



Universität Stuttgart Institut für Wasserbau Lehrstuhl für Hydromechanik und Hydrosystemmodellierung Freie Universität Berlin Fachbereich Mathematik und Informatik Institut für Mathematik II

MEHRGITTERMETHODEN UND ADAPTIVE EULER-LAGRANGE-VERFAHREN ZUR SIMULATION VON STRÖMUNGS- UND TRANSPORTVORGÄNGEN IN KLUFTAQUIFERSYSTEMEN

DFG–Projekte Ko 1806/2–3 und Hi 640/1–3 Bericht zur zweiten Projektphase (01.01.2002 – 31.12.2002)

Lina Neunhäuserer Reinhard Hinkelmann Susanna Gebauer Ralf Kornhuber Steffen Ochs Rainer Helmig

März 2004

Inhaltsverzeichnis

| 1 | Allg | emeine Angaben | 1 |
|---|------------------------------|--|----|
| | 1.1 | DFG-Geschäftszeichen | 1 |
| | 1.2 | Antragsteller | 1 |
| | 1.3 | Institut/Lehrstuhl | 1 |
| | 1.4 | Thema des Projektes | 1 |
| | 1.5 | Berichtszeitraum, Föderungszeitraum insgesamt | 1 |
| | 1.6 | Liste der Publikationen | 2 |
| | 1.7 | Liste der Vorträge und Poster-Präsentationen der Bearbeiter | 2 |
| 2 | Arbeits- und Ergebnisbericht | | |
| | 2.1 | Ausgangsfragen und Zielstellung des Projektes | 3 |
| | 2.2 | Entwicklung der durchgeführten Arbeiten und Darstellung der erreichten Er- | |
| | | gebnisse | 4 |
| | | 2.2.1 Weiterentwicklung des Netzgenerators | 4 |
| | | 2.2.2 Weiterentwicklung der Diskretisierungsverfahren | 6 |
| | | 2.2.3 Weiterentwicklung adaptiver Methoden | 11 |
| | | 2.2.4 Weiterentwicklung der Löser | 13 |
| | | 2.2.5 Weiterentwicklung der Softwarebasis | 15 |
| | | 2.2.6 Abweichungen vom ursprünglichen Konzept | 15 |
| | 2.3 | Qualifikationen des wissenschaftlichen Nachwuchses im Zusammenhang mit | |
| | | diesem Projekt | 15 |
| 3 | Zus | ammenfassung | 16 |

1 Allgemeine Angaben

1.1 DFG-Geschäftszeichen

Ko 1806/2–3, Hi 640/1–3

1.2 Antragsteller

Ralf **Kornhuber**, Prof. Dr.^a

Reinhard Hinkelmann, Dr.–Ing.^b

Rainer Helmig, Prof. Dr.–Ing.^b

1.3 Institut/Lehrstuhl

^aFreie Universität Berlin, Fachbereich Mathematik und Informatik Institut für Mathematik II

^b Universität Stuttgart, Fakultät für Bau- und Umweltingenieurwissenschaften Institut für Wasserbau Lehrstuhl für Hydromechanik und Hydrosystemmodellierung

1.4 Thema des Projektes

Mehrgittermethoden und adaptive Euler–Lagrange–Verfahren zur Simulation von Strömungs– und Transportvorgängen in Kluftaquifersystemen

1.5 Berichtszeitraum, Föderungszeitraum insgesamt

Berichtszeitraum: 1.1.2002 – 31.12.2002

Föderungszeitraum insgesamt: 1.11.1999 – 30.10.2001, 1.1.2002 – 31.12.2002

1.6 Liste der Publikationen

Gebauer, S. (2003): *Hierarchische Gebietszerlegungsmethoden für die gesättigte Grundwasserströmung in Kluftaquifersystemen,* Dissertation, Fachbereich Mathematik und Informatik, Freie Universität Berlin.

Gebauer, S., Neunhäuserer, L., Kornhuber, R., Ochs, S., Hinkelmann, R., Helmig, R. (2002): *Equidimensional Modelling of Flow and Transport Processes in Fractured Porous Systems I*, in: S.M. Hassanizadeh et al. (eds.) 'Computational Methods in Water Resources', Elsevier, pp. 335–342.

Gebauer, S., Kornhuber, R., Yserentant, H. (2004): *Hierarchical Decomposition of Domains with Fractures*, in Vorbereitung.

Hinkelmann, R. (2003): *Efficient Numerical Methods and Information-Processing Techniques in Environment Water*, Habilitationsschrift, Mitteilungen Heft 117, Institut für Wasserbau, Universität Stuttgart, zur Veröffentlichung im Springer Verlag in der Reihe 'Lecture Notes in Applied and Computational Mechanics' angenommen.

Neunhäuserer, L. (2003): Diskretisierungsansätze zur Modellierung von Strömungs- und Transportprozessen in geklüftet-porösen Medien, Dissertation, Mitteilungen Heft 119, Institut für Wasserbau, Universität Stuttgart.

Neunhäuserer, L., Gebauer, S., Ochs, S., Hinkelmann, R., Kornhuber, R., Helmig, R. (2002): *Equidimensional Modelling of Flow and Transport Processes in Fractured Porous Systems II*, in: S.M. Hassanizadeh et al. (eds.) 'Computational Methods in Water Resources', Elsevier, pp. 343–350.

Ochs, S., Hinkelmann, R., Neunhäuserer, L., Süss, M., Helmig, R., Gebauer, S., Kornhuber, R. (2002): *Adaptive Methods for the Equidimensional Modelling of Flow and Transport Processes in Fractured Aquifers,* 'Proceedings of the 5th International Conference on Hydro-Science and Engineering', on CDROM, Warschau, Poland.

1.7 Liste der Vorträge und Poster-Präsentationen der Bearbeiter

S. Gebauer (2002): *Equidimensional modelling of flow and transport processes in fractured porous systems I,* 'XIV International Conference on Computational Methods in Water Resources', 23.-28. Juni, Delft, The Netherlands.

L. Neunhäuserer (2002): *Equidimensional modelling of flow and transport processes in fractured porous systems II*, 'XIV International Conference on Computational Methods in Water Resources', 23.-28. Juni, Delft, The Netherlands.

S. Ochs (2002): *Adaptive methods for the equidimensional modelling of flow and transport processes in fractured aquifers,* 5th International Conference on Hydro-Science and Engineering', 18.-21. September, Warschau, Poland.

2 Arbeits- und Ergebnisbericht

2.1 Ausgangsfragen und Zielstellung des Projektes

Im Zusammenhang mit der Deponierung von Schadstoffen (z.B. Altlasten, Endlagerung) kommt der Simulation von Strömungs- und Transportprozessen in Kluftaquifersystemen eine hohe Bedeutung zu. Basierend auf *kombinierten Modellansätzen* sollten hier die Nachteile der bisher verwendeten Kopplung von Elementen unterschiedlicher Dimension, z.B. keine Flusserhaltung am Kluft/Matrix-Übergang, vermieden werden. Dazu wurde ein Konzept entwickelt, in dem Kluft und Matrix mit Elementen gleicher Dimension vernetzt werden, in den Klüften bzw. Kluftnetzwerken aber degenerierte Elemente zugelassen sind. Alle weiteren Bausteine des Lösungsprozesses sollten robust gegenüber verschwindender Kluftweite (reduziertes Problem) sein. Um den unterschiedliche Diskretisierungsverfahren in Kluft und Matrix möglich sein. Zu diesem Zweck sollten robuste Mehrgittermethoden für primale und gemischte Diskretisierungen der Strömung sowie hierarchische Diskretisierungen und Partikelmethoden zur Transportsimulation entwickelt, analysiert und in Verbindung mit Parallelisierungstechniken zu einem schnellen, robusten und zuverlässigen Löser für Strömungs- und Transportprozesse in Kluftaquifersystemen weiterentwickelt werden.

Die in der ersten Projektphase implementierten Neu– und Weiterentwicklungen bildeten eine solide Basis für den Aufbau eines flexiblen und zuverlässigen Lösungsverfahrens für Strömungs– und Transportprozesse in geklüftet–porösen Medien. In der verbleibenden Laufzeit der ersten Antragsphase sollten zunächst das Verhalten und die Möglichkeiten der äquidimensionalen Modellierung tiefergehend analysiert und mit der niederdimensionalen Simulation verglichen werden. Dies konnte zuvor nur ansatzweise geschehen, da die Bereitstellung der komplexen und umfangreichen gemeinsamen Softwarebasis einen Großteil des ersten Antragszeitraums in Anspruch genommen hat. Die Analyse und der Vergleich der Verfahren sollten für Kluft–Matrix–Strukturen aufsteigend komplexer Geometrie (Einzelkluft, Kluftkreuzung, Kluftnetzwerk) durchgeführt werden. In diesem Zuge sollte auch der Einfluss von a priori im Kluftbereich verfeinerten Netzen und h–adaptiver Verfeinerung auf der Basis heuristischer Fehlerindikatoren und a posteriori Fehlerschätzern auf das Lösungsverhalten untersucht werden.

Im weiteren Verlauf der Arbeit sollten die implementierten Bausteine auf kompliziertere Geometrien erweitert werden: im Modellgebiet endende Klüfte, in andere Klüfte einmündende Klüfte und Kreuzungen von mehr als zwei Klüften. Dies erforderte weitere Entwicklungsarbeit, da es für diese Geometrien nicht zu vermeiden ist, im Gegensatz zum bisherigen Vorgehen auch in den Klüften Dreiecke einzusetzen. Für den neu entwickelten Strömungslöser sollte der Nachweis von schritt- und kluftweitenunabhängigen oberen Schranken für die Konvergenzraten erbracht werden. Zur Diskretisierung der Strömungsgleichung wurde bisher ein Ritz-Galerkin Finite-Elemente-Verfahren verwendet. Dies approximiert die Geschwindigkeit eine Ordnung niedriger als den Druck bzw. die Piezometerhöhe. Da die Geschwindigkeit aber ein sehr sensitiver Parameter für die Transportberechnung ist, sollte im nächsten Schritt ein gemischtes Finite-Elemente-Verfahren implementiert werden, das die Geschwindigkeit sogar besser als den Druck beschreibt und bessere Approximations- und Stetigkeitseigenschaften hat.

Weitere Arbeiten sollten sich mit der Weiterentwicklung des Lösers für die Transportmodellierung, Partikelmethoden für die äquidimensionale Transportsimulation, die Parallelisierung des gesamten Lösers und die Definition von Benchmarks zur Verifikation der neu entwickelten Methoden befassen.

2.2 Entwicklung der durchgeführten Arbeiten und Darstellung der erreichten Ergebnisse

Die durchgeführten Arbeiten und ihre Ergebnisse sind in den in Kapitel 1.1 genannten Publikationen veröffentlicht und dort detailliert beschrieben. Es werden hier die wesentlichen Ergebnisse kurz vorgestellt. Eine Übersicht über die Arbeiten zur Transportmodellierung ist in Hinkelmann (2003) gegeben.

2.2.1 Weiterentwicklung des Netzgenerators

Der Netzgenerator FRACMESH wurde für die äquidimensionale Modellierung von 2D Kluft-Matrix Systemen mit komplexen Geometrien dahingehend erweitert, dass nun im Modellgebiet endende Klüfte, in anderen Klüften endende Klüfte sowie Kluftkreuzungen mit mehr als zwei Klüften erfasst werden können (siehe Abbildung 2.1).



Abbildung 2.1: Links: Kluftkreuzung; rechts: Kluftende; aus Neunhäuserer (2003)

In der zweiten Antragsphase wurden die Simulationsergebnisse im Bereich der Kluftkreuzungen und Kluftenden genauer analysiert, da dort lokale Instabilitäten aufgetreten sind (siehe 2.2, rechts). Diese Effekte sind lokaler Natur und haben sich auf globale Ergebnisse wie z.B. Durchbruchskurven kaum ausgewirkt. Sie können jedoch die Austauschprozesse zwischen Kluft und Matrix stärker beeinflussen. Es wurden verschiedene geometrische Formen der Gestaltung von Kluftkreuzungen untersucht, die sich aber nur wenig auf die Simulationsergebnisse ausgewirkt haben. Des weiteren wurden verschiedene Formen der Kluftenden untersucht, wobei die Konformität der Elemente erhalten bleiben sollte: Abschluss mit kurzem Kluftdreieck, Abschluss mit langem Kluftdreieck und Abschluss der Kluft mit langem Matrixdreieck; diese Variante wird in Abb. 2.2, rechts Rechteck genannt. Das in Abbildung 2.2, links dargestellte System (Matrix: K = 10^{-11} m², $\phi = 0.2$; Kluft : K = 10^{-8} m², $\phi = 0.3$, d = 0.005m) ist oben und unten geschlossen, links und rechts offen, und es wird ein Druckgradient über die seitlichen Ränder dem System aufgeprägt. Die Abbildung 2.2, rechts zeigt, dass die Variante Abschluss der Kluft mit langem Matrixdreieck (als Rechteck bezeichnet) die glatteste Lösung liefert. Diese Variante wurde für die nachfolgenden Simulationen verwendet.



Abbildung 2.2: Links: System mit Einzelkluft; rechts: Verteilung der Vertikalgeschwindigkeit längs der Kluftachse; aus Neunhäuserer (2003)

In Neunhäuserer (2003) wird weiter gezeigt, dass die Größe der Peaks am Kluftende mit wachsender Netzauflösung zunimmt und dass die Wahl der Diskretisierung (Box-Verfahren mit 1D Kluft (niederdimensional), Box-Verfahren mit 2D Kluft (äquidimensional) und gemischthybride Finite-Elemente Methode, siehe Kapitel 2.2.2 und Neunhäuserer (2003)) den Peak stark beeinflussen kann, wobei mit dem Box Verfahren 1D meistens die glattesten Lösungen erzielt wurden.

2.2.2 Weiterentwicklung der Diskretisierungsverfahren

In der zweiten Antragsphase wurden verschiedene Weiterentwicklungen zu Diskretisierungsverfahren durchgeführt und systematisch analysiert. Die Verfahren Box 1D und Box 2D mit Fully Upwinding und Upwinding mit Streamline Orientation sind im Bericht zur ersten Antragsphase ausführlich erläutert. Die gemischt-hybride Finite-Elemente Methode wird nachfolgend erklärt.

Im Bericht zur ersten Antragsperiode wurden erste Ergebnisse zu den beiden unterschiedlichen Upwinding Verfahren für die äquidimensionale Diskretisierung gezeigt. Diese Untersuchungen sind in der zweiten Antragsperiode weitergehend durchgeführt worden. Dem in Abbildung 2.3 dargestellten System (Strömungsparameter wie in Kapitel 2.2.1; Transportparameter Matrix: $D = 10^{-9} m^2/s$, $\alpha_1 = \alpha_t = 0.01m$; Transportparameter Kluft: $D = 10^{-9} m^2/s$, $\alpha_1 = 0.001m$, $\alpha_t = 0.0001m$) wird am linken offenen Rand eine Randbedingung $c = 1 kg/m^3$ aufgeprägt, der rechte Rand ist ein Ausflussrand, und zu Beginn der Simulation ist die Konzentration im gesamten System gleich null.



Abbildung 2.3: Links: System mit Kluftkreuzung (Grobgitter); rechts: Lage unterschiedlicher Schnitte; aus Neunhäuserer (2003)

Ergbnissbilder zu Druck- und Konzentrationsverteilungen sind im Bericht der ersten Antragsperiode enthalten und werden hier nicht wiederholt. Die Konzentrationsverteilungen längs der Schnittlinien B und E für unterschiedliche (uniforme) Verfeinerungslevel (Hinweis: in Abbildung 2.3, links ist das Grobgitter dargestellt) zeigt, dass das Upwinding mit Streamline Orientation deutlich weniger numerische Dispersion aufweist. In den Abbildungen 2.4, links und rechts ist der Peak des Upwinding mit Streamline Orientation auf Level 2 ausgeprägter als mit dem Fully Upwinding auf Level 2 und 3, und es wird beim Upwinding mit Streamline Orientation auf Level 2 bereits Gitterkonvergenz erzielt, da die Ergebnisse zum Upwinding mit Streamline Orientation auf Level 3 keine merklichen Änderungen erkennen lassen. Quasi die gleichen Ergebnisse hat Neunhäuserer (2003) auch für das in Abbildung 2.1, links dargestellte System mit Einzelkluft erzielt. Im Folgenden wurde i.d.R. das Upwinding mit Streamline Orientation verwendet.



Abbildung 2.4: Konzentrationsverteilungen längs Schnittlinie B (links) und E (rechts); fu = Fully Upwinding, so = Upwinding mit Streamline Orientation, Level = Verfeinerungslevel; aus Neunhäuserer (2003)

Neunhäuserer (2003) hat ein gemischt-hybrides Verfahren für die Strömungsgleichung aus Arbeiten von Wieners (1997) ¹ entwickelt, wobei ein Raviart-Thomas Ansatz zugrunde gelegt wurde. Wieners (1997) hat eine zusätzliche Unbekannte auf der Elementkante als Lagrange-Multiplikator sowie die Flusserhaltung über den Rand als weitere Gleichung eingeführt. Der Druck wird im Element konstant approximiert und die Flüsse stetig über den Rand. Im Zuge der äquidimensionalen (Kluft-)Modellierung ist der Einsatz gemischt-hybrider finite Elemente anzustreben, da das Strömungsfeld i.d.R. den größten Einfluss auf die Transportsimulation hat und die gemischt-hybride Formulierung ein stetiges Geschwindigkeitsfeld am Kluft-Matrix Interface ermöglicht.

Ein Abbildung 2.5 ist ein Vergleich des (äquidimensionalen) Box Verfahrens (Box 2d) mit der gemischt-hybriden Finite-Elemente Methode (MHFE 2d) für das System aus Abbildung 2.5 gegeben. Die Abbildung 2.5, links wie auch weitere Untersuchungen machen deutlich, dass sich die beiden Verfahren nur lokal unterscheiden: in diesem Fall im Bereich der Kluftkreuzung, hier liefert die gemischte Finite-Elemente Methode die glattere und vermutlich bessere Lösung. Weitere Studien haben gezeigt, dass komplexe lokale Strömungsfelder, z.B. im Bereich von Kluftkreuzungen, mit der gemischten Finite-Elemente Methode mit niedrigeren Verfeinerungsleveln berechnet werden konnten, während beim Box Verfahren auf höheren Verfeinerungsleveln noch Oszillationen auftragen. Andererseits muss erwähnt werden, dass die gemischte Finite-Elemente Methode bei gleichem Verfeinerungslevel rechenaufwendiger ist. In Abbildung 2.5, rechts ist zu erkennen, dass sich die beiden Verfahren bei globalen Betrachtungen wie z.B. Durchbruchskurven quasi nicht unterscheiden.

¹C. Wieners: The implementation of adaptive multigrid methods for finite elements, Preprint Nr. 97/12, Institut für Computeranwendungen, Universität Stuttgart, 1997.



Abbildung 2.5: Links: Konzentrationsverteilungen längs Schnittlinie B (links); rechts: Durchbruchskurve am Ausstromrand; aus Neunhäuserer (2003)

Im Folgenden werden die (äquidimensionale) gemischte Finite-Element Methode mit dem niederdimensionalen Box Verfahren verglichen. In Abbildung 2.6, links ist ein Kluftnetzwerk dargestellt. Die Systemparameter entsprechen denen der Einzelkluft bzw. der Kluftkreuzung. In diesem Fall ist das System links und rechts geschlossen und oben und unten offen. Abbilung 2.6, rechts zeigt das Druckfeld für eine über Randbedingungen am oberen und unteren Rand vorgegebene Druckdifferenz. Das System wird langsam und 'senkrecht' zur Kluftrichtung durchströmt. Die Klüfte, die im System enden, beeinflussen die Druckverteilung am stärksten.



Abbildung 2.6: Links: System mit Kluftnetzwerk (Grobitter); rechts: Druckverteilung; aus Neunhäuserer (2003)

In den Abbildungen 2.7 und 2.8 wird die unterschiedliche Geschwindigkeitsapproximation für die nieder- und äquidimensionale Kluftdiskretisierung gezeigt. Zum einen wird die unterschiedlich-dimensionale Geschwindigkeitsverteilung in den Klüften nochmals herausgestellt. Zum anderen sieht man, dass das 'Herausströmen' aus der Kluft bei der äquidimensionalen Modellierung weiter links bei ca. x=0.68m auftritt, während dies bei der niederdimensionalen Modellierung bei ca. x=0.73m ist.



Abbildung 2.7: Geschwindigkeitsverteilung im Bereich der oberen rechten Kluft, Level 3, niederdimensional, Boxverfahren; aus Neunhäuserer (2003)



Abbildung 2.8: Geschwindigkeitsverteilung im Bereich der oberen rechten Kluft, Level 3, äquidimensional, gemischt-hybride Finite-Element Methode; aus Neunhäuserer (2003)

In Abbildung 2.9 ist die Konzentrationsverteilung im Modellgebiet nach 3600s für die niederund äquidimensionale Kluftdiskretisierung gegeben. Es wird deutlich, dass sich im äquidimensionalen Fall deutlich mehr Masse im System befindet und der Massenaustausch zwischen Kluft und Matrix größer ist.

Anhand der Durchbruchskurven in Abbildung 2.10 ist zu erkennen, dass der äquidimensionale Ansatz den wesentlich höheren Peak aufweist und der niederdimensionale Ansatz ein stärker diffusives Verhalten zeigt.

Das in den Abbildungen 2.6 bis 2.10 untersuchte System wurde von unten nach oben, also 'senkrecht' zur Kluftrichtung durchströmt. Wird dieses System von links nach rechts, also in Kluftrichtung, oder schneller durchströmt, so fallen die Unterschiede zwischen der nieder- und äquidimensionalen Kluftdiskretisierung wesentlich geringer aus (siehe Neunhäuserer (2003)). Es wird darauf hingewiesen, dass bei der gemischt-hybriden Finite-Element Methode bei schmaleren als den hier verwendeten Kluftdicken von d = 0.005m große numerische Probleme im Löser auftreten, die vermutlich erheblichen Weiterentwicklungsbedarf erfordern (siehe Neunhäuserer (2003)).



Abbildung 2.9: Konzentrationsverteilung nach 3600s, Level 3; links: niederdimensional; rechts: äquidimensional; aus Neunhäuserer (2003)



Abbildung 2.10: Durchbruchskurve am Ausstromrand; Box Verfahren niederdimensional (1d Box) und gemischt-hybride Finite-Element Method für Strömung, Box Verfahren für Transport, Level 2 und 3; aus Neunhäuserer (2003)

2.2.3 Weiterentwicklung adaptiver Methoden

Ochs et al. (2002) haben adaptive Methoden für die Transportgleichung in geklüftet-porösen Medien weiterentwickelt. Es wurden die gleichen Parameter wie für die in Abbildung 2.2, links und 2.3, links untersuchten Systeme verwendet. Als Diskretisierungsverfahren wurde der äquidimensionale Ansatz mit dem Box Verfahren und Fully Upwinding eingesetzt. Am linken Rand wurde eine zeitlich konstante Randbedingung von c = 1.0 mg/l angesetzt. Abbildung 2.11, links zeigt das bereits 2-fach verfeinerte Grobgitter und Abbildung 2.11, rechts das bis auf Level 4 adaptiv verfeinerte Gitter aufgrund der Konzentrationsausbreitung (siehe Abb. 2.12, links). Es erfolgt eine Netzverfeinerung im Bereich der steilen Gradienten längs der Kluft und am linken Systemrand.



Abbildung 2.11: Links: System mit horizontaler Kluft (2-fach verfeinertes Gitter); rechts: adaptiv verfeinertes Gitter; aus OCHS et al. (2002)

Im zuvor gezeigten Bild wurde ein Differenzen-Indikator verwendet, der ähnliche Ergebnisse wie ein Gradientenindikator geliefert hat. Die uniform und adaptiv verfeinerten Lösung stimmen auf Level 4 gut überein, sie sind aber von der analytischen Lösung von Tang (1981) ² noch beträchtlich entfernt (siehe 2.12, rechts). Ein maßgeblicher Grund hierfür resultiert aus dem Box Verfahren mit Fully Upwinding, was numerische Disperion aufweist. Ein Vergleich der uniform und der adaptiv verfeinerten Lösung zeigt, dass die adaptive Variante nur etwa 20 % der Rechenzeit und des Speichers benötigt.

OCHS et al. (2002) haben eine ähnliche Leistungsfähigkeit der adaptiven Methoden für das geometrisch komplexere System in Abbildung 2.13 gezeigt.

²Tang,D.H., Frind,E.O. and Sudicky: Contaminant Transport in Fractured Porous Media, Analytical Solution for a Single Fracture, Water Resources Research, (17) pp. 555-564, 1981.



Abbildung 2.12: Links: Konzentrationsverteilung auf adaptiv verfeinertem Gitter; Frontausbreitung in der Kluft für verschiedene Varianten; aus OCHS et al. (2002)



Abbildung 2.13: Links: adaptiv verfeinertes Gitter; rechts: Konzentrationsverteilung; aus OCHS et al. (2002)

Zur Diskretisierung der Strömungsgleichung hat Gebauer (2003) eine adaptive Verfeinerungsstrategie entwickelt. Die Auswahl zu verfeinernder Elemente in der Gesteinsmatrix erfolgt auf der Basis von aus der Literatur bekannten a posteriori Residuenfehlerschätzern. Halbierte Kanten am Kluftrand führen zu anisotroper Verfeinerung in der Kluft mit daraus resultierenden neuen Kanten senkrecht zur Kluftrichtung. Mit aus der Literatur bekannten, anisotropen Residuenfehlerschätzern wird eine Schätzung des Gesamtfehlers in der Kluft ermittelt. Liegt der über einem gewissen Schwellwert, so wird die gesamte Kluft uniform verfeinert. Diese einfache Vorgehensweise wird dadurch gerechtfertigt, daß in der Kluft wegen der hohen Permeabilität meist relativ homogene Verhältnisse herrschen und außerdem i.a. nur wenige solcher Verfeinerungsschritte erforderlich sind. Abbildung 2.14 zeigt links ein grobes Ausgangsgitter und rechts das endgültige Gitter nach 5 Verfeinerungsschritten.





Abbildung 2.14: Links: Ausgangsgitter; rechts: adaptiv verfeinertes Gitter; aus Gebauer (2003)

Die aus der adaptiven Verfeinerung resultierende Gitterhierarchie bildet den Ausgangspunkt für die schnelle und robuste Lösung der resultierenden diskreten Probleme mit hierarchischen Gebietszerlegungsverfahren (siehe nächster Abschnitt).

2.2.4 Weiterentwicklung der Löser

Die theoretische Analyse der Mehrgitter-Verfahren aus dem ersten Berichtszeitraum führte auf die Entwicklung neuartiger *hierarchischer Gebietszerlegungsverfahren* (Gebauer (2003)). Dieser Ansatz beruht im wesentlichen auf einer hierarchischen Zerlegung des diskreten Ansatzraums in Kluft- und Matrixraum. Die bei der resultierenden Teilraumkorrekturmethode auftretenden Teilprobleme können ihrerseits durch einen oder mehrere Schritte eines Mehrgitterverfahrens mit Linienglätter (Kluft) oder Varianten klassischer Mehrgitterverfahren (Matrix) approximiert werden. In Gebauer (2003) und Gebauer et al. (2004) wird gezeigt, daß die Konvergenzraten der resultierenden Teilraumkorrektur-Methode nicht von der Kluftweite ε oder Koeffizientensprüngen abhängen, falls die Klüfte in Trapeze zerlegt sind. Numerische Tests zeigen, daß geringe Abweichungen von der Trapzform zwar theoretisch relevant aber praktisch nicht von Bedeutung sind. So ist etwa im Falle der in Abbildung 2.15 dargestellten Ausgangstriangulierung, 6-facher uniformer Verfeinerung in der Matrix und 2-facher uniformer Verfeinerung in

der Kluft (insgesamt 60893 Unbekannte) keine Veränderung der Konvergenzraten zu beobachten, obwohl der Sprung in der Permeabilität wie auch die Kluftweite über 10 Größenordnungen variieren: Abbildung 2.16 zeigt links die Konvergenzraten in Abhängigkeit von 1/ ε und rechts in Abhängigkeit von dem Verhältnis der Permeabilität in Kluft und Matrix. Eine Ausnahme bildet der Wert $\varepsilon = 1$ auf dem linken Bild. Für derart große Kluftweiten ist die HBB-Methode nicht gemacht: Es liegt keinerlei Gitteranisotropie in Kluftrichtung vor und klassische Mehrgittertechniken liefern in dieser isotropen Situation die Verfahren der Wahl. Interessant ist auch der Vergleich mit der Konvergenzrate eines entsprechenden klassischen Mehrgitterverfahrens (kanonische Restriktion/Prolongation, Gauß-Seidel-Glätter) im Falle $\varepsilon = 0$ (keine Kluft), welche durch die durchgezogene Linie markiert ist.



Abbildung 2.15: Grobgitter eines Modellproblems aus Gebauer (2003)



Abbildung 2.16: Abhängigkeit der Konvergenzraten von Kluftweite (links) und Permeabilitätsverhältnis (rechts); aus Gebauer (2003)

Dieser neue, theoretisch abgesicherte Zugang weist den Weg für zukünftige Entwicklungen hinsichtlich unterschiedlicher Diskretisierungen und Modelle in Kluft und Matrix.

2.2.5 Weiterentwicklung der Softwarebasis

Von Neunhäuserer (2003) wurde das o.g. gemischt-hybride Verfahren zur Strömungsberechnung vollständig in MUFTE-UG integriert. Desweiteren wurde der Netzgenerator erweitert (siehe oben) sowie die nötige Schnittstelle zu MUFTE-UG geschaffen (Neunhäuserer (2003)). Die verschiedenen Varianten des oben beschriebenen Mehrgitter-Konzepts für die diskretisierten Strömungsgleichungen wurden ebenfalls vollständig in MUFTE–UG integriert (Gebauer (2003)). Im Einzelnen betrifft dies insbesondere die Teilraum-Korrektur (induziert durch eine Zerlegung in Kluft- und Matrix-Raum) nebst Mehrgitter-Verfahren mit Linien-Glättung für das Kluft-Problem. Dazu kommt eine Erweiterung auf praxisrelevante Kluft-Geometrien (Gebauer (2003)).

2.2.6 Abweichungen vom ursprünglichen Konzept

Trotz einer Reihe vielversprechender Resultate ist es nicht gelungen, den zeitlichen Rückstand aus dem ersten Berichtszeitraum wettzumachen. Deshalb haben wir uns entschieden, keinen Fortsetzungsantrag für ein weiteres Jahr zu stellen, sondern die ursprünglich im Rahmen dieses Projekts geplanten weiteren Entwicklungen statt dessen aus der Grundausstattung zu finanzieren. Entsprechend Abschnitt 2.1 wird es in dieser Konsolidierungsphase insbesondere um schnelle, robuste Löser für gemischte Diskretisierungen der Strömung und für die Transportberechnung, um Partikelmethoden für den Transport und um Parallelisierung gehen. Anschließend soll auf Grundlage der dabei erzielten Ergebnisse ein entsprechender Neuantrag ins Auge gefasst werden.

2.3 Qualifikationen des wissenschaftlichen Nachwuchses im Zusammenhang mit diesem Projekt

Unmittelbar aus den Projektarbeiten sind die *Dissertationen* von Neunhäuserer (2003) und Gebauer (2003) hervorgegangen. Der Antragsteller Hinkelmann hat die wesentlichen erzielten Forschungsergebnisse zur Transportsimulation als einen von mehreren wichtigen Aspekten in seiner *Habilitation* (Hinkelmann (2003)) eingebracht; diese Arbeit wird ist zur Veröffentlichung im Springer Verlag in der Reihe 'Lecture Notes in Applied and Computational Mechanics' angenommen.

3 Zusammenfassung

In Zusammenhang mit z.B. der Trinkwassergewinnung aus Kluftaquiferen oder der Beurteilung von Deponiestandorten kommt der Simulation von Strömungs- und Transportprozessen in geklüfteten Systemen eine große Bedeutung zu. Die oft sehr unterschiedlichen hydraulischen Eigenschaften von Kluft und umgebender Gesteinsmatrix prägen das Strömungs- und Transportverhalten stark. Unter gesättigten Bedingungen können Klüfte bevorzugte Fließwege darstellen, während die umgebende Gesteinsmatrix dagegen häufig wie ein Speicher wirkt. Diese gegensätzlichen physikalischen Prozesse müssen bei der numerischen Simulation von dem zur Anwendung kommenden Modellkonzept mit den dazugehörigen Diskretisierungsverfahren in Abhängigkeit von der Fragestellung hinreichend erfasst werden.

Vor diesem Hintergrund wurden in diesem Projekt Diskretisierungsansätze für die Simulation von Strömungs- und Transportprozesse in geklüftet-porösen Medien entwickelt und untersucht. Als Grundlage wurde der kombinierte Modellansatz verwendet. Die Klüfte werden dabei üblicherweise mit Elementen niedrigerer Dimension diskretisiert als die Matrix. Dieses Vorgehen wird als *niederdimensional* bezeichnet. Dabei ist allerdings die lokale Flusserhaltung am Kluft–Matrix Übergang nicht gewährleistet und der zugrunde liegende physikalische Prozess gegebenenfalls nicht richtig erfasst. Um hier eine bessere Prozessdarstellung zu erreichen, wurde als neuer Ansatz eine *äquidimensionale* Formulierung entwickelt, bei der Kluft und Matrix mit Elementen gleicher Dimension beschrieben werden. Dazu wurde ein Netzgenerator aufbereitet und eine gemeinsame Softwarebasis für die Strömungs- und Transportmodellierung geschaffen.

Zur schnellen und robusten Lösung der diskretisierten Strömungsgleichung wurden neuartige *hierarchische Gebietszerlegungsverfahren* entwickelt. Sie erlauben Abschätzungen der Konvergenzraten, welche nicht von Permeabilität oder Kluftweite abhängen. Die geometrieangepassten Glättungsschritte aus dem ersten Berichtszeitraum ergeben sich durch eine leichte Modifikation, nämlich eine weitere Zerlegung am Kluft/Matrix-Interface. Numerische Simulationen anhand von Modell-Problemen und praktisch relevanten Kluftgeometrien zeigen dementsprechend sehr ähnliche Ergebnisse.

Es wurde auch ein gemischt-hybrides Verfahren für die Strömung entwickelt. Für den Transport wurde u.a. ein Upwinding mit Streamline Orientation entwickelt.

Die Anwendbarkeit und die Eigenschaften der äquidimensionalen und der niederdimensionalen Formulierung wie auch der gewählten numerischen Diskretisierungsverfahren wurde anhand von Modellbeispielen unterschiedlicher geometrischer Komplexität aufgezeigt. Die Ergebnisse zeigen, dass die Verwendung eines äquidimensionalen Ansatzes bei langsameren Systemen mit Klüften quer zur Hauptströmung deutliche Auswirkungen auf die approximierte Lösung im Gesamtsystem hat, während bei schnelleren Systemen eher lokale Effekte auftreten. Der Einsatz gemischt-hybrider Finiter Elemente ist bei äquidimensionaler Formulierung sinnvoll. Das für den Transport verwendete Boxverfahren mit Streamline Orientation in der Matrix erzeugt deutlich steilere Konzentrationsfronten im Matrixbereich als mit reinem Fully Upwinding.