinert
2. niederdimensionale Kanten und Seiten dürfen nie verfeinert werden

Alle Elemente, die keine Markierung „niederdimensional“ haben, können mit einer Ausnahme mit den Standard-Verfeinerungs-Routinen verfeinert werden. Im Normalfall bedeutet dies eine reguläre isotrope Verfeinerung. Es kann aber auch jede weitere beliebige Verfeinerung benutzt werden, wobei es sich häufig anbietet insbesondere die Bereiche, in der Nähe der Kluft besser aufzulösen, als die weiter von ihr entfernten.

Die Ausnahme bei der Verfeinerung von Elementen wird durch die Bedingung 2 gefordert. Durch diese Forderung müssen Elemente, die nicht zur Kluft gehören, jedoch an eine niederdimensionale Kante bzw. Seite der Kluft angrenzen, so verfeinert werden, dass diese niederdimensionale Kante bzw. Seite nicht verfeinert wird (vgl. Abb. 5.2). So ein Fall kann für eine d -dimensionale Kluft auftreten, wenn die Kluft nicht mit einem Dreieck in 2D (bzw. mit Pyramiden in 3D) endet (vgl. Abb. 5.2, linkes Ende der Kluft), sondern mit einem Viereck (bzw. mit Prismen) (vgl. Abb. 5.2, rechtes Ende der Kluft). Die Frage, welche von beiden Möglichkeiten physikalischer ist, bleibt offen zu lassen, da durchaus beide Szenarien, die Kluft wird immer dünner und läuft in einer Spitze aus bzw. die Kluft wird beispielsweise durch eine Verschiebung von Gesteinsschichten jäh unterbrochen, denkbar sind. Jedoch für die Vergleiche zwischen d - und $(d - 1)$ -dimensionaler Modellierung in Kapitel 7.1, wird der Fall verwendet, in dem die Kluft in 2D mit Vierecken endet, da im $(d - 1)$ -dimensionalen Modell von einer konstanten Kluftdicke über die gesamte Länge der Kluft ausgegangen wird.

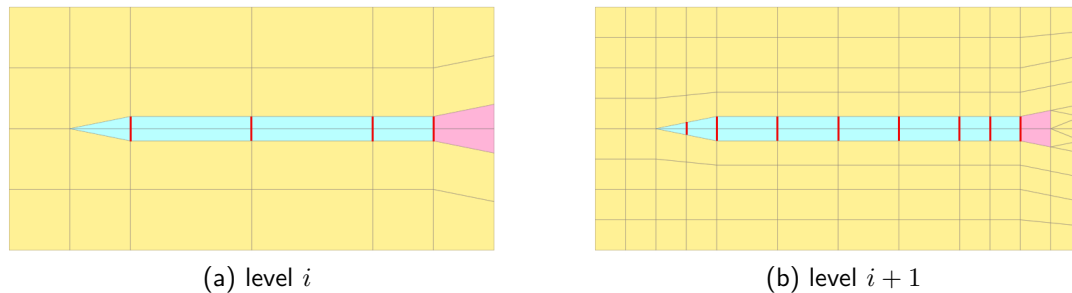


Abbildung 5.2: Verfeinerung in 2D. Die degenerierten Klufterelemente (hellblau) werden ausschließlich anisotrop verfeinert. Anschlusselemente (rosa) an degenerierte Kanten (rot), die selbst nicht degeneriert sind, müssen speziell verfeinert werden, so dass dabei die degenerierten Kanten nicht verfeinert werden. Alle übrigen Elemente des die Kluft umgebenden Mediums (gelb) werden regulär isotrop verfeinert.

Im folgenden werden kurz die bei der speziellen anisotropen Verfeinerung der degenerierten (oder als niederdimensional markierten) Elemente entstehenden neuen Elemente für die verschiedenen Elementtypen angegeben. Im Vergleich dazu jeweils die reguläre Verfeinerung nach [Bank et al., 1983]:

- Viereck (2D): Im regulären Fall entstehen 4 Vierecke, im degenerierten Fall 2 Vierecke (vgl. Abb. 5.3a).
- Dreieck (2D): Im regulären Fall entstehen 4 Dreiecke, im degenerierten Fall 1 Viereck und 1 Dreieck (vgl. Abb. 5.3a).
- Tetraeder (3D): Im regulären Fall entstehen 8 Tetraeder, im degenerierten Fall 1 Prisma, 1 Pyramide und 2 Tetraeder (vgl. Abb. 5.3f).
- Pyramide (3D): Im regulären Fall entstehen 6 Pyramiden und 4 Tetraeder, im degenerierten Fall 1 Pyramide und 3 Prismen (vgl. Abb. 5.3e).
- Prisma (3D): Im regulären Fall entstehen 8 Prismen, für den Fall eines degenerierten Prismas gibt es zwei Möglichkeiten: Wenn das Prisma zu einem Viereck degeneriert, entstehen 2 Hexaeder und 2 Prismen. Wenn jedoch das Prisma zu einem Dreieck degeneriert, entstehen 4 Prismen (vgl. Abb. 5.3c und 5.3d).
- Hexaeder (3D): Im regulären Fall entstehen 8 Hexaeder, im degenerierten Fall 4 Hexaeder (vgl. Abb. 5.3b).

5.2 d^3f

In diesem Abschnitt wird das Programmpaket d^3f beschrieben, das als Applikation in *UG* zur Lösung der Modellgleichungen verwendet wird. Dabei werden zunächst allgemeine Informationen

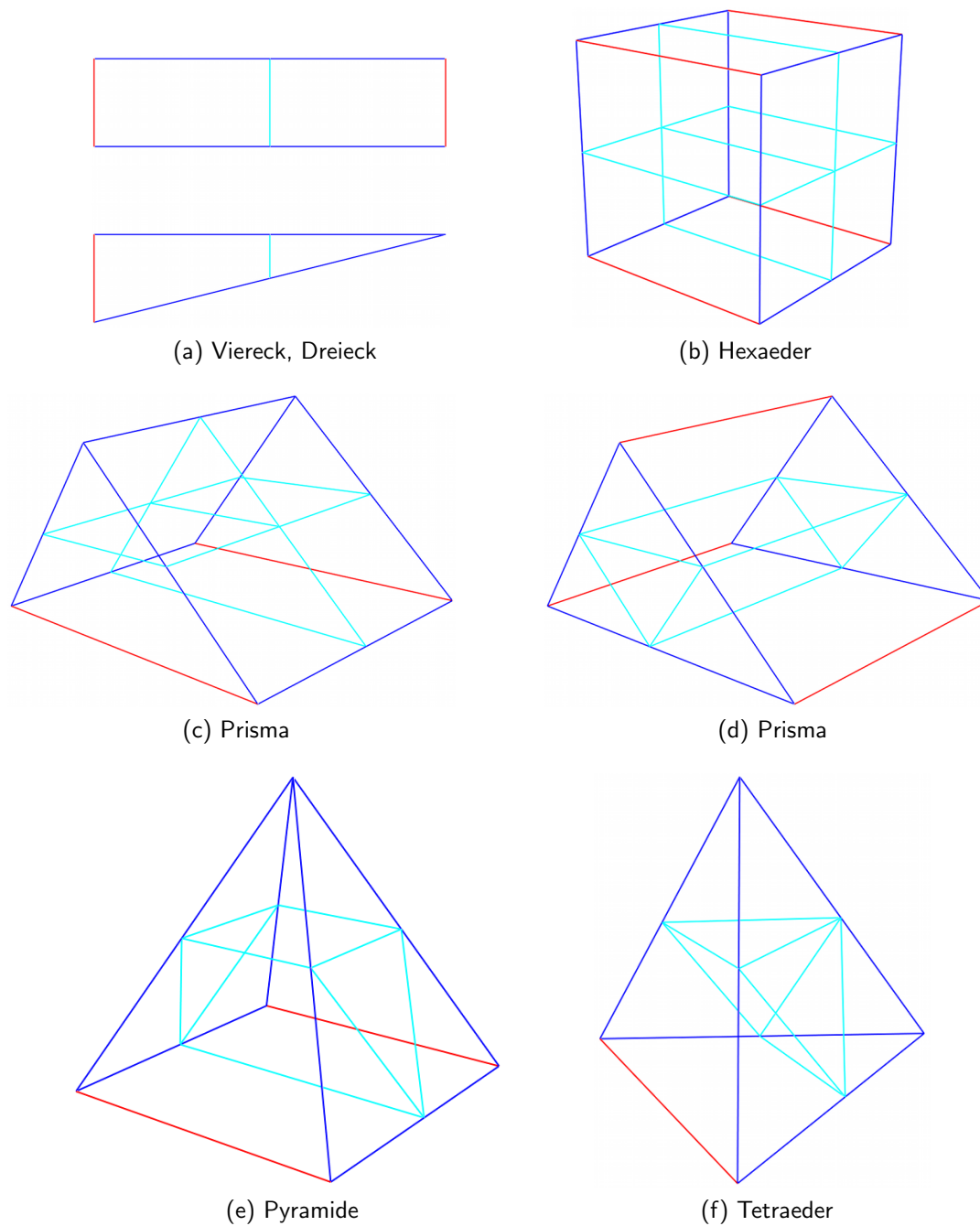


Abbildung 5.3: Verfeinerung degenerierter Elemente: Rote Kanten sind degeneriert, türkise Kanten entstehen nach Verfeinerung und sind z.T. auch degeneriert. Zur vereinfachten Darstellung wurden die degenerierten Kanten nicht maßstabsgetreu sondern verlängert dargestellt.

gegeben (Abschnitt 5.2.1) und danach die Anpassung auf das aktuelle Problem geklüfteter

Medien beschrieben (Abschnitt 5.2.2).

5.2.1 Allgemeines

Das Programmpaket d^3f wurde entwickelt um haline Strömung in porösen Medien zu simulieren (vgl. [Fein, 1999b], [Johannsen et al., 2002] und [Thiele, 1999]) und der Name ist eine Abkürzung für *distributed density driven flow* (engl. für Dichte-getriebene Strömung, wobei *distributed* noch auf die Parallelisierung anspielt). In seiner Grundstruktur besteht es aus drei Hauptteilen, dem *preprocessor*, dem *simulator* und dem *postprocessor*. Dabei können mit dem *preprocessor* hydrogeologische Daten verarbeitet werden und damit die Geometrie beschrieben und die Parameter festgelegt werden. Der *postprocessor* basierend auf der Software *GRAPE* (vgl. [Rumpf und Wierse, 1992]) kann zur Visualisierung verwendet werden.

Für diese Arbeit ist jedoch ausschließlich der *simulator* von Relevanz, der die Gleichungen der halinen Strömung diskretisiert und löst. Der *simulator* basiert auf dem Programmpaket *UG* (vgl. Abschnitt 5.1) und beinhaltet einen Gittergenerator, die Diskretisierung und einen Fehlerschätzer. Die Diskretisierung der Gleichungen benutzt in der Zeit ein implizites Eulerverfahren und im Ort ein Knoten-zentriertes Finite-Volumen-Verfahren (s. Abschnitt 3.1) unter Berücksichtigung verschiedener Upwind-Verfahren und einer konsistenten Geschwindigkeits-Approximation (vgl. [Frolkovič, 1998a],[Frolkovič und Knabner, 1996]). Die durch die Diskretisierung entstehenden nichtlinearen algebraischen Gleichungen, die in Abschnitt 4.1 aufgeführt sind, werden mit einem Newton-Verfahren (s. Abschnitt 3.2.1) gelöst. Das System der linearen algebraischen Gleichungen, das in jedem Newton-Schritt entsteht, wird mit einem vorkonditionierten BiCGStab-Verfahren (s. Abschnitt 3.2.4) gelöst. Der Vorkonditionierer ist dabei ein Mehrgitterverfahren (s. Abschnitt 3.2.3) mit ILU-Glätter (s. Abschnitt 3.2.2). Diese Lösungsstrategie hat sich als sehr geeignet im Zusammenhang mit haliner Strömung erwiesen. Eine Parallelisierung der benutzten Verfahren ist vorhanden.

Für eine detailliertere Beschreibung des Programmpakets sei hier auf [Fein, 1999b] verwiesen.

5.2.2 Erweiterung von d^3f für geklüftete Medien

In der laufenden Entwicklung wurde d^3f bereits so erweitert, dass es auch speziell für geklüftete Medien gut einzusetzen ist (vgl. [Schneider und Fein, 2004]). Dazu wurde die Diskretisierung $(d - 1)$ -dimensionaler Kluftelemente eingebaut (in *dfpp/gen/discpp/de_fracture*), wie sie in [Grillo et al., 2010b] und [Reiter et al., 2013b] eingeführt wurde. In Abschnitt 4.2 sind die dabei entstehenden Gleichungen aufgeführt.

Im Rahmen dieser Arbeit wurde die vorhandene Struktur so überarbeitet, dass nun auch eine dimensions-adaptive Behandlung der Klüfte möglich ist. Dies wird durch die Markierung der Elemente als niederdimensional erleichtert (vgl. Abschnitt 5.1.2). Abhängig von dieser Markierung, wird nun die gewünschte Assemblierung gewählt, wie in Abschnitt 4.3 beschrieben. Da die Assemblierung elementweise ausgeführt wird und die Matrizen auf jedem Gitterlevel aus der Diskretisierung assembliert werden, ist es so einfach möglich, das dort vorgestellte dimensions-adaptive Mehrgitterverfahren umzusetzen.

Zusätzlich zu der Anpassung der Diskretisierung an die speziellen Anforderungen für geklüftete Medien, wurde auch eine Forchheimer-Korrektur der Geschwindigkeit implementiert (in *dfpp/gen/discpp/de_forchheimer*). Nun kann die gewünschte Diskretisierung im Skriptfile ausgewählt werden:

- Haline Strömung mit Darcy-Geschwindigkeit (*loc_dff_de_cp*): Es werden Gleichungen (2.12) und (2.13) mit (2.4) (d -dim. Fall) bzw. (2.58) und (2.59) zusammen mit (2.62) und (2.63) und Darcy-Geschwindigkeit ($(d - 1)$ -dim. Fall) gelöst.
- Thermohaline Strömung mit Darcy-Geschwindigkeit (*loc_dff_cpt_de*): Es werden Gleichungen (2.1)–(2.3) mit (2.4) gelöst.
- Haline Strömung mit Forchheimer-Geschwindigkeit (*loc_Fdff_de_cp*): Es werden Gleichungen (2.12) und (2.13) mit (2.33) (d -dim. Fall) bzw. (2.58) und (2.59) mit (2.60) zusammen mit (2.62) und (2.63) mit (2.64) ($(d - 1)$ -dim. Fall) gelöst.

Ebenfalls wurden im Rahmen dieser Arbeit verschiedene Kommandos (in *expandcmd.c*) geschrieben, die für die Behandlung der Elemente im dimensions-adaptiven Fall benötigt werden. Dazu zählen unter anderem

- *fract_refine*: Analog zum normalen *refine* ermöglicht es die Verfeinerung aller Elemente. Dabei werden Elemente, die als niederdimensional markiert sind, gemäß den dafür geltenden Regeln ausschließlich anisotrop verfeinert. Zusätzlich wird sichergestellt, dass bei volldimensionalen Elementen, die an eine degenerierte Seite eines als niederdimensional markierten Elementes angrenzen, diese Seite nicht verfeinert wird. Für tatsächlich degenerierte Elemente tritt so ein Fall nie auf, für die als niederdimensional markierten Elemente ist dies an den Enden der Kluft durchaus möglich (vgl. Abb. 5.2).
- *fract_refine_sub*: Analog zu *fract_refine*. Es werden hier jedoch nur die Kluftelemente und Elemente, die an diese angrenzen, verfeinert. Dies kann deswegen sehr hilfreich sein, da man für die hier angestellten Versuche mit Einzelklüften insbesondere in und um die Kluft herum eine besonders hohe Auflösung haben möchte.
- *fract_correct_newel*: Hiermit wird die Markierung der Elemente als niederdimensional überprüft und gegebenenfalls korrigiert. Beim Laden des Gitters werden die Markierungen für alle Elemente gemäß des Seitenverhältnisses gesetzt (vgl. Abschnitt 5.1.2). Wenn jedoch das Gitter sehr unregelmäßig ist, kann es durchaus auch in Elementen, die nicht zur Kluft gehören, dazu kommen, dass das Seitenverhältnis schlechter als der Referenzwert ist. Ebenso kann es sein, dass es in der Kluft einzelne Elemente gibt, die bereits ein relativ gutes Seitenverhältnis haben. Bei solchen Elementen muss die Markierung korrigiert werden, da sonst ein Fehler in der Diskretisierung entsteht.
- *fract_set_deg* und *fract_set_deg_on_level*: Hiermit wird ermöglicht die Markierung der Elemente (als niederdimensional) unabhängig vom Seitenverhältnis zu verändern. Dies kann entweder für alle Gitterlevel passieren (*fract_set_deg*) oder nur für das aktuelle (*fract_set_deg_on_level*). Damit wird es ermöglicht, Vergleiche auf diesem Gebiet durchzuführen.

- *fract_expand*: Es wird das Seitenverhältnis aller als niederdimensional markierten Elemente überprüft. Die anisotrope Verfeinerung führt bei nicht tatsächlich degenerierten Elementendazu, dass sich das Seitenverhältnis mit jedem Verfeinerungsschritt verbessert. Die erneute Überprüfung kann nun zeigen, ob das Seitenverhältnis nun gut genug ist (größer als eine vorgegebene Schranke). Wenn dies der Fall ist, wird die Markierung des Elementes als niederdimensional entfernt.

Für die Verwendung des dimensions-adaptiven Mehrgitterverfahrens kann die Verfeinerung im Skriptfile dann beispielsweise so aussehen:

```
fract_correct_newel $N 1 $fract 2 $NB 1 $bulk 1;
  lev = 0;
  repeat
  {
    if (lev >= :toplevel) break;
    fract_refine;
    fract_expand $N 1 $fract 2;
    lev = lev+1;
  }
fract_set_deg_on_level $N 1 $fract 2 $D 0;
```

Dabei stellt zunächst *fract_correct_newel* sicher, dass keine Medium-Elemente degeneriert sind und dass die Kluft einheitlich behandelt wird. Dann wird so oft, wie mit *toplevel* vorgegeben, unter Berücksichtigung aller Regeln mit *fract_refine* verfeinert und nach jedem Verfeinerungsschritt wird mit *fract_expand* überprüft, ob die Kluft nun *d*-dimensional behandelt werden kann. Zuletzt wird mit *fract_set_deg_on_level* sichergestellt, dass die Kluft auf dem feinsten Level *d*-dimensional ist.

Die Spezifikation der Parameter für Klüfte \mathcal{F}_i und Medium \mathcal{M} kann über sogenannte *config* Dateien beim Starten der Applikation einfach vorgenommen werden, ohne dass das Programm neu kompiliert werden muss. Dies passiert in der Datei *hydrogeology*:

```
MEDIUM
permeability isotropic const 1.019368e-9
porosity      const 0.35
tortuosity    const 1
dispersion    Scheidegger long 0 trans 0
diffusion     1.88571e-05
Forchheimer   const 36
MEDIUM END

FRACTURE_1
aperture 0.001
permeability isotropic const 1.019368e-06
```

```

orth_permeability const 1.019368e-06
porosity          const 0.7
tortuosity        const 1
orth_tortuosity   const 1
dispersion        Scheidegger long 0 trans 0
diffusion          1.88571e-05
Forchheimer        const 51
FRACTURE_1 END

```

Hierbei geben *MEDIUM* und *FRACTURE_1* die Namen der zum Medium \mathcal{M} bzw. zur Kluft \mathcal{F}_1 gehörenden Subdomain an. Diese Namen wurden während der Geometrie-Erzeugung in der *.lgm Datei vergeben (vgl. Abschnitt 5.3.1). Es beschreiben *permeability* die Permeabilität \mathbf{K}_α , *porosity* die Porosität ϕ_α , *tortuosity* die Tortuosität \mathbf{T}_α , *dispersion* die Dispersion D_α^{md} , *diffusion* die Diffusion D_α^d und *Forchheimer* den Forchheimer-Koeffizienten A_α . Außerdem werden im $(d - 1)$ -dimensionalen Modell noch zusätzliche Parameter für die Klüfte benötigt. Dabei gibt *aperture* die Kluftdicke ϵ an und *orth_permeability* und *orth_tortuosity* geben die Werte von Permeabilität und Tortuosität am Interface zwischen Kluft und Medium an, wie sie in Gleichungen (2.78) und (2.79) benötigt werden. Durch letztere kann die Anisotropie des Materials in der Kluft in Normalenrichtung beschrieben werden; im isotropen Fall entsprechen sie den Werten von *permeability* und *tortuosity*.

Außerdem können in den Dateien *initial* und *boundary* Anfangs- und Randbedingungen und in der Datei *source* mögliche Quellen oder Senken festgelegt werden. Genauere Erläuterungen dazu können in [Fein, 1999a] nachgeschlagen werden.

Für die Auswertung sollen in Kapitel 7.1 Ergebnisse zwischen d - und $(d - 1)$ -dimensionalen Simulationen verglichen werden. Hierzu wurden die folgenden beiden Kommandos (in *getvalcmd.c*) eingeführt, wobei als Option ein bestimmter Punkt in der Kluft mit angegeben wird.

- *get_fract_val*: Gibt die sich aus der $(d - 1)$ -dimensionalen Simulation ergebenden drei Werte für die Unbekannten an diesem Punkt aus. Dabei entspricht einer einem gemittelten Wert in der Kluft, die anderen den Werten an den Interfaces zwischen Kluft und Medium.
- *get_ave_val*: Um nun dieses Ergebnis mit dem der d -dimensionalen Rechnung vergleichen zu können, muss dort an dem vorgegebenen Punkt über die Kluftbreite gemittelt werden. Dazu wird eine Gerade (senkrecht zur Kluft) durch diesen Punkt gelegt und es werden die Schnittpunkte dieser Geraden mit den Seitenflächen der Kluftelemente berechnet. Anschließend wird mittels der Trapezregel das Integral über die durchschnittenen Elemente berechnet. Zusätzlich werden, wie auch im $(d - 1)$ -dimensionalen Fall, die Werte an den Interfaces zwischen Kluft und Medium ausgegeben.

5.2.3 Gittertransfer in d^3f

Wie in Abschnitt 4.3.2 erläutert, kann es sinnvoll sein die Kluft, abhängig u.a. von den aktuellen Strömungsverhältnissen, während einer Simulation mal d - und mal $(d - 1)$ -dimensional zu

behandeln. Dazu muss es möglich sein, während der Laufzeit der Simulation zwischen verschiedenen Rechen-Gittern zu wechseln.

In *UG* ist es möglich mehrere Gitterhierarchien zur gleichen Zeit zu benutzen, diese werden über ihren Namen unterschieden und können auch darüber gewechselt werden (*SetCurrentMG(name)*). Dies ist jedoch nur im sequentiell kompilierten *UG* problemlos möglich. Allerdings ist es langfristig, um dadurch tatsächlich den Speichervorteil (und nicht einen noch größeren Speicherverlust) zu erhalten, sinnvoll, das momentan nicht benötigte Gitter zu schließen. Dieses kann einfach mittels der Befehle *save*, *close* und *open* erreicht werden.

Nun werden Transferoperatoren benötigt, die die Lösung, also die Werte der Unbekannten, Massenbruch ω und Druck p , von dem einen auf das andere Gitter übertragen. Dabei kann die Lösung im Medium \mathcal{M} kopiert werden, sofern die beiden Gitter im Medium identisch sind. Ist dies nicht der Fall, wird die Lösung interpoliert. Die Lösung in der Kluft \mathcal{F} benötigt eine gesonderte Betrachtung.

Beim Vergleich zwischen d - und $(d - 1)$ -dimensionalen Gittern fällt zunächst auf, dass am Interface zwischen Kluft \mathcal{F} und Medium \mathcal{M} die geometrische Lage der Knoten verschoben ist, da im d -dimensionalen Gitter im Gegensatz zum $(d - 1)$ -dimensionalen die Kluftdicke ϵ tatsächlich vorhanden und aufgelöst ist. Diese Verschiebung muss während des Transfers im hydrostatischen Anteil des Drucks berücksichtigt werden. Dieser muss um den Anteil $\pm \rho_f g_z \Delta z$ korrigiert werden, wobei g_z die z -Komponente des Gravitationsvektors \mathbf{g} bezeichnet und Δz der Verschiebung des d -dimensionalen im Vergleich zum $(d - 1)$ -dimensionalen Knoten entspricht. Im Falle einer horizontalen Kluft ist die Verschiebung gerade durch $|\Delta z| = \epsilon/2$ gegeben.

Um nun die Notation einfach zu halten, wird in diesem Abschnitt angenommen, dass das Gebiet Ω nur eine Kluft \mathcal{F} enthält. Sei nun $\Omega_\ell^{(d-1)}$ ($\ell \in \{0, \dots, L\}$) die Gitterhierarchie, auf der die Kluft \mathcal{F} eine $(d - 1)$ -dimensionale Repräsentation besitzt und Ω_ℓ^d ($\ell \in \{0, \dots, L\}$) die Gitterhierarchie, auf der \mathcal{F} d -dimensional dargestellt ist. Seien $V_\ell^{(d-1)}$ und V_ℓ^d die zugehörigen Vektorräume, definiert auf $\Omega_\ell^{(d-1)}$ und Ω_ℓ^d .

Dann wird der Operator $\mathcal{L}_d^{(d-1)}$, der vom d -dimensionalen auf das $(d - 1)$ -dimensionale Gitter abbildet, definiert

$$\mathcal{L}_d^{(d-1)} : V_\ell^d \rightarrow V_\ell^{(d-1)} \quad \ell \in \{0, \dots, L\}. \quad (5.1)$$

Die Werte der Lösung am Interface zwischen Kluft und Medium können kopiert werden, da diese auch im $(d - 1)$ -dimensionalen Modell explizit vorhanden sind. Dabei wird, wie oben erwähnt, der Druck um den hydrostatischen Anteil der Verschiebung korrigiert. Der Mittelwert in der Kluft, der für das $(d - 1)$ -dimensionale Modell benötigt wird, wird berechnet, indem im d -dimensionalen Fall ein Mittelwert entlang der Kluftbreite bestimmt wird, was durch numerische Integration mit der Trapezregel durchgeführt wird.

Der andere Transferoperator bildet vom $(d - 1)$ -dimensionalen auf das d -dimensionale Gitter ab

$$\mathcal{L}_{(d-1)}^d : V_\ell^{(d-1)} \rightarrow V_\ell^d \quad \ell \in \{0, \dots, L\}. \quad (5.2)$$

Da im $(d - 1)$ -dimensionalen Modell nur die Werte an den Interfaces zwischen Kluft und Medium und der Mittelwert in der Kluft bekannt sind, im d -dimensionalen Modell allerdings die Werte der

Unbekannten über die gesamte Kluftbreite benötigt werden, müssen diese unter irgendwelchen Annahmen bestimmt werden. Hierfür wird nun ein quadratisches Verhalten der Unbekannten in der Kluft angenommen und so unter Vorgabe der bekannten Werte die gesuchten berechnet. Dazu wird für jede Gerade quer zur Kluft (parallel zu \mathbf{n}), die Knoten in \mathcal{F} enthält, angenommen, dass die Unbekannten in der Kluft den Verlauf

$$f(x) = ax^2 + bx + c \quad (5.3)$$

annehmen. Für einen zu betrachtenden Punkt \mathbf{x} ist der Ort x auf der Gerade durch $x := |\mathbf{x} - \mathbf{x}^{(1)}|$ definiert, wobei $\mathbf{x}^{(1)}$ den Schnittpunkt der Geraden mit dem einen Interface $\mathcal{S}^{(1)}$ zwischen Kluft und Medium angibt.

Gleichung (5.3) muss nun die folgenden Bedingungen erfüllen

$$f(0) = u_1 \quad (5.4)$$

$$f(x^{(2)}) = u_2 \quad (5.5)$$

$$\frac{1}{|x^{(2)} - x^{(1)}|} \int_0^{x^{(2)} - x^{(1)}} f(x) dx = \bar{u} \quad (5.6)$$

Dabei sollen Bedingungen (5.4) und (5.5) sicherstellen, dass die Werte der Unbekannten an den Interfaces $\mathcal{S}^{(k)}$ ($k = 1, 2$) zwischen Kluft und Medium, die bekannt sind, beibehalten werden, wobei, wie oben erwähnt, der Druck um den hydrostatischen Anteil der Verschiebung korrigiert werden muss. Es gilt also für $k = 1, 2$ für den Massenbruch

$$u_k = \hat{\omega}^{(k)} \quad (5.7)$$

und für den Druck

$$u_k = \hat{p}^{(k)} - \varrho_f g_z \Delta z. \quad (5.8)$$

Bedingung (5.6) stellt sicher, dass der Mittelwert über die für das d -dimensionale Modell berechneten Werte in der Kluft dem Mittelwert aus dem $(d - 1)$ -dimensionalen Modell entspricht und kann auch so umgeschrieben werden

$$\left[\frac{1}{3}ax^3 + \frac{1}{2}bx^2 + cx \right]_0^{x^{(2)} - x^{(1)}} = \bar{u} \cdot |x^{(2)} - x^{(1)}| \quad (5.9)$$

Aus Bedingung (5.4) folgt sofort, dass der Parameter c in (5.3) durch $c = u_1$ gegeben ist. Für die Bestimmung der Parameter a und b wird das entstehende Gleichungssystem

$$\begin{pmatrix} (x^{(2)} - x^{(1)})^2 & (x^{(2)} - x^{(1)}) \\ \frac{1}{3}(x^{(2)} - x^{(1)})^3 & \frac{1}{2}(x^{(2)} - x^{(1)})^2 \end{pmatrix} \begin{pmatrix} a \\ b \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} u_2 - u_1 \\ |x^{(2)} - x^{(1)}|(\bar{u} - u_1) \end{pmatrix} \quad (5.10)$$

betrachtet, das sich einfach exakt lösen lässt und die Parameter a und b liefert, wodurch sich die Unbekannten dann mit (5.3) an jedem Punkt in der Kluft bestimmen lassen.

Sollte der Fall auftreten, an dem mit Hilfe des quadratischen Polynoms eine unphysikalische

Lösung berechnet wird (beispielsweise $\omega < 0$), wird stattdessen ein lineares Verhalten angenommen. In diesem Fall kann dann der Mittelwert nicht beibehalten werden, die Werte an den Interfaces werden jedoch beibehalten, was auch für die Stetigkeit der Lösung notwendig ist.

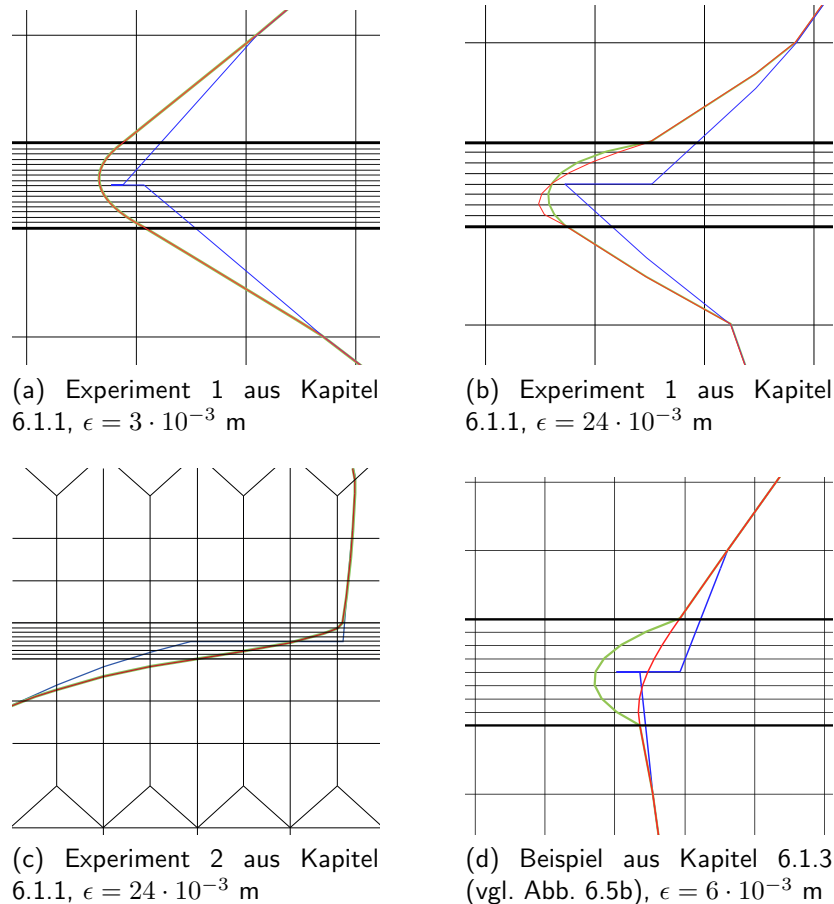


Abbildung 5.4: Gittertransfer: Verlauf in der Kluft: Gitterausschnitt und Isolinie der Konzentration ($\omega = 0.1$) in der d -dimensionalen Simulation (rot). Anwendung von $\mathcal{L}_d^{(d-1)}$ (blau) und von $\mathcal{L}_{(d-1)}^d(\mathcal{L}_d^{(d-1)})$ (grün) darauf.

In Abb. 5.4 ist die zweifache Anwendung des Gittertransfers auf das Ergebnis der d -dimensionalen Simulation, wonach dieses wieder auf dem d -dimensionalen Gitter gegeben ist, dargestellt. Dabei ist nur ein Ausschnitt des Gitters gezeigt, da außerhalb der Kluft die Lösungen übereinstimmen. Es ist zu erkennen, dass die Wahl des quadratischen Verhaltens im Falle des Experiments 1 (Abb. 5.4a) mit einer dünnen Kluft ($\epsilon = 3 \cdot 10^{-3}$ m) eine sehr gute Wahl darstellt. Es ist kaum ein Unterschied zwischen dem ursprünglichen Ergebnis und dem Ergebnis nach zweimaliger Anwendung des Transferoperators zu erkennen. Sie liefert auch für größere Kluftweiten (z.B. $\epsilon = 24 \cdot 10^{-3}$ m, Abb. 5.4b) noch gute Ergebnisse und ist auch in der Lage für den Fall mit sehr weit auseinander liegenden Kluftwandwerten das Profil der Konzentration gut wieder

zu geben (vgl. Abb. 5.4c). Dagegen gibt es jedoch auch Fälle (vgl. Abb. 5.4d), in denen die Berechnung mit dem quadratischen Polynom keine so gute Wahl darstellt. Dies ist auch darauf zurückzuführen, dass in dem dargestellten Beispiel die Strömung durch sich bildende Verwirbelungen (vgl. Kapitel 6.1.3) abgebremst wird, was das eigentlich zu erwartende Profil verändert. Trotz dieses Beispiels, ist das quadratische Verhalten als gute Approximation anzusehen und wird in dieser Arbeit verwendet, da das $(d - 1)$ -dimensionale Modell in keinem Fall in der Lage ist Verwirbelungen aufzulösen und für die anderen getesteten Fälle sehr gute Ergebnisse erzielt wurden.

Die Konstruktion der Transferoperatoren impliziert, dass bei einer zweifachen Anwendung des Gittertransfers angefangen beim d -dimensionalen Gitter, $\mathcal{L}_{(d-1)}^d(\mathcal{L}_d^{(d-1)})$, die Werte an den Interfaces zwischen Kluft und Medium, sowie der Mittelwert in der Kluft beibehalten werden. Das restliche Profil von Massenbruch und Druck in der Kluft ist jedoch auf Grund der Definition von $\mathcal{L}_{(d-1)}^d$ unterschiedlich. Hingegen werden bei zweifacher Anwendung, angefangen beim $(d - 1)$ -dimensionalen Gitter alle Werte beibehalten, also $\mathcal{L}_d^{(d-1)}(\mathcal{L}_{(d-1)}^d) = \mathbf{1}$.

Der Gittertransfer kann mit folgendem Kommando (in *expandcmd.c*) manuell ausgeführt werden:

```
transfer $name mg_full $name2 mg_low $N 1 $fract 2 $normal 0 1
```

wobei mit *\$name* der Name des d -dimensionalen Gitters, der im Skriptfile bei Erstellung der Gitterhierarchie vergeben wurde, und mit *\$name2* der des $(d - 1)$ -dimensionalen gemeint ist. *\$N* gibt die Anzahl der zur Kluft gehörigen Subdomains an, deren Subdomain-Ids mit *\$fract* und Normalen mit *\$normal* angegeben werden.

Für die in Kapitel 4.3.2 eingeführte dimensions-adaptive Methode, wird jedoch folgendes Kommando benötigt

```
check_transfer $sol sol $name mg_full $name2 mg_low $N 1 $fract 2
$seps 0.001 $normal 0 1 $time @step_time
```

das den Gittertransfer abhängig von der in Kapitel 7.2.1 aufgestellten Bedingung ausführt. Dabei werden die selben Optionen wie bei *transfer* übergeben und zusätzlich noch mit *\$sol* die Lösung, mit *\$seps* die Kluftdicke und mit *\$time* die Simulationszeit. Die ersten beiden Informationen werden hierbei für die Berechnung der Bedingung benötigt, abhängig von welcher der Transfer ausgeführt wird und die der Größe aus Gleichung (7.2) entspricht, während die Zeit ausschließlich für die Ausgabe verwendet wird.

Näheres zu der Wahl der Bedingung, wann der Transfer durchgeführt wird, und Ergebnisse sind in Abschnitt 7.2 zu finden.

5.3 Gitter-Erzeugung

Die ersten Testgitter, die im Rahmen dieser Arbeit verwendet wurden, wurden mühselig einzeln von Hand erzeugt. Da dies natürlich einen sehr großen Arbeits- und Zeitaufwand erfordert und

für komplizierte 3D- Geometrien auch gar nicht möglich ist, werden hier die verschiedenen Verfahren zur Gitter-Erzeugung einer geklüfteten Domain vorgestellt, die für die Gitter-Erzeugung der Beispiele in dieser Arbeit verwendet wurden. In den nächsten Abschnitten wird zunächst erwähnt, auf was bei den Gittern geachtet werden muss, und dann werden die einzelnen verwendeten Tools grob beschrieben. Da hier nur ein kurzer Überblick gegeben wird, wird für eine detailliertere Beschreibung dieser Software Tools die Lektüre von [Reiter, 2014] stark empfohlen.

5.3.1 Grundlegendes für die Gitter-Erzeugung

Das Grob-Gitter wird in dem für *UG* gebräuchlichen Gitterformat, bestehend aus einer *.lgm und einer *.ng Datei, angegeben (vgl. [Feuchter, 2008]). Die Angabe der degenerierten Elemente in diesem Format erfolgt folgendermaßen: In der *.lgm Datei werden beispielsweise zwei Punkte angegeben, die das linke bzw. das rechte Ende einer Kluft angeben. Diese beiden Punkte werden dann, anstelle davon mit nur einem Polygonzug, genannt *line*, verbunden zu werden, mit zwei *lines* verbunden, deren Orientierung entgegengesetzt ist und die das obere bzw. untere Interface zwischen Kluft und Medium beschreiben. In der *.ng Datei werden zusätzlich alle Knoten des Grundgitters angegeben, auch wenn bei diesen im Falle eines degenerierten Elementes jeweils mehrere auf ein und derselben geometrischen Position liegen. Dadurch wird gewährleistet, dass in *UG* automatisch eine ausreichende Anzahl an Freiheitsgraden zur Verfügung steht, da in *UG* automatisch jedem Knoten ein Freiheitsgrad zugewiesen wird. Mit Hilfe des Seitenverhältnisses wird dann in *UG* festgestellt, ob es sich um ein degeneriertes Element handelt. Die feineren Gitter für die Mehrgitterhierarchie werden dann in *UG* mittels der enthaltenen Verfeinerungsroutinen erstellt.

Bei der Erzeugung des Grobgitters müssen neben den normalen Anforderungen an ein Gitter (Regularität, Konformität, etc. - vgl. Abschnitt 3.1.2) insbesondere auch die Klüfte speziell berücksichtigt werden. Grundsätzlich werden Gebiete mit verschiedenen Eigenschaften, wie unterschiedlichen Parametern, zunächst mit verschiedenen *subdomains* dargestellt. Deswegen bekommt auch jede Kluft ihre eigene Subdomain zugeordnet und zwar unabhängig davon, ob die Kluft später d - oder $(d - 1)$ -dimensional betrachtet wird. Mit dieser Subdomain wird der Kluft auch ein Name zugeordnet, über den z.B. Parameter vorgegeben werden können (vgl. Kapitel 5.2.2). Bei sich kreuzenden Klüften ist zu beachten, dass entweder alle sich kreuzenden Klüfte derselben Subdomain zugeordnet werden oder Teilstücke einer Kluft (links und rechts von der Kreuzung) in unterschiedlichen Subdomains liegen. Dies liegt daran, dass in *UG* nur zusammenhängende Subdomains zugelassen sind.

Im weiteren wird unterschieden, ob die Kluft in der Geometrie d - oder $(d - 1)$ -dimensional repräsentiert werden soll. Für den Fall einer d -dimensionalen Kluft, muss die Kluft bereits auf dem Grobgitter geometrisch aufgelöst sein. Das bedeutet, dass die Kluft mit ihrer tatsächlichen Dicke durch das Gitter dargestellt sein muss. Dabei ist zu beachten, dass sich das Gitter an die Kluft anpassen muss, also die Kluftländer mit Kanten in 2D bzw. Oberflächen in 3D des restlichen Gitters übereinstimmen. Für den Fall einer $(d - 1)$ -dimensionalen Kluft ist zunächst nur zu beachten, dass das Gitter an die Kluft angepasst ist. Desweiteren muss in beiden Fällen die Breite der Kluft auf dem Grobgitter durch exakt 2 Schichten an Elementen aufgelöst sein, da dies für die $(d - 1)$ -dimensionale Diskretisierung notwendig ist. Diese benötigt einen Frei-

heitsgrad in der Kluft und jeweils einen auf dem Interface zum Medium, was mit Hilfe von zwei (degenerierten) Elementen erreicht werden kann, wie bereits in Abschnitt 5.1.2 erläutert wurde. Weiterhin benötigen eventuelle Kreuzungen von verschiedenen Klüften eine spezielle Betrachtung. Diese müssen so konstruiert sein, dass bei der niederdimensionalen Diskretisierung keine Unstimmigkeiten entstehen. Deswegen darf es in Kluftkreuzungen keine zusätzlichen Elemente geben (vgl. Abb. 5.5).

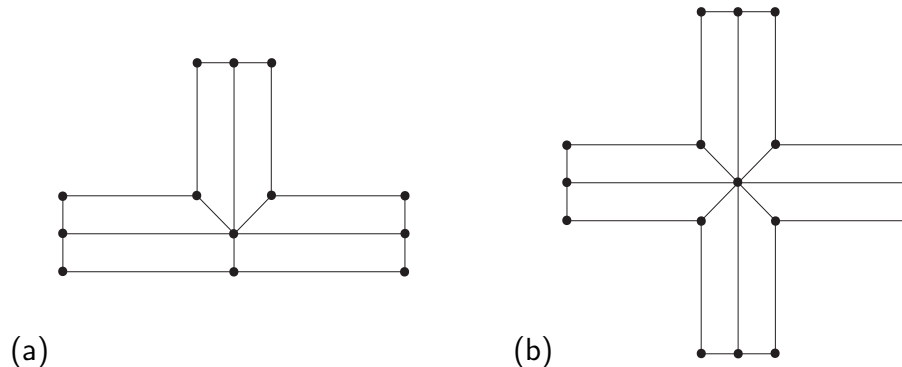


Abbildung 5.5: Topologische Struktur der Elemente einer Kluftkreuzung in 2D. Die kürzeren Seiten können degeneriert sein. Die schwarzen Punkte geben die Freiheitsgrade an.

5.3.2 Blender

Für die Gitter-Erzeugung kam zunächst die Benutzung der freien (mit GPL lizenzierten) Software *Blender* ([Wartmann, 2007],[Ble,]) in Frage. Diese ist eine 3D-Grafik-Software, die normalerweise zur Film- bzw. Videospiel-Entwicklung benutzt wird. In unserem Fall wurde Blender jedoch zur Erzeugung von Test-Geometrien verwendet. Dabei wurde entweder direkt ein zwei- oder drei-dimensionales Gitter mit Aufteilung in verschiedene Subdomains (vgl. Abb. 5.6) erzeugt oder ausschließlich die geometrische Grundstruktur festgelegt. Ein so erzeugtes Gitter wurde im Format *.obj exportiert.

Zur weiteren Bearbeitung wurde dann das hierfür geschriebene Kommandozeilen-Tool für Oberflächengitter *mesh* (siehe [Reiter, 2008]) verwendet. Damit werden aus Dateien im *.obj Format zweidimensionale *.lgm und *.ng Dateien erzeugt, wobei folgendes Kommando verwendet wurde:

```
mesh load name.obj ,
info ,
remove_doubles 0.0001 ,
export_ug_2d lgmname problemname name convex
```

Dabei wird eine Datei *info* erstellt, die Informationen über die Anzahl der Knoten, Elemente und Subdomains enthält. Mit *lgmname* kann der Name der neu entstehenden *.lgm Datei gewählt werden, während *name* und *problemname* Namen in der *.lgm Datei angeben, die dann in *UG*

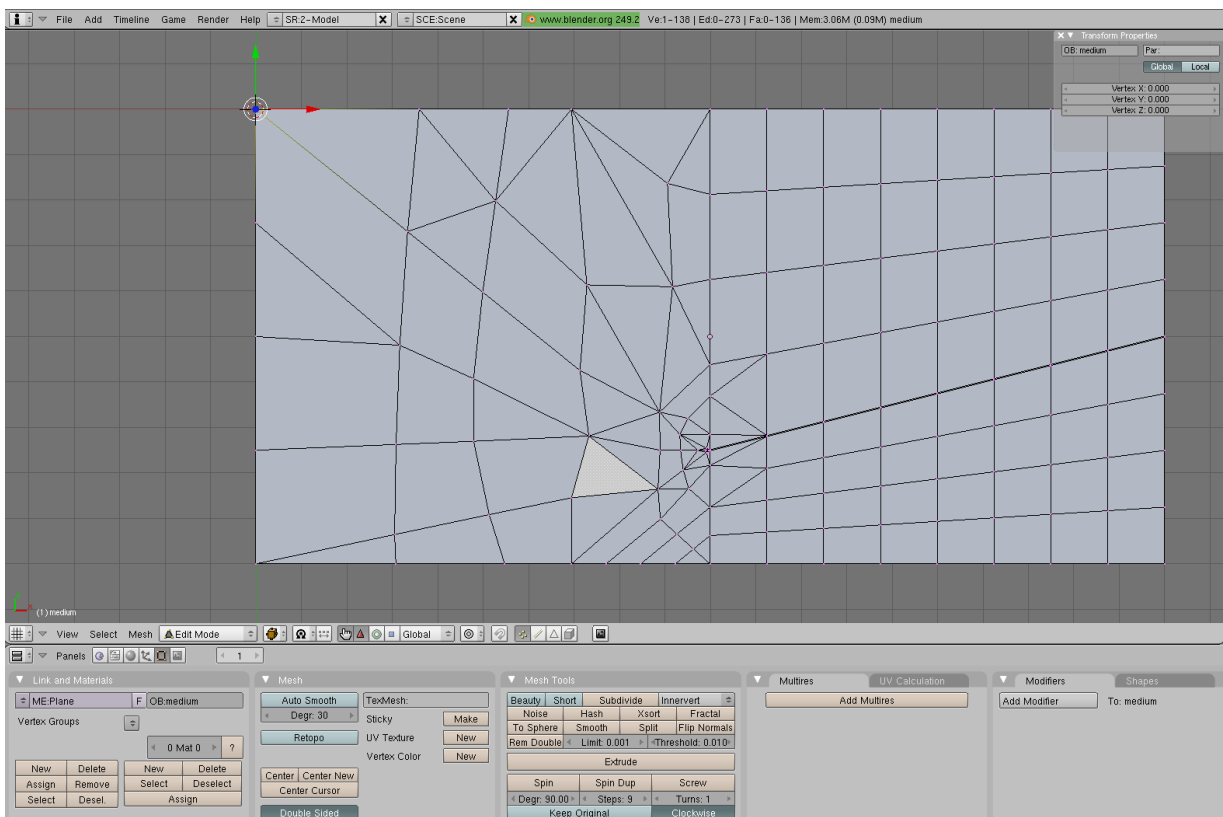


Abbildung 5.6: Geometrie-Erzeugung mit der 3D-Grafik-Software Blender.

abgefragt werden können. Der Parameter *convex* kann 0 oder 1 gewählt werden. Für eine Geometrie mit degenerierten Klüften wird der Befehl *fracture_to_subset* benutzt.

5.3.3 ProMesh

Im Laufe der Arbeit wurde dann das neuentwickelte *ProMesh* (vgl. [Reiter und Wittum, 2013]) ein Programm zur Erzeugung, Bearbeitung und Visualisierung von Geometrien verwendet. Hierin können u.a. auch mit Blender erzeugte *.obj Dateien geladen und weiter verarbeitet werden. Erstellte Geometrien können in dem von *UG* benötigten *.lgm und *.ng Format exportiert werden.

Es können allerdings auch auf einfache, intuitive Weise neue zwei- und dreidimensionale Geometrien erzeugt werden. Ein für diese Arbeit entscheidendes Feature von *ProMesh* ist das Erzeugen von Klüften in 2D und 3D (vgl. [Reiter et al., 2013a]). Dazu werden im zuvor erzeugten Gitter in 2D Kanten (in 3D Flächen) ausgewählt, die die Lage der Kluft vorgeben. Die Kluft muss also im zugrunde liegenden Gitter mit Seiten-Kanten (oder -Flächen) übereinstimmen. Diesen wird dann zunächst eine eigene Subdomain zugeordnet. Dann kann mit dem Befehl *Expand Layers 2d* (oder *3d*) eine oder mehrere dieser Subdomains ausgewählt werden und es werden Elemente so eingefügt, dass eine zweischichtige Kluft mit vorgegebener Breite entsteht (vgl. Abb. 5.7). Da

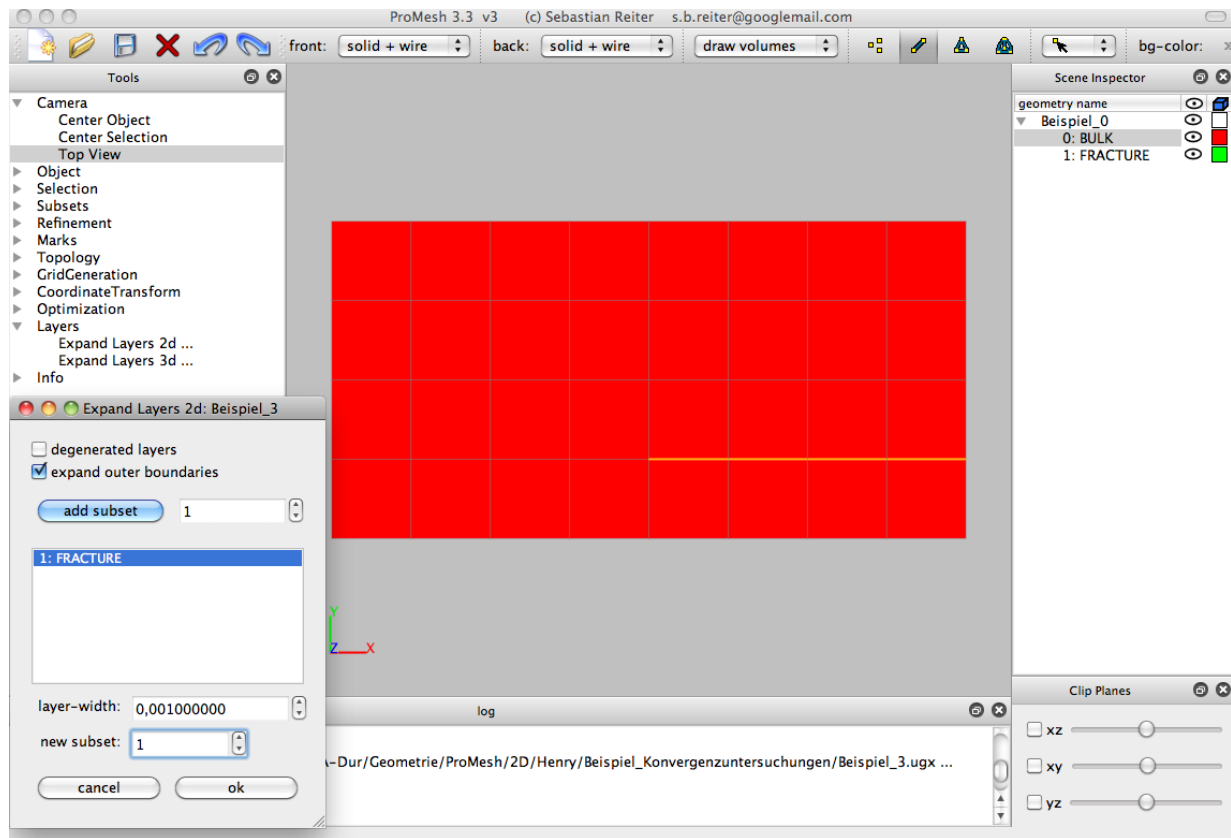


Abbildung 5.7: Geometrie-Erzeugung mit ProMesh.

ein Ablaufen aller $(d - 1)$ -dimensionalen Kluftelemente (die markierten Kanten bzw. Flächen) und ein entsprechendes Einfügen von Elementen auf beiden Seiten bei Kluftkreuzungen zu Problemen und insbesondere in 3D zu vielen Spezialfällen führen kann, wird hierfür ein Algorithmus verwendet, der die benachbarten Elemente abläuft und dort neue Knoten einfügt. Dieser ist in [Stichel et al., 2012], [Reiter et al., 2013b] und [Reiter et al., 2013a] beschrieben.

6 Auswahl und Analyse von Benchmark-Problemen

In diesem Kapitel werden einfache Beispielprobleme festgelegt um die numerischen Verfahren zu testen. Dazu werden zwei Beispiele gewählt, die auf allgemein bekannten Benchmark-Problemen für haline Strömungsprobleme basieren und für den Fall von geklüfteten Medien modifiziert werden, wie auch in [Grillo et al., 2010b], [Grillo et al., 2012], [Stichel et al., 2012], [Reiter et al., 2013b], [Reiter et al., 2013a] und [Grillo et al., 2013]. In den Abschnitten 6.1, 6.2 und 6.3 werden die Probleme zunächst eingeführt und es wird untersucht, welchen Einfluss das Vorhandensein der Klüfte auf das Strömungsprofil dieser Probleme hat.

6.1 Geklüftetes Henry-Problem

Als erstes Testbeispiel wird eine modifizierte Version des klassischen Henry-Problems (vgl. [Henry, 1964]) betrachtet, das das Einfließen von Salzwasser in einen Süßwasserleiter beschreibt. Da für dieses Problem eine semi-analytische Lösung entwickelt wurde, wird es vielfach als Benchmark-Problem für die Simulation von Dichte-abhängigen Strömungen verwendet. Um dieses Problem nun für geklüftete Medien benutzen zu können, wird die $2 \times 1 \text{ m}^2$ große Geometrie verändert. Dazu werden eine (oder mehrere) Klüfte in das Gebiet gelegt (vgl. Abb. 6.1), wobei hier unterschiedliche geometrische Lagen dieser Kluft (Klüfte) untersucht werden.

Die Randbedingungen (vgl. Abb. 6.1) werden bis auf eine kleine Veränderung so gewählt wie im

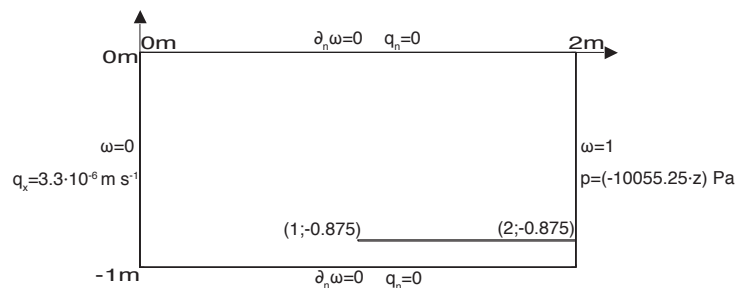


Abbildung 6.1: Geometrie und Randbedingungen für das geklüftete Henry-Problem. Die Geometrie der Kluft entspricht Experiment 1.

ursprünglichen Problem. Dort beschreiben der obere ($z = 0 \text{ m}$) und der untere Rand ($z = -1 \text{ m}$) undurchlässige Wände, weswegen dort Neumann-Null-Randbedingungen für beide Gleichungen gesetzt werden. Auf der rechten Seite ($x = 2 \text{ m}$), der Meeresseite, liegt Salzwasser mit einer Konzentration von $c_\alpha = 1025 \text{ kg} \cdot \text{m}^{-3}$ ($\omega_\alpha = 1$) vor und der Druck verhält sich dort hydrostatisch: $p_\alpha(z) = \rho_\alpha g_z z \text{ Pa}$ (wobei z die z -Koordinate angibt). Auf der linken Seite ($x = 0 \text{ m}$), der Landseite, liegt Süßwasser mit einer Salzkonzentration $c_m = 0 \text{ kg} \cdot \text{m}^{-3}$ ($\omega_m = 0$) vor. Außerdem wird von dort ein konstanter Frischwasserfluss in das Gebiet vorgegeben. Dieser wird beim Henry-Problem vielfach mit einem Wert von $\mathbf{q}_m \cdot \mathbf{n} = -q_{mx} = -6.6 \cdot 10^{-5} \text{ m s}^{-1}$ angegeben (vgl. z.B. [Kolditz et al., 1998]), wobei \mathbf{n} die äußere Normale an den Rand ist. In [Simpson und Clement, 2003] und [Simpson und Clement, 2004] wurde untersucht, dass dabei

Dichte-Effekte nicht so deutlich zu Tage treten können, da die Randbedingungen das Problem zu sehr festsetzen. Daraufhin schlägt [Simpson und Clement, 2004] vor den Frischwasserfluss auf $q_{mx} = -3.3 \cdot 10^{-5} \text{ m s}^{-1}$ zu reduzieren und zeigt, dass so der Einfluss der Dichte-Abhängigkeit erhöht werden kann ohne andere Vorteile des Standard-Testfalls zu verlieren. Dem folgend wird auch hier als Randbedingung dieser reduzierte Fluss gewählt.

Die in den Rechnungen benutzten Parameter entsprechen für das Medium \mathcal{M} den Parametern des ursprünglichen Henry-Problems. Für die Kluft \mathcal{F} werden dazu passende Parameter gewählt, die die hohe Permeabilität als wesentliche Eigenschaft der Kluft beinhalten. Alle Parameter sind in Tabelle 6.1 angegeben, wobei zunächst mit Darcy-Geschwindigkeit gerechnet wird und der Einfluss der Forchheimer-Korrektur dann in Abschnitt 6.1.4 untersucht wird.

Symbol	Koeffizient	Wert	Einheit
D_m	Diffusionskoeffizient im Medium	$6.6 \cdot 10^{-6}$	$[\text{m}^2 \text{ s}^{-1}]$
D_f	Diffusionskoeffizient in der Kluft	$13.2 \cdot 10^{-6}$	$[\text{m}^2 \text{ s}^{-1}]$
\mathbf{g}	Gravitation	$(0, -9.81)^T$	$[\text{m s}^{-2}]$
K_m	Permeabilität im Medium	$1.019368 \cdot 10^{-9}$	$[\text{m}^2]$
K_f	Permeabilität in der Kluft	$1.019368 \cdot 10^{-5}$	$[\text{m}^2]$
ϕ_m	Porosität im Medium	0.35	[1]
ϕ_f	Porosität in der Kluft	0.7	[1]
μ	Viskosität	10^{-3}	$[\text{kg m}^{-1} \text{ s}^{-1}]$
ρ^{pW}	reine Dichte des Wassers	$1 \cdot 10^3$	$[\text{kg m}^{-3}]$
ρ^{pB}	reine Dichte der Salzlösung	$1.025 \cdot 10^3$	$[\text{kg m}^{-3}]$
$a_\alpha^t, a_\alpha^\ell$	Dispersionslängen	0	[m]
A_α	Forchheimer-Koeffizient	0	$[\text{m}^{-1} \text{ s}]$

Tabelle 6.1: Parameter für die Simulation des Henry-Problems.

6.1.1 Einfluss der geometrischen Lage der Kluft

In diesem Abschnitt wird darauf eingegangen, welchen erheblichen Einfluss das Hinzufügen einer Kluft zum ursprünglichen Henry-Problem hat. Dazu werden verschiedene Beispiele betrachtet.

Das ursprüngliche Henry-Problem ohne Kluft wird dadurch charakterisiert, dass das schwerere Salzwasser durch die Gravitation nach unten absinkt. Dort erhöht sich die Dichte, der Druckgradient ist an dieser Stelle der Gravitation entgegen gerichtet und es kommt zu einem lateralen Fluss, durch den das Salzwasser im unteren Teil in das Gebiet einfließt. Auf der linken Hälfte des Gebiets, wo die Dichte-Unterschiede deutlich kleiner sind, dominiert der durch die Randbedingung vorgegebene Frischwassereinfluss das Geschehen. Dieser führt auch dazu, dass das von rechts einströmende Salzwasser seine Richtung ändert und dann in der oberen Hälfte des rechten Randes das Gebiet wieder verlässt. (vgl. dazu auch Abb. 6.2). Der rechte Rand wird also in zwei Teile geteilt: in der unteren Hälfte strömt Wasser in das Gebiet hinein, in der oberen aus ihm heraus. Der Wechsel zwischen diesen beiden Szenarien findet in etwa in der

Mitte der Randseite statt.

Wenn nun eine Kluft in das Gebiet eingefügt wird, ändern sich, wie in Abb. 6.2 zu sehen ist,

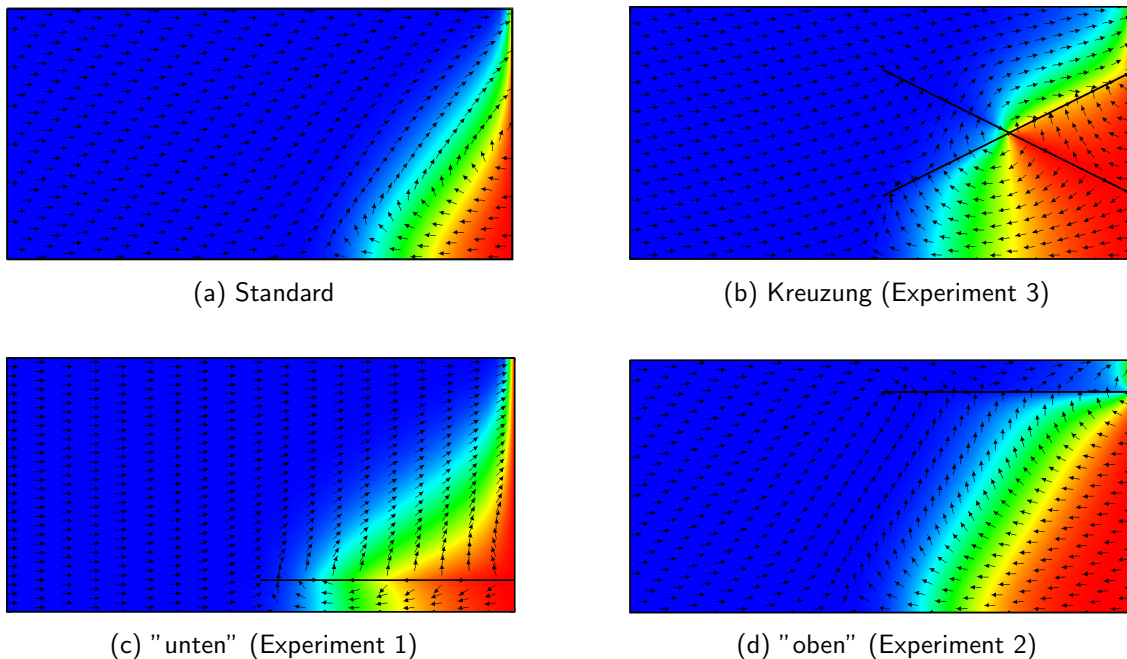


Abbildung 6.2: Geklüftetes Henry-Problem: Einfluss der geometrischen Lage der Kluft zum Zeitpunkt $t = 25\text{min}$. Dargestellt ist die Konzentrationsverteilung (rot: $\omega = 1$, blau: $\omega = 0$) und das Geschwindigkeitsfeld.

sowohl das Konzentrations- als auch das Geschwindigkeitsprofil. Dadurch dass die Permeabilität in der Kluft um mehrere Größenordnungen größer ist als im umgebenden Medium, ist die Konvektion deutlich größer und es fließt mehr Salzwasser in das Gebiet. Auch ist zu beobachten, dass die Isolinien des Massenbruchs, wenn sie die Kluft erreichen, einer Abknickung unterliegen, was durch den großen Sprung in der Permeabilität ausgelöst wird.

Weiterhin ist festzustellen, dass abhängig von der geometrischen Lage der Kluft komplett unterschiedliche Ergebnisse erzeugt werden. Hier werden zum Vergleich drei Experimente betrachtet, die verschiedene repräsentative Kluft-Konstellationen beinhalten:

1. *Kluft in der unteren Hälfte* ($\epsilon = 6 \cdot 10^{-3} \text{ m}$) mit Endpunkten $(x, z) = (1 \text{ m}, -0.875 \text{ m})$ und $(2 \text{ m}, -0.875 \text{ m})$ (vgl. Abb. 6.2c): Innerhalb der Kluft zeigt die Richtung der Geschwindigkeit von rechts nach links, was auf die haline Strömung zurückzuführen ist und unabhängig von der Kluft ist. In der Nähe des linken Endes der Kluft kann eine Drehung der Geschwindigkeits-Richtung beobachtet werden. An der Stelle treffen Frischwasser und Salzwasser aufeinander, was zu einem Wirbel führt.

Durch die deutlich größere Permeabilität in der Kluft, ist dort auch die Geschwindigkeit deutlich größer, wodurch mehr Salzwasser schneller durch die Kluft in das Gebiet einfließen kann. Der Vergleich mit Experiment 2 zeigt hier jedoch, dass dieses Ergebnis von der

Position der Kluft innerhalb des Gebiets abhängt, was auf die erhöhte Salzkonzentration im unteren Teil der Domain zurückzuführen ist. Der Punkt, der auf der rechten Seite ein- und ausströmendes Wasser teilt, liegt nun auf der Kluft.

2. *Kluft in der oberen Hälfte* ($\epsilon = 6 \cdot 10^{-3}$ m) mit Endpunkten $(x, z) = (1 \text{ m}, -0.125 \text{ m})$ und $(2 \text{ m}, -0.125 \text{ m})$ (vgl. Abb. 6.2d): Innerhalb der Kluft zeigt die Geschwindigkeit von links nach rechts, was wieder unabhängig von der Kluft schon durch das Problem gegeben ist, wodurch jedoch eine Ausbreitung des Salzwassers in der Kluft verhindert wird. In der Nähe des rechten Endes der Kluft kommt es zu einer Drehung der Geschwindigkeit innerhalb der Kluft, da auf Grund der großen Permeabilität und damit großen Geschwindigkeit in der Kluft an dieser Stelle auch Salzwasser in das Gebiet fließt. Der Punkt, der auf der rechten Seite ein- und ausströmendes Wasser teilt, liegt wieder auf der Kluft. Obwohl im Gegensatz zu Experiment 1 so gut wie kein Salzwasser durch die Kluft selbst in das Gebiet fließt, dringt insgesamt im Vergleich zu dem Standardproblem ohne Kluft deutlich mehr Salzwasser in das Gebiet ein.
3. *Kreuzung zweier Klüfte* ($\epsilon = 1.7888 \cdot 10^{-3}$ m, vgl. Abb. 6.2b): Dieses Beispiel erscheint als eine Zusammenfassung der beiden bisherigen Beispiele. Es wird hier die Kreuzung von zwei Klüften betrachtet: die eine mit Endpunkten bei $(x, z) = (1 \text{ m}, -0.25 \text{ m})$ und $(2 \text{ m}, -0.75 \text{ m})$, die andere bei $(1 \text{ m}, -0.75 \text{ m})$ und $(2 \text{ m}, -0.25 \text{ m})$. Dabei entspricht der rechte Teil der ersten Kluft in etwa Experiment 1, die Geschwindigkeit in der Kluft ist in das Gebiet hinein gerichtet und dadurch fließt viel Salzwasser durch die Kluft in das Gebiet. Der rechte Teil der zweiten Kluft entspricht in etwa Experiment 2, wobei hier die Geschwindigkeit in der Kluft aus dem Gebiet heraus zeigt. In den linken Teilen beider Klüfte zeigt die Geschwindigkeit in Richtung des rechten Randes, weswegen es zu einer Drehung der Geschwindigkeit innerhalb der ersten Kluft genau am Kreuzungspunkt kommt. Der Umkehrpunkt der Geschwindigkeit, wird nun durch den gesamten rechten Teil der zweiten Kluft gekennzeichnet. Zusätzlich bildet der Kreuzungspunkt der Kluft ein Zentrum der darum drehenden Geschwindigkeit.

Zudem konnte beobachtet werden, dass die horizontale Ausrichtung der Klüfte aus den ersten beiden Beispielen kein wesentlicher Parameter für die hier beschriebenen Unterschiede ist. So konnte festgestellt werden, dass für schief gelegene Klüfte (wie auch in Experiment 3) ein ähnliches Verhalten zu beobachten ist wie für horizontale und dass Veränderungen im Winkel keinen weiteren Einfluss auf dieses grundlegende Verhalten haben.

6.1.2 Einfluss der Kluft-Dicke

Neben der geometrischen Lage der Kluft hat sich auch die Kluft-Dicke ϵ als weiterer wichtiger Parameter, der das Ergebnis beeinflusst, gezeigt. Um diesen Einfluss zu untersuchen, werden Geometrien mit variabler Kluft-Dicke betrachtet, bei denen alle übrigen Parameter (Lage, Länge, Neigungswinkel, etc.) fest gewählt sind. Um dabei den zusätzlichen Einfluss durch die geometrische Lage nicht zu vernachlässigen, werden verschiedene Dicken für an zwei verschiedenen

geometrischen Positionen liegende Klüfte (vgl. im letzten Abschnitt Experimente 1 und 2) untersucht.

Zunächst wird die Kluft in der unteren Hälfte des Gebiets (Experiment 1, Abb. 6.3) betrachtet.

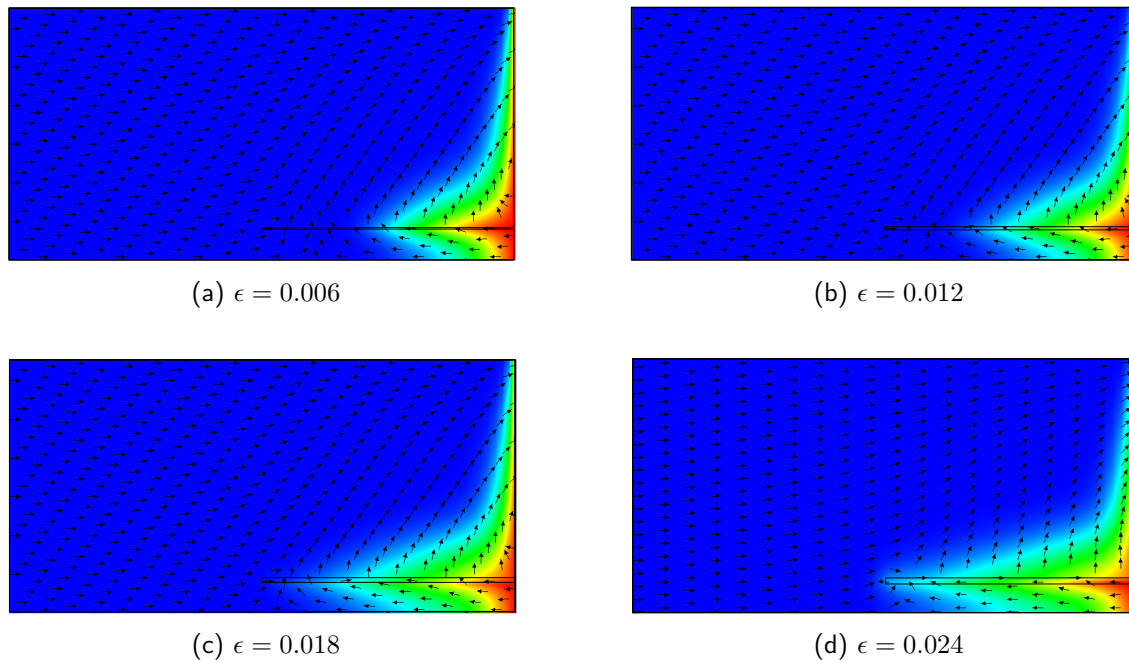


Abbildung 6.3: Geklüftetes Henry-Problem: Einfluss der Kluftdicke zum Zeitpunkt $t = 25\text{min}$ für Kluft in der unteren Hälfte (Experiment 1).

Dabei wird deutlich, dass bei einer dickeren Kluft das Salzwasser schneller durch die Kluft in das Gebiet hineinfließt. Desweiteren kann bei den dickeren Klüften aber auch ein neuer Effekt beobachtet werden: die Bildung von Wirbeln in der Kluft. Tatsächlich ist bei der sehr dicken Kluft (vgl. Abb. 6.3d) die Geschwindigkeit im unteren Teil der Kluft von rechts nach links gerichtet, während sie im oberen Teil der Kluft von links nach rechts zeigt. Die Vermutung liegt nahe, dass dieses Ergebnis daher kommt, dass die Kluft in diesem Fall dick genug ist um einen Dichte-Unterschied innerhalb der Kluft zu ermöglichen, der zu eben dieser Drehung der Geschwindigkeit, also der Bildung von Wirbeln, führt (s. auch Abschnitt 6.1.3).

Auch bei dem Beispiel, bei dem die Kluft in der oberen Hälfte des Gebiets liegt (Experiment 2, Abb. 6.4), hat die Dicke der Kluft einen großen Einfluss auf das Strömungsverhalten, auch wenn dieser nicht ganz so groß ist wie bei Experiment 1. Ebenfalls kann hier beobachtet werden, dass bei zunehmender Kluftdicke mehr Salzwasser einströmen kann, das umso weiter einfließt je dicker die Kluft ist. Auch kann hier festgestellt werden, dass die Geschwindigkeit in der unteren Hälfte der Kluft, der Geschwindigkeit in der oberen Hälfte der Kluft entgegen gerichtet ist, so dass das Salzwasser hier fast ausschließlich in der unteren Hälfte der Kluft einfließt.

Zusammenfassend ist zu sagen, dass ein Vergrößern der Dicke der Kluft zum einen dazu führt,

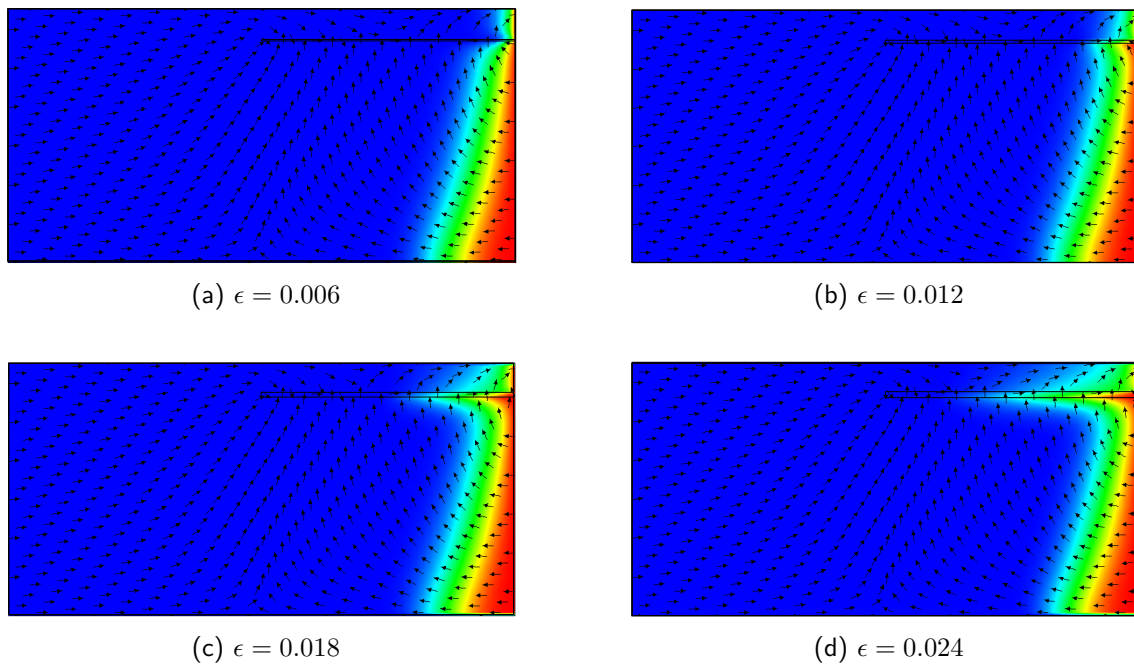


Abbildung 6.4: Geklüftetes Henry-Problem: Einfluss der Kluftdicke zum Zeitpunkt $t = 25\text{min}$ für Kluft in der oberen Hälfte (Experiment 2).

dass mehr Salzwasser in das Gebiet eindringen kann, zum anderen aber auch dazu, dass sich Wirbel in der Kluft bilden.

6.1.3 Wirbelbildung

Wie im letzten Abschnitt gesehen, führt eine Vergrößerung der Dicke der Kluft dazu, dass sich Wirbel in der Kluft bilden (siehe auch [Grillo et al., 2010b]). Um diese zu charakterisieren, wird die *Wirbelstärke* ζ_α^1 , auch Wirbelhaftigkeit oder Vortizität genannt, betrachtet, die die Rotation der Fluidgeschwindigkeit, die in Richtung der Rotationsachse bzw. in 2D senkrecht zur Flussebene orientiert ist, beschreibt. Sie hat die Einheit $[\zeta_\alpha] = 1/\text{s}$ und ist direkt verbunden mit der zirkulierenden Bewegung, die das Salzwasser transportiert.

Ganz allgemein stellen Temperatur- und Dichte-getriebene Strömungen keine Potentialströmungen dar (vgl. [Bear, 1972]), was bedeutet, dass die Rotation der Geschwindigkeit $\mathbf{v}_\alpha = \mathbf{q}_\alpha / \phi_\alpha$ nicht überall in Ω verschwindet. Da in dieser Arbeit die Porosität ϕ_α als konstant angenommen wird, kann die Wirbelstärke definiert werden als

$$\zeta_\alpha = \nabla \times \mathbf{q}_\alpha \quad (6.1)$$

¹In der Strömungsmechanik wird die Wirbelstärke zumeist mit dem Symbol ω bezeichnet. Um jedoch eine Verwechslung mit dem Massenbruch ω zu vermeiden, wird hier das in der Meteorologie übliche Symbol ζ verwendet.

und unter der Annahme von konstanter Viskosität, isotroper und stückweise konstanter Permeabilität und der Gültigkeit des Darcy-Gesetzes (2.4) folgt mit $\nabla \times \nabla p = \mathbf{0}$

$$\zeta_\alpha = \frac{K_\alpha}{\mu} (\nabla \varrho_\alpha \times \mathbf{g}). \quad (6.2)$$

Für die haline Strömung mit $\varrho_\alpha = \varrho_\alpha(\omega_\alpha)$ erhält man also

$$\zeta_\alpha = \frac{K_\alpha}{\mu} \frac{\partial \varrho_\alpha}{\partial \omega_\alpha} (\nabla \omega_\alpha \times \mathbf{g}), \quad (6.3)$$

woran zu erkennen ist, dass der Betrag der Wirbelstärke maximal wird, wenn der Gradient des Massenbruchs $\nabla \omega_\alpha$ senkrecht zur Gravitationsbeschleunigung \mathbf{g} steht oder, in anderen Worten, wenn die Isolinien des Massenbruchs parallel zur Gravitationsbeschleunigung verlaufen.

Natürlich wird nun auch wieder die Verteilung der Wirbelstärke durch das Vorhandensein von Klüften stark beeinflusst und dies ist wie auch die Verteilung der Konzentration abhängig von der Geometrie (vgl. Abschnitt 6.1.1) und der Dicke der Kluft (vgl. Abschnitt 6.1.2). Insbesondere, wenn die Kluft dick genug ist, so dass die Verteilung der Konzentration innerhalb der Kluft (entlang der Breite) variieren kann, kann auch die Wirbelstärke innerhalb der Kluft variieren.

Sei nun $\mathbf{q}_\alpha = (q_{\alpha 1}, q_{\alpha 2}, q_{\alpha 3})^T = \sum_{i=1}^3 q_{\alpha i} \mathbf{e}_i$ mit $\{\mathbf{e}_1, \mathbf{e}_2, \mathbf{e}_3\}$ der kanonischen Basis des \mathbb{R}^3 . In 2D gilt also $q_{\alpha 2} \equiv q_{\alpha y} = 0$ und es ergibt sich aus Gleichung (6.3) der skalare Wert

$$\zeta_\alpha = \frac{K_\alpha}{\mu} \frac{\partial \varrho_\alpha}{\partial \omega_\alpha} g_z \frac{\partial \omega_\alpha}{\partial x} \quad (6.4)$$

Für das Beispiel aus Experiment 1 mit einer Kluft der Dicke $\epsilon = 0.024$ m (vgl. Abb. 6.3d) wurde bereits beobachtet, dass das Profil der Konzentration innerhalb der Kluft stark vom Mittelwert abweicht und somit der Konzentrationsgradient nicht an jedem Punkt der Kluft orthogonal zur Gravitationsbeschleunigung ist. Auch für die Wirbelstärke erhält man ein entlang der Kluftbreite vom Mittelwert abweichendes Profil (vgl. Abb. 6.5a(i)). An den Stromlinien der Geschwindigkeit (vgl. Abb. 6.5a(ii)) ist zu erkennen, dass sich bei diesem Beispiel zwar keine volle Verwirbelung ausbildet, die die Strömung stoppt, allerdings jedoch das Salzwasser in der unteren Hälfte der Kluft in das Gebiet hinein- und in der oberen Hälfte der Kluft wieder herausströmt. Dadurch kommt es in der Kluft zu zwei entgegengerichteten Strömungen.

In Abb. 6.5b ist ein Beispiel gezeigt, in dem sich eine volle Verwirbelung bildet, wie an den Stromlinien gut zu erkennen ist. Hier zirkuliert die Strömung nach Eindringen am rechten Ende der Kluft in dieser. In diesem Beispiel ist auch an den Isolinien des Massenbruchs gut zu erkennen, wie die Strömung durch den Wirbel abgebremst wird und so das Eindringen von Salzwasser in die Kluft vermindert auftritt.

Natürlich ist die Ausbildung von Wirbeln eigentlich ein dreidimensionales Phänomen, was sich in zwei Dimensionen nur bedingt untersuchen lassen kann. Abschnitt 6.2.1 widmet sich deswegen der vollen dreidimensionalen Betrachtung.

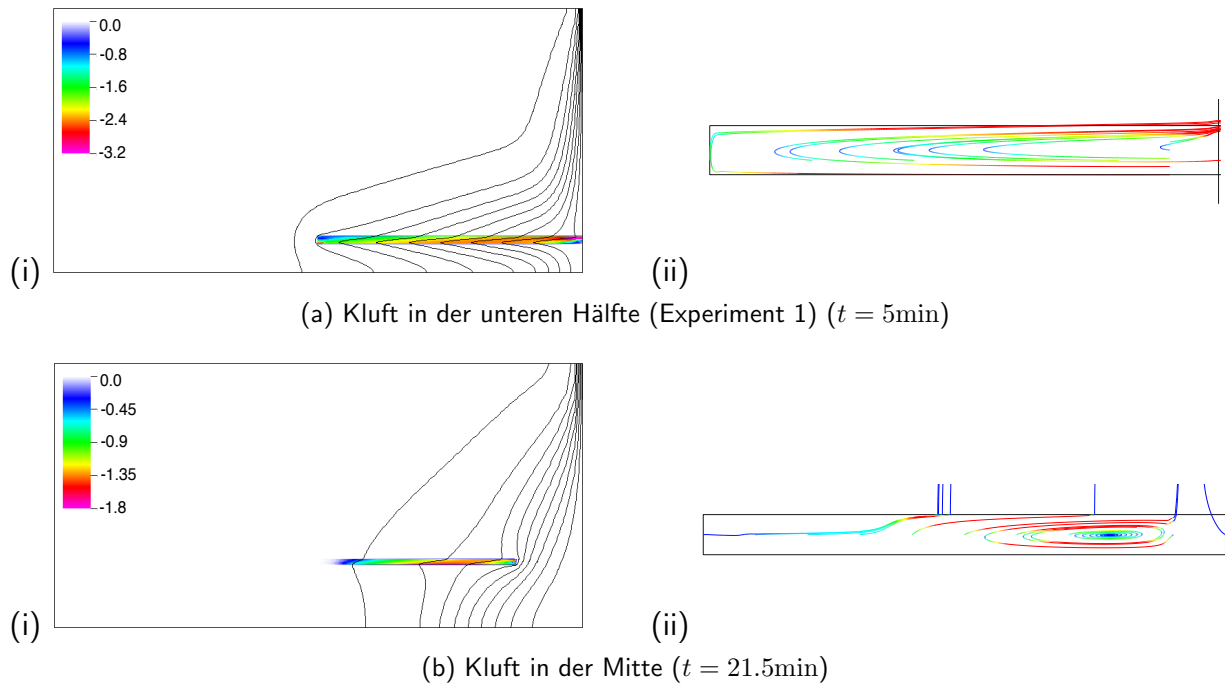


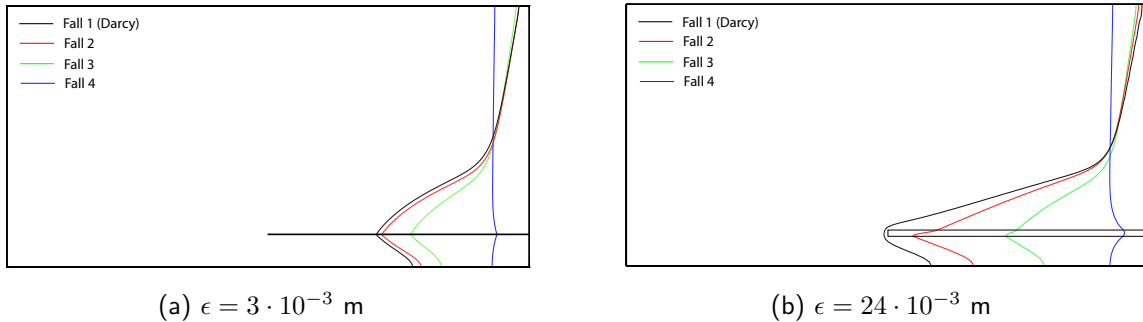
Abbildung 6.5: Geklüftetes Henry-Problem: (i) Wirbelstärke ζ_α (Farbprofil) und Konzentrationsisolinien ($\omega \in \{0.01, \dots, 1\}$) für Klüfte der Dicke $\epsilon = 0.024$ m. (ii) Stromlinien der Geschwindigkeit in der Kluft.

6.1.4 Einfluss der Forchheimer-Korrektur

Im letzten Abschnitt wurde festgestellt, dass sich in den Klüften bei ausreichender Kluftdicke unter bestimmten Voraussetzungen Wirbel bilden können. Dieses Erkenntnis legt nahe, die Gültigkeit des Darcy-Gesetzes, das eine laminare Strömung voraussetzt, anzuzweifeln. Aus diesem Grund wurde in Kapitel 2.2.2 eine Forchheimer-Korrektur für die Geschwindigkeit eingeführt (vgl. auch [Grillo et al., 2013]). Für den gesteinspezifischen Forchheimer-Koeffizienten A_α sind in der Literatur vielfältige Angaben zu finden. Hier werden, wie in Tabelle 6.2 dargestellt, vier Wertepaare gewählt und die Auswirkungen der Wahl dieser Parameter untersucht. Zwei dieser Wertepaare beruhen auf der Arbeit von [Thauvin und Mohanty, 1998], in welcher verschiedene Formeln für den Forchheimer-Koeffizienten in Abhängigkeit von der Permeabilität \mathbf{K}_α und der Porosität ϕ_α angegeben sind. Da diese beiden Wertepaare sehr weit voneinander abweichen, wird noch frei ein Wertepaar in der Mitte gewählt und außerdem das Darcy-Gesetz.

Betrachtet wird nun Experiment 1 mit Klüften in zwei unterschiedlichen Dicken ($\epsilon = 3 \cdot 10^{-3}$ m und $\epsilon = 24 \cdot 10^{-3}$ m). In Abb. 6.6 ist zu erkennen, dass für größere Werte des Forchheimer-Koeffizienten A_α insgesamt weniger Salzwasser in das Gebiet eindringt und der Einfluss der Kluft auf das Strömungsprofil geringer wird. Diese Beobachtung ist bei Betrachtung der zugrunde liegenden Gleichungen einfach zu erklären: Gleichung (2.33) stellt die mit der Forchheimer-Korrektur korrigierte Geschwindigkeit als ein Produkt aus der Darcy-Geschwindigkeit und einem u.a. von A_α abhängenden Faktor f dar. Für diesen Faktor gilt das Verhalten $f \rightarrow 0$ für $A_\alpha \rightarrow \infty$

Fall	A_f	A_m	Referenz
1	0	0	Darcy-Gesetz
2	36	51	([Thauvin und Mohanty, 1998], Gl. 4)
3	$1 \cdot 10^3$	$1 \cdot 10^3$	–
4	$2.5 \cdot 10^6$	$2.2 \cdot 10^5$	([Thauvin und Mohanty, 1998], Gl. 2)

Tabelle 6.2: Parameter-Paare für den Forchheimer Koeffizienten A_α [$\text{m}^{-1} \text{s}$].Abbildung 6.6: Isolinien des Massenbruchs bei $\omega_0 = 0.1$ der d -dimensionalen Simulation mit verschiedenen Forchheimer Koeffizienten A_α des geklüfteten Henry-Problems zum Zeitpunkt $t = 5 \text{ min}$.

(für eine Darcy-Geschwindigkeit $\mathbf{q}_D \neq \mathbf{0}$), was impliziert, dass die korrigierte Geschwindigkeit für größere Forchheimer-Koeffizienten A_α kleiner wird. Für den Fall 4 ($A_f = 2.5 \cdot 10^6 \text{ m}^{-1} \text{ s}$, $A_m = 2.2 \cdot 10^5 \text{ m}^{-1} \text{ s}$) ist dies sogar so extrem, dass der Einfluss der Kluft komplett gegensätzlich verläuft: Das Salzwasser kann durch die Kluft weniger schnell in das Gebiet eindringen als im umgebenden Medium. Vermutlich ist die Wahl dieses Parameter-Paares jedoch nicht so geeignet, da das simulierte Ergebnis für diesen Fall fast keinen Zusammenhang mit dem ursprünglichen Strömungsbild des Henry-Problems zeigt.

Wenn nun der Einfluss der Forchheimer-Korrektur für verschiedene Kluftdicken ϵ verglichen wird (vgl. Abb. 6.6a und 6.6b), kann für die dickere Kluft mit $\epsilon = 24 \cdot 10^{-3} \text{ m}$ beobachtet werden, dass für größere Forchheimer-Koeffizienten A_α das Konzentrationsprofil innerhalb der Kluft homogener entlang der Kluftbreite verteilt wird.

Bei Benutzung der Forchheimer Korrektur für die Geschwindigkeit, ergibt sich auch ein anderer Wert für die Wirbelstärke

$$\zeta_\alpha = \nabla \times \mathbf{v}_\alpha = \nabla f(A_\alpha, q_{\alpha D}) \times \mathbf{v}_{\alpha D} + f(A_\alpha, q_{\alpha D}) \zeta_{\alpha D} \quad (6.5)$$

mit $\zeta_{\alpha D} := \nabla \times \mathbf{v}_{\alpha D}$ der Wirbelstärke im Fall der Darcy-Geschwindigkeit aus Gleichung (6.3). Es kann folglich also vorkommen, dass, obwohl das Darcy-Gesetz eine Geschwindigkeit beschreibt, bei der $\zeta_{\alpha D} = \mathbf{0}$ ist, durch die Forchheimer Korrektur eine Wirbelstärke $\zeta_\alpha \neq \mathbf{0}$ vorhanden ist.

In Abb. 6.7 ist das Profil der Wirbelstärke ζ_f in der Kluft mit $\epsilon = 24 \cdot 10^{-3} \text{ m}$ für die verschiedenen Forchheimer-Parameter aus Tabelle 6.2 dargestellt. Zu erkennen ist zunächst, dass die

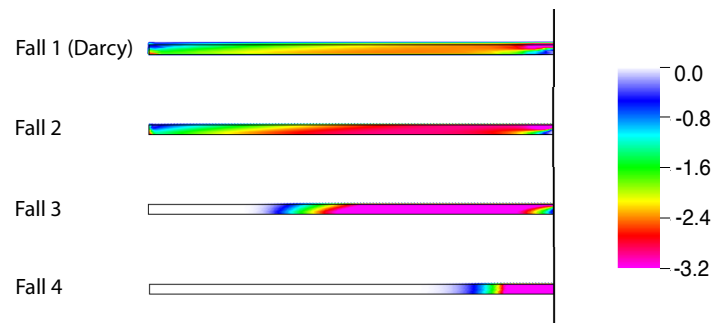


Abbildung 6.7: Wirbelstärke (Farbprofil) in einer Kluft mit $\epsilon = 24 \cdot 10^{-3}$ m der d -dimensionalen Simulation mit verschiedenen Forchheimer Koeffizienten A_α des geklüfteten Henry-Problems zum Zeitpunkt $t = 5$ min.

Wirbelstärke sich mit zunehmendem Forchheimer-Koeffizienten auf den rechten Teil der Kluft konzentriert, was jedoch daran liegt, dass mit zunehmendem Forchheimer-Koeffizienten auch die Strömung langsamer geworden ist und das Salzwasser noch nicht so weit in die Kluft vorgedrungen ist (vgl. Abb. 6.6b). Allerdings ist auch zu erkennen, dass sich das Profil homogener entlang der Kluftbreite verhält. Weiterhin verändert sich der maximale Betrag der Wirbelstärke. So ist im Fall 1 (Darcy) der maximale Wert $|\zeta_f| = 15.4 \text{ ms}^{-1}$, im Fall 2 $|\zeta_f| = 38.5 \text{ ms}^{-1}$, im Fall 3 $|\zeta_f| = 5.2 \text{ ms}^{-1}$ und im Fall 4 $|\zeta_f| = 86.9 \text{ ms}^{-1}$. Bei Betrachtung des Geschwindigkeitsprofils bzw. der Stromlinien (nicht dargestellt), ist zu erkennen, dass es im Fall 3 zu diesem Zeitpunkt zu einer vollständigen Verwirbelung in der Kluft kommt.

6.2 Geklüftetes Henry-Problem in 3D

Für Testrechnungen in 3D wird das Henry-Problem um eine Dimension erweitert. Die Geometrie mit den Randbedingungen ist in Abb. 6.8 dargestellt. Dabei wurde das Problem in y -Richtung

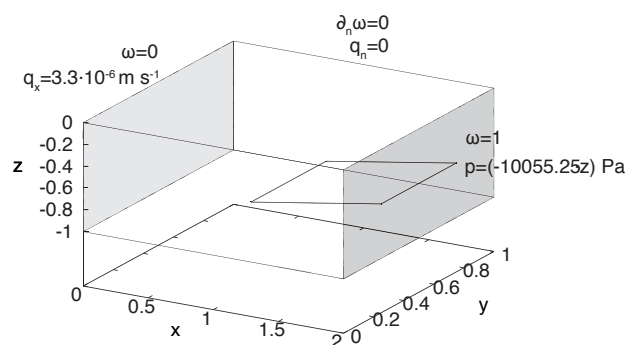


Abbildung 6.8: Geometrie und Randbedingungen für das geklüftete Henry-Problem in 3D.

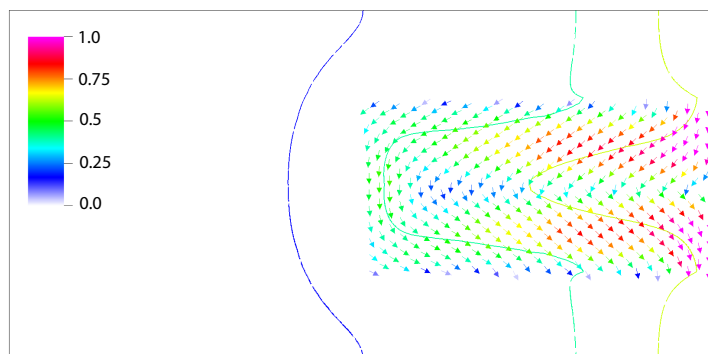
erweitert, wodurch die Landseite weiterhin bei $x = 0$ m und die Meerseite bei $x = 2$ m

liegen. An allen übrigen Rändern ($z = 0$ m und $z = -1$ m, sowie $y = 0$ m und $y = 1$ m) gelten Neumann-Null-Randbedingungen für beide Gleichungen. Die Parameter werden wie in 2D gewählt (Tabelle 6.1), mit der Ausnahme, dass für die Permeabilität in der Kluft der kleinere Wert von $K_f = 1.019368 \cdot 10^{-6} \text{ m}^2$ gewählt wird (siehe dazu auch Kapitel 7.1).

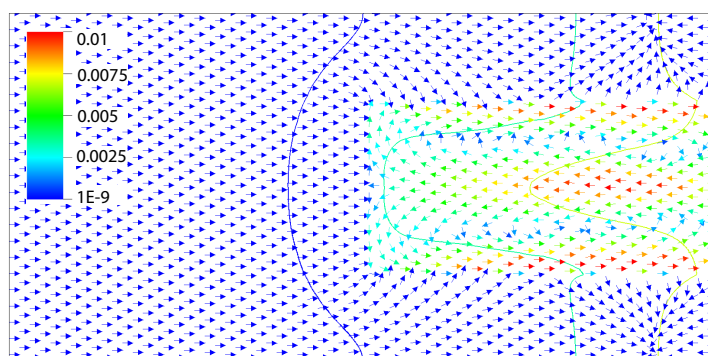
Für den Fall, dass keine Kluft im Gebiet vorliegt, ändert die Erweiterung um eine Dimension nichts an den grundlegenden Ergebnissen, die aus dem 2D Fall bekannt sind - das Ergebnis ist im Prinzip immer noch zwei-dimensional. Wenn jetzt jedoch eine Kluft in das Gebiet eingefügt wird, wird auch das Ergebnis drei-dimensional. Plots der Konzentrationsisolines für zwei verschiedene Kluftdicken sind in Abb. 7.7 zu finden.

6.2.1 Wirbelbildung

Wie bereits in Abschnitt 6.1.3 festgestellt, können sich in der Kluft zum einen aufgrund der



(a) Schnitt durch Kluftebene: ζ_α



(b) Schnitt durch Kluftebene: \mathbf{q}_α

Abbildung 6.9: 3D geklüftetes Henry-Problem ($\epsilon = 0.024$ m): Isolinien des Massenbruchs (vgl. Abb. 7.7b) und Vektordarstellung der Wirbelstärke ζ_α bzw. der Geschwindigkeit \mathbf{q}_α zum Zeitpunkt $t = 25$ min, wobei die Farbe des Vektors dessen Betrag angibt.

großen Permeabilität K_f und zum anderen aufgrund der Sprünge in der Permeabilität von Kluft

K_f und Medium K_m und den damit verbundenen Unterschieden in der Geschwindigkeit Wirbel bilden.

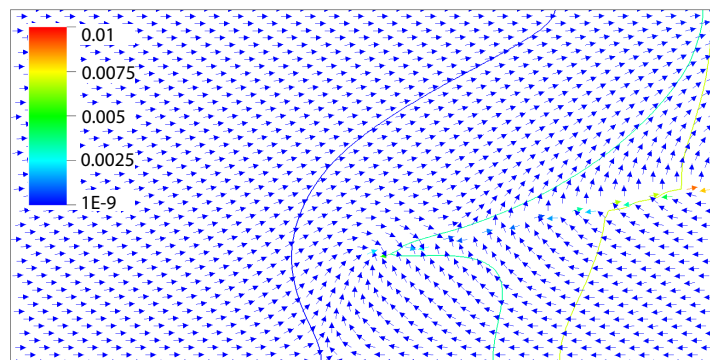
Gleichung (6.3) mit $\mathbf{g} = (0, 0, g_z)^T$ liefert uns

$$\zeta_\alpha = \frac{K_\alpha}{\mu} \frac{\partial \varrho_\alpha}{\partial \omega_\alpha} g_z \left(\frac{\partial \omega_\alpha}{\partial y} \mathbf{e}_1 - \frac{\partial \omega_\alpha}{\partial x} \mathbf{e}_2 \right) \quad (6.6)$$

Betrachtet wird zunächst das Testproblem mit der dicken Kluft mit $\epsilon = 0.024$ m. Die Wirbelstärke ζ_α und die Geschwindigkeit \mathbf{q}_α sind in Abbildungen 6.9 und 6.10 dargestellt. Dabei



(a) Schnitt quer zur Kluft ($y = 0.375$): ζ_α



(b) Schnitt quer zur Kluft ($y = 0.375$): \mathbf{q}_α

Abbildung 6.10: 3D geklüftetes Henry-Problem ($\epsilon = 0.024$ m): Isolinien des Massenbruchs (vgl. Abb. 7.7b) und Vektordarstellung der Wirbelstärke ζ_α bzw. der Geschwindigkeit \mathbf{q}_α zum Zeitpunkt $t = 25$ min, wobei die Farbe des Vektors dessen Betrag angibt.

fällt bei Betrachtung der Geschwindigkeit auf, dass zum einen eine Drehung der Geschwindigkeit entlang der Kluftbreite stattfindet (vgl. Abb. 6.10b). Wie bereits im zweidimensionalen Fall beobachtet, ist hier die Geschwindigkeit in der unteren Hälfte der Kluft der Geschwindigkeit in der oberen Hälfte entgegen gerichtet. Zum anderen bilden sich zusätzliche Verwirbelungen in der Kluftebene (vgl. Abb. 6.9b). So ist die Geschwindigkeit in der Mitte der Kluft den Ge-

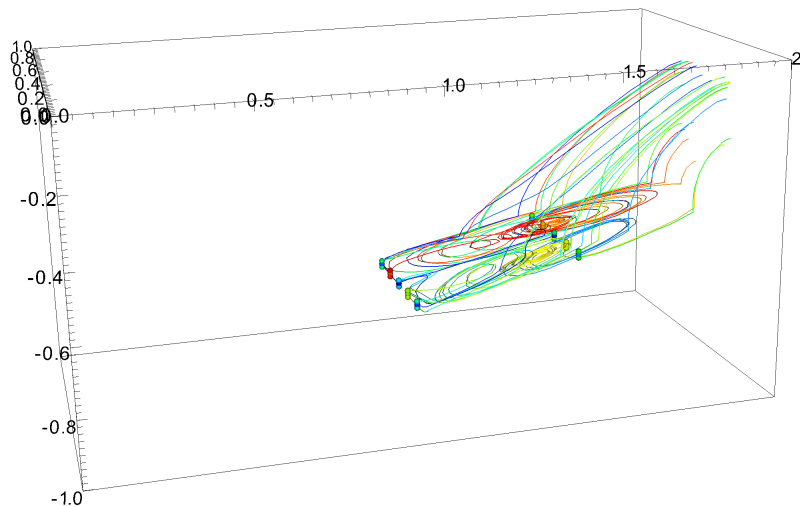


Abbildung 6.11: 3D geklüftetes Henry-Problem ($\epsilon = 0.024$ m): Stromlinien der Geschwindigkeit \mathbf{q}_α mit Startpunkten innerhalb der Kluft zum Zeitpunkt $t = 25$ min.

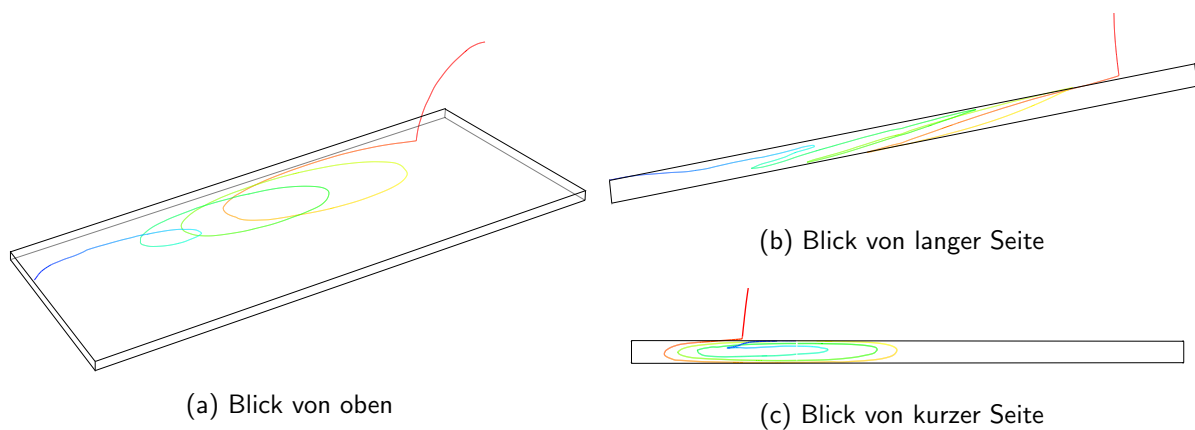
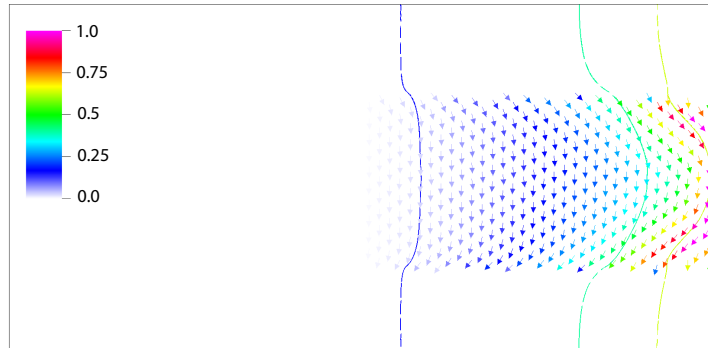


Abbildung 6.12: 3D geklüftetes Henry-Problem ($\epsilon = 0.024$ m): Stromlinie der Geschwindigkeit \mathbf{q}_α mit Startpunkt $\mathbf{x} = (1, 0.6, -0.69)$ m zum Zeitpunkt $t = 25$ min aus verschiedenen Perspektiven: (a) wie in Abb. 6.11, (b) und (c) durch die Kluftebene. Der Farbverlauf gibt die zeitliche Entwicklung an.

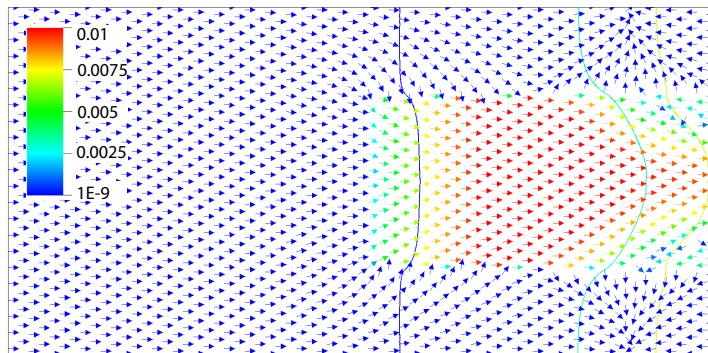
schwindigkeiten an den Seiten entgegen gerichtet. Dadurch kommt es innerhalb der Kluft zu einer Strömung, die durch viele Zirkulationen mit schraubenförmigen Verläufen charakterisiert wird, wie in Abbildungen 6.11 und 6.12 zu erkennen ist. Die Vektoren der Wirbelstärke ζ_f liegen in der Kluftebene und sind dort entlang der Isolinien des Massenbruchs bzw. der Konzentration ausgerichtet.

Bei Betrachtung der Geschwindigkeit für das Testproblem mit der dünnen Kluft ($\epsilon = 0.003$ m) können ebenfalls Drehungen der Geschwindigkeit in der Kluftebene beobachtet werden (vgl.

Abb. 6.13), welche sich nahe dem rechten Rand befinden.



(a) Schnitt durch Kluftebene: ζ_α



(b) Schnitt durch Kluftebene: \mathbf{q}_α

Abbildung 6.13: 3D geklüftetes Henry-Problem: Isolinien des Massenbruchs (rot: $\omega = 1$, blau: $\omega = 0.01$) der d -dimensionalen Simulation einer Kluft mit $\epsilon = 0.003$ m (vgl. auch Abb. 7.7b) und Vektordarstellung der Wirbelstärke ζ_α bzw. der Geschwindigkeit \mathbf{q}_α zum Zeitpunkt $t = 25$ min, wobei die Farbe des Vektors dessen Betrag angibt.

6.3 Geklüftetes Elder-Problem

Neben dem Henry-Problem wird auch das Elder-Problem häufig als Benchmark-Beispiel verwendet (vgl. z.B. [Oldenburg und Pruess, 1995], [Kolditz et al., 1998], [Ackerer et al., 1999]). Dies wird vor allem auch deswegen gemacht, weil u.a. im Henry-Problem ein eher unrealistisch hoher Wert für die Diffusion angenommen wird, wodurch die Lösung glatter und unproblematischer wird und deshalb das konvektions-dominierte Elder-Problem eine gute Ergänzung dazu bildet (vgl. [Diersch und Kolditz, 2005]).

Das Elder-Problem (vgl. [Elder, 1967a], [Elder, 1967b]) hat als Geometrie ein Rechteck mit den Maßen 600×150 m², wie in Abb. 6.14 dargestellt. Aus der Abbildung können auch die

Randbedingungen abgelesen werden. Dabei ist ein Teil des oberen Randes in Kontakt mit einem Salz-Reservoir mit Salzkonzentration $c_\alpha = 1200 \text{ kg} \cdot \text{m}^{-3}$ ($\omega_\alpha = 1$). Außerdem wird das Gebiet einem Temperatur-Gradienten ausgesetzt: am gesamten oberen Rand herrscht eine Temperatur von $\Theta_m = 293 \text{ K}$ und am unteren Rand eine höhere Temperatur von $\Theta_m = 303 \text{ K}$. Alle übrigen Ränder sind adiabatisch und undurchlässig, was durch Neumann-Null Randbedingungen für alle Gleichungen beschrieben wird. Zusätzlich wird der Druck an den beiden oberen Eckpunkten festgesetzt ($p_m = 1$).

Um das Problem für geklüftete Medien benutzen zu können, wird wieder eine oder mehrere

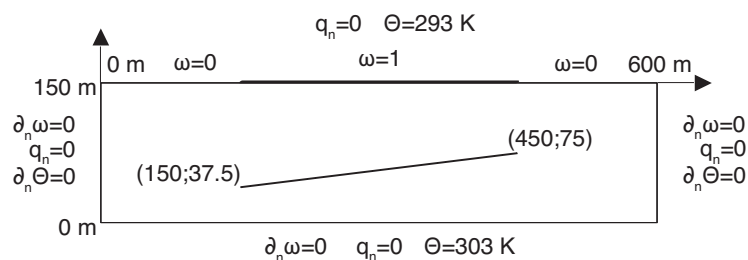


Abbildung 6.14: Geometrie und Randbedingungen für das Elder-Problem. Beispielhaft wurde eine Kluft in das Gebiet gelegt (entspricht Experiment 1).

Klüfte in das Gebiet eingefügt. Für die Parameter, aufgelistet in Tabelle 6.3, werden im Medium die Standard-Parameter des Elder-Problems und in der Kluft daran angepasste Werte, die vor allem eine hohe Permeabilität aufweisen, gewählt.

Für das Elder-Problem sind zwei verschiedene Versionen verbreitet, zum einen das klassische Elder-Problem, das ein thermohalines Problem darstellt, und zum anderen eine von [Voss und Souza, 1987] (und anderen) umformulierte Version als Benchmark-Problem für haline Strömung. In diesem abgeänderten Problem wurde die Temperatur konstant gesetzt, so dass Dichteveränderungen nur noch durch das schwere Salzwasser initiiert werden. Die Randbedingungen entsprechen denen aus Abb. 6.14 mit der einzigen Abänderung, dass die Temperatur Θ im gesamten Gebiet Ω konstant ist. In diesem Abschnitt, in dem es nur um das grundsätzliche Verhalten geht, wird das thermohaline Problem untersucht. Im folgenden Kapitel 7.1, in dem Vergleiche zwischen d - und $(d - 1)$ -dimensionalem Modell gemacht werden, wird jedoch das für die haline Strömung abgeänderte Problem betrachtet, da uns momentan nur dafür ein $(d - 1)$ -dimensionales Modell zur Verfügung steht.

Das ursprüngliche thermohaline Elder-Problem wird dadurch charakterisiert, dass das Salzwasser bedingt durch die Gravitation in das Gebiet einströmt. Die Gravitationskräfte lassen dabei einen Salztropfen nach unten sinken, der Flüssigkeit von oben nachzieht, wodurch an dieser Stelle mehr Salz abgelaugt wird und sich ein Salzfinger bildet, der durch die Gravitation sein eigenes Wachstum verstärkt. Im Verlaufe des Fingerwachstums breitet sich auch die zu jedem Salzfinger gehörende Strömungswalze in die transversale Richtung aus und kleinere Finger werden von den Walzen größerer Finger in diese hineingezogen (vgl. [Fein, 1999b]). Solange das Problem symmetrisch gestellt ist und keine Kluft im Gebiet liegt, ist das Konzentrationsprofil

Symbol	Koeffizient	Wert	Einheit
D_m	Diffusionskoeffizient im Medium	$3.565 \cdot 10^{-6}$	$[\text{m}^2\text{s}^{-1}]$
D_f	Diffusionskoeffizient in der Kluft	$10.695 \cdot 10^{-6}$	$[\text{m}^2\text{s}^{-1}]$
\mathbf{g}	Gravitation	$(0, -9.81)$	$[\text{m s}^{-2}]$
K_m	Permeabilität im Medium	$4.845 \cdot 10^{-13}$	$[\text{m}^2]$
K_f	Permeabilität in der Kluft	$4.845 \cdot 10^{-10}$	$[\text{m}^2]$
ϕ_m	Porosität im Medium	0.1	[1]
ϕ_f	Porosität in der Kluft	0.3	[1]
μ	Viskosität	10^{-3}	$[\text{kg m}^{-1}\text{s}^{-1}]$
ρ^{pW}	reine Dichte des Wassers	$1 \cdot 10^3$	$[\text{kg m}^{-3}]$
ρ^{pB}	reine Dichte der Salzlösung	$1.2 \cdot 10^3$	$[\text{kg m}^{-3}]$
$a_\alpha^t, a_\alpha^\ell$	Dispersionslängen	0	[m]
Λ_m	Wärmeleitfähigkeit im Medium	1.8	$[\text{W m}^{-1}\text{K}^{-1}]$
Λ_f	Wärmeleitfähigkeit in der Kluft	1.6	$[\text{W m}^{-1}\text{K}^{-1}]$
C_ℓ	Wärmekapazität des Fluids	4186	$[\text{J kg}^{-1}\text{K}^{-1}]$
C_{ms}	Wärmekapazität des Feststoffs im Medium	900	$[\text{J kg}^{-1}\text{K}^{-1}]$
C_{fs}	Wärmekapazität des Feststoffs in der Kluft	840	$[\text{J kg}^{-1}\text{K}^{-1}]$
ρ_{ms}	Massendichte des Feststoffs im Medium	2280	$[\text{kg m}^{-3}]$
ρ_{fs}	Massendichte des Feststoffs in der Kluft	2350	$[\text{kg m}^{-3}]$
A_α	Forchheimer-Koeffizient	0	$[\text{m}^{-1} \text{s}]$

Tabelle 6.3: Parameter für die Simulation des thermohalinen Elder-Problems.

ebenfalls symmetrisch. Jedoch kann auch über eine lange Zeitskala eine Aufhebung der Symmetrie beobachtet werden, wenn die thermische Konvektion sehr groß wird (vgl. [Diersch und Kolditz, 2005]).

Wenn nun eine Kluft in das Gebiet eingefügt wird, werden Konzentrations-, Temperatur- und Geschwindigkeitsprofil verändert (vgl. Abb. 6.15). Dadurch dass die Permeabilität in der Kluft um mehrere Größenordnungen größer ist als die im umgebenden Medium, ist die Konvektion dort deutlich größer und damit bildet die Kluft die bevorzugte Fließregion innerhalb des Gebiets. Sowohl die Isolinien der Konzentration, als auch die der Temperatur werden durch den Sprung in der Permeabilität an der Kluft abgelenkt. Da der Salztransport in erster Linie durch die Konvektion angetrieben wird, kann man beobachten, dass die Salzverteilung dem Geschwindigkeitsfeld folgt. So kann es vor allem auch passieren, dass das Salzwasser nicht nur, der Gravitation folgend, nach unten sondern auch nach oben fließt. Dies ist dann der Fall, wenn das Salzwasser auf eine nach oben gerichtete Kluft trifft, wie es in Abb. 6.15b am linken Ende der Kluft der Fall ist. Dadurch dass in der Kluft die Geschwindigkeit in verschiedene Richtungen zeigt, wie in Abb. 6.15b auf der linken Hälfte nach rechts und auf der rechten Hälfte nach links, kommt es zu "Oszillationen" des Salzwassers und die Knicke der Konzentrations-Isolinien werden umgedreht.

Um den Wärmetransport zu charakterisieren, wird der Retardationsfaktor R_α eingeführt (vgl. [Oldenburg und Pruess, 1998]). Während das Salzwasser mit der Porengeschwindigkeit $|\mathbf{v}_\alpha| = |\mathbf{q}_\alpha|/\phi_\alpha$ transportiert wird, wird die Wärme mit der niedrigeren Geschwindigkeit $|\mathbf{q}_\alpha|/R_\alpha$ mit $R_\alpha > 1$ und

$$R_\alpha = \frac{\phi_\alpha \varrho_\alpha C_{al} + (1 - \phi_\alpha) \varrho_{\alpha s} C_{\alpha s}}{\phi_\alpha \varrho_\alpha C_{al}} \quad (6.7)$$

transportiert. Dabei beschreibt der Retardationsfaktor, dass die feste Phase zwar in der Lage ist thermische Energie zu speichern aber nicht Salzwasser (vgl. [Grillo et al., 2011], [Grillo et al., 2010a]). Nun müssen in dem geklüfteten Beispiel zwei unterschiedliche Retardationsfaktoren berücksichtigt werden. Die gewählten Parameter (vgl. Tabelle 6.3) implizieren $R_f < R_m$, was bedeutet, dass die Wärme in der Kluft mit einem Bruchteil $1/R_f$ der Geschwindigkeit transportiert wird, wobei jedoch auch die Geschwindigkeit in der Kluft größer ist.

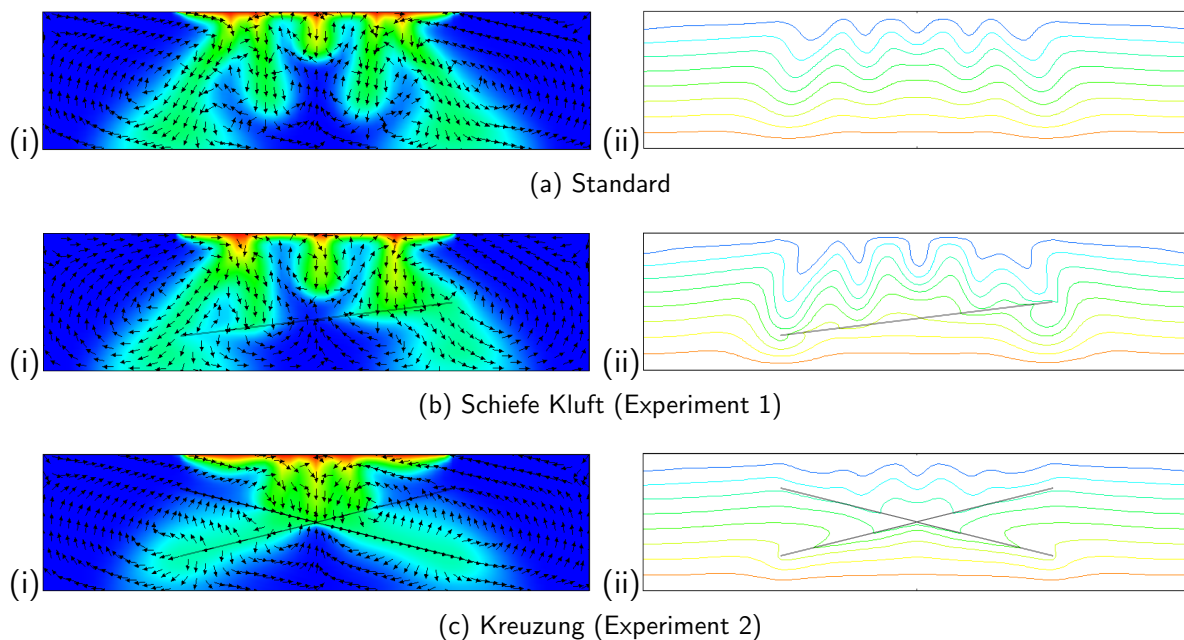


Abbildung 6.15: Elder-Problem mit Klüften der Dicke $\epsilon = 1$ m zum Zeitpunkt $t = 4.9$ a [Grillo et al., 2012]: (i) Farbprofil der Konzentrationsverteilung (Rot: $\omega = 1$, Blau: $\omega = 0$) und Richtungen des Geschwindigkeitsfelds (Betrag normiert). (ii) Isolinien der Temperaturverteilung (Rot: $\Theta = 303$ K, Blau: $\Theta = 293$ K).

Nun werden zwei Experimente mit unterschiedlichen Kluft-Konstellationen betrachtet um den Einfluss der Geometrie der Kluft zu untersuchen:

1. *Schiefe Kluft* ($\epsilon = 1$ m) mit Endpunkten $(x, z) = (150 \text{ m}, 37.5 \text{ m})$ und $(450 \text{ m}, 75 \text{ m})$ (vgl. Abb. 6.15 (c)): Dadurch dass die Geometrie mit der Kluft nicht mehr symmetrisch ist, ist auch das Ergebnis nicht mehr symmetrisch. Die Ausbreitung des Salzwassers erfolgt etwas schneller als im Fall ohne Kluft. Ebenso erfolgt der Wärmetransport schneller, was man an den längeren Fingern erkennt.
2. *Kreuzung zweier Klüfte* ($\epsilon = 1$ m, vgl. Abb. 6.15 (d)): Die eine Kluft hat die Endpunkte $(x, z) = (150 \text{ m}, 37.5 \text{ m})$ und $(450 \text{ m}, 112.5 \text{ m})$, die andere Kluft hat die Endpunkte $(x, z) = (150 \text{ m}, 112.5 \text{ m})$ und $(450 \text{ m}, 37.5 \text{ m})$. Beim Konzentrationsprofil werden die

Finger in die Mitte verschoben. Die äußeren Finger bleiben flach und entwickeln sich nicht weiter. Die Klüfte und der Bereich um sie herum füllt sich mit Salzwasser, der Transport weiter nach unten wird dadurch gestoppt. Die Finger der Temperaturverteilung sind weniger ausgeprägt als im Fall ohne Kluft, aber die Wärme innerhalb der Kluft wird schnell transportiert.

7 Gültigkeit des $(d - 1)$ -dimensionalen Modells

In diesem Abschnitt soll festgestellt werden, in welchen Fällen es sinnvoll und notwendig ist, die Kluft voll aufzulösen und in welchen Fällen Rechenzeit eingespart werden kann, dadurch dass eine $(d - 1)$ -dimensionale Approximation der Kluft verwendet wird. Da die $(d - 1)$ -dimensionale Formulierung bisher nur für die haline Strömung aufgestellt wurde, wird in diesem Kapitel auch nur diese betrachtet und die Temperatur als konstant angenommen.

Zunächst werden in Abschnitt 7.1 Ergebnisse der Simulationen unter Benutzung der $(d - 1)$ -dimensionalen Formulierung und der d -dimensionalen Darstellung für die in Abschnitt 6 eingeführten Test-Probleme verglichen. Dann in einem weiteren Schritt wird in Abschnitt 7.2 eine Bedingung für die Gültigkeit des $(d - 1)$ -dimensionalen Modells aufgestellt und in Abschnitt 7.2.3 anhand von vielfältigen Testrechnungen validiert.

7.1 Vergleich zwischen d - und $(d - 1)$ -dimensionalem Modell

In diesem Abschnitt sollen Ergebnisse aus den d - und $(d - 1)$ -dimensionalen Simulationen miteinander verglichen werden. Dazu werden die in Abschnitt 6 eingeführten Benchmark-Probleme für verschiedene Kluftkonstellationen mit beiden Simulationen gerechnet und es werden zunächst die Ergebnisse an Hand der Ergebnis-Plots visuell verglichen. In manchen Fällen ist bereits dabei eine Abweichung offensichtlich erkennbar. Um dann einen quantitativen Vergleich zu erhalten, werden die Werte für Konzentration und Druck an einem bestimmten, jedoch frei wählbaren Punkt in der Kluft verglichen (vgl. auch [Grillo et al., 2010b], [Grillo et al., 2012], [Stichel et al., 2012] und [Reiter et al., 2013b]).

7.1.1 Geklüftetes Henry-Problem

Zunächst wird das geklüftete Henry-Problem aus Experiment 1 (siehe Abschnitt 6.1.1) betrachtet. Dabei wurden die Simulationen mit einem Zeitschritt von $\tau^k = 15$ s und ungefähr $6 \cdot 10^4$ Freiheitsgraden (behandelt als Gitterlevel 6) ausgeführt, wobei im d -dimensionalen Fall die Kluftdicke durch 8 Schichten von Elementen aufgelöst wurde im Vergleich zu 2 Schichten im $(d - 1)$ -dimensionalen Fall.

In Abschnitt 6.1.2 war klar geworden, dass die Dicke einen entscheidenden Einfluss auf das Ergebnis hat. Da diese im $(d - 1)$ -dimensionalen Modell zwar als Parameter eingeht, jedoch für die Ergebnisse nur eine untergeordnete Rolle spielt, werden hier zwei unterschiedliche Dicken betrachtet, eine eher dünne ($\epsilon = 0.003$ m) und eine eher dicke ($\epsilon = 0.024$ m) Kluft. In Abb. 7.1 ist für Klüfte mit diesen Dicken sowohl das Ergebnis der d -dimensionalen als auch das der $(d - 1)$ -dimensionalen Simulation an einem festen Zeitpunkt gezeigt. Im Vergleich der Ergebnisse für die dünne Kluft (Abb. 7.1a und 7.1d) lässt sich so leicht kein Unterschied feststellen. Dagegen liefern die verschiedenen Simulationen für die dicke Kluft (Abb. 7.1b und 7.1e) komplett unterschiedliche Ergebnisse. So wird von der $(d - 1)$ -dimensionalen Rechnung (Abb. 7.1e) der sehr schnelle Einfluss von viel Salzwasser durch die Kluft, wie er in Abb. 7.1b zu erkennen ist, nicht wiedergegeben. Aufgrund der Niederdimensionalität wird natürlich auch vernachlässigt, dass das Ergebnis innerhalb der Kluft auch entlang der Kluftdicke variiert und es zu einer Dre-

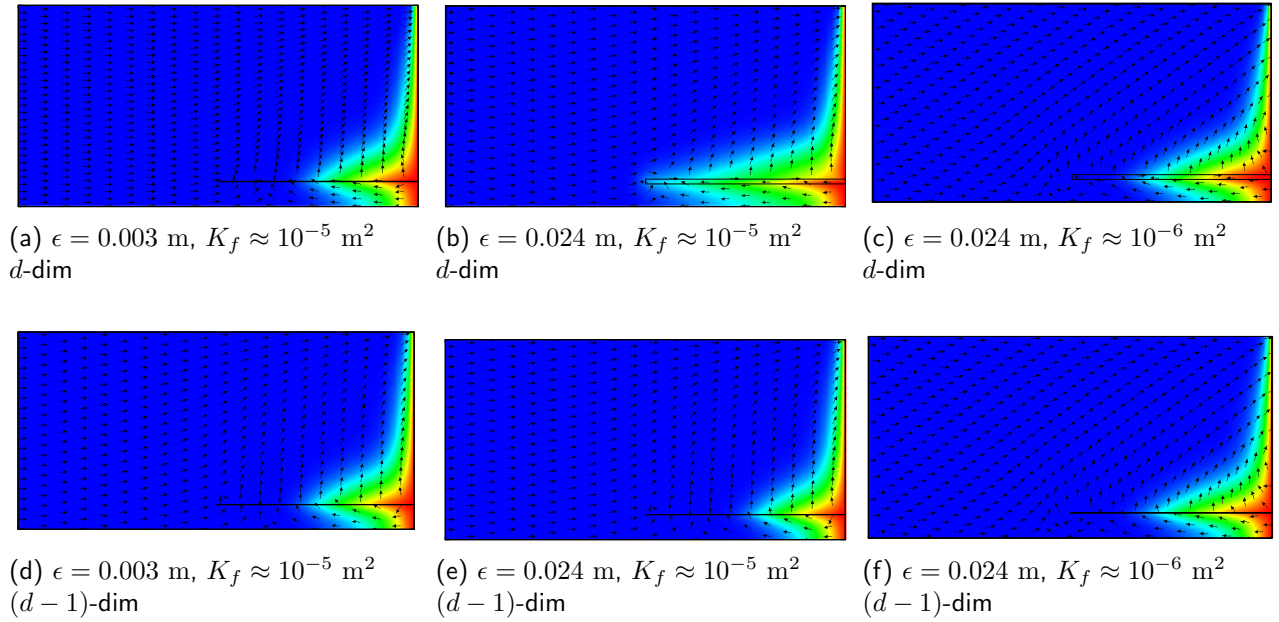


Abbildung 7.1: Geklüftetes Henry-Problem: Vergleich der d - und $(d - 1)$ -dimensionalen Simulationsergebnisse zum Zeitpunkt $t = 5$ min. Dargestellt ist die Konzentrationsverteilung (rot: $\omega = 1$, blau: $\omega = 0$) und das Geschwindigkeitsfeld.

hung der Geschwindigkeit kommt (vgl. Abschnitt 6.1.2).

Dass die Kluftdicke einen so entscheidenden, so leicht sichtbaren Einfluss hat, liegt auch an der Größe der Permeabilität K_f in der Kluft. Wenn für diesen Wert anstelle der in Tabelle 6.1 gewählten $K_f \approx 10^{-5}$ m² ein kleinerer Wert von $K_f \approx 10^{-6}$ m² gewählt wird, ist der Unterschied für die dickere Kluft nicht mehr so enorm und auf den ersten Blick nicht so genau zu erkennen (vgl. Abb. 7.1c und 7.1f). Für die folgenden Rechnungen in dieser Arbeit wird dieser Wert gewählt (auch für die Rechnung mit der dünnen Kluft), alle übrigen Parameter bleiben wie in Tabelle 6.1 aufgelistet.

Um nun einen genaueren, quantitativen Vergleich als den Vergleich von Plots der Simulationsergebnisse zu bekommen, wird für einen beliebigen, aber festen Punkt innerhalb der Kluft die Konzentration und der Druck über ein Zeitintervall verglichen. Dabei ist zu beachten, dass das Ergebnis der $(d - 1)$ -dimensionalen Rechnung einen gemittelten Wert für die Konzentration und den Druck in der Kluft liefert. Um nun aus der d -dimensionalen Rechnung Werte zu erhalten, die damit vergleichbar sind, wird an dem fest gewählten Punkt entlang der Kluftbreite gemittelt, was mit der in Abschnitt 5.2.2 eingeführten Methode `get_ave_val` ausgeführt wird. Im folgenden bezeichnen ω_α und p_α ($\alpha \in \{f, m\}$) die Lösung des d -dimensionalen Modells (Gleichungen (2.12)–(2.13)), während für die Lösung des $(d - 1)$ -dimensionalen Modells (Gleichungen (2.58)–(2.59) in \mathcal{F} mit (2.62)–(2.63) in \mathcal{M}) die Notation aus Kapitel 2.2.3 beibehalten wird: $\hat{\omega}_f$ und \hat{p}_f für die Lösung in der Kluft und $\hat{\omega}_m$ und \hat{p}_m für die Lösung im Medium. Hierbei

ist anzumerken, dass auf Grund der Definition in Kapitel 2.2.3 für einen genauen, konsistenten Vergleich der beiden Modelle der Massenbruch aus der $(d - 1)$ -dimensionalen Simulation $\hat{\omega}_f$ nicht mit dem gemittelten Massenbruch aus der d -dimensionalen Simulation $\langle \omega_f \rangle$ verglichen werden sollte, sondern mit dem Massenbruch, der aus der entlang der Kluftbreite gemittelten Konzentration berechnet wird. Deswegen wird, analog zur Herleitung des $(d - 1)$ -dimensionalen Modells, zunächst ω_f in c_f umgerechnet mittels

$$c(\omega) = \frac{\rho^{pW} \rho^{pB} \omega}{\rho^{pB} + (\rho^{pW} - \rho^{pB}) \omega}, \quad (7.1)$$

dann die Mittelung entlang der Kluftbreite ausgeführt, $\langle c(\omega_f) \rangle$, und schließlich das Ergebnis mit Gleichung (2.57) umgerechnet zu $\hat{\omega}_f^d := \hat{\omega}_f^d(\langle c(\omega_f) \rangle)$. Allerdings ist kaum ein Unterschied zwischen $\langle \omega_f \rangle$ und $\hat{\omega}_f^d$ festzustellen. Im folgenden wird nun $\hat{\omega}_f^d$ mit $\hat{\omega}_f$ verglichen.

Nun werden für die eben betrachteten Beispiele der Massenbruch $\hat{\omega}_f$ und der Druck p_f an

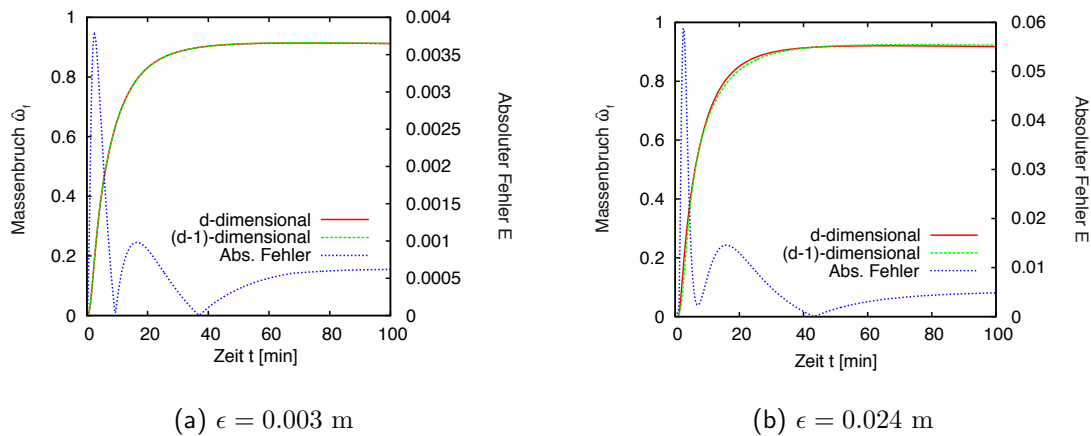


Abbildung 7.2: Henry-Problem. Vergleich des Massenbruchs $\hat{\omega}_f$ in der Kluft am Punkt $x = 1.5$ m errechnet mit den d - und $(d - 1)$ -dimensionalen Simulationen. Ebenfalls dargestellt ist die absolute Abweichung der beiden Ergebnisse voneinander $E(\hat{\omega}_f)$.

einem Punkt in der Kluft verglichen und es wird untersucht, wie sich die absoluten Fehler, $E(\hat{\omega}_f) := |\hat{\omega}_f^d - \hat{\omega}_f|$ und $E(p) := |\langle p_f \rangle - \bar{p}_f|$, zwischen den Ergebnissen der beiden Modelle verhalten. Der Vergleich für den Massenbruch ist in Abb. 7.2 dargestellt. Es ist zu erkennen, dass die Ergebnisse der $(d - 1)$ -dimensionalen Simulation sehr gut mit denen der d -dimensionalen übereinstimmen. Die absolute Abweichung ist dabei im ersten Zeitintervall am größten, was daran liegt, dass in diesem Zeitintervall das einströmende Salzwasser den Auswertungspunkt in der Kluft passiert und dort eine hohe Dichteänderung stattfindet. Dennoch liegt der Fehler unter $E(\hat{\omega}_f) < 3.8 \cdot 10^{-3}$. Für die geänderte Permeabilität $K_f \approx 10^{-6} \text{ m}^2$ erhält man auch im Fall der dicken Kluft (vgl. Abb. 7.2b) einen relativ kleinen Fehler, $E(\hat{\omega}_f) < 5.9 \cdot 10^{-2}$, auch wenn dieser in etwa eine Größenordnung größer ist als der für die dünne Kluft.

Der Vergleich für den Druck ist in Abb. 7.3 dargestellt und es ist zu erkennen, dass der gemit-

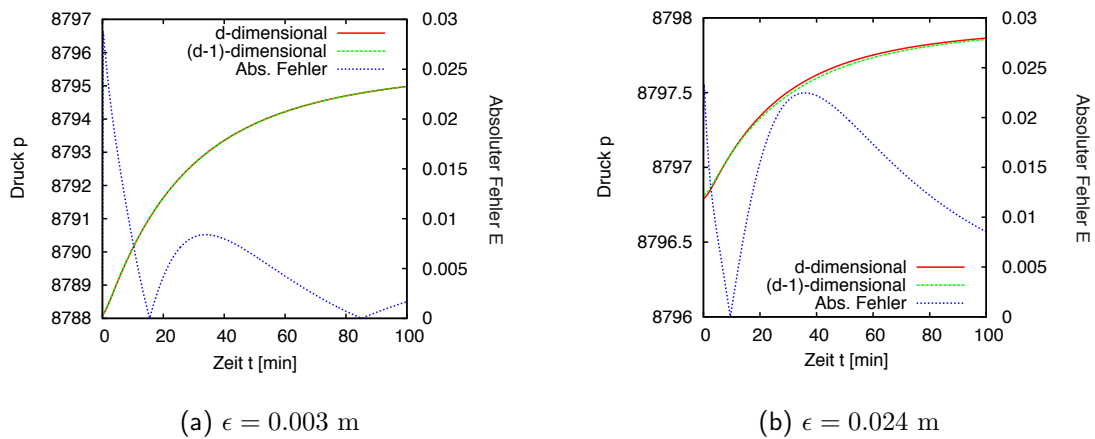


Abbildung 7.3: Henry-Problem. Vergleich der Drücke p in der Kluft am Punkt $x = 1.5$ m errechnet mit den d - und $(d - 1)$ -dimensionalen Simulationen. Ebenfalls dargestellt ist die absolute Abweichung der beiden Ergebnisse voneinander $E(p)$.

telte Druck sich sowohl für die dünne als auch für die dicke Kluft in der $(d - 1)$ -dimensionalen Rechnung kaum von dem in der d -dimensionalen Rechnung unterscheidet. Der Fehler ist in beiden Fällen $E(p) < 2.9 \cdot 10^{-2}$ Pa.

Um die Abhängigkeit der Abweichung zwischen den beiden Modellen von der Gitterfeinheit

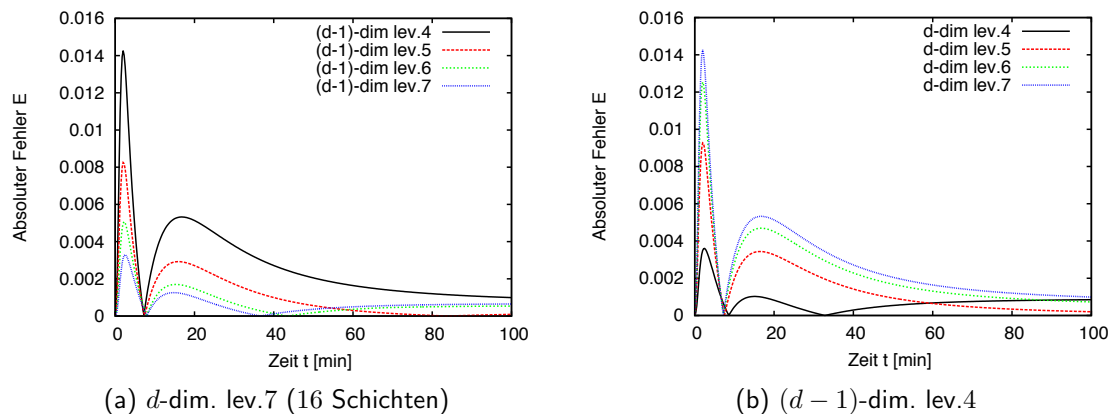


Abbildung 7.4: Henry-Problem. Absolute Abweichung $E(\hat{\omega}_f)$ des Massenbruchs $\hat{\omega}_f$ in der Kluft der Dicke $\epsilon = 0.003$ m am Punkt $x = 1.5$ m errechnet mit den d - und $(d - 1)$ -dimensionalen Simulationen auf verschiedenen Gitterleveln.

zu untersuchen, wird die Abweichung des Massenbruchs $E(\hat{\omega}_f)$ auf verschiedenen Gitterleveln betrachtet (vgl. Abb. 7.4). Dabei entsteht Gitterlevel i ($i \in \{5, 6, 7\}$) durch eine reguläre Verfeinerung von Gitterlevel $i - 1$. Die Kluftbreite im d -dimensionalen Fall ist dabei mit 2, 4, 8 oder

16 Schichten von Elementen aufgelöst. Zur übersichtlicheren Darstellung wurde zunächst für festes Gitterlevel in der d -dimensionalen Rechnung das Gitterlevel des $(d - 1)$ -dimensionalen Falls variiert (vgl. Abb. 7.4a), und dann für festes Gitterlevel in der $(d - 1)$ -dimensionalen Rechnung das des d -dimensionalen Falls (vgl. Abb. 7.4b). Dabei wurde als festes $(d - 1)$ -dimensionales Gitter aus rein illustrativen Gründen das relativ grobe Gitterlevel 4 ausgewählt, da dort die Unterschiede leichter zu erkennen sind.

Zunächst kann festgestellt werden, dass die absolute Abweichung $E(\hat{\omega}_f)$ zwischen d - und $(d - 1)$ -dimensionalem Ergebnis für den Massenbruch mit jedem feineren Gitterlevel bei gleichzeitiger Verfeinerung beider Modelle zunächst kleiner wird und gegen einen Wert konvergiert (nicht dargestellt). Bei Gitterlevel 6 hat sich der Fehler seinem Grenzwert bereits ausreichend genähert, weswegen dieses Gitterlevel 6 für die angestrebten Vergleiche ausgewählt wurde. Ebenfalls wurde in diesem Zusammenhang mit einer noch feiner aufgelösten Rechnung überprüft, dass das Seitenverhältnis von ca. 0.1 der Elemente in der d -dimensionalen Kluft keinen Einfluss auf das Ergebnis hat.

Bei Betrachtung von Abbildung 7.4 kann außerdem eine zunächst sehr interessante Beobachtung gemacht werden. So wird zwar, bei Verfeinerung des Gitters im $(d - 1)$ -dimensionalen Fall für festes d -dimensionales Gitter (vgl. Abb. 7.4a) der Fehler reduziert, was im Sinne der eben beschriebenen Gitterkonvergenz zu erwarten ist. Jedoch bei Verfeinerung des Gitters im d -dimensionalen Fall für festes $(d - 1)$ -dimensionales Gitter (vgl. Abb. 7.4b) ist eine Vergrößerung des Fehlers zu erkennen. Dies ist damit zu erklären, dass bei jeder Verfeinerung des d -dimensionalen Modells, die Kluft besser aufgelöst wird und ihre Breite mit mehr Schichten an Elementen dargestellt wird. Eine bessere Auflösung dessen, was in der Kluft passiert, kann jedoch das Ergebnis deutlicher vom approximierten Mittelwert abweichen lassen. Bei gleichzeitiger Verfeinerung beider Gitter ist jedoch diese Vergrößerung des Fehlers stets deutlich kleiner als die Verkleinerung, die durch das Verfeinern an sich erreicht wird.

Da das $(d - 1)$ -dimensionale Modell neben den gemittelten Werten in der Kluft auch noch Werte an den Interfaces zwischen Kluft und Medium liefert, die eine Approximation eines vertikalen Gradienten erlauben, sollen auch diese noch verglichen werden. Dazu werden die Sprünge zwischen oberem und unterem Interface des Massenbruchs $(\omega_m^{(2)} - \omega_m^{(1)})$ und des Drucks $(p_m^{(2)} - p_m^{(1)})$ verglichen. Auch hier wird wieder untersucht, wie sich die absoluten Fehler, $E(\omega_m^{(2)} - \omega_m^{(1)}) := |(\omega_m^{(2)} - \omega_m^{(1)}) - (\hat{\omega}_m^{(2)} - \hat{\omega}_m^{(1)})|$ und $E(p_m^{(2)} - p_m^{(1)}) := |(p_m^{(2)} - p_m^{(1)}) - (\hat{p}_m^{(2)} - \hat{p}_m^{(1)}) + \rho(\hat{\omega}_f)\mathbf{g} \cdot \mathbf{n}\epsilon|$, zwischen den Ergebnissen der beiden Modelle verhalten, wobei beim Sprung des Drucks mit $\rho(\hat{\omega}_f)\mathbf{g} \cdot \mathbf{n}\epsilon$ (mit \mathbf{n} der äußeren Normalen an die untere Seite der Kluft) berücksichtigt wird, dass im $(d - 1)$ -dimensionalen Modell der hydrostatische Druckabfall über die Kluft vernachlässigt wird.

Für die dicke Kluft (vgl. Abb. 7.5b) ist zu erkennen, dass die Sprünge des Massenbruchs, die sich aus den beiden Modellen ergeben, komplett unterschiedlich sind. Nicht nur, dass der Sprung im d -dimensionalen Fall vom Betrag her deutlich größer ist als der im $(d - 1)$ -dimensionalen Fall, er hat auch noch ein anderes Vorzeichen. Dies macht noch einmal deutlich, dass das $(d - 1)$ -dimensionale Modell auch für die verkleinerte Permeabilität mit steigender Kluftdicke seine Gültigkeit verliert. Beim Vergleich der Sprünge des Massenbruchs für die dünne Kluft

(vgl. Abb. 7.5a) werden jedoch sowohl die Größenordnung des Sprungs als auch das Vorzeichen durch das $(d - 1)$ -dimensionale Modell richtig wieder gegeben. Allerdings fällt auf, dass die Abweichung mit $(\omega_m^{(2)} - \omega_m^{(1)}) < 2.1 \cdot 10^{-4}$ einem maximalen relativen Fehler von ungefähr 12% entspricht, was durchaus ein sehr großer Fehler ist, der vor allem deswegen interessant ist, weil der Mittelwert sehr gut übereinstimmt. Es konnte jedoch festgestellt werden, dass dieser Fehler mit abnehmender Kluftdicke weiter sinkt auf z.B. 5% bei $\epsilon = 0.001$ m. Eine richtige Darstellung des Sprungs des Massenbruchs mit dem $(d - 1)$ -dimensionalen Modell ist also noch deutlicher von der Kluftdicke abhängig als die des Mittelwerts. Dabei ist anzumerken, dass der Sprung auch etwas über das Profil der Konzentration in der Kluft aussagt. Dieses scheint bereits für die hier betrachtete dünne Kluft nicht mehr einer in die Kluft wandernden Wand zu entsprechen (was durch das $(d - 1)$ -dimensionale Modell impliziert wird).

Der Vergleich des Drucksprungs über die Kluft liefert keine neuen Erkenntnisse. In Abb. 7.6 ist

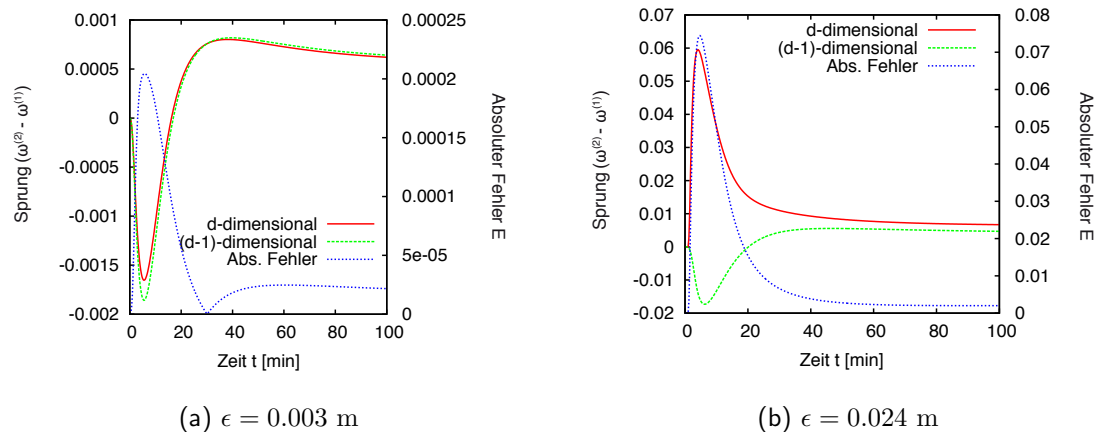


Abbildung 7.5: Henry-Problem. Vergleich der Sprünge des Massenbruchs $(\omega_m^{(2)} - \omega_m^{(1)})$ an den Kluft-Interfaces am Punkt $x = 1.5$ m errechnet mit den d - und $(d - 1)$ -dimensionalen Simulationen. Ebenfalls dargestellt ist die absolute Abweichung $E(\omega_m^{(2)} - \omega_m^{(1)})$ dazwischen.

zu erkennen, dass sowohl für die dünne als auch für die dicke Kluft die absolute Abweichung der Ergebnisse voneinander verschwindend gering ist, auch wenn der Fehler wieder bei der dicken Kluft deutlich größer als bei der dünnen Kluft ist. Dennoch wird der Drucksprung in beiden Fällen durch das $(d - 1)$ -dimensionale Modell gut wiedergegeben.

Natürlich spielen neben der Kluftdicke auch noch andere Faktoren eine wichtige Rolle, die die Gültigkeit des $(d - 1)$ -dimensionalen Modells beeinträchtigen können. Dazu zählen die Geometrie der Kluft (vgl. Abschnitt 6.1.1) und, wie in Abb. 7.1 zu erkennen war, auch die Permeabilität in der Kluft bzw. das Verhältnis der Permeabilitäten in Kluft und Medium. Die Gültigkeit des $(d - 1)$ -dimensionalen Modells unter Berücksichtigung sämtlicher dieser Faktoren soll in Abschnitt 7.2 genauer untersucht werden.

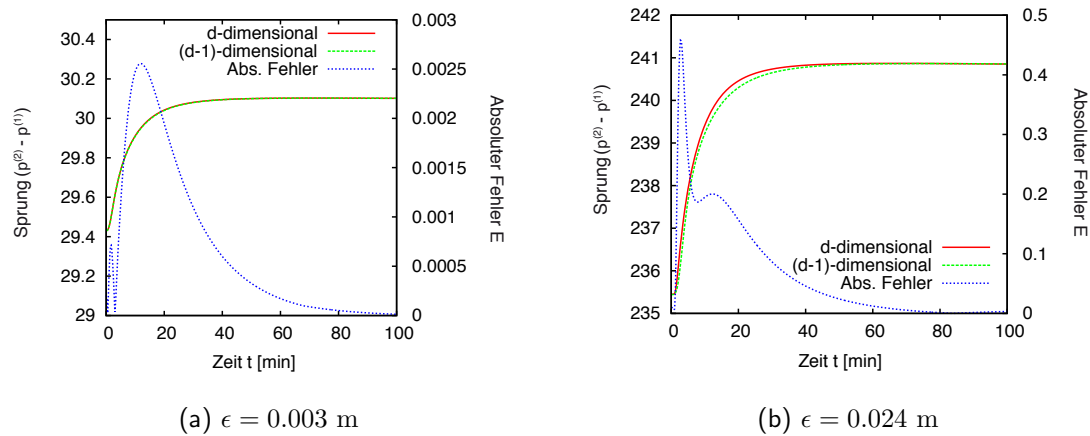


Abbildung 7.6: Henry-Problem. Vergleich der Sprünge des Drucks $(p_m^{(2)} - p_m^{(1)})$ an den Kluft-Interfaces am Punkt $x = 1.5$ m errechnet mit den d - und $(d - 1)$ -dimensionalen Simulationen. Ebenfalls dargestellt ist die absolute Abweichung $E(p_m^{(2)} - p_m^{(1)})$ dazwischen.

7.1.2 Geklüftetes Henry-Problem in 3D

Auch in 3D sollen Vergleiche durchgeführt werden, wozu das auf 3 Dimensionen erweiterte geklüftete Henry Problem (vgl. Kapitel 6.2) betrachtet wird. Auch hier werden die beiden verschiedenen Kluftdicken $\epsilon = 0.003$ m und $\epsilon = 0.024$ m getestet und für die Permeabilität in der Kluft wird $K_f \approx 10^{-6}$ m² gewählt (vgl. Abschnitt 7.1.1).

Beim Vergleich der Plots der Ergebnisse aus beiden Modellen (vgl. Abb. 7.7) ist zu erkennen, dass für die dünne Kluft auf den ersten Blick sehr gut übereinstimmende Ergebnisse erzielt werden, wohingegen für die dicke Kluft unterschiedliche Ergebnisse berechnet werden. In Abb. 7.8 ist zu sehen, dass für die dünne Kluft die Ergebnisse tatsächlich sehr gut übereinstimmen. Anzumerken ist hier, dass die absolute Abweichung der Sprünge des Massenbruchs $(\omega_m^{(2)} - \omega_m^{(1)})$ aus den d - und $(d - 1)$ -dimensionalen Simulationen hier sehr klein ist, $E(\omega_m^{(2)} - \omega_m^{(1)}) < 1.6 \cdot 10^{-5}$ ($< 1\%$). Im zwei-dimensionalen Henry-Problem war die absolute Abweichung deutlich größer gewesen (vgl. Abb. 7.5). Dies ist jedoch einfach damit zu erklären, dass die Lage der Kluft eine andere ist (vgl. Abschnitt 6.1.1): Während bei dem im zweidimensionalen untersuchten Beispiel viel Salzwasser durch die Kluft hereinströmt, was zu einer Dichteänderung in der Kluft führt, wird das Wasser im drei-dimensionalen Beispiel durch die Kluft aus dem Gebiet herausgedrückt. Dieses Verhalten ist jedoch ausschließlich auf die Lage der Kluft und nicht auf die Dimension zurückzuführen.

Für die dicke Kluft mit $\epsilon = 0.024$ m sind in Abb. 7.9 die Vergleiche des Massenbruchs und des Sprungs des Massenbruchs zwischen d - und $(d - 1)$ -dimensionalen Simulationsergebnissen dargestellt. Auch ohne die Darstellung des absoluten Fehlers E ist sofort zu erkennen, dass die Abweichung zwischen beiden Ergebnissen riesig ist. Insbesondere ist beim Sprung des Massenbruchs auch wie in 2D zu sehen, dass zu Beginn der Rechenzeit ein unterschiedliches Vorzeichen im Sprung auftritt. Dies ist ein massiver Fehler, der ein komplett unterschiedliches Ergebnis im-

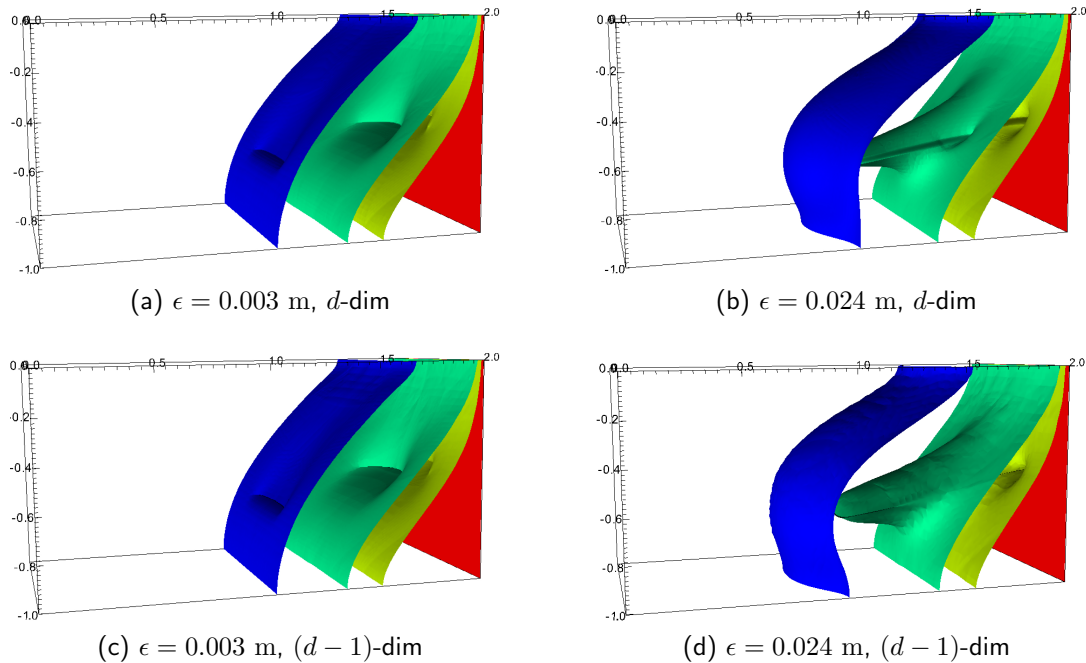


Abbildung 7.7: Geklüftetes Henry-Problem in 3D: Vergleich der d - und $(d - 1)$ -dimensionalen Simulationsergebnisse zum Zeitpunkt $t = 25$ min. Dargestellt sind Isoflächen der Konzentration (rot: $\omega = 1$, blau: $\omega = 0.01$).

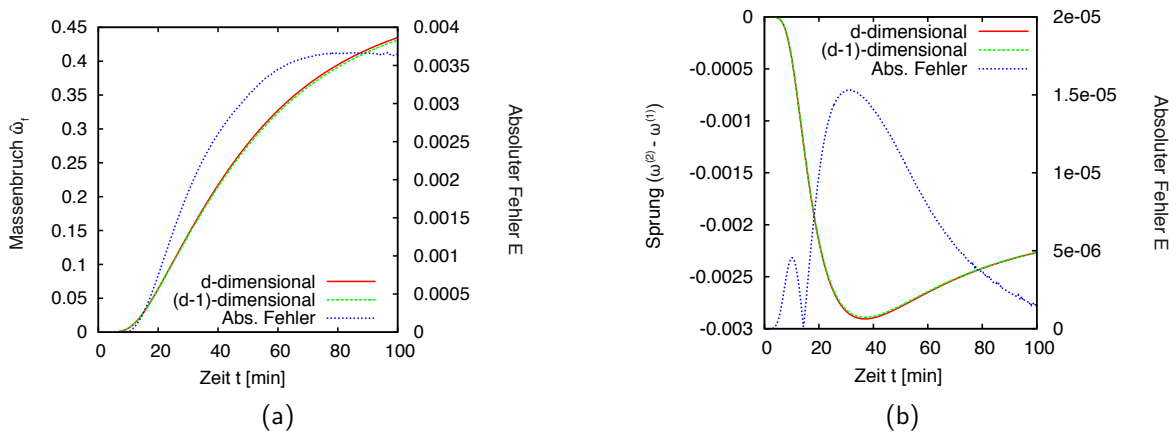


Abbildung 7.8: Henry-Problem 3D mit Kluft der Dicke $\epsilon = 0.003$ m. Vergleich (a) des Massenbruchs $\hat{\omega}_f$ in der Kluft und (b) der Sprünge $(\omega_m^{(2)} - \omega_m^{(1)})$ an der Kluft am Punkt $\mathbf{x} = (1.5, 0.5, -0.6)$ m errechnet mit den d - und $(d - 1)$ -dimensionalen Simulationen.

pliziert. Zu erklären ist dieser Fehler mit dem Auftreten der Wirbel (vgl. Kapitel 6.2.1) und die Vermutung liegt nahe, dass er deswegen bei der Betrachtung des dreidimensionalen Problems deutlich größer ist, da die Rotation in 3D einen stärkeren Effekt auf die Strömung bewirkt.

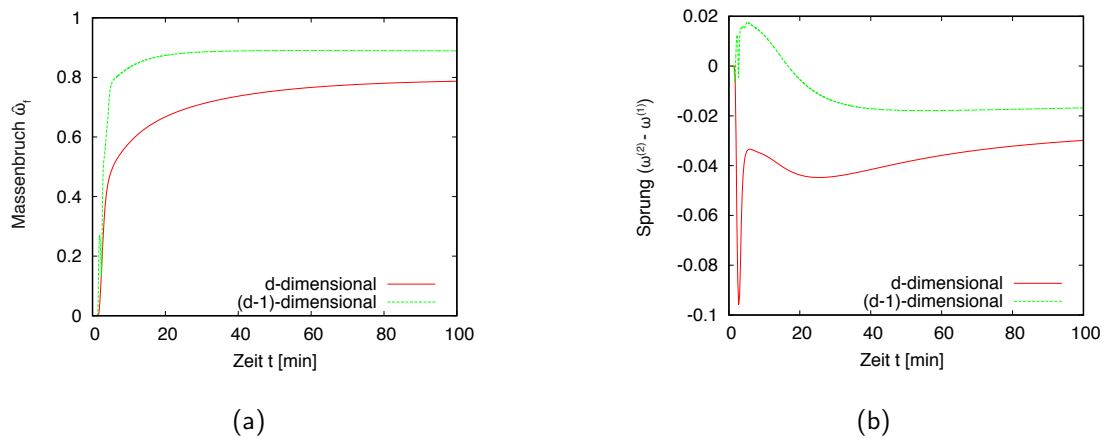


Abbildung 7.9: Henry-Problem 3D mit Kluft der Dicke $\epsilon = 0.024$ m. Vergleich (a) des Massenbruchs $\hat{\omega}_f$ in der Kluft und (b) der Sprünge $(\omega_m^{(2)} - \omega_m^{(1)})$ an der Kluft am Punkt $\mathbf{x} = (1.5, 0.5, -0.6)$ m errechnet mit den d - und $(d - 1)$ -dimensionalen Simulationen.

Dieser gravierende Unterschied in den Ergebnissen zeigt, dass die Prozesse, die ab einer bestimmten Dicke in der Kluft auftreten im drei-dimensionalen Fall noch viel deutlicher auftreten und hier das $(d - 1)$ -dimensionale Modell viel früher seine Gültigkeit verliert.

7.1.3 Geklüftetes Elder-Problem

Da das Henry-Problem ein sehr stabiles Problem ist und keine Konvektionsdominanz vorherrscht, sollte auch das Elder-Problem für die Vergleiche herangezogen werden (vgl. Abschnitt 6.3). Es wird jedoch nur das modifizierte Elder-Problem für die haline Strömung mit konstanter Temperatur betrachtet. Die verwendeten Parameter sind in Tabelle 6.3 zu finden.

Wieder werden zunächst die Plots der Simulationsergebnisse zu einem festen Zeitpunkt und dann die Werte an einem festen Punkt über einen größeren Zeitraum verglichen.

Beim Vergleich der Plots der $(d - 1)$ - und d -dimensionalen Simulationsergebnisse (Abb. 7.10)

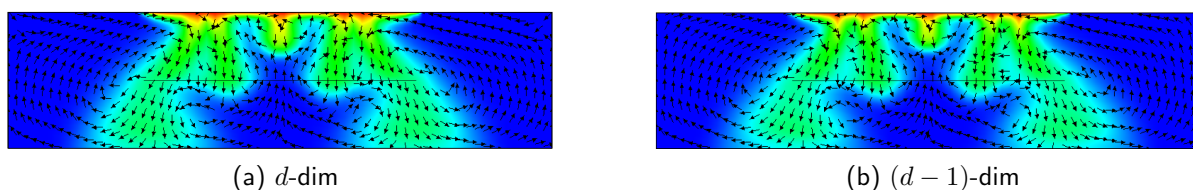


Abbildung 7.10: Geklüftetes Elder-Problem: Vergleich der d - und $(d - 1)$ -dimensionalen Simulationsergebnisse zum Zeitpunkt $t = 5a$. Dargestellt ist die Konzentrationsverteilung (rot: $\omega = 1$, blau: $\omega = 0$) und das Geschwindigkeitsfeld.

kann festgestellt werden, dass man ein akzeptabel gut übereinstimmendes Ergebnis erhält. Wenn

man die beiden Plots sehr genau vergleicht, kann man erkennen, dass sie nicht hundertprozentig übereinstimmen. So liegen z.B. die äußeren Finger im d -dimensionalen Fall näher beieinander. Allerdings sollte man auch bedenken, dass es beim Elder-Problem ein wohl-bekanntes Phänomen ist, dass verschiedene Lösungen auftreten können, die u.a. durch die Anzahl der Finger in der stationären Lösung gekennzeichnet sind (vgl. dazu z.B. [Johannsen, 2002],[Johannsen, 2003]). Da diese verschiedenen Lösungen u.a. durch die Wahl von verschiedenen Gittern beeinflusst werden und in den $(d - 1)$ - und d -dimensionalen Simulationen unterschiedliche Gitter verwendet wurden, bleibt das hier vorliegende Ergebnis des Vergleichs als sehr gut festzuhalten.

Um jedoch auch hier, eine genaue Aussage treffen zu können, wird der gemittelte Massenbruch

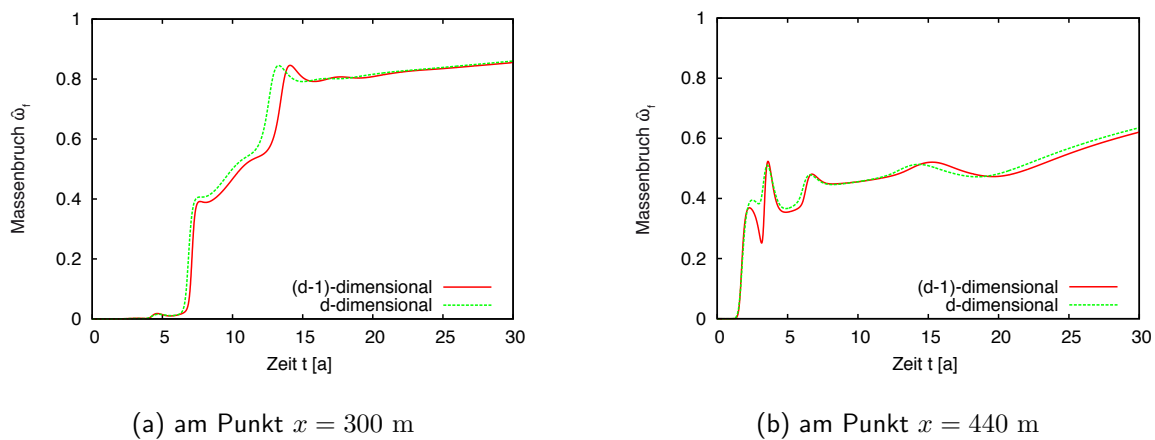


Abbildung 7.11: Elder-Problem. Vergleich des Massenbruchs $\hat{\omega}_f$ in der Kluft errechnet mit den d - und $(d - 1)$ -dimensionalen Simulationen.

$\hat{\omega}_f$ an einem fixierten Punkt in der Kluft verglichen (vgl. Abb. 7.11). Dabei werden in diesem Fall zwei verschiedene Punkte gewählt: einmal in der Mitte der Kluft bei $x = 300$ m und einmal in der Nähe des rechten Endes der Kluft bei $x = 440$ m. Aus Symmetriegründen entspricht das Ergebnis bei $x = 440$ m dem Ergebnis am linken Ende der Kluft bei $x = 160$ m. Bei diesem Vergleich ist zu beobachten, dass obwohl durchaus sichtbare Unterschiede zu erkennen sind, das grundsätzliche Verhalten der Lösung, inklusive aller Peaks, auch durch die $(d - 1)$ -dimensionale Rechnung wiedergegeben wird. Allerdings ist eine kleine Verschiebung zwischen den beiden Ergebnissen zu erkennen. Dies ist damit zu erklären, dass bei diesem Testfall im Gegensatz zu dem zuvor gezeigten Henry-Problem, die Kluft quer zur ankommenden Salzwasserfront liegt. Da beim d -dimensionalen Fall, die Kluftdicke aufgelöst ist und damit die Gitterknoten näher an der ankommenden Salzwasserfront liegen, steigt dort die Konzentration in der Kluft früher an als im $(d - 1)$ -dimensionalen Fall, in dem die Gitterknoten erst später erreicht werden. Folglich ist dies ein Fehler der zunächst mit feinerer Gitterweite abnimmt, dann jedoch nicht kleiner werden kann. Die Verschiebung verschwindet jedoch deswegen auch mit gegen 0 gehender Kluftdicke. Diese Abweichung ist folglich nicht direkt als Fehler der Modellgleichungen zu werten, sondern wird durch die $(d - 1)$ -dimensionale Geometrie bedingt. Wenn die Kluftdicke vergrößert wird, ergeben sich hier noch weiter voneinander abweichende Ergebnisse.

7.2 Bedingung für die Gültigkeit des $(d - 1)$ -dimensionalen Modells

In diesem Abschnitt soll nun mit den gesammelten Beobachtungen eine Bedingung für die Gültigkeit des niederdimensionalen Modells bestimmt werden. Um diese Bedingung bestimmen und testen zu können, wird die zuvor in Abschnitt 4.3.2 eingeführte Methode verwendet. Dieses dimensions-adaptive Verfahren wechselt abhängig von verschiedenen Faktoren während der Laufzeit zwischen d - und $(d - 1)$ -dimensionalen Gittern und damit zwischen d - und $(d - 1)$ -dimensionalen Modellen für die Darstellung und Berechnung der Kluft. Der Transfer der Lösung zwischen diesen Gittern wurde in Abschnitt 5.2.3 eingeführt, wobei zunächst die Frage nach der Bedingung, wann dieser Wechsel stattfinden soll, offen blieb. Diese Bedingung soll nun in Abschnitt 7.2.1 mit Hilfe der Untersuchungen des letzten Abschnitts 7.1 und auch der Beobachtung der Wirbelbildung (Abschnitt 6.1.3) definiert werden. In Abschnitt 7.2.2 werden dann Ergebnisse der Berechnung mit dem dimensions-adaptiven Gitter vorgestellt und in Abschnitt 7.2.3 wird diese Methode verwendet um anhand von vielzähligen Testrechnungen diese Bedingung als Kriterium für die Gültigkeit des $(d - 1)$ -dimensionalen Modells zu validieren.

7.2.1 Aufstellung eines Kriteriums

Betrachtet wird zunächst die Größe

$$\theta_f := \frac{|\mathbf{q}_f|}{|\mathbf{q}_{\text{rot}}|} \quad (7.2)$$

mit

$$\mathbf{q}_{\text{rot}} := \frac{\epsilon K_f}{2 K_m} \zeta_f \frac{\omega_f}{\omega_\theta} \quad \text{für } |\zeta_f|, \omega_f \neq 0. \quad (7.3)$$

Dabei ist die Wirbelstärke ζ_f gegeben durch Gleichung (6.2) und $\omega_\theta \in (0, 1)$ gibt einen Schwellenwert an, so dass erst ab $\omega_f > \omega_\theta$ die Wirbelstärke voll gewertet wird. ω_θ sollte nun abhängig von dem untersuchten Problem und dem darin auftretenden maximalen Wert für den Massenbruch gewählt werden. Desweiteren gilt wegen $|\zeta_f|, \omega_f \neq 0$ auch $|\mathbf{q}_{\text{rot}}| \neq 0$ und folglich ist θ_f wohldefiniert.

Diese dimensionslose Größe θ_f ist nun eine Größe, die die Strömung in der Kluft charakterisiert. Dabei gibt \mathbf{q}_{rot} eine Geschwindigkeit an, die durch auftretende Verwirbelungen, auf Grund einer Rotation der Strömungsgeschwindigkeit, induziert wird. Wenn jedoch deren Betrag viel kleiner ist als der Betrag der eigentlichen Strömungsgeschwindigkeit \mathbf{q}_f , können die Wirbel nicht sichtbar auftreten. Deswegen beschreibt die Größe θ_f eine Kennzahl, die angibt, ob es in der Kluft zu sichtbaren Verwirbelungen kommt oder nicht.

Um nun ein Kriterium für die Gültigkeit des $(d - 1)$ -dimensionalen Modells aufstellen zu können, werden zunächst die Faktoren aufgelistet, die sich bei den zuvor angestellten Vergleichen als die mit dem wesentlichen Einfluss auf die Gültigkeit des niederdimensionalen Modells erwiesen haben:

- (i) *Dicke der Kluft*: Die Kluftdicke ist ganz grundlegend Voraussetzung für die Gültigkeit des Mittelungsprozesses. Außerdem können bei zunehmender Kluftdicke Prozesse innerhalb der

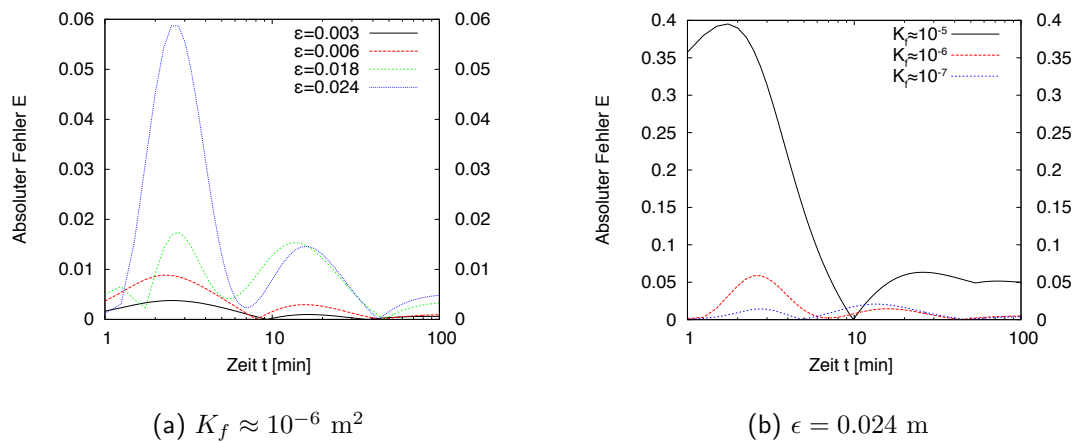


Abbildung 7.12: Einfluss der Parameter (a) Kluftdicke ϵ und (b) Permeabilität K_f auf das Henry-Problem (Experiment 1). Dargestellt ist die absolute Abweichung $E(\hat{\omega}_f)$ zwischen Ergebnissen für den Massenbruch aus d - und $(d - 1)$ -dimensionalen Simulationen.

Kluft auftreten (wie z.B. Wirbel, vgl. Abschnitt 6.1.3), die durch das $(d - 1)$ -dimensionale Modell nicht mehr dargestellt werden können.

Bei Betrachtung von Abb. 7.12a fällt auf, dass es für die Kluftdicke ϵ eine kritische Grenze zu geben scheint, ab deren Überschreitung sich der Fehler deutlich vergrößert. So ist zu erkennen, dass der absolute Fehler zwischen $\epsilon = 0.003 \text{ m}$ und $\epsilon = 0.018 \text{ m}$ zwar ansteigt, allerdings beim Übergang zu $\epsilon = 0.024 \text{ m}$ noch deutlich größer wird. Der relative Fehler liegt dabei für $\epsilon < 0.018 \text{ m}$ bei maximal 11%, wohingegen er für $\epsilon = 0.024 \text{ m}$ einen Maximalwert von ungefähr 50% annimmt.

- (ii) *Winkel der Kluft zur Gravitation:* Wie in Abschnitt 6.1.3 beobachtet, hängt das Auftreten von Wirbeln mit dem Winkel zwischen Konzentrationsgradient und Gravitation zusammen. Da durch die hohe Permeabilität in der Kluft und das daraus resultierende bevorzugte Strömen durch die Kluft der Konzentrationsgradient in Richtung der Kluftachse groß ist, ist das Auftreten von Wirbeln bei horizontalen Klüften wahrscheinlicher als bei vertikalen.
- (iii) *Verhältnis der Permeabilitäten in Kluft und Medium:* Je größer die Permeabilität in der Kluft ist, desto größer ist dort die Geschwindigkeit und desto eher kann es zu Phänomenen in der Kluft kommen. Auch das Verhältnis zwischen den Permeabilitäten in Kluft und Medium ist entscheidend. Haben beide die gleiche Permeabilität, kann man sie als ein gemeinsames poröses Medium annehmen. Je größer das Verhältnis ist, desto größer ist die Unstetigkeit am Interface und in Folge dessen kann es z.B. zu Verwirbelungen kommen. Bei Betrachtung von Abb. 7.12b kann ein Anstieg des Maximalwerts des relativen Fehlers von ca. 10% für $K_f \approx 10^{-7} \text{ m}^2$ über ca. 50% für $K_f \approx 10^{-6} \text{ m}^2$ auf ca. 100% für $K_f \approx 10^{-5} \text{ m}^2$ beobachtet werden, was einen nicht-linearen Zusammenhang impliziert.
- (iv) *Aktuelle Strömungsverhältnisse:* Offensichtlich ist, dass wenn die Salzkonzentration an der Kluft nur sehr klein ist, weil die Strömung dort noch nicht angekommen ist, das $(d - 1)$ -dimensionale Modell ausreichend für die Beschreibung der Strömung ist. Ebenso erlaubt

nur eine Strömung, die schnell genug ist, das Auftreten von Wirbeln.

Nun fällt auf, dass diese Faktoren in θ_f alle berücksichtigt werden. So sind die Faktoren (i) und (iii) direkt enthalten, Faktor (ii) fließt indirekt über die Wirbelstärke ζ_f mit ein und (iv) wird sowohl über ω_f/ω_θ als auch über \mathbf{q}_f berücksichtigt. Auch der beobachtete nicht-lineare Zusammenhang mit der Permeabilität K_f ist insofern berücksichtigt, da diese auch implizit in ζ_f enthalten ist. Folglich ist es naheliegend, θ_f als mögliches Kriterium zu betrachten.

Dabei sollte allerdings der minimale Wert in der Kluft $\theta_{\mathcal{F}} := \min_{\mathcal{F}}\{\theta_f\}$ untersucht werden, da die Kluft stets einheitlich d - oder $(d - 1)$ -dimensional betrachtet werden muss und folglich bereits das Auftreten von Wirbeln an einer kleinen Stelle ein Auflösen der gesamten Kluft erfordert. Nun wird das Kriterium folgendermaßen definiert:

$$\theta_{\mathcal{F}} < 1 - \delta \quad d\text{-dimensional} \quad (7.4)$$

$$\theta_{\mathcal{F}} > 1 + \delta \quad (d - 1)\text{-dimensional} \quad (7.5)$$

Dabei ist $\delta \in (0, 1)$ eine Konstante, beispielsweise $\delta = 0.8$ in den Rechnungen in dieser Arbeit. Die Definition mit δ ermöglicht eine Übergangszone von 2δ , in der sowohl d - als auch $(d - 1)$ -dimensional gerechnet werden kann. Dies wurde eingeführt um ein unnötiges Hin- und Herschalten zwischen den beiden Modellen, wenn das Kriterium nahe der Grenze ist, zu vermeiden.

Das so definierte Kriterium sagt also aus, das immer dann d -dimensional aufgelöst gerechnet werden sollte, wenn die tatsächliche Strömungsgeschwindigkeit \mathbf{q}_f kleiner ist als die durch die Wirbel induzierte \mathbf{q}_{rot} , es also zu einer sichtbaren Verwirbelung in der Kluft kommt, was ein Phänomen darstellt, das durch das $(d - 1)$ -dimensionale Modell nicht aufgelöst werden kann. Umgekehrt kann, wenn die durch die Rotation induzierte Geschwindigkeit \mathbf{q}_{rot} nur sehr klein ist, auch $(d - 1)$ -dimensional gerechnet werden, da das entscheidende Verhalten der Strömung ein Durchfließen der Kluft ist, welches auch durch das $(d - 1)$ -dimensionale Modell wiedergegeben werden kann.

Um nun die Wahl von $\theta_{\mathcal{F}}$ als Kriterium zu unterstützen, werden die Grenzfälle betrachtet: So geht mit verschwindender Kluftdicke $\epsilon \rightarrow 0$ der Wert $\theta_{\mathcal{F}} \rightarrow \infty$ und folglich kann $(d - 1)$ -dimensional gerechnet werden, was für verschwindende Kluftdicke auch richtig ist. Dagegen geht für $\epsilon \rightarrow \infty$ der Wert $\theta_{\mathcal{F}} \rightarrow 0$, was bedeutet, dass die Kluft voll aufgelöst werden muss, und was ebenfalls richtig ist, da eine größere Kluft mehr Raum einnimmt, der aufgelöst werden sollte, mehr Phänomene innerhalb der Kluft auftreten können und eine Mittelung nicht gerechtfertigt ist. Für $K_f/K_m \rightarrow 0$, also $K_m \gg K_f$, geht $\theta_{\mathcal{F}} \rightarrow \infty$ und es kann $(d - 1)$ -dimensional gerechnet werden, da die eigentlichen Strömungsprozesse im die Kluft \mathcal{F} umgebenden Medium \mathcal{M} stattfinden, wohingegen bei $K_f/K_m \rightarrow \infty$, also $K_f \gg K_m$, die eigentlichen Strömungsprozesse in der Kluft stattfinden und diese aufgelöst werden muss, was auch durch $\theta_{\mathcal{F}} \rightarrow 0$ gegeben ist.

Um eine konsistente Berechnung des Kriteriums zu gewährleisten, wird es immer wie auf dem

$(d - 1)$ -dimensionalen Gitter ausgewertet. So wird im d -dimensionalen Fall das Kriterium berechnet, indem zunächst über die Unbekannten ω_f und p_f gemittelt wird. Dadurch erhält man eine konsistente Berechnung des Kriteriums und es kann auch nach einem möglichen Gitterwechsel nicht plötzlich zu riesigen Sprüngen im Kriterium kommen. Für eine Auswertung auf dem $(d - 1)$ -dimensionalen Gitter spricht auch, dass mit dem Kriterium die Gültigkeit auf genau diesem Gitter angegeben wird und es folglich entscheidend ist, was auf diesem Gitter berechnet wird.

7.2.2 Untersuchung des Gittertransfers mit Hilfe des aufgestellten Kriteriums

In diesem Abschnitt soll die in Kapitel 4.3.2 eingeführte Methode mit dimensions-adaptivem Gitter unter Benutzung des aufgestellten Kriteriums als Bedingung für den Gitterwechsel anhand der Benchmark-Probleme aus Kapitel 6 auf ihre Güte untersucht werden. Dazu werden drei Simulationen durchgeführt, die sich darin unterscheiden, dass in ihnen entweder das d -dimensionale, das $(d - 1)$ -dimensionale oder das dimensions-adaptive Modell verwendet wird. Das Ergebnis der d -dimensionalen Rechnung wird dabei als richtig vorausgesetzt und als Referenzlösung betrachtet. Anschließend werden die Abweichungen der Ergebnisse der beiden anderen Modelle davon untersucht.

Beispiel 1 Zunächst wird das bereits in den vorigen Abschnitten ausführlich diskutierte Experiment 1 mit einer Kluft der Dicke $\epsilon = 0.024$ m betrachtet. In Abb. 7.13 sind der Verlauf von Massenbruch $\hat{\omega}_f$ und Sprung des Massenbruchs $(\omega_m^{(2)} - \omega_m^{(1)})$ für die verschiedenen Simulationen dargestellt. Ebenfalls dargestellt sind die jeweiligen absoluten Abweichungen zum d -dimensionalen Ergebnis.

Es kann festgestellt werden, dass im dimensions-adaptiven Modell, wenn im ersten Zeitschritt das $(d - 1)$ -dimensionale Modell benutzt wird, sofort ein Gitterwechsel stattfindet. Dies liegt daran, dass sich sofort bei Einfließen ein Wirbel am rechten Rand der Kluft bildet. Auch wenn sich diese vollständige Verwirbelung schnell wieder auflöst, bleiben zwei einander entgegen gerichtete Geschwindigkeiten in der oberen und unteren Hälfte der Kluft bestehen. Diese führen dazu, dass insbesondere im Sprung des Massenbruchs eine erhebliche Abweichung des $(d - 1)$ -dimensionalen Ergebnis vom d -dimensionalen einen niedrigen Wert von $\theta_{\mathcal{F}}$ rechtfertigt. Im Verlaufe der Zeit bildet sich ab $t \approx 13$ min eine neue vollständige Verwirbelung in der linken Hälfte der Kluft. Dieser Wirbel schiebt sich zum linken Ende der Kluft und auch wenn sich dann die komplette Verwirbelung wieder auflöst, bleibt auch im stationären Zustand ein Profil mit entgegengesetzten Geschwindigkeiten in der Kluft bestehen, was auch im stationären Zustand eine volle Auflösung der Kluft erfordert.

Bei Betrachtung des Verlaufs von $\theta_{\mathcal{F}}$ (vgl. Abb. 7.14a) kann folglich beobachtet werden, dass der Wert von $\theta_{\mathcal{F}}$ über die gesamte Rechenzeit im voll aufzulösenden Bereich bleibt. Eine leichte Differenz zwischen den Werten von $\theta_{\mathcal{F}}$ berechnet mit dem d - und mit dem $(d - 1)$ -dimensionalen Modell, ist dadurch zu erklären, dass die Geschwindigkeit auf Grund der sich bildenden Wirbel in den beiden Modellen sehr unterschiedlich ist. Diese Differenz ist zu erkennen, obwohl bereits aus Konsistenzgründen der Wert im d -dimensionalen Modell exakt so berechnet wird wie im $(d - 1)$ -dimensionalen.

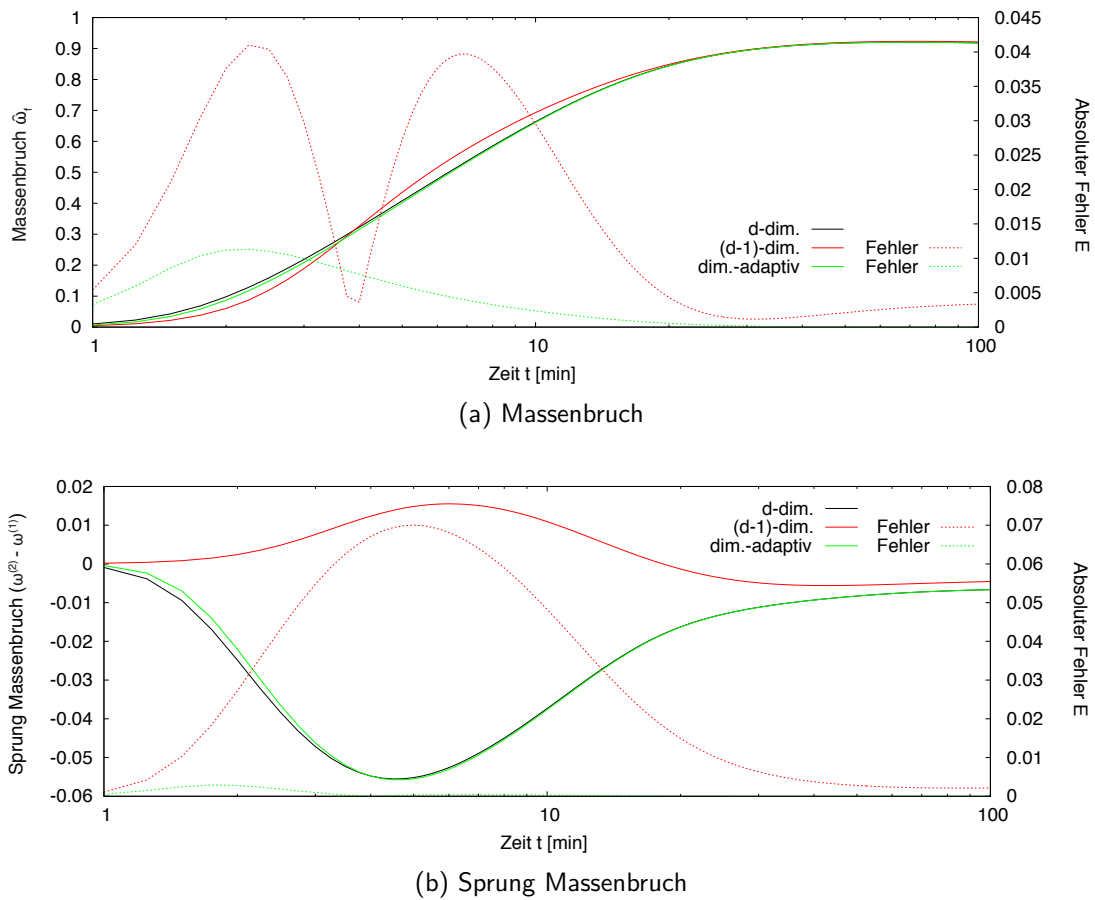


Abbildung 7.13: Gittertransfer Geklüftetes Henry-Problem (Experiment 1, $\epsilon = 0.024$ m): Vergleich der $(d - 1)$ -dimensional und dimensions-adaptiv berechneten Lösungen am Punkt $x = 1.5$ m mit der d -dimensional berechneten.

Was die Aussagekraft des Kriteriums und den Erfolg der dimensions-adaptiven Methode angeht, kann beobachtet werden, wie auf Grund des Wechsels zum d -dimensionalen Modell, der absolute Fehler sowohl des Massenbruchs, als auch der des Sprungs des Massenbruchs deutlich verkleinert wird (vgl. Abb. 7.13). Ein kleiner Fehler bleibt jedoch insbesondere am Anfang bestehen, da das dimensions-adaptive Modell erst nach dem ersten Zeitschritt überprüft, ob der Wechsel stattfinden soll und für dieses Beispiel in diesem ersten Zeitschritt schon ein großer Fehler gemacht wird. Dies könnte jedoch durch einen kleineren Anfangszeitritt oder durch ein Wiederholen des ersten Zeitschritts in so einem Fall, behoben werden. Dennoch kann der relative Fehler des Massenbruchs $E_{rel}(\hat{\omega}_f) := |\hat{\omega}_f^d - \hat{\omega}_f| / \hat{\omega}_f^d$ von einem Maximum von 38% für das $(d - 1)$ -dimensionale Modell auf einen Maximalwert von 11% für das dimensions-adaptive Modell gesenkt werden. Für den Sprung des Massenbruchs wird diese Verbesserung noch deutlicher. Hier kann der relative Fehler von einem Maximum von über 100% auf einen Maximalwert von 15% reduziert werden.

Für eine dünnere Kluft der Dicke $\epsilon = 0.003$ m findet kein Gitterwechsel statt, da das Kriterium

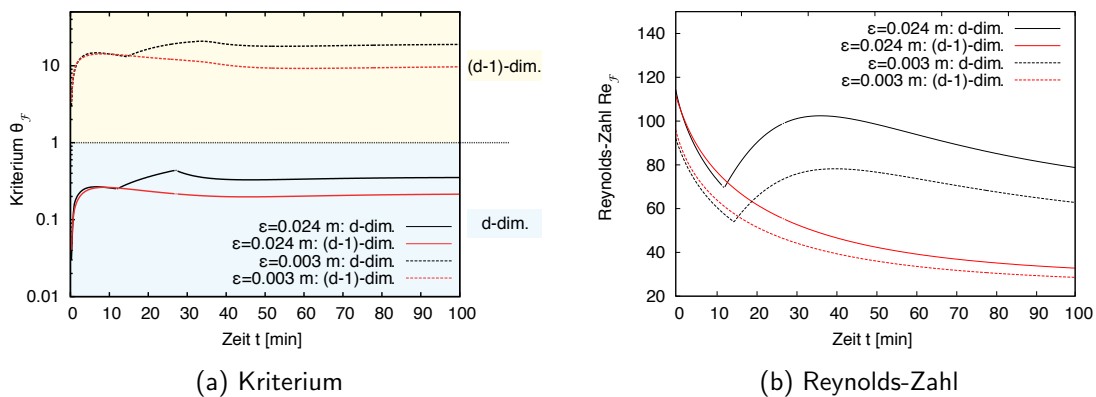


Abbildung 7.14: Kriterium θ_f und Reynolds-Zahl Re_f für das geklüftete Henry-Problem (Experiment 1) mit unterschiedlichen Kluftdicken.

θ_f stets einen großen Wert behält (vgl. Abb. 7.14a) bzw. die Geschwindigkeit \mathbf{q}_f stets größer ist als die durch die Rotation induzierte Geschwindigkeit \mathbf{q}_{rot} . Dieses Ergebnis wird auch durch die Vergleiche (vgl. z.B. Abb. 7.2a), bei denen nur eine geringe Abweichung zwischen $(d - 1)$ - und d -dimensionalen Ergebnissen beobachtet werden konnte, unterstützt.

Beispiel 2 Um zu untersuchen, ob sich das Kriterium auch für einen Wechsel eignet, der nach Durchfließen der Kluft von der aufgelösten Kluft im d -dimensionalen Modell zurück zur approximierten Kluft im $(d - 1)$ -dimensionalen Modell umschaltet, wird das Testproblem so modifiziert, dass sich kein stationärer Zustand einstellt, indem die Kluft voll mit Salzwasser gefüllt ist (vgl. Abb. 7.15). Dazu wird angenommen, dass die Salzquelle mit $\omega = 1$ an der rechten Wand nur für $t < t_0$ vorhanden ist und danach dort verschwindet ($\omega = 0$). Außerdem wird der Frischwasserstrom von links mit der Zeit verringert, sodass die Strömung die Kluft durchfließt. In Abb. 7.15a ist der stationäre Zustand dieses veränderten Testproblems dargestellt und in

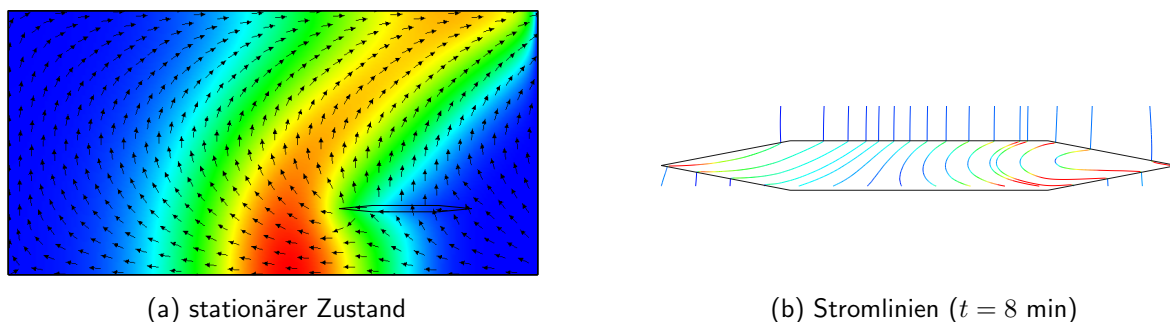


Abbildung 7.15: Modifiziertes Testproblem. Dargestellt sind (a) die Konzentrationsverteilung (rot: $\omega = 3 \cdot 10^{-4}$, blau: $\omega = 0$) und das Geschwindigkeitsfeld im stationären Zustand und (b) die Stromlinien der Geschwindigkeit zum Zeitpunkt $t = 8$ min in der Kluft.

Abb. 7.15b die Wirbelbildung bei Einfließen des Salzwassers in die Kluft: Man kann eine Drehung der Stromlinien innerhalb der Kluft beobachten. Es bildet sich in diesem Fall jedoch kein kompletter Wirbel aus.

In Abb. 7.16 ist der Verlauf des Massenbruchs und des Sprungs des Massenbruchs über die Kluft

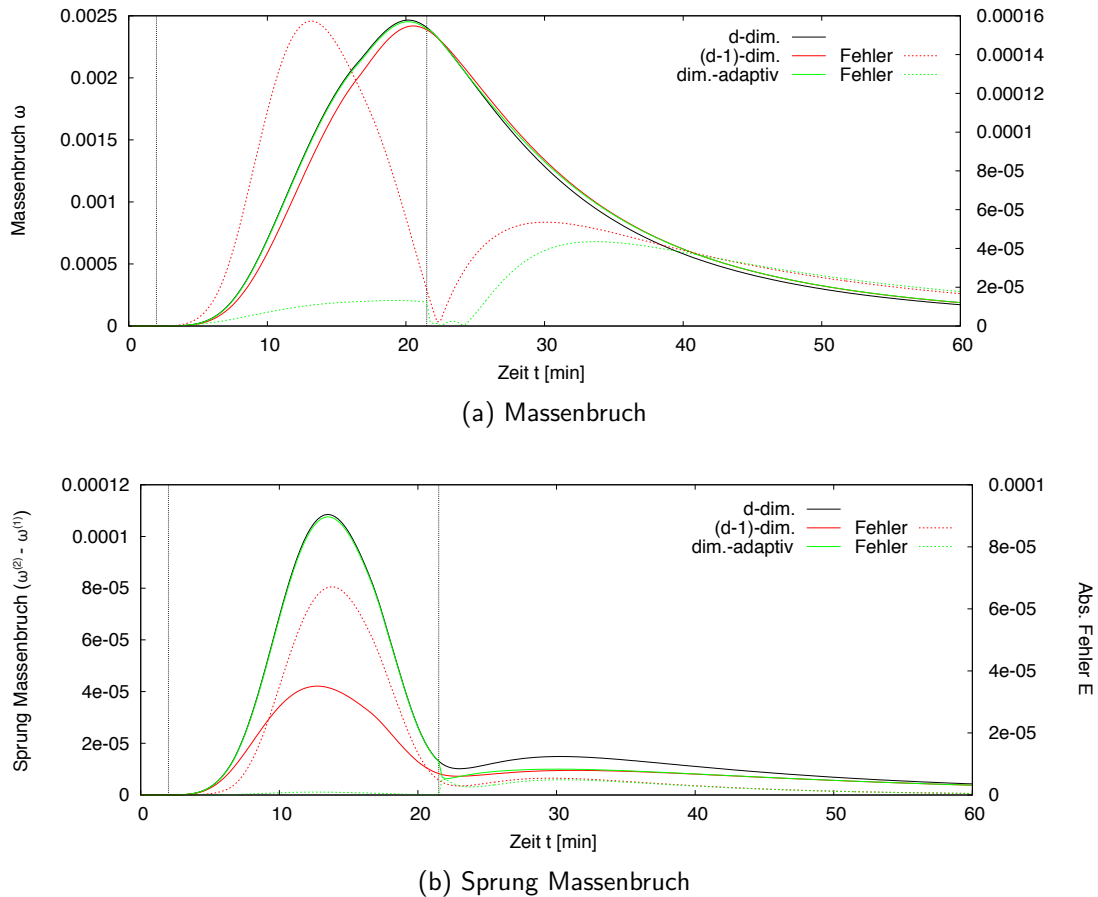


Abbildung 7.16: Gittertransfer Modifiziertes Test-Problem: Vergleich der $(d - 1)$ -dimensional und dimensions-adaptiv berechneten Lösungen am Punkt $x = 1.5$ m mit der d -dimensional berechneten. Die vertikalen Linien geben die Zeitpunkte des Gitterwechsels an.

für die verschiedenen Varianten, d - und $(d - 1)$ -dimensional und dimensions-adaptiv, dargestellt. Bei Erreichen des Salzwassers der Kluft bei $t = 2$ min findet in der dimensions-adaptiven Simulation ein Wechsel vom $(d - 1)$ -dimensionalen zum d -dimensionalen Modell statt, da das Einströmen des Salzwassers auch Verwirbelungen hervorruft. Dieser ist im Bild nicht zu erkennen, da der Massenbruch in der Kluft zu diesem Zeitpunkt noch sehr klein ist. Dadurch wird sowohl der Fehler im Massenbruch $E(\hat{\omega}_f)$ als auch der Fehler im Sprung des Massenbruchs $E(\omega_m^{(2)} - \omega_m^{(1)})$ nahe bei Null gehalten, $E(\omega_m^{(2)} - \omega_m^{(1)})$ reduziert sich sogar um mehrere Größenordnungen im Vergleich zum $(d - 1)$ -dimensionalen Modell. Bei $t = 21.5$ min hat der größte Teil der Salzwasser-Strömung die Kluft durchströmt und in der Kluft passiert nur noch wenig. Hier findet nun der Wechsel zurück zum $(d - 1)$ -dimensionalen Modell statt, da nun

eine genaue Auflösung nicht mehr erforderlich ist. Dadurch steigt der Fehler wieder leicht an, was daran liegt, dass das Problem stabil ist und sich die Lösung der stationären Lösung des $(d - 1)$ -dimensionalen Problems annähert, allerdings bleibt der relative Fehler $E_{\text{rel}}(\hat{\omega}_f) < 10\%$. So kann, während bei der $(d - 1)$ -dimensionalen Simulation sich ein relativer Fehler von bis zu $E_{\text{rel}}(\hat{\omega}_f) \approx 20\%$ ergibt und insbesondere der relative Fehler des Sprungs hier bis auf $E(\omega_m^{(2)} - \omega_m^{(1)}) \approx 65\%$ steigt, bei der dimensions-adaptiven Simulation über die gesamte Rechenzeit hinweg ein relativer Fehler $E_{\text{rel}}(\hat{\omega}_f) < 10\%$ und $E(\omega_m^{(2)} - \omega_m^{(1)}) < 10\%$ erreicht werden. Gleichzeitig wird nicht über den gesamten Zeitraum die volle Auflösung des Problems benötigt, ausschließlich für das Zeitintervall $t \in (2, 21.5)$ min wird d -dimensional gerechnet, was Rechenzeit einspart, da während der $(d - 1)$ -dimensionalen Rechnung ca. 94% weniger Gitterknoten in der Kluft benötigt werden.

Vergleich mit Reynolds-Zahl Beim Betrachten der Strömung durch eine Kluft in Hinblick auf Wirbelbildung, kommt der Gedanke auf, eine Analogie zu den sogenannten Rohrströmungen zu ziehen, die vielfach in der Strömungsmechanik untersucht werden (vgl. z.B. [Reynolds, 1883], [Avila et al., 2011]). Bei diesen Beispielen durchströmt Flüssigkeit ein zu den Seitenwänden undurchlässiges Rohr und abhängig von der Geschwindigkeit der durchströmenden Flüssigkeit bilden sich Wirbel im Rohr. Das Auftreten dieser Wirbel lässt sich mit Hilfe der Reynolds-Zahl (Gleichung (2.14)) charakterisieren. Eine kritische Reynolds-Zahl, die den Übergang zwischen laminaren und turbulenten Rohrströmungen anzeigt, wird dabei im Bereich $Re_{\text{krit}} \in (1500, 2500)$ angegeben (vgl. z.B. [Darbyshire und Mullin, 1995], [Faisst und Eckhardt, 2004]). Da die Grenze der Gültigkeit des $(d - 1)$ -dimensionalen Modells mit dem Auftreten von Wirbeln in Verbindung zu stehen scheint, liegt es nahe, auch die Reynolds-Zahl als mögliches Kriterium zu untersuchen. Für die eben betrachteten Beispiele wird über den gesamten Zeitraum mit $Re_{\mathcal{F}} := \max_{\mathcal{F}} \{Re_f\} \geq 70$ eine für eine Rohrströmung sehr kleine Reynolds-Zahl in der Kluft erreicht (vgl. Abb. 7.14b), wobei hier die Kluftdicke als charakteristische Länge angenommen wurde. Dennoch ist die Reynolds-Zahl so groß, dass die Gültigkeit des Darcy-Gesetzes in der Kluft hinterfragt und eine Modellierung mit der Forchheimer-Korrektur angedacht werden sollte (vgl. Kapitel 2.2.2). Diese hat jedoch keinen wesentlichen Einfluss auf die Anwendung des Kriteriums, weswegen sie hier nicht weiter betrachtet wird.

Es kann auch festgestellt werden (vgl. Abb. 7.14b), dass die Reynolds-Zahl für das Experiment 1 mit Kluftdicke $\epsilon = 0.003$ m einen ähnlich hohen Wert annimmt wie für dasselbe Beispiel mit Kluft der Dicke $\epsilon = 0.024$ m. Für die dünnere Kluft liefert jedoch das $(d - 1)$ -dimensionale Modell gute Ergebnisse, so dass diese nicht aufgelöst werden muss, wohingegen die dickere Kluft aufgrund der stark vom d -dimensionalen abweichenden Ergebnisse aufgelöst werden sollte. Eine Differenzierung zwischen den beiden Fällen mit unterschiedlicher Kluftdicke ist hierbei mit der Reynolds-Zahl nicht so einfach zu bewerkstelligen. Hingegen läuft für $\epsilon \rightarrow 0$ ebenfalls $Re_{\mathcal{F}} \rightarrow 0$, was dann die richtige Tendenz liefert.

Ganz allgemein konnte beobachtet werden, dass, wenn das Kriterium eine volle Auflösung empfiehlt, auch stets die Reynolds-Zahl groß ist ($Re_{\mathcal{F}} > 50$), allerdings umgekehrt, wenn die Reynolds-Zahl groß ist, das Kriterium sowohl groß als auch klein sein kann. So ist es z.B. bei Verändern der Permeabilität im Medium auf $K_m \approx 1 \cdot 10^{-8}$ m² für das Experiment 1 mit

Kluftdicke $\epsilon = 0.024$ m der Fall. Der relative Fehler im Massenbruch liegt dabei für die $(d - 1)$ -dimensionale Rechnung bei maximal 10%. Die Reynolds-Zahl ist jedoch für dieses Problem mit $Re_{\mathcal{F}} > 300$ ziemlich groß, was für eine volle Auflösung der Kluft sprechen würde, die in diesem Fall jedoch nicht notwendig ist. Das Kriterium $\theta_{\mathcal{F}}$ hingegen gibt an, dass eine $(d - 1)$ -dimensionale Modellierung angebracht ist.

So kann geschlossen werden, dass die Reynolds-Zahl als Kriterium vielleicht manchmal eine richtige Tendenz liefert, allerdings grundsätzlich viel zu viel auflösen würde.

7.2.3 Validierung des aufgestellten Kriteriums

Im letzten Abschnitt wurde u.a. auch beobachtet, dass das eingeführte Kriterium sich für die betrachteten Test-Probleme sehr gut eignet. Um nun eine allgemeinere Aussage treffen zu können und das Kriterium zu validieren, wird ein allgemeines Testbeispiel konstruiert, mit dessen Hilfe viele unterschiedliche Szenarien untersucht werden können, in denen jeweils die Qualität der Aussage des Kriteriums überprüft wird.

Einführung des Test-Beispiels. Die Geometrie dieses allgemeinen Test-Beispiels ist dabei durch die Maße der Kluft, ihre Länge ℓ und Dicke ϵ , maßgeblich bestimmt (vgl. Abb. 7.17). Dadurch dass die Geometrie nur einen Teilausschnitt um die Kluft herum betrachtet, ist zum einen der Fokus ausschließlich auf die Kluft gelegt und zum anderen bleibt das Problem sehr klein, was deswegen wichtig ist, weil sehr viele Szenarien betrachtet werden sollen und dies mit vernünftigem Aufwand zu bewerkstelligen sein muss.

Die Variation der Simulationsparameter erfolgt in den in Tabelle 7.1 angegebenen Bereichen,



Abbildung 7.17: Geometrie für das allgemeine Test-Problem. Dabei bezeichnen ϵ und ℓ die Dicke und Länge der Kluft.

wobei die Parameter D_m , ϕ_m , a_α^t , a_α^ℓ , μ , ρ^{pW} und ρ^{pB} konstant gelassen sind und den entsprechenden Wert aus Tabelle 6.1 annehmen. Der Winkel ψ der Kluft zur Gravitation kann durch verschiedenen gerichtete Gravitationsvektoren, wie in Tabelle 7.2 angegeben, verändert werden. Als Anfangsbedingung ist in allen Beispielen die Konzentration im gesamten inneren Gebiet $\omega_\alpha = 0$. Als eine Randbedingung wird angenommen, dass an einem beliebigen Teilstück des Randes eine Salzkonzentration mit $\omega_\alpha = 1$ vorherrscht. So kann am oberen, rechten, unteren oder linken Rand Salzwasser vorhanden sein. Dabei werden jedoch einige Fälle aus Symmetriegründen nicht untersucht, da beispielsweise für $\psi = 90^\circ$ mit Salzwasser am linken Rand das gleiche (jedoch gespiegelte) Problem erzeugt wird, wie mit Salzwasser am rechten Rand.

Symbol	Koeffizient	Wert min	Wert max	Einheit
D_f	Diffusionskoeffizient in der Kluft	$1 \cdot 10^{-6}$	$1 \cdot 10^{-5}$	$[\text{m}^2 \text{s}^{-1}]$
K_m	Permeabilität im Medium	$1 \cdot 10^{-10}$	$1 \cdot 10^{-9}$	$[\text{m}^2]$
K_f	Permeabilität in der Kluft	$1 \cdot 10^{-8}$	$1 \cdot 10^{-5}$	$[\text{m}^2]$
ϕ_f	Porosität in der Kluft	0.35	0.7	-
ℓ	Länge der Kluft	0.01	10	$[\text{m}]$
ϵ	Dicke der Kluft	0.001	0.016	$[\text{m}]$

Tabelle 7.1: Parameter für die Simulation des allgemeinen Test-Problems.

Gravitation $[\text{ms}^{-2}]$	Winkel
$(0, -9.81)$	$\psi = 90^\circ$: Horizontale Kluft
$(6.936717523, -6.936717523)$	$\psi = 45^\circ$
$(9.81, 0)$	$\psi = 0^\circ$: Vertikale Kluft

Tabelle 7.2: Variation des Winkels ψ der Kluft zur Gravitation.

Zusätzlich kann eingestellt werden, ob das Salzvorkommen sich über den gesamten Rand erstreckt oder nur über einen Teil des Randes.

Der Druck wird auf dem Rand mit Salzkonzentration entsprechend seines hydrostatischen Wertes vorgegeben. Über eine weitere Randbedingung für die Druckgleichung kann ein möglicher Einfluss in das Gebiet vorgegeben werden, wodurch verschiedene Fluss-Situationen untersucht werden können. Dieser kann ebenfalls von jedem beliebigen Randstück aus auftreten und nimmt verschiedene Werte an (siehe Tabelle 7.3).

Fluss $[\text{ms}^{-1}]$
$q_{\alpha n} = 0$
$q_{\alpha n} = 3.3 \cdot 10^{-7}$
$q_{\alpha n} = 3.3 \cdot 10^{-5}$
$q_{\alpha n} = 3.3 \cdot 10^{-3}$

Tabelle 7.3: Variation des Einflusses $q_{\alpha n} := -\mathbf{q}_\alpha \cdot \mathbf{n}$, wobei \mathbf{n} die äußere Normale an das jeweilige Randstück angibt.

Aufgrund der vielzähligen Einstellmöglichkeiten, mit denen u.a. auch Probleme analog zu den in Kapitel 6 vorgestellten Benchmark-Problemen (Henry und Elder) abgedeckt sind, wird dieses Testbeispiel hier als allgemein angenommen. Insgesamt wurden für die im folgenden vorgestellten Ergebnisse 1261 verschiedene Szenarien betrachtet.

Nun werden für diese Testprobleme jeweils drei verschiedene Simulationen ausgeführt, eine mit d -dimensionaler Kluft, eine mit $(d - 1)$ -dimensionaler Kluft und eine mit dimensions-adaptivem Gitter. Die Parameter für die Berechnung des Wechselkriteriums $\theta_{\mathcal{F}}$ in der dimensions-adaptiven Rechnung waren dabei $\delta = 0.8$ und $\omega_\theta = 0.001$. Die Gitterhierarchie in den drei Simulationen

wurde so gewählt, dass auf dem feinsten Gitterlevel die d -dimensionale Kluft stets mit mindestens 8 Schichten an Elementen aufgelöst ist und das gesamte Gebiet mit mindestens 5000 Elementen überdeckt ist. Die selbe Gitterfeinheit wird für alle drei Rechnungen verwendet. Für das dimensions-adaptive Gitter ist noch zu berücksichtigen, dass es bei Klüften mit einer sehr großen Dicke ϵ vorkommen kann, dass im $(d - 1)$ -dimensionalen Gitter zum Medium \mathcal{M} gehörende Gitterknoten an einer geometrischen Position liegen, die im d -dimensionalen Gitter bereits zur Kluft \mathcal{F} gehört. Da die Transferoperatoren allerdings so konstruiert sind, dass die Unbekannten im Medium \mathcal{M} interpoliert werden, sollte dieser Fall aus Konsistenzgründen nicht auftreten. Um dieses Problem zu umgehen, wird in diesem Fall das $(d - 1)$ -dimensionale Gitter so an das d -dimensionale Gitter angepasst, dass alle im $(d - 1)$ -dimensionalen zum Medium gehörenden Gitterknoten auch im d -dimensionalen im Medium liegen. Aufgrund der einfachen Konstruktion der Geometrie des Testproblems, wird das Auftreten dieses Falls angenommen, wenn $2^L > \ell/4\epsilon$ wobei L das feinste Gitterlevel angibt.

Als Zeitschritt wird zunächst ein Zeitschritt vorgeschlagen, der abhängig von der Permeabilität und der Dicke der Kluft kleiner oder größer sein kann. Sollte das Problem so nicht konvergieren, wird eine weitere Rechnung mit verkleinertem Zeitschritt ausgeführt. Dieser Zeitschritt wird dann in allen drei Simulationen verwendet. Es wird dann eine maximale Anzahl von 100 Zeitschritten gerechnet, wobei bei Erreichen des stationären Zustands, die Simulation vorzeitig abgebrochen wird.

Um die Ausführung der zahlreichen benötigten Simulationen möglichst einfach und effizient zu gestalten, wurde zunächst ein Skriptfile erstellt, das für einen vorgegebenen Parametersatz die benötigten Geometrien erstellt und die Simulationen mit den drei verschiedenen Modellansätzen ausführt. Mit einer ähnlichen Methode wie in [Muha und Queisser, 2013] werden unter Angabe von Parametergrenzen und -variationen zunächst sämtliche Parametersätze erstellt und dann dem Ausführungs-Skriptfile übergeben und dieses ausgeführt. Dieser Prozess findet parallel statt und nutzt dank einer geschickten Lastverteilung die Parallelität optimal aus.

Auswertung der Ergebnisse. Anschließend können die Ergebnisse ausgewertet werden und es kann untersucht werden, in welchen Fällen bei der dimensions-adaptiven Simulation ein Gitterwechsel stattgefunden hat. Für die Evaluierung, ob dieser Wechsel gerechtfertigt war, wird das Ergebnis der Simulation mit der d -dimensionalen Kluft wieder als Referenzlösung betrachtet und als richtig vorausgesetzt. Dann kann dieses sowohl mit dem Ergebnis der $(d - 1)$ -dimensionalen Simulation als auch mit dem der dimensions-adaptiven verglichen werden. Dabei werden verschiedene Vergleiche ausgeführt:

- Vergleich der Mittelwerte von Massenbruch und Druck an einem Punkt in der Kluft: $E(\hat{\omega}_f)$ und $E(p_f)$
- Vergleich der Sprünge von Massenbruch und Druck zwischen den Interfaces an einem Punkt in der Kluft: $E(\omega_m^{(2)} - \omega_m^{(1)})$ und $E(p_m^{(2)} - p_m^{(1)})$
- Vergleich von Massenbruch und Druck an einem Punkt im Medium

Die ersten beiden Vergleiche werden hierbei an 3 verschiedenen Punkten in der Kluft ausgewertet, auf der Hälfte der Kluft, bei $x = \ell/8 + \ell/2$, und in der Nähe des linken, $x = \ell/8 + \ell/8$,

bzw. des rechten Randes der Kluft, $x = \ell/8 + 7\ell/8$.

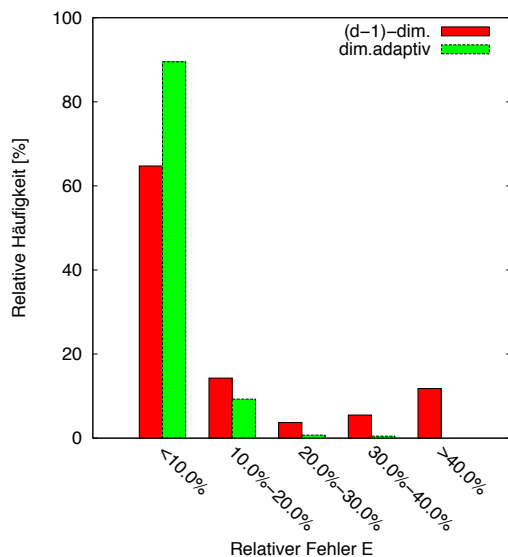
Der letzte Vergleich, der den Fehler an Punkten im Medium betrachtet, wird hier deswegen zusätzlich ausgeführt, da die anderen Vergleiche für den Fall, dass die Kluft quer zur ankommenden Salzfront liegt, nicht aussagekräftig sind, da dort eine zeitliche Verschiebung in Folge der geometrischen Verschiebung auftritt, wie es beim Elder-Problem beobachtet wurde (vgl. Abschnitt 7.1.3). Dieser Vergleich wird an 6 verschiedenen Punkten, die gleichmäßig im Gebiet um die Kluft verteilt liegen, ausgewertet.

Von diesen Vergleichen an den verschiedenen Auswertungspunkten wird dann im folgenden nur noch der maximale Fehler betrachtet, der über die gesamte Laufzeit in einem der Vergleiche an einem Auswertungspunkt aufgetreten ist.

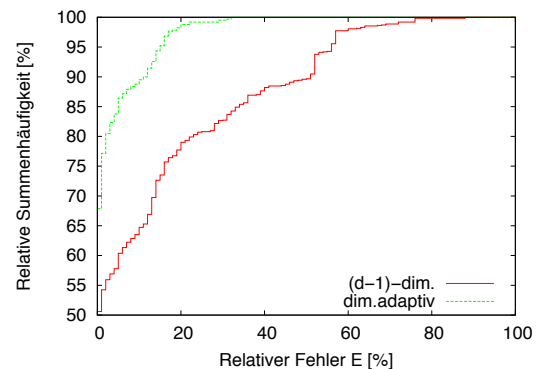
Dieser maximale Fehler wird dann sowohl für die $(d - 1)$ -dimensionale Berechnung als auch für die dimensions-adaptive betrachtet. Dabei wird die relative Abweichung so berechnet, dass erst ab 10% des Maximalwertes ein relativer Fehler berechnet wird, da relative Abweichungen bei Werten nahe Null ohne Aussagekraft groß sein können. Da der Fehler für den Druck und den Sprung des Drucks in allen Fällen sehr klein war, wird hier auf eine Darstellung verzichtet und ausschließlich der Massenbruch und der Sprung des Massenbruchs betrachtet.

Zunächst kann festgestellt werden, dass die Wahl des Kriteriums insofern konsistent ist, dass es zu keinem Hin- und Herschalten zwischen d - und $(d - 1)$ -dimensionalem Gitter kommt.

In Abb. 7.18 ist nun die Häufigkeitsverteilung des relativen Fehlers $E_{\text{rel}} = E(\hat{\omega}_f)/\hat{\omega}_f^d$ für den



(a) Häufigkeitsverteilung



(b) Kumulative Häufigkeitsverteilung

Abbildung 7.18: Prozentuale Verteilung des relativen Fehlers $E(\hat{\omega}_f)/\hat{\omega}_f^d$ der Ergebnisse für den Massenbruch aus den $(d - 1)$ -dimensionalen und dimensions-adaptiven Simulationen in Bezug auf den Massenbruch $\hat{\omega}_f^d$ aus dem d -dimensionalen Modell.

Massenbruch in Bezug auf den Massenbruch $\hat{\omega}_f^d$ aus dem d -dimensionalen Modell dargestellt. Die Daten stammen aus den $N = 1261$ verschiedenen Varianten des Testproblems. Dabei ist klar zu erkennen, dass während bei Benutzung des $(d - 1)$ -dimensionalen Modells nur in 65% der getesteten Varianten der relative Fehler kleiner als 10% ist, dies bei Benutzung des dimensions-adaptiven Modells in 90% der Fälle so ist. Die Tatsache, dass in so vielen Fällen der Fehler bereits im $(d - 1)$ -dimensionalen Modell $< 10\%$ bleibt, liegt an den Testproblemen, die auch viele Fälle abdecken, in denen wenig in der Kluft passiert, da dort bspw. wenig Salzwasser vorhanden oder die Permeabilität klein ist.

Die empirische Verteilungsfunktion gegeben durch die relative Summenhäufigkeit wird berechnet durch

$$F(E_k) = \sum_{i=1}^k E_i \quad \text{für } k = 1, \dots, N \quad (7.6)$$

und ist dargestellt in Abb. 7.18b. Daran lassen sich auch einfach die Quantile der Ordnung p erkennen. So wird beim $(d - 1)$ -dimensionalen Modell in 75% aller Testfälle ein relativer Fehler von maximal $F^{-1}(0.75) = 16\%$ gemacht und in 90% der Fälle sogar einer von maximal $F^{-1}(0.9) = 34\%$. Bei Benutzung des dimensions-adaptiven Modells kann dies auf $F^{-1}(0.9) = 5\%$ und $F^{-1}(0.75) = 1\%$ reduziert werden.

In Tabelle 7.4 sind diese und weitere statistische Lage- und Streuungsparameter (vgl. bspw.

Größe	Formel	$E_{\text{rel}}(\hat{\omega}_f)$ [%]		$E_{\text{rel}}(\omega_m^{(2)} - \omega_m^{(1)})$ [%]	
		$(d - 1)$ -dim.	dim.-adaptiv	$(d - 1)$ -dim.	dim.-adaptiv
Maximalwert	$\max_{\{i=1, \dots, N\}} E_i$	87	31	> 100	76
Mittelwert	$\bar{E} = \frac{1}{N} \sum_{i=1}^N E_i$	12	2	24	4
Mittlere absolute Abweichung	$\frac{1}{N} \sum_{i=1}^N E_i - \bar{E} $	14	3	40	7
0.75-Quantil	$F^{-1}(0.75)$	16	1	0	0
0.9-Quantil	$F^{-1}(0.9)$	34	5	28	3

Tabelle 7.4: Statistische Auswertung der $N = 1261$ Testrechnungen.

[Kohn, 2005]) der Verteilung der relativen Fehler in den Testrechnungen, wie Mittelwert und mittlere absolute Abweichung, aufgeführt. Es kann erkannt werden, dass diese bei Benutzung des dimensions-adaptiven Ansatzes im Gegensatz zum $(d - 1)$ -dimensionalen Modell deutlich reduziert werden können.

In Abb. 7.19 ist die Häufigkeitsverteilung des relativen Fehlers $E_{\text{rel}}(\omega_m^{(2)} - \omega_m^{(1)}) = E(\omega_m^{(2)} - \omega_m^{(1)}) / (\omega_m^{(2)} - \omega_m^{(1)})$ für den Sprung des Massenbruchs in Bezug auf den Sprung des Massenbruchs $(\omega_m^{(2)} - \omega_m^{(1)})$ aus dem d -dimensionalen Modell dargestellt, der in gleicher Weise wie der relative Fehler des Massenbruchs bestimmt wurde. Hier wird noch deutlicher, wie weit der relative Fehler durch die Benutzung des dimensions-adaptiven Ansatzes reduziert werden kann, da hier deut-

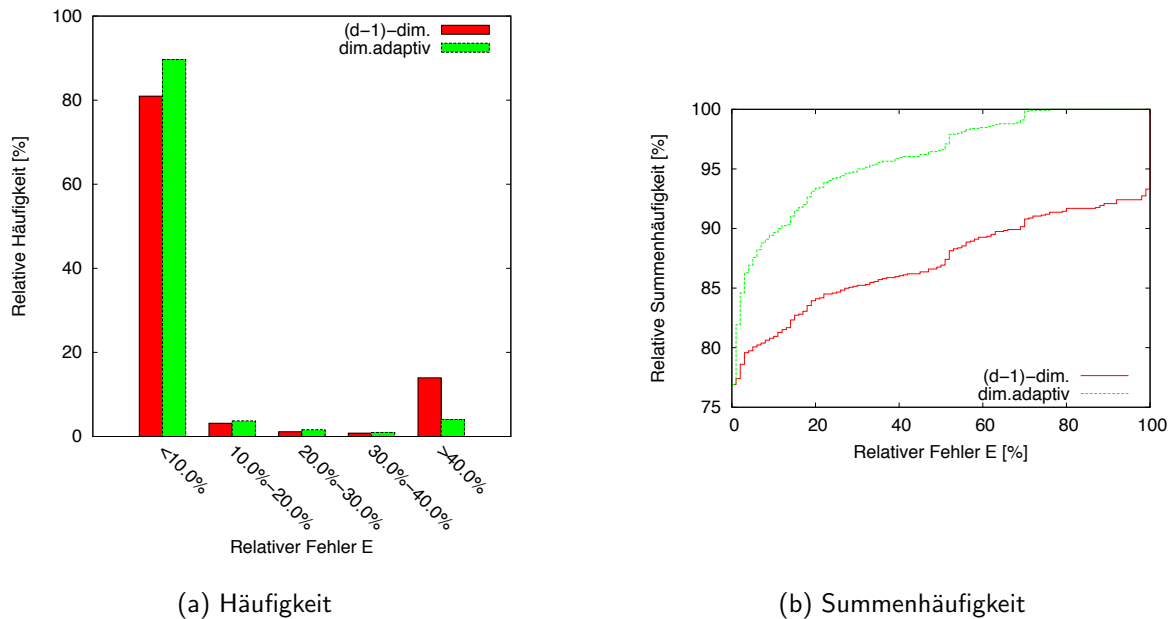


Abbildung 7.19: Prozentuale Verteilung des relativen Fehlers $E(\omega_m^{(2)} - \omega_m^{(1)})/(\omega_m^{(2)} - \omega_m^{(1)})$ der Ergebnisse für den Sprung des Massenbruchs aus den $(d - 1)$ -dimensionalen und dimensionsadaptiven Simulationen in Bezug auf den Sprung des Massenbruchs $(\omega_m^{(2)} - \omega_m^{(1)})$ aus dem d -dimensionalen Modell.

lich größere Fehler auftreten. Bei Betrachtung der relativen Summenhäufigkeiten in Abb. 7.19b sehen wir, dass bei Benutzung des $(d - 1)$ -dimensionalen Modells in 7% der betrachteten Fälle sogar ein Fehler gemacht wird, der größer als 100% ist, was einem komplett unterschiedlichen Ergebnis entspricht. Ein so großer Fehler tritt bei Benutzung des dimensionsadaptiven Modells nicht mehr auf. Dass dennoch auch mit der dimensionsadaptiven Methode in einigen wenigen Fällen ein Fehler $> 40\%$ auftritt, ist mit der im $(d - 1)$ -dimensionalen Fall nicht geometrisch aufgelösten Kluftdicke zu begründen.

Auch für den Sprung des Massenbruchs werden die statistischen Lage- und Streuungsparameter berechnet (siehe Tabelle 7.4). Beim $(d - 1)$ -dimensionalen Modell wird in 90% aller Testfälle ein relativer Fehler von maximal $F^{-1}(0.9) = 28\%$ gemacht. Bei Benutzung des dimensionsadaptiven Modells kann dies auf $F^{-1}(0.9) = 3\%$ reduziert werden.

Die Methode des dimensionsadaptiven Gitters ist zunächst nur in 2D implementiert, sodass diese Methode in 3D nicht zur Untersuchung des aufgestellten Kriteriums benutzt werden kann. Um trotzdem zumindest an einem Beispiel festmachen zu können, ob das Kriterium die richtige Aussage liefert, wird für das in Kapitel 6.2 eingeführte 3-dimensionale geklüftete Henry-Problem der Wert des Kriteriums berechnet. Dabei werden, wie auch schon in Abschnitt 7.1.2, zwei unterschiedliche Kluftdicken, $\epsilon = 0.003$ m und $\epsilon = 0.024$ m, betrachtet. In Abb. 7.20 ist nun der Verlauf des Kriteriums $\theta_{\mathcal{F}}$ für diese beiden Beispiele dargestellt. Man kann erkennen, dass das

Kriterium über die gesamte Laufzeit eine $(d - 1)$ -dimensionale Darstellung der dünneren Kluft ($\epsilon = 0.003$ m) als ausreichend ansieht. Dies steht in Übereinstimmung mit den bei den Vergleichen (vgl. Abb. 7.8) gemachten Beobachtungen, dass für diese Kluft die Ergebnisse zwischen d - und $(d - 1)$ -dimensionalem Modell sehr gut übereinstimmen. Für die dickere Kluft ($\epsilon = 0.024$ m) empfiehlt das Kriterium über die gesamte Laufzeit eine volle d -dimensionale Auflösung der Kluft, was ebenfalls in Übereinstimmung steht mit den Vergleichen (Abb. 7.9), die starke Abweichungen der $(d - 1)$ -dimensionalen von den d -dimensionalen Ergebnissen gezeigt haben. Es

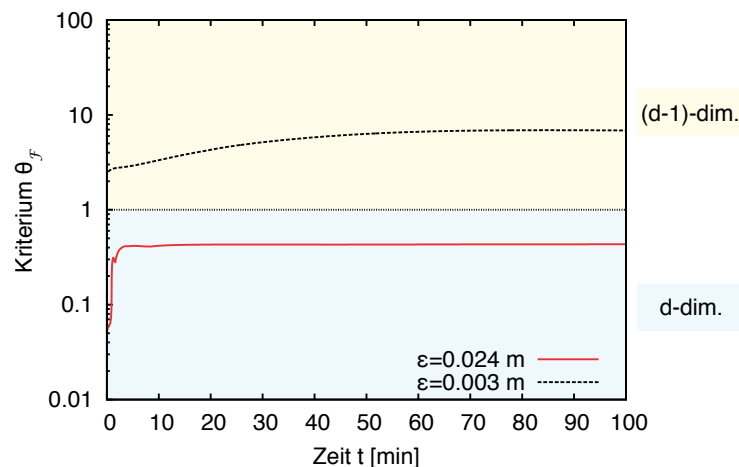


Abbildung 7.20: Kriterium für das geklüftete Henry-Problem in 3D (Abb. 6.8) mit den Kluftdicken $\epsilon = 0.003$ m und $\epsilon = 0.024$ m.

wird also deutlich, dass das Kriterium auch in 3D für die betrachteten Beispiele die richtige Aussage trifft.

8 Diskussion

In der vorliegenden Arbeit wurde die Modellierung und Simulation von Dichte-getriebenen Grundwasserströmungen in geklüftet porösen Medien untersucht. Da die Klüfte bevorzugte Transportwege darstellen und damit einen großen Einfluss auf die Grundwasserströmung haben, ist die Simulation von geklüfteten Medien besonders wichtig. Dies ist z.B. im Hinblick auf Sicherheitsanalysen von Endlagerstätten von großer Bedeutung. Allerdings weist die Modellierung und Simulation der Strömung in geklüfteten Medien numerisch große Schwierigkeiten auf, da das Problem sowohl eine große Anisotropie durch die Geometrie der Klüfte, als auch große Heterogenitäten durch die schnelle Änderung der Parameter auf kleinem Raum beinhaltet.

In dieser Arbeit wurden beispielhaft für eine Einzelkluft Methoden entwickelt, die diese Schwierigkeiten beheben. Dabei wurde insbesondere die Auflösung des Problems diskutiert. So fordert die kleine Breite der Klüfte im Vergleich zu ihrer Länge und zu der Größe des gesamten zu betrachtenden Systems eine Auflösung über mehrere Größenskalen. Eine solche Auflösung ist jedoch stets auch mit enormen Speicher- und Rechenaufwand verbunden. Einen vielfach genutzten Ansatz stellen deswegen Modelle dar, in denen die Klüfte als $(d - 1)$ -dimensionale Medien approximiert werden. Dabei sind viele unterschiedliche Herangehensweisen verbreitet, wie beispielsweise die Betrachtung der Klüfte als Interfaces (vgl. u.a. [Martin et al., 2005]). In dieser Arbeit wurde ein Modell gewählt (vgl. u.a. [Grillo et al., 2010b]), in dem die Kluff durch ein poröses Medium dargestellt ist und Modellgleichungen analog zu denen im umgebenden Medium gelten (s. Kapitel 2.2.3). Trotz der numerischen Vorteile, die durch eine $(d - 1)$ -dimensionale Approximation gewonnen werden, muss die Approximation stets von hoher Qualität sein. Deswegen wurde in dieser Arbeit zusätzlich ein zweiter Ansatz gewählt, in dem die Klüfte voll aufgelöst betrachtet werden.

Im Laufe dieser Arbeit wurden zunächst Vergleiche angestellt um die Unterschiede zwischen $(d - 1)$ - und d -dimensionalen Rechnungen zu untersuchen (vgl. Kapitel 7.1). Dabei hat sich gezeigt, dass für sehr dünne Klüfte, die Ergebnisse meist zufriedenstellend übereinstimmen, bei dicker werdenden Klüften jedoch immer größere Unterschiede festzustellen waren. Weiterhin wurde auch die Beobachtung gemacht, dass es in dickeren Klüften aufgrund von Dichteunterschieden zu Wirbelbildungen kommen kann (vgl. Kapitel 6.1.3), die das Strömungsverhalten enorm beeinflussen und so zu großen Abweichungen des $(d - 1)$ -dimensionalen vom d -dimensionalen Ergebnis führen.

Aufbauend auf den gemachten Beobachtungen wurde ein Kriterium gesucht, das die Gültigkeit des $(d - 1)$ -dimensionalen Modells angeben soll. Dazu wurde in Gleichung (7.2) eine die Strömung charakterisierende Größe θ_f eingeführt, die angibt, ob sichtbare Verwirbelungen oder Strömungswalzen in der Kluff auftreten können oder nicht. Da das Auftreten von Wirbeln aufgrund der gemachten Beobachtungen als eine Hauptursache der Abweichungen der $(d - 1)$ -dimensionalen von den d -dimensionalen Ergebnissen angesehen wird, wurde ein Kriterium aufgestellt, das abhängt von der Dicke der Kluff, dem Verhältnis der Permeabilität in Kluff und Medium, dem Massenbruch in der Kluff und dem Verhältnis der Strömungsgeschwindigkeit in der Kluff zu ihrer Rotation. Dieses wurde anhand von vielfältigen Testrechnungen evaluiert (s. Kapitel 7.2.3).

Mit Hilfe des Kriteriums konnte außerdem eine dimensions-adaptive Methode eingeführt wer-

den (vgl. Kapitel 4.3.2), die während der Laufzeit der Simulation überprüft, ob eine $(d - 1)$ -dimensionale Rechnung ausreicht oder ob eine volle Auflösung der Kluft für genauere Ergebnisse benötigt wird. Abhängig von der Größe des Kriteriumswerts θ_f wählt die Methode das Modell und damit eine d - oder eine $(d - 1)$ -dimensionale Darstellung der Kluft. So kann, wie in Kapitel 7.2.2 an einigen Beispielen gezeigt wurde, effektiv Rechenzeit eingespart werden. Gleichzeitig ist sichergestellt, dass der gemachte Fehler stets klein genug ist.

Es mag die Frage aufkommen, ob auch ein Kriterium zu bestimmen ist, das nicht von den aktuellen Strömungsverhältnissen abhängt und so bereits vor einer Rechnung indizieren kann, ob eine Kluft aufgelöst werden sollte oder nicht. Allerdings scheint es zunächst zweifelhaft, ob ein solches Kriterium überhaupt möglich ist, da die aktuellen Strömungsverhältnisse einen entscheidenden Einfluss darauf haben, was in der Kluft passiert. Zudem darf angezweifelt werden, ob ein solches Kriterium tatsächlich zu effektiverer Berechnung der Strömung in geklüfteten Medien beitragen kann, da durchaus auch Klüfte aufgelöst werden müssten, die von ihrer Beschaffenheit Verwirbelungen erlauben würden, in denen jedoch tatsächlich nichts passiert, da sie durch die Strömung nie erreicht werden.

Unter diesen Gesichtspunkten scheint das hier aufgestellte Kriterium kombiniert mit der eingeführten dimensions-adaptiven Simulationsmethode eine sehr effektive und gute Herangehensweise für die Betrachtung von geklüftet porösen Medien darzustellen.

Abbildungsverzeichnis

2.1	Approximation der Reibungskraft	17
2.2	Schema einer planaren d -dimensionalen Kluft im Mittelungsprozess.	18
3.1	Diskretisierungs-Gitter	27
3.2	Möglichkeiten des Mehrgitterzyklus: V- und W-Zyklus	35
4.1	Nummerierung der Gitterknoten bei $(d - 1)$ -dimensionalen Klüften	42
5.1	Niederdimensionale Kluftdarstellung	52
5.2	Verfeinerung von Klüften in 2D	55
5.3	Verfeinerung degenerierter Elemente	56
5.4	Gittertransfer: Verlauf in der Kluft	63
5.5	Elemente einer Kluftkreuzung	66
5.6	Geometrie-Erzeugung mit Blender	67
5.7	Geometrie-Erzeugung mit ProMesh	68
6.1	Geometrie und Randbedingungen für das geklüftete Henry-Problem	69
6.2	Geklüftetes Henry-Problem: Einfluss der Geometrie, Konzentration	71
6.3	Geklüftetes Henry-Problem: Einfluss der Kluft-Dicke ("unten")	73
6.4	Geklüftetes Henry-Problem: Einfluss der Kluft-Dicke ("oben")	74
6.5	Geklüftetes Henry-Problem: Wirbelstärke	76
6.6	Geklüftetes Henry-Problem: Einfluss des Forchheimer-Koeffizienten auf den Massenbruch	77
6.7	Geklüftetes Henry-Problem: Einfluss des Forchheimer-Koeffizienten auf die Wirbelstärke	78
6.8	Geometrie und Randbedingungen für das geklüftete Henry-Problem in 3D	78
6.9	Geklüftetes Henry-Problem 3D ($\epsilon = 0.024$ m): Wirbelstärke (1)	79
6.10	Geklüftetes Henry-Problem 3D ($\epsilon = 0.024$ m): Wirbelstärke (2)	80
6.11	Geklüftetes Henry-Problem 3D ($\epsilon = 0.024$ m): Stromlinien (1)	81
6.12	Geklüftetes Henry-Problem 3D ($\epsilon = 0.024$ m): Stromlinien (2)	81
6.13	Geklüftetes Henry-Problem 3D ($\epsilon = 0.003$ m): Wirbelstärke	82
6.14	Geometrie und Randbedingungen für das geklüftete Elder-Problem	83
6.15	Geklüftetes Elder-Problem: Einfluss der Geometrie	85
7.1	Geklüftetes Henry-Problem: Vergleich d - und $(d - 1)$ -dimensional	88
7.2	Vergleich d - und $(d - 1)$ -dim.: Massenbruch (Henry-Problem)	89
7.3	Vergleich d - und $(d - 1)$ -dim.: Druck (Henry-Problem)	90
7.4	Vergleich d - und $(d - 1)$ -dim.: Gitterabhängigkeit (Henry-Problem)	90
7.5	Vergleich d - und $(d - 1)$ -dim.: Sprung des Massenbruchs (Henry-Problem)	92
7.6	Vergleich d - und $(d - 1)$ -dim.: Sprung des Drucks (Henry-Problem)	93
7.7	Geklüftetes Henry-Problem in 3D: Vergleich d - und $(d - 1)$ -dimensional	94
7.8	Vergleich d - und $(d - 1)$ -dim.: Massenbruch (Henry-Problem 3D)	94
7.9	Vergleich d - und $(d - 1)$ -dim.: Sprung des Massenbruchs (Henry-Problem 3D)	95
7.10	Geklüftetes Elder-Problem: Vergleich d - und $(d - 1)$ -dimensional	95
7.11	Vergleich d - und $(d - 1)$ -dim.: Massenbruch (Elder-Problem)	96
7.12	Vergleich d - und $(d - 1)$ -dim.: Einfluss Parameter (Henry-Problem)	98

7.13	Gittertransfer Geklüftetes Henry-Problem	101
7.14	Kriterium und Reynolds-Zahl (Henry-Problem)	102
7.15	Modifiziertes Test-Problem	102
7.16	Gittertransfer Modifiziertes Test-Problem	103
7.17	Geometrie für das allgemeine Test-Problem	105
7.18	Relativer Fehler Massenbruch: $(d - 1)$ -dim. und dim.-adaptiv	108
7.19	Relativer Fehler Sprung des Massenbruchs: $(d - 1)$ -dim. und dim.-adaptiv	110
7.20	Kriterium (Henry-Problem 3D)	111

Tabellenverzeichnis

6.1	Parameter für die Simulation des Henry-Problems.	70
6.2	Parameter-Paare für den Forchheimer Koeffizienten	77
6.3	Parameter für die Simulation des thermohalinen Elder-Problems.	84
7.1	Parameter für die Simulation des allgemeinen Test-Problems.	106
7.2	Variation des Winkels ψ der Kluft zur Gravitation.	106
7.3	Variation des Einflusses $q_{\alpha n}$	106
7.4	Statistische Auswertung.	109

Literatur

- [Ble,] <http://www.blender.org/>. [Online; aufgerufen am 02.01.2012].
- [Ackerer et al., 1999] Ackerer, P., Younes, A., und Mose, R. (1999). Modeling variable density flow and solute transport in porous medium: 1. Numerical model and verification. *Transport in Porous Media*, 35(3):345–373.
- [Adler und Thovert, 1999] Adler, P. M. und Thovert, J.-F. (1999). *Fractures and fracture networks*, Band 15. Springer.
- [Angot et al., 2009] Angot, P., Boyer, F., und Hubert, F. (2009). Asymptotic and numerical modelling of flow in fractured porous media. *ESAIM: M2AN. Mathematical Modelling and Numerical Analysis*, 43:239–275.
- [Avila et al., 2011] Avila, K., Moxey, D., de Lozar, A., Avila, M., Barkley, D., und Hof, B. (2011). The onset of turbulence in pipe flow. *Science*, 333(6039):192–196.
- [Bank und Rose, 1987] Bank, R. und Rose, D. (1987). Some error-estimates for the box method. *SIAM Journal on Numerical Analysis*, 24:777–787.
- [Bank et al., 1983] Bank, R., Sherman, A., und Weiser, A. (1983). Refinement algorithms and data structures for regular mesh refinement. In *Scientific Computing: 10. IMACS World Conference on System Simulation and Scientific Computation*, Seiten 3–17, North-Holland: Amsterdam.
- [Barenblatt et al., 1960] Barenblatt, G., Zheltov, I., und Kochina, I. (1960). Basic concepts in the theory of homogeneous liquids in fractured rocks. *J. Appl. Math. Mech.*, 24:1286–1303.
- [Barrett et al., 1993] Barrett, R., Berry, M., Chan, T. F., Demmel, J., Donato, J., Dongarra, J., Eijkhout, V., Pozo, R., Romine, C., und van der Vorst, H. (1993). *Templates for the solution of linear systems: building blocks for iterative methods*. SIAM, Philadelphia, PA.
- [Bastian et al., 2000a] Bastian, P., Birken, K., Johannsen, K., Lang, S., Reichenberger, V., Wieners, C., Wittum, G., und Wrobel, C. (2000a). Parallel solution of partial differential equations with adaptive multigrid methods on unstructured grids. In Jäger, W. und Krause, E., Herausgeber, *High performance computing in science and engineering*, Seiten 506–519, Berlin. Springer.
- [Bastian et al., 2000b] Bastian, P., Chen, Z., Ewing, R. E., Helmig, R., Jakobs, H., und Reichenberger, V. (2000b). Numerical simulation of multiphase flow in fractured porous media. In Chen, Z. und et al., Herausgeber, *Numerical treatment of multiphase flows in porous media. Proceedings of the international workshop, Beijing, China, August 2–6, 1999.*, Band 552 von *Lect. Notes Phys.*, Seiten 50–68, Berlin. Springer.

- [Bastian und Wittum, 1994] Bastian, P. und Wittum, G. (1994). Adaptive Multigrid Methods: The UG concept. In W. Hackbusch; G. Wittum, Herausgeber, *Adaptive Methods - Algorithms, Theory and Applications (Proceedings of the 9th GAMM Seminar Kiel)*, Band 46 von *Notes on Numerical Fluid Mechanics*. Vieweg.
- [Bear, 1972] Bear, J. (1972). *Dynamics of fluid in Porous Media*. Dover Publications, INC. New York.
- [Bear, 1977] Bear, J. (1977). On the aquifer's integrated balance equations. *Adv. Water Resour.*, 1(1):15–23.
- [Bear, 1979] Bear, J. (1979). *Hydraulics of Groundwater*. Dover Publications. Inc., Mineola.
- [Bear und Bachmat, 1990] Bear, J. und Bachmat, Y. (1990). *Introduction to Modeling of Transport Phenomena in Porous Media*. Kluwer Academic Publishers, Dordrecht, Boston, London.
- [Bear et al., 1993] Bear, J., Tsang, C.-F., und deMarsily, G. (1993). *Flow and contaminant transport in fractured rocks*. Academic Press, Inc., New York.
- [Bennethum und Giorgi, 1997] Bennethum, L. S. und Giorgi, T. (1997). Generalized Forchheimer Equation for Two-Phase Flow Based on Hybrid Mixture Theory. *Transport in Porous Media*, 26:261–275.
- [Berkowitz, 1989] Berkowitz, B. (1989). Boundary conditions along permeable fracture walls: Influence on flow and conductivity. *Water Resources Research*, 25(8):1919–1922.
- [Berkowitz, 2002] Berkowitz, B. (2002). Characterizing flow and transport in fractured geological media: A review. *Advances in Water Resources*, 25(8-12):861 – 884.
- [Bey, 1998] Bey, J. (1998). *Finite-Volumen- und Mehrgitter-Verfahren für elliptische Randwertprobleme*. Advances in numerical mathematics. Teubner, Stuttgart [u.a.].
- [Birken, 1998] Birken (1998). *Ein Modell zur effizienten Parallelisierung von Algorithmen auf komplexen, dynamischen Datenstrukturen*. Dissertation, Universität Stuttgart.
- [Bogdanov et al., 2003] Bogdanov, I., Mourzenko, V., Thovert, J.-F., und Adler, P. (2003). Effective permeability of fractured porous media in steady state flow. *Water Resources Research*, 39(1):1023.
- [Boussinesq, 1903] Boussinesq (1903). *Theorie analytique de la chaleur*, Band 2. Paris.
- [Brinkman, 1947] Brinkman, H. (1947). A calculation of the viscous force exerted by a flowing fluid on a dense swarm of particles. *Appl. Sci. Res.*, A1:27–34.
- [Busch et al., 1993] Busch, K.-F., Luckner, L., und Tiemer, K. (1993). *Geohydraulik*. Gebrüder Borntraeger, Berlin, Stuttgart, 3. Auflage.

-
- [Cacas et al., 1990] Cacas, M. C., Ledoux, E., de Marsily, G., Tillie, B., Barbreau, A., Durand, E., Feuga, B., und Peaudecerf, P. (1990). Modeling fracture flow with a stochastic discrete fracture network: calibration and validation: 1. The flow model. *Water Resources Research*, 26(3):479–489.
- [D'Angelo und Scotti, 2012] D'Angelo, C. und Scotti, A. (2012). A mixed finite element method for darcy flow in fractured porous media with non-matching grids. *ESAIM: Mathematical Modelling and Numerical Analysis*, 46(02):465–489.
- [Darbyshire und Mullin, 1995] Darbyshire, A. und Mullin, T. (1995). Transition to turbulence in constant-mass-flux pipe flow. *Journal of Fluid Mechanics*, 289:83–114.
- [Darcy, 1856] Darcy, H. (1856). *Les Fontaines Publiques de la Ville de Dijon*. Victor Dalmond.
- [Deuflhard und Hohmann, 2002] Deuflhard, P. und Hohmann, A. (2002). *Numerische Mathematik*. de Gruyter, Berlin [u.a.], 3. Auflage.
- [Diersch und Kolditz, 1998] Diersch, H.-J. und Kolditz, O. (1998). Coupled groundwater flow and transport: 2. Thermohaline and 3D convection systems. *Advances in Water Resources*, 21(5):401–425.
- [Diersch und Kolditz, 2005] Diersch, H.-J.-G. und Kolditz, O. (2005). Variable-density flow and transport in porous media: approaches and challenges. In *Wasy Software FEFLOW© - Finite Element Subsurface flow and Transport Simulation System*, Band 2. Wasy GmbH.
- [Dietrich et al., 2005] Dietrich, P., Helmig, R., Hötzl, H., Köndeter, J., und Teutsch, G. (2005). *Flow and Transport in Fractured Porous Media*. Springer, Berlin.
- [Douglas und Arbogast, 1990] Douglas, J. und Arbogast, T. (1990). Dual porosity models for flow in naturally fractured reservoirs. in: *Dynamics of Fluids in Hierarchical Porous Media*. Academic Press, Inc., San Diego, California., Seiten 177–221.
- [Eberhardt und Wittum, 2005] Eberhardt, J. und Wittum, G. (2005). A Coarsening multigrid method for flow in heterogenous porous media. In Engquist, B. and Lötstedt, P. and Runborg, O., Herausgeber, *Multiscale Methods in Science and Engineering*, Lecture Notes in Computational Science and Engineering 44, Seiten 113–134. Springer, Berlin, Heidelberg.
- [Elder, 1967a] Elder, J. (1967a). Steady free convection in a porous medium heated from below. *J. Fluid Mech.*, 27:29–48.
- [Elder, 1967b] Elder, J. (1967b). Transient convection in a porous medium. *J. Fluid Mech.*, 27:609–623.
- [Eringen, 1980] Eringen, A. C. (1980). *Mechanics of Continua*. John Wiley and Sons Inc., New York.

- [Faisst und Eckhardt, 2004] Faisst, H. und Eckhardt, B. (2004). Sensitive dependence on initial conditions in transition to turbulence in pipe flow. *Journal of Fluid Mechanics*, 504:343–352.
- [Fein, 1999a] Fein (1999a). *d3f - A Simulator for Density Driven Flow. User's Manual*. GRS, Braunschweig.
- [Fein, 1999b] Fein, E. (1999b). Ein Programmpaket zur Modellierung von Dichteströmungen. *GRS, Braunschweig*, 139.
- [Feuchter, 2008] Feuchter, D. (2008). *Geometrie- und Gittererzeugung für anisotrope Schichtengebiete*. Dissertation, Universität Heidelberg.
- [Fletcher, 1976] Fletcher, R. (1976). Conjugate gradient methods for indefinite systems. In Watson, G., Herausgeber, *Numerical Analysis*, Band 506 von *Lecture Notes in Mathematics*, Seiten 73–89. Springer Berlin / Heidelberg. 10.1007/BFb0080116.
- [Forchheimer, 1901] Forchheimer, P. (1901). Wasserbewegung durch Boden. *Zeits. Ver. deutsch. Ing.*, 45:1781–1788.
- [Froh et al., 2008] Froh, N., Roberts, J., und Saada, A. (2008). Modeling fractures as interfaces: a model for forchheimer fractures. *Computational Geosciences*, 12(1):91–104.
- [Frolkovič, 1998a] Frolkovič, P. (1998a). Consistent velocity approximation for density driven flow and transport. In Van Keer, R. und at al., Herausgeber, *Advanced Computational Methods in Engineering, Part 2: Contributed papers*, Seiten 603–611, Maastricht. Shaker Publishing.
- [Frolkovič, 1998b] Frolkovič, P. (1998b). Maximum principle and local mass balance for numerical solutions of transport equation coupled with variable density flow. *Acta Mathematica Universitatis Comenianae*, 1(68):137–157.
- [Frolkovič und Knabner, 1996] Frolkovič, P. und Knabner, P. (1996). Consistent velocity approximations in finite element or volume discretizations of density driven flow. In Aldama, A.A., et al., Herausgeber, *Computational Methods in Water Resources XI*, Seiten 93–100, Southhampton. Computational Mechanics Publication.
- [Frolkovič et al., 1997] Frolkovič, P., Knabner, P., Tapp, C., und Thiele, K. (1997). Adaptive finite volume discretization of density driven flows in porous media. In *Transport de Contaminants en Milieux Poreux Support de Cours, CEA-EDF-INRIA, INRIA*, Seiten 322–355.
- [Fumagalli und Scotti, 2011] Fumagalli, A. und Scotti, A. (2011). Numerical modelling of multiphase subsurface flow in the presence of fractures. *Communications in Applied and Industrial Mathematics*.
- [Fumagalli und Scotti, 2012] Fumagalli, A. und Scotti, A. (2012). An unfitted method for two-phase flow in fractured porous media. In *XIX International Conference on Water Resources CMWR*, University of Illinois at Urbana-Champaign.

-
- [Gordner et al., 2007] Gordner, A., Naegele, S., und Wittum, G. (2007). Multigrid methods for large-eddy simulation. In Jaeger, W., Rannacher, R., und Warnatz, J., Herausgeber, *Reactive Flows, Diffusion and Transport*, Seiten 375–396. Springer Berlin Heidelberg.
- [Graf und Degener, 2011] Graf, T. und Degener, L. (2011). Grid convergence of variable-density flow simulations in discretely fractured porous media. *Advances in Water Resources*, 34:760–769.
- [Graf und Therrier, 2005] Graf, T. und Therrier, R. (2005). Variable-density Groundwater Flow and Solute Transport in Porous Media Containing Nonuniform Discrete Fractures. *Adv. Water Resour.*, 28:1351–1367.
- [Graf und Therrier, 2007] Graf, T. und Therrier, R. (2007). Variable-density Groundwater Flow and Solute Transport in Irregular 2D Fracture Networks. *Adv. Water Resour.*, 30:455–468.
- [Graf und Therrier, 2009] Graf, T. und Therrier, R. (2009). Stable-unstable flow of geothermal fluids in fractured rock. *Geofluids*, 9:138–152.
- [Gratwohl, 1998] Gratwohl, P. (1998). *Diffusion in natural porous media: Contaminant transport, sorption/desorption and dissolution kinetics*. Kluwer Academic Publishers.
- [Grillo et al., 2012] Grillo, A., Lampe, M., Logashenko, D., Stichel, S., und Wittum, G. (2012). Simulation of salinity- and thermohaline-driven flow in fractured porous media. *Journal of Porous Media*, 15(5):439–458.
- [Grillo et al., 2010a] Grillo, A., Lampe, M., und Wittum, G. (2010a). Three-dimensional simulation of the thermohaline-driven buoyancy of a brine parcel. *Computing and Visualization in Science*, 13(6):287–297.
- [Grillo et al., 2011] Grillo, A., Lampe, M., und Wittum, G. (2011). Modelling and Simulation of temperature-density-driven flow and thermodiffusion in porous media. *Journal of Porous Media*, 14(8):671–690.
- [Grillo et al., 2010b] Grillo, A., Logashenko, D., Stichel, S., und Wittum, G. (2010b). Simulation of density-driven flow in fractured porous media. *Advances in Water Resources*, 33(12):1494 – 1507.
- [Grillo et al., 2013] Grillo, A., Logashenko, D., Stichel, S., und Wittum, G. (2013). Forchheimer corrections in modelling flow and transport in fractured porous media. *Comput. Vis. Sci.* Angenommen.
- [Grisak und Pickens, 1980] Grisak, G. und Pickens, J. F. (1980). Solute transport through fractured media. *Water Resources Research*, 16(4):719–730.
- [Grisak und Pickens, 1981] Grisak, G. und Pickens, J. F. (1981). An analytic solution for solute transport through fractured media with matrix diffusion. *Journal of Hydrology*, 52:47–57.

- [Hackbusch, 1985] Hackbusch, W. (1985). *Multi-Grid Methods and Applications*. Springer, Berlin.
- [Hackbusch, 1989] Hackbusch, W. (1989). On first and second order box schemes. *Computing*, 41:277–296. 10.1007/BF02241218.
- [Hackbusch, 1993] Hackbusch, W. (1993). *Iterative Lösung großer schwachbesetzter Gleichungssysteme*. Teubner.
- [Hackbusch, 1996] Hackbusch, W. (1996). *Theorie und Numerik elliptischer Differentialgleichungen*. Teubner.
- [Hairer und Wanner, 1996] Hairer, E. und Wanner, G. (1996). *Solving ordinary differential equations II. Stiff and differential algebraic problems*, Band 14 von *Springer series in computational mathematics*. Springer, Berlin, 2. Auflage.
- [Hassanizadeh, 1986] Hassanizadeh, S. M. (1986). Derivation of basic equations of mass transport in porous media, Part 2. Generalized Darcy's and Fick's laws. *Adv. Water Resour.*, 9:207–222.
- [Hassanizadeh und Gray, 1988] Hassanizadeh, S. M. und Gray, W. G. (1988). Reply to comments by Barak on "High velocity flow in porous media". *Transport in Porous Media*, 25(3):319–321.
- [Henry, 1964] Henry, H. R. (1964). Effects of dispersion on salt encroachment in coastal aquifers. In *Sea water in coastal aquifers*, Seiten 70–84. USGS Water Supply Paper 1613-c.
- [Hestenes und Stiefel, 1952] Hestenes, M. R. und Stiefel, E. (1952). Methods of Conjugate Gradients for Solving Linear Systems. *Journal of Research of the National Bureau of Standards*, 49(6):409–436.
- [Holstad, 2001] Holstad, A. (2001). Temperature-driven flow in porous media using a Mixed Finite Element Method and Finite Volume Method. *Adv. Water Resour.*, 24(8):843–862.
- [Hölting, 1996] Hölting, B. (1996). *Hydrogeologie: Einführung in die allgemeine und angewandte Hydrogeologie*. Enke, 5 Auflage.
- [Hoteit und Firoozabadi, 2008] Hoteit, H. und Firoozabadi, A. (2008). An efficient numerical model for incompressible two-phase flow in fractured media. *Advances in Water Resources*, 31(6):891–905.
- [Ikeda, 1983] Ikeda, T. (1983). *Maximum principle in finite element models for convection-diffusion phenomena*, Band 4 von *Lecture notes in numerical and applied analysis*. North-Holland, Amsterdam [u.a.].
- [Johannsen, 2002] Johannsen, K. (2002). The Elder problem - Bifurcations and steady state solutions. In Hassanizadeh, S.M., et al., Herausgeber, *Computational Methods in Water Resources*, Band 47(1), Seiten 485–492.

-
- [Johannsen, 2003] Johannsen, K. (2003). On the validity of the Boussinesq approximation for the Elder problem. *Comput. Geosci.*, 7(3):169–182.
- [Johannsen, 2004] Johannsen, K. (2004). *Numerische Aspekte dichtegetriebener Strömung in porösen Medien*. Habilitationsschrift, Universität Heidelberg.
- [Johannsen et al., 2002] Johannsen, K., Kinzelbach, W., Oswald, S., und Wittum, G. (2002). The saltpool benchmark problem - numerical simulation of saltwater upconing in a porous medium. *Advances in Water Resources*, 25(3):335–348.
- [Johannsen et al., 2006] Johannsen, K., Oswald, S., Held, R., und Kinzelbach, W. (2006). Numerical simulation of three-dimensional saltwater-freshwater fingering instabilities observed in a porous medium. *Advances in Water Resources*, 29(11):1690–1704.
- [Kinzelbach und Rausch, 1995] Kinzelbach, W. und Rausch, R. (1995). *Grundwassermodellierung - Eine Einführung mit Beispielen*. Borntraeger Verlag Stuttgart.
- [Kobus et al., 1996] Kobus, H., Barczewski, B., und Koschitzky, H.-P., Herausgeber (1996). *Groundwater and Subsurface Remediation*. Environmental Engineering. Springer, Berlin.
- [Kohl et al., 1997] Kohl, T., Evans, K. F., Hopkirk, R. J., Jung, R., und Rybach, L. (1997). Observation and simulation of non-darcian flow transients in fractured rock. *Water Resour. Res.*, 33(3):407–418.
- [Kohn, 2005] Kohn, W. (2005). *Statistik*. Statistik und ihre Anwendungen. Springer, Berlin, Heidelberg.
- [Kolditz, 1997] Kolditz, O. (1997). *Strömung, Stoff- und Wärmetransport im Kluftgestein*. Gebr. Borntraeger, Berlin Stuttgart.
- [Kolditz et al., 1998] Kolditz, O., Ratke, R., Diersch, H.-J. G., und Zielke, W. (1998). Coupled groundwater flow and transport: 1. Verification of variable density flow and transport models. *Advances in Water Resources*, 21(1):27 – 46.
- [Kröhn, 1991] Kröhn, K.-P. (1991). *Simulation von Transportvorgängen im klüftigen Gestein mit der Methode der Finiten Elemente*. Dissertation, Institut für Strömungsmechanik, Universität Hannover.
- [Lang und Wittum, 2005] Lang, S. und Wittum, G. (2005). Large-scale density-driven flow simulations using parallel unstructured Grid adaptation and local multigrid methods. *Concurrency Computat.: Pract. Exper.*, 17:1415–1440.
- [Langguth und Voigt, 2004] Langguth, H.-R. und Voigt, R., Herausgeber (2004). *Hydrogeologische Methoden*. Springer, Berlin; Heidelberg [u.a.], 2. Auflage.
- [Lemke et al., 2013] Lemke, B., Frolkovič, P., Logashenko, D., Muha, I., Nägel, A., Paech, B., Vogel, A., Wehner, C., und Wittum, G. (2013). The Software System UG3 for the Simulation of PDE-Based Models. *Comput. Vis. Sci.* In Vorbereitung.

- [Logashenko et al., 2006] Logashenko, D., Fischer, T., Motz, S., Gilles, E., und Wittum, G. (2006). Simulation of crystal growth and attrition in a stirred tank. *Computing and Visualization in Science*, 9:175–183. 10.1007/s00791-006-0031-z.
- [Long et al., 1982] Long, J. C. S., Remer, J., Wilson, C., und Witherspoon, P. (1982). Porous media equivalents for networks of discontinuous fractures. *WRR*, 18(3).
- [Louis, 1967] Louis, C. (1967). *Strömungsvorgänge in klüftigen Medien und ihre Wirkung auf die Standsicherheit von Bauwerken und Böschungen im Fels*. Dissertation, Universität Karlsruhe.
- [Martin et al., 2005] Martin, J., Jaffre, J., und Roberts, J. E. (2005). Modeling fractures and barriers as interfaces for flow in porous media. *Siam J. Sci. Comput.*, 26(5):1667–1691.
- [Martinez-Landa und Carrera, 2006] Martinez-Landa, L. und Carrera, J. (2006). A methodology to interpret cross-hole tests in a granite block. *Journal of Hydrogeology*, 325(1-4):222–240.
- [Meister, 2011] Meister, A. (2011). *Numerik linearer Gleichungssysteme*. Vieweg+Teubner Verlag / Springer Fachmedien Wiesbaden GmbH, Wiesbaden. 4., überarbeitete Auflage.
- [Michev, 1996] Michev, I. D. (1996). *Finite Volume and Finite Volume Element Methods for Nonsymmetric Problems*. Dissertation, Texas A&M Univ., Inst. for Scientific Computation, 612 Blocker, College Station, Texas 77843-3404, USA.
- [Muha und Queisser, 2013] Muha, I. und Queisser, G. (2013). Asynchronous and adaptive multigrid-level control in parameter estimation methods. *Siam Journal of Numerical Analysis*. In Vorbereitung.
- [Murphy, 1979] Murphy, H. D. (1979). Convective Instabilities in Vertical Fractures and Faults. *Journal of Geophysical Research*, 84:6121–6130.
- [Nägel, 2010] Nägel, A. (2010). *Schnelle Löser für große Gleichungssysteme mit Anwendungen in der Biophysik und den Lebenswissenschaften*. Dissertation, Universität Heidelberg.
- [National Research Council, 1996] National Research Council (1996). *Rock Fractures and Fluid Flow: Contemporary Understanding and Applications*. National Academy Press, Washington, DC.
- [Neumann, 2005] Neumann, S. (2005). Trends, prospects and challenges in quantifying flow and transport through fractured rocks. *Hydrogeology J.*, 13:124–147.
- [Neunhäuserer, 2003] Neunhäuserer, L. (2003). *Diskretisierungsansätze zur Modellierung von Strömungs- und Transportprozessen in geklüftet-porösen Medien*. Dissertation, Universität Stuttgart.
- [Neuss et al., 2001] Neuss, N., Jäger, W., und Wittum, G. (2001). Homogenization and multigrid. *Computing*, 66(1):1–26.

-
- [Oberbeck, 1879] Oberbeck, A. (1879). Über die Wärmeleitung der Flüssigkeiten bei Berücksichtigung der Strömungen infolge von Temperaturdifferenzen. *Annalen der Physik*, 243(6):271–292.
- [Oldenburg und Pruess, 1995] Oldenburg, C. M. und Pruess, K. (1995). Dispersive transport dynamics in a strongly coupled groundwater-brine flow system. *Water Resources Research*, 31(2):289–302.
- [Oldenburg und Pruess, 1998] Oldenburg, C. M. und Pruess, K. (1998). Layered Thermohaline Convection in Hypersaline Geothermal Systems. *Transport in Porous Media*, 33:29–63.
- [Patankar, 1980] Patankar, S. V. (1980). *Numerical heat transfer and fluid flow*. Series in computational and physical processes in mechanics and thermal sciences. Hemisphere Publ. Corp. ; Routledge, New York [u.a.].
- [Qian et al., 2005] Qian, J., Zhan, H., Zhao, W., und Sun, F. (2005). Experimental study of turbulent unconfined groundwater flow in a single fracture. *Journal of Hydrology*, 311:134–142.
- [Reichenberger et al., 2006] Reichenberger, V., Jakobs, H., Bastian, P., und Helmig, R. (2006). A mixed-dimensional finite volume method for two-phase flow in fractured porous media. *Advances in Water Resources*, 29(7):1020 – 1036.
- [Reiter, 2008] Reiter, S. (2008). Glatte Randapproximation in hierarchischen Gittern. Diplomarbeit, Universität Heidelberg.
- [Reiter, 2014] Reiter, S. (2014). *Algorithmen und Datenstrukturen für die effiziente Implementierung von unstrukturierten hierarchischen Gittern für massiv parallele Systeme*. Dissertation, Universität Frankfurt. In Vorbereitung.
- [Reiter et al., 2013a] Reiter, S., Logashenko, D., Grillo, A., und Wittum, G. (2013a). Preparation of grids for simulations of groundwater flow in fractured porous media. *Comput. Vis. Sci.* Eingereicht.
- [Reiter et al., 2013b] Reiter, S., Logashenko, D., Stichel, S., Wittum, G., und Grillo, A. (2013b). Models and simulations of variable-density flow in fractured porous media. *International Journal of Computational Science and Engineering*. In Druck.
- [Reiter und Wittum, 2013] Reiter, S. und Wittum, G. (2013). Promesh - a flexible interactive meshing software for unstructured hybrid grids in 1, 2 and 3 dimensions. *Comput. Vis. Sci.* In Vorbereitung.
- [Reynolds, 1883] Reynolds, O. (1883). An experimental investigation of the circumstances which determine whether the motion of water shall be direct or sinuous, and of the law of resistance in parallel channels. *Phil. Trans. R. Soc. Lond.*, 174:935–982.

- [Ruge und Stüben, 1987] Ruge, J. und Stüben, K. (1987). Algebraic multigrid. In McCormick, S. F., Herausgeber, *Multigrid Methods*, Seiten 73–130. Society for Industrial and Applied Mathematics, Philadelphia, Pennsylvania.
- [Rumpf und Wierse, 1992] Rumpf, M. und Wierse, A. (1992). GRAPE, Eine Interaktive Umgebung für Visualisierung und Numerik. *Informatik, Forschung und Entwicklung*, 7:145–151.
- [Sahimi, 1995] Sahimi, M. (1995). *Flow and Transport in Porous Media and Fractured Rock: From Classical Methods to Modern Approaches*. VCH, Weinheim.
- [Scheidegger, 1961] Scheidegger (1961). General theory of dispersion in porous media. *J. Geophys. Res.*, 66:3273–3278.
- [Schincariol et al., 1997] Schincariol, R. A., Schwartz, F. W., und Mendoza, C. A. (1997). Instabilities in variable density flows: Stability and sensitivity analyses for homogeneous and heterogeneous media. *Water resources research*, 33(1):31–41.
- [Schmoll et al., 2006] Schmoll, O., Howard, G., Chilton, J., und Chorus, I., Herausgeber (2006). *Protecting groundwater for health. Managing the Quality of Drinking Water Sources*. World Health Organization. IWA Publishing, London.
- [Schneider, 2013] Schneider, A., Herausgeber (2013). *Representation of inhomogeneities in the flow and transport codes d^3f and r^3t* . FKZ 02 E 10558. Gesellschaft für Anlagen- und Reaktorsicherheit (GRS) mbH, GRS-311, Braunschweig.
- [Schneider und BIRTHLER, 2004] Schneider, A. und BIRTHLER, H. (2004). Modellrechnungen zur grossräumigen dichteabhängigen Grundwasserbewegung. *GRS, Braunschweig*, 191.
- [Schneider und Fein, 2004] Schneider, A. und Fein, E. (2004). Enhancement of the Codes d^3f and r^3t . *GRS, Braunschweig*, 292. ISBN 978-3-939355-68-7.
- [Schwartz et al., 1983] Schwartz, F. W., Smith, L., und Crowe, A. S. (1983). A stochastic analysis of macroscopic dispersion in fractured media. *Water Resources Research*, 19(5):1253–1265.
- [Sharp und Shi, 2009] Sharp, J. M. J. und Shi, M. (2009). Heterogeneity effects on possible salinity-driven free convection in low-permeability strata. *Geofluids*, 34:263–274.
- [Shikaze et al., 1998] Shikaze, S. G., Sudicky, E. A., und Schwartz, F. W. (1998). Density-dependent solute transport in discretely-fractured geologic media: is prediction possible? *Journal of Contaminant Hydrogeology*, 34:273–291.
- [Simmons et al., 2001] Simmons, C. T., Fenstemaker, T. R., und Sharp, J. M. J. (2001). Variable-density groundwater flow and solute transport in heterogeneous porous media: approaches, resolutions and future challenges. *Journal of Contaminant Hydrogeology*, 52:245–275.

-
- [Simpson und Clement, 2004] Simpson, M. und Clement, T. (2004). Improving the worthiness of the Henry problem as a benchmark for density-dependent groundwater flow models. *Water Resources Research*, 40.
- [Simpson und Clement, 2003] Simpson, M. J. und Clement, T. (2003). Theoretical Analysis of the worthiness of Henry and Elder problems as benchmarks of density-dependent groundwater flow models. *Adv. Water. Resour.*, 26:17–31.
- [Smith und Schwartz, 1984] Smith, L. und Schwartz, F. W. (1984). An analysis of the influence of fracture geometry on mass transport in fractured media. *Water Resources Research*, 20(9):1241–1252.
- [Sonneveld, 1989] Sonneveld, P. (1989). Cgs, a fast lanczos-type solver for nonsymmetric linear systems. *SIAM Journal on Scientific and Statistical Computing*, 10(1):36–52.
- [Sorek et al., 2001] Sorek, S., Borisov, V., und Yakirevich, A. (2001). A two-dimensional Areal Model for Density Dependent Flow Regime. *Transport in Porous Media*, 43:87–105.
- [Spena und Vacca, 2001] Spena, F. und Vacca, A. (2001). A potential formulation of non-linear models of flow through anisotropic porous media. *Transport in Porous Media*, 45:407–423.
- [Stichel, 2013] Stichel, S. (2013). Adaptive numerical multi-scale solver. In Schneider, A., Herausgeber, *Representation of inhomogeneities in the flow and transport codes $d^{\beta}f$ and $r^{\beta}t$* . GRS-311, Braunschweig.
- [Stichel et al., 2012] Stichel, S., Logashenko, D., Grillo, A., Reiter, S., Lampe, M., und Witum, G. (2012). Numerical methods for flow in fractured porous media. In Delgado, J., Herausgeber, *Heat and Mass Transfer in Porous Media*, Band 13 von *Advanced Structured Materials*, Seiten 83–113. Springer Berlin Heidelberg.
- [Tang et al., 1981] Tang, D., Frind, E., und Sudicky, E. (1981). Contaminant transport in fractured porous media: Analytical solution for a single fracture. *Water Resources Research*, 17(3):555–564.
- [Thauvin und Mohanty, 1998] Thauvin, F. und Mohanty, K. K. (1998). Network modeling of non-darcy flow through porous media. *Transport in Porous Media*, 31:19–37.
- [Therrien und Sudicky, 1996] Therrien, R. und Sudicky, E. (1996). Three-dimensional analysis of variably-saturated flow and solute transport in discretely-fractured porous media. *Journal of Contaminant Hydrology*, 23(1):1–44.
- [Thiele, 1999] Thiele, K. (1999). *Adaptive Finite Volume Discretisation of Density Driven Flows in Porous Media*. Dissertation, Universität Erlangen-Nürnberg.
- [Van der Vorst, 1992] Van der Vorst, H. (1992). Bi-CGSTAB: A Fast and Smoothly Converging Variant of Bi-CG for the Solution of Nonsymmetric Linear Systems. *SIAM Journal on Scientific and Statistical Computing*, 13:631–644.

-
- [Voss und Souza, 1987] Voss, C. und Souza, W. (1987). Variable density flow and solute transport simulation of regional aquifers containing a narrow freshwater-saltwater transition zone. *Water Resources Research*, 26:2097–2106.
- [Warren und Root, 1963] Warren, J. E. und Root, P. J. (1963). The behavior of naturally fractured reservoirs. *Old SPE Journal*, 3(3):245–255.
- [Wartmann, 2007] Wartmann, C. (2007). *Das Blender-Buch. 3D-Grafik und Animation mit freier Software*. dpunkt.verlag, 3 Auflage.
- [Zeng und Grigg, 2006] Zeng, Z. und Grigg, R. (2006). A criterion for non-darcy flow in porous media. *Transport in Porous Media*, 63:57–69.