Universität Stuttgart

Mathematisches Institut A
Institut für Wasserbau

Mathematische Modelle für Filtrations- und Ausbreitungsprozesse in porösen Medien

S. Berres, H. Eichel, I. Pflieger, A. Pieringer

Inhaltsverzeichnis

I Modellierung von Mehrphasenprozessen 5

1 Physikalische Grundlagen 6
1.1 Fluidphasen 7
1.2 Poröses Medium 8
1.3 Kapillardruck - Mikroskopische Kapillarität 9
1.4 Sättigung - Makroskopische Kapillarität 11
1.5 Durchlässikeitsbeiwert und Permeabilität 13

2 Mathematische Modellierung 16
2.1 Allgemeine Voraussetzungen und Annahmen 16
2.2 Reynolds'sches Transporttheorem 18
2.3 Allgemeine Bilanzgleichung 18
2.4 Kontinuitätsgleichung je Phase 20
2.5 Fließgesetz von Darcy 22
2.5.1 Erweiterung für Mehrphasenströmungen 22
2.6 Typeinteilung von linearer partieller DGLn zweiter Ordnung . 23
2.7 Allgemeine Form der Mehrphasenströmungs-DGL 26
2.7.1 Druck-Sättigungsformulierung 27
2.7.2 Sättigungsformulierung 28

3 Numerische Modellierung 32
3.1 Problemstellung: Diffusions-/Konvektionsterm 33
3.1.1 Konvektions-Diffusions-Gleichung 33
3.1.2 Mehrphasengleichung – Sättigungsformulierung 35
3.2 Schwache Formulierung 36
3.3 Spezielle numerische Verfahren 38
3.3.1 Standard-Galerkin-FE-Methode 38
3.3.2 Petrov-Galerkin-FE-Methode 41

3.4 Vergleich der Verfahren am Buckley-Leverett-Problem . . 45

4 Die instationäre hyperbolische Transportgleichung 51
4.1 Klassifizierung hyperbolischer DGLn erster Ordnung 52
4.2 Charakteristikenmethode 53
4.3 Lineare hyperbolische Transportgleichung 54
4.4 Quasilineare hyperbolische Transportgleichung 57
4.5 Grenzen der Charakteristikenmethode 60
4.6 Lösung des Buckley-Leverett-Problems 62
4.6.1 Lineare relative Permeabilität-Sättigungs-Beziehung 62
4.6.2 Quadratische rel. Permeabilität-Sättigungs-Beziehung 64

II Modellierung von Sedimentations-Konsolidationsvorgängen 77

5 Modellgleichungen 78
5.1 Einleitung und Gliederung 78
5.2 Erhaltungsgleichungen 79
5.2.1 Annahmen 79
5.2.2 Massen- und Impulserhaltung 79
5.3 Konstitutive Beziehungen 80
5.3.1 Konstitutive Variablen 80
5.3.2 Porendruck und Feststoffspannungsanteil 80
5.3.3 Fest-Flüssig-Interaktionskraft 81
5.4 Relativgeschwindigkeit und Impulsgleichung der Mischung . . 82
5.4.1 Relativgeschwindigkeit 82
5.4.2 Impulserhaltung der Mischung 82
5.5 Dimensionsanalyse 83
5.6 Endgültige Form der Gleichungen 84
5.6.1 Eindimensionaler Fall 85
5.7 Diskussion 85

6 Skalare hyperbolische Erhaltungsgleichungen 88
6.1 Sedimentation mit Kompression 88
6.2 Typeneinteilung für Evolutionsgleichungen 89

6.3 Integral- und Differentialform von Erhaltungsgleichungen . . . 90
6.4 Schwache Lösungen einer skalaren Erhaltungsgleichung . . . 91
6.5 Das Charakteristikenverfahren . . . 92
6.6 Das Riemann-Problem . . . 92
6.7 Stoßgeschwindigkeit . . . 93
6.7.1 Entropielösungen . . . 93
6.8 Geometrische Deutung der Entropiebedingung . . . 94
6.9 Viskositätsansatz . . . 94
6.10 Konstruktion globaler Lösungen . . . 95
6.11 Riemann-Probleme mit konvexer Flußfunktion . . . 96
6.12 Ein Riemann-Problem mit einer nicht-konvexen Flußfunktion . 96

7 Mathematisches Modell der Druckfiltration 99
7.1 Einleitung und Gliederung . . . 99
7.2 Physikalisches Modell . . . 100
7.3 Mathematisches Modell . . . 100
7.3.1 Annahmen . . . 100
7.3.2 Bilanzgleichungen . . . 101
7.3.3 Filterkuchenbildung und Kompaktierung . . . 102
7.3.4 Verknüpfung und Lösung der Systeme . . . 106
7.3.5 Randbedingungen . . . 106
7.3.6 Betriebsarten . . . 109
7.4 Numerische Simulation . . . 110
7.4.1 Modellrechnungen . . . 110
7.5 Zusammenfassung . . . 113

8 Finite Differenzenverfahren 115
8.1 Verfahren erster Ordnung . . . 115
8.1.1 Verfahren zweiter Ordnung . . . 116
8.1.2 Zeitdiskretisierung zweiter Ordnung . . . 117
8.1.3 Eigenschaften des Verfahrens . . . 118
8.2 Dimensions-Zerlegung . . . 118

Teil I

Modellierung von Mehrphasenprozessen

Vortrag 1

Physikalische Grundlagen der Modellierung von Mehrphasenströmungen in porösen Medien

Ausgearbeitet von Astrid Pieringer.

Grundwasservorräte sind die wichtigste Quelle zur Trinkwassergewinnung in Deutschland. Das Hydrosystem Untergrund ist durch eine Vielzahl von Schadstoffen gefährdet, die z.B. aus undichten Deponien, lecken Tanks und Kanälen stammen oder durch Unfälle freigesetzt werden. Viele herkömmliche Strömungs- und Transportmodelle beschreiben die Ausbreitung von Wasser und darin gelösten Komponenten. Einige Substanzklassen, die in der Industrie verwendet werden, sind jedoch nicht in Wasser löslich und bilden eigene Phasen. Zur Beschreibung des Ausbreitungsverhaltens dieser Mehrphasensysteme müssen neue Modelle entwickelt werden, die nach ihrer Kalibrierung Anwendung in der Vorhersage und Sanierungsplanung finden können. Diese Vortragsreihe widmet sich dem Themenbereich der Modellierung von Mehrphasenströmungen in porösen Medien und stellt neben den theoretischen Grundlagen einige wichtige Aspekte der mathematischen und numerischen Modellierung vor.

Der erste Vortrag behandelt die Grundlagen für die Modellierung von Mehrphasenströmungen in porösen Medien. Für das weitere Verständnis im Laufe der Vortragsreihe müssen eine Reihe von Begriffen definiert und einige physikalische Phänomene erläutert werden.

1.1 Fluidphasen

In den hier behandelten Mehrphasensystemen liegen neben Wasser noch weitere Fluidphasen vor.

Definition 1.1 *Fluidphasen sind in sich homogene, d.h. physikalisch gleichartige Bereiche von Fluidkontinua. Einzelne Phasen sind durch scharfe Grenzflächen voneinander getrennt.*

Voraussetzung für die Bildung unterschiedlicher Fluidphasen ist, dass die Fluide auf der Mikroskala nicht mischbar sind. Zwei Flüssigkeiten mit unterschiedlichen physikalischen Eigenschaften (z.B. hydrophob und hydrophil) können somit unterschiedliche Phasen bilden. Es gibt jedoch nur eine Gasphase, da Gase miteinander immer mischbar sind.

In der ungesättigten Zone des Untergrundes werden in der Regel drei Fluidphasen betrachtet:

- Wässrige Phase
- NAPL (Non Aqueous Phase Liquids)
- Gasphase (Bodenluft)

Mit NAPL werden Flüssigkeiten bezeichnet, die nicht mit Wasser mischbar sind. Hierzu gehören viele organische Verbindungen, die als Schadstoffe in den Untergrund gelangen können. Bekannte Beispiele sind Mineralöle und chlorierte Kohlenwasserstoffe (CKW).

In dieser Vortragsreihe wollen wir uns im wesentlichen auf die gesättigte Bodenzone beschränken und deshalb nur zwischen wässriger Phase als benetzender Phase und NAPL als nicht-benetzender Phase unterscheiden.

1.2 Poröses Medium

Untersucht werden hier nur Ausbreitungsvorgänge in Bereichen des Untergrundes, die sich als poröses Medium klassifizieren lassen.

Definition 1.2 *Ein poröses Medium ist ein von Hohlräumen durchsetzter Festkörper. Die Hohlräume stehen zumindest teilweise untereinander in Verbindung.*

Die dreidimensionale Struktur eines solchen Mediums ist äußerst komplex und kann nicht im Detail erfasst werden. Eine Beschreibung der Strömung mit den Navier-Stokes-Gleichungen ist aus diesem Grund nicht möglich. Für die Modellierung beschreibt man den Porenraum des Untergrunds deshalb mit makroskopischen Größen. Wir führen die Porosität ϕ ein, die den Hohlraumanteil am Gesamtvolumen angibt:

$$\phi := \frac{\text{Porenvolumen}}{\text{Gesamtvolumen}}. \tag{1.1}$$

Tatsächlich wird nur ein Teil des Hohlraums durchflossen. Wasser ist unter anderem an Bodenteilchen gebunden oder steht in sogenannten dead-end-pores („Sackgassen“). Die effektive Porosität ist somit geringer als der Hohlraumanteil.

Bei mehreren Fluidphasen gibt man die Porositäten ϕ_α der einzelnen Phasen α an. Diese entsprechen dem Hohlraum, der der Phase α bezogen auf das Gesamtvolumen zur Verfügung steht:

$$\phi_\alpha := \frac{\text{Porenvolumen von der Phase } \alpha \text{ eingenommen}}{\text{Gesamtvolumen}}. \tag{1.2}$$

Bei der Einführung der Porosität erfolgt der Übergang von einer mikroskopischen Betrachtung des Untergrunds auf Porenebene zu einer Betrachtung im makroskopischen Maßstab. Das poröse Medium wird als Kontinuum beschrieben. Zur Überführung des diskreten physikalischen Modells der Materie in das phänomenologische Materiemodell des Kontinuums erfolgt eine Mittelung über die Hohlraumgeometrie im sogenannten *Repräsentativen Elementarvolumen (REV)* [1]. Es wird postuliert, dass ein solches existiert und somit der Hohlraumanteil in einem bestimmten Bereich unabhängig von der Größe des Mittelungsvolumens ist. Dies ist der Fall, wenn Gesteinskörnchen und

Hohlräume jeweils statistisch gleich verteilt sind [3]. Bei Mittelung über Volumina kleiner als das REV treten starke Fluktuationen bei der Porosität auf, je nachdem, ob das Volumen im Bereich einer Pore oder eines Gesteinskörnchens gewählt wird. Auch bei Volumina größer als das REV kann durch großräumige Inhomogenitäten wieder eine Abhängigkeit der Porosität von der Größe des Mittelungsvolumens auftreten (siehe Abbildung 1.1).

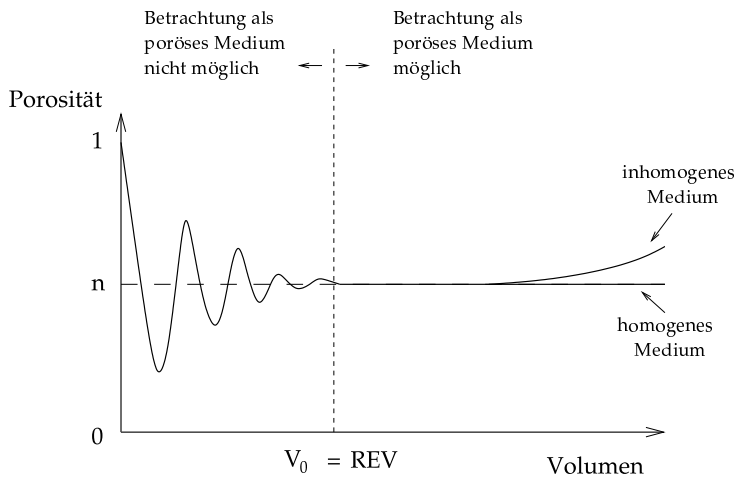

Abbildung 1.1: Definition des REV am Beispiel der Porosität Φ [6]

Beim Übergang zum Kontinuumsmodell entstehen neben der Porosität noch weitere Größen, die auf dem Maßstab einzelner Poren nicht existieren. Im Rahmen dieses Vortrags wird noch auf die Sättigung S und die Permeabilität $\mathbf{K}$ eingegangen.

1.3 Kapillardruck - Mikroskopische Kapillarität

Eine sehr wichtige Größe zur Beschreibung von Mehrphasenströmungen stellt der Kapillardruck dar. Da die folgenden Betrachtungen auf dem Skalenniveau einzelner Poren erfolgen, wird auch die Bezeichnung mikroskopische Kapillarität verwendet. Der Kapillardruck p_{c12} ist definiert als Druckdifferenz, die sich zwischen zwei aneinandergrenzenden Fluidphasen 1 und 2 einstellt:

$$p_{c12} = p_2 - p_1. \tag{1.3}$$

Der Drucksprung an der Fluidgrenzfläche geht zurück auf die Oberflächenspannung, die von molekularen Kräften in (Kohäsion) und zwischen (Adhäsion) den Phasen verursacht wird.

In Poren des porösen Mediums grenzen mit den beiden nicht mischbaren Fluiden und der Festkörpermatrix bis zu drei Phasen aneinander. Zwischen der Grenzfläche der beteiligten Fluide und der Porenwand stellt sich ein Grenzwinkel α ein, dessen Größe von den Stoffeigenschaften der beteiligten Phasen anhängig ist (siehe Abbildung 1.2). Die Fluidphase mit dem spitzen Winkel wird als benetzende Phase bezeichnet. Dies ist in der Regel die wässrige Phase. Die andere Phase, in der Fluidgrenzfläche und Porenwand einen stumpfen Winkel einschließen, erhält die Bezeichnung nicht-benetzende Phase (z.B. NAPL).

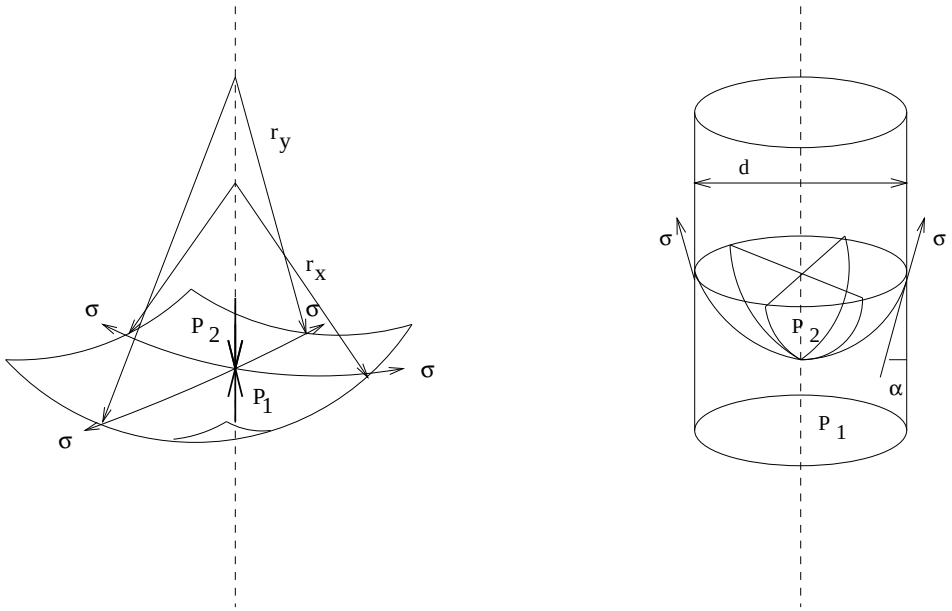

Abbildung 1.2: Grenzflächenelement und Kapillarröhre [5]

In einer Pore mit kreisförmigem Querschnitt bildet sich auf Grund der erläuterten Kapillareffekte eine gewölbte Grenzfläche aus, die sich so einstellt, dass die Energie des Systems ein Minimum annimmt [5].

Die Laplace-Gleichung formuliert die Abhängigkeit des Kapillardrucks

von den Stoffeigenschaften und der Porengeometrie:

$$p_{\mathrm{c}12} = \sigma_{12} \left(\frac{1}{r_x} + \frac{1}{r_y} \right) = \frac{4\,\sigma_{12}\,\cos\alpha}{d} \tag{1.4}$$

Hierbei steht σ_{12} für die Oberflächenspannung zwischen den Fluiden 1 und 2, r_x und r_y für die Krümmungsradien der Grenzfläche und d für den Porendurchmesser (siehe Abbildung 1.2).

Gleichung (1.4) zeigt, dass der Kapillardruck bei gegebenen Stoffeigenschaften indirekt proportional zum Porendurchmesser ist. Daraus kann man ableiten, dass sich Wasser als benetzende Phase bei Verdrängungsvorgängen durch nicht-benetzende Fluide in immer schmalere Poren zurückzieht. Damit einher geht ein Anstieg des Kapillardrucks. Beim umgekehrten Vorgang, d.h. dem Zuführen von Wasser in ein Mehrphasensystem, dringt Wasser nach und nach in immer größere Poren vor. Der Kapillardruck nimmt ab [5].

1.4 Sättigung - Makroskopische Kapillarität

Die Sättigung S wurde bereits als makroskopische Größe eingeordnet. Für die Sättigung S_α der Fluidphase α gilt:

$$S_\alpha := \frac{\phi_\alpha}{\phi}. \tag{1.5}$$

Die Sättigung S_α ist somit der relative Anteil des Porenvolumens, der von der Phase α erfüllt wird.

In einem Mehrphasensystem besteht eine grundlegende Beziehung zwischen Sättigung und Kapillardruck. Eine Vergrößerung der Wassersättigung S_w führt dazu, dass größere Poren mit Wasser befüllt werden. Nach der Laplace-Gleichung (1.4) führt dies zum Absinken des Kapillardrucks. Eine Verkleinerung der Wassersättigung und somit das Verdrängen des Wassers in kleinere Poren ruft dagegen einen Anstieg des Kapillardrucks hervor.

Für die Kapillardruck-Sättigungs-Beziehung $p_\mathrm{c}(S_\mathrm{w})$ wurden verschiedene Parametrisierungen entwickelt: Brooks und Corey (1964) [2], Van Genuchten (1980) [4]. Den qualitativen Verlauf von $p_\mathrm{c}(S_\mathrm{w})$ zeigt Abbildung 1.3. Die verwendeten Parameter sind aus der Abbildung ersichtlich, werden aber in diesem Vortrag nicht näher erläutert.

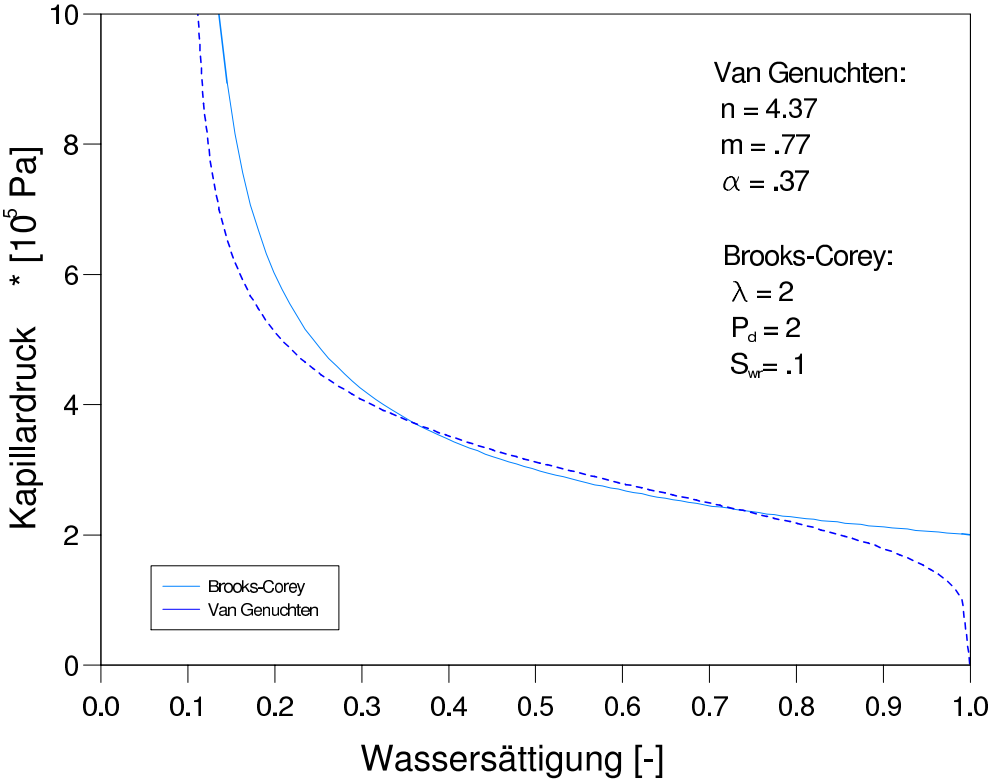

Abbildung 1.3: Kapillardruck-Sättigungs-Beziehung $p_c(S_w)$ nach Brooks-Corey und Van Genuchten [5]

1.5 Durchlässikeitsbeiwert und Permeabilität

Der Durchlässigkeitsbeiwert $\mathbf{K}_\mathrm{f}$ – im allgemeinen Fall ein Tensor 2. Stufe – ist ebenfalls eine makroskopische Größe. Er gibt an, wie gut das poröse Medium für ein bestimmtes Fluid durchgängig ist und drückt somit Zähigkeits- und Adhäsionseffekte aus.

$\mathbf{K}_\mathrm{f}$ lässt sich in fluidunabhängige und fluidabhängige Größen zerlegen. Für Einphasenströmungen gilt:

$$\mathbf{K}_\mathrm{f} = \frac{\rho\, g}{\mu}\,\mathbf{K}. \tag{1.6}$$

ρ ist die Dichte des Fluids, μ die dynamische Viskosität des Fluids und g die Erdbeschleunigung. $\mathbf{K}$ steht für die intrinsische Permeabilität, die ausschließlich eine Funktion des porösen Mediums ist.

Für Mehrphasenströmungen muss Gleichung (1.6) formuliert werden als:

$$\mathbf{K}_{\mathrm{f}\alpha} = k_{\mathrm{r}\alpha}\frac{\rho_\alpha g}{\mu_\alpha}\,\mathbf{K}. \tag{1.7}$$

Gleichung (1.6) und Gleichung (1.7) unterscheiden sich durch den dimensionslosen Faktor $k_{\mathrm{r}\alpha}$, der als relative Permeabilität bezeichnet wird und Werte zwischen 0 und 1 annehmen kann. Liegen im porösen Medium zwei Fluidphasen nebeneinander vor, verringert sich die Durchlässigkeit für das eine Fluid durch die Anwesenheit des anderen. Dem trägt die relative Permeabilität Rechnung.

$k_{\mathrm{r}\alpha}$ ist eine Funktion der Sättigung. Bei Rückkehr auf die Mikroskala wird dies sofort deutlich. Liegen Kapillardruckeffekte vor, besetzt die nicht-benetzende Phase die größeren Poren und verdrängt die benetztende Phase in kleinere Porenkanäle (siehe Gleichung (1.4)). Insbesondere die Strömung der benetzenden Phase wird dadurch behindert. Ihre Fließwege verlängern sich. Je größer die Sättigung der nicht-benetzenden Phase, desto schwieriger wird es also für die benetzende Phase, der die Hauptfließwege nicht mehr zur Verfügung stehen, einen Weg durch das poröse Medium zu finden (siehe Abbildung 1.4).

Für die relative Permeabilitäts-Sättigungs-Beziehung $k_{\mathrm{r}\alpha}(S_\alpha)$ wurden wie für $p_\mathrm{c}(S_\mathrm{w})$ parametrisierte Ansätze entwickelt: Brooks und Corey (1964) [2], Van Genuchten (1980) [4]. Abbildung 1.5 zeigt beide Modelle für ein Zwei-Phasen-System. Die verwendeten Parameter sind aus der Abbildung ersichtlich.

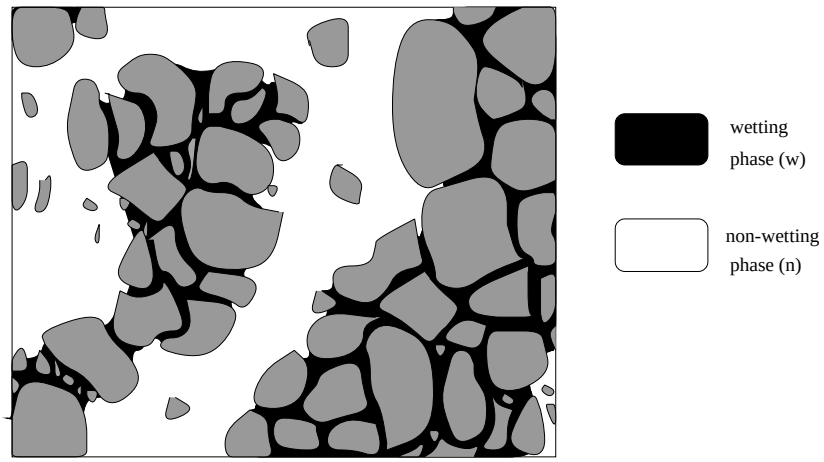

Abbildung 1.4: Dreiphasensystem (benetzende Phase (w), nicht-benetzende Phase (n) und Bodenmatrix) auf der Mikroskala [5]

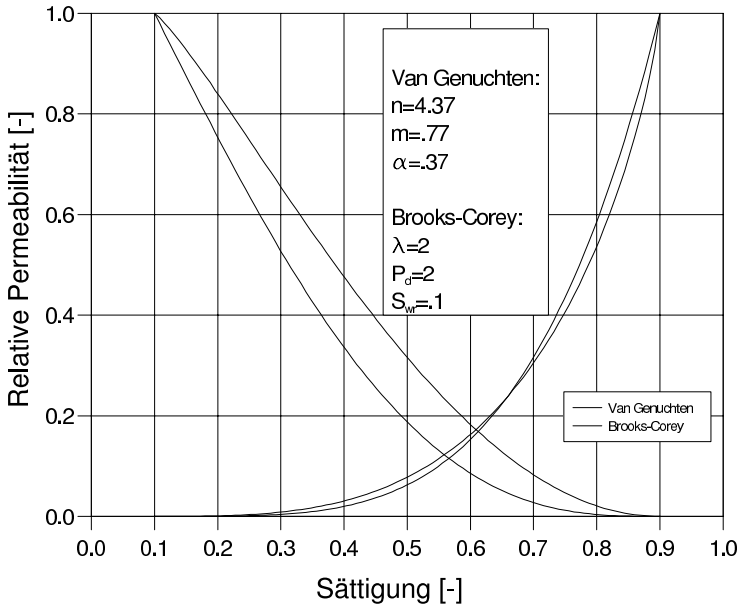

Abbildung 1.5: Relative-Permeabilitäts-Sättigungs-Beziehung $k_{\mathrm{r}\alpha}(S_{\mathrm{w}})$ nach Brooks-Corey und Van Genuchten [5]

Literaturverzeichnis

[1] J. Altenbach, H. Altenbach. *Einführung in die Kontinuumsmechanik*. Teubner, Stuttgart, 1994.

[2] R.H. Brooks, A.T. Corey. *Hydraulic Properties of Porous Media*. Hydrol. Pap., volume 3, Fort Collins, Colorado State University, 1964.

[3] O.A. Cirpka. *Ausbreitungs- und Transportvorgänge in Strömungen*, Teil 1. Vorlesung, Universität Stuttgart, Sommersemester 2002.

[4] M.T. Van Genuchten. *A Closed-Form Equation for Predicting the Hydraulic Conductivity of Unsaturated Soils*. Soil Sci. Soc. Am. J., 44:892-898, 1980.

[5] R. Helmig. *Multiphase Flow and Transport Processes in the Subsurface - A Contribution to the Modeling of Hydrosystems*. Springer Verlag, Berlin, Heidelberg, New York, 1995.

[6] R. Helmig. *Modellierung von Hydrosystemen*. Vorlesung, Universität Stuttgart, Wintersemester 2001/02.

Vortrag 2

Mathematische Modellierung von Mehrphasenströmungen in porösen Medien

Ausgearbeitet von Iris Pflieger.

In diesem Kapitel werden Mehrphasenströmungen mathematisch modelliert. Aus der allgemeinen Bilanzgleichung wird die Kontinuitätsgleichung hergeleitet und anschließend die Mehrphasenströmungsdifferentialgleichung.

2.1 Allgemeine Voraussetzungen und Annahmen

Bei der mathematischen Modellierung von Fließvorgängen werden im Vorfeld einige erleichternde Annahmen getroffen. Im vorliegenden Fall handelt es sich um die Folgenden:

- Zu jeder Zeit und an jedem Punkt des REV (Repräsentatives Elementares Kontrollvolumen) herrscht ein lokales thermodynamisches Gleichgewicht. Dieses Gleichgewicht setzt sich aus drei Gleichgewichtszuständen zusammen:

  - Thermisches Gleichgewicht:
    Das System hat an jedem Punkt die gleiche Temperatur $T_\alpha = T$ (d.h. die Temperatur der Phase α ist gleich der Temperatur des gesamten Systems).
  - Mechanisches Gleichgewicht:
    An den Phasengrenzen ist der Druck gleich. In porösen Medien findet an den Phasengrenzen eine Druckänderung statt. Diese wird mit Hilfe des Kapillardruckes berücksichtigt, so dass ein mechanisches Gleichgewicht angenommen werden kann.
  - Chemisches Gleichgewicht:
    Die Phasen befinden sich hinsichtlich des Stoffaustausches in einem Gleichgewichtszustand.

- Fluidphasen sind untereinander makroskopisch reibungsfrei. Beim Mittelungsprozess entfällt die Haftreibung; diese fließt in die Permeabilität ein.

- Trägheitskräfte sind vernachlässigbar.

- Äußere Kräfte sind zeitlich konstant.

- Die Festphase ist ein Starrkörper; d.h. sie bewegt sich nicht und ändert ihr Volumen nicht.

Im Folgenden unterscheiden wir

- *Intensive Größen:*
  Zustandsgrößen, die sich bei der Zerlegung eines ausgeglichenen und abgeschlossenen Systems nicht ändern, wie Temperatur, Druck, Dichte.

- *Extensive Größen:*
  Zustandsgrößen, die sich bei der Zerlegung des Systems ändern, wie Volumen, Energie, Entropie, und deren Größe man durch Summation über die einzelnen Teile des Systems gewinnt.

Weiterhin finden unsere Betrachtungen bezogen auf das feste Koordinatensystem $(t, x) \in \mathbb{R}^+ \times \mathbb{R}^3$ (Euler'sches Koordinatensystem, der Beobachter steht außerhalb des Systems) statt. Daraus ergibt sich, dass das Kontrollvolumen zeitlich und räumlich unverändert bleibt.

2.2 Reynolds'sches Transporttheorem

Das REYNOLDS'sche Transporttheorem beschreibt die zeitliche Veränderung einer extensiven Größe. Hierzu betrachtet man eine zeitabhängige extensive Größe über einem Gebiet $G(t)$

$$E(t) = \int\limits_{G(t)} e(x,t)\, dG. \tag{2.1}$$

Hierbei kann $E(t)$ z.B die Masse oder Energie als Integral über die Massen- bzw. Energiedichte $e(x,t)$ (intensive Größe) sein. Mit Hilfe der Überlegung, dass sich $E(t)$ nur dann ändert, wenn sich entweder die intensive Größe $e(x,t)$ oder der Integrationsbereich ändert, kommt man zu folgender Gleichung (ohne Beweis)

$$\dot{E}(t) = \lim_{\Delta t \to 0} \frac{E(t+\Delta t) - E(t)}{\Delta t} = \int\limits_{G(t)} \frac{\partial e}{\partial t}\, dG + \int\limits_{\partial G(t)} (\mathbf{v}e)\, \mathbf{n}\, d\sigma. \tag{2.2}$$

Das erste Integral beschreibt die zeitliche Veränderung der intensiven Größe. Das zweite Integral beschreibt den Einfluss durch die Veränderung des Integrationsbereiches. $\mathbf{v}$ steht für die Geschwindigkeit, mit der sich die Integrationsgrenzen ausbreiten, und $\mathbf{n}$ steht für den äußeren Normalenvektor.

Mit Hilfe des GAUSS'schen Integralsatzes

$$\int\limits_{\partial G} (\mathbf{v}e)\, \mathbf{n}\, d\sigma = \int\limits_{G} \operatorname{div}(\mathbf{v}e)\; dG \tag{2.3}$$

kann das Oberflächenintegral in ein Volumenintegral überführt werden. Damit ergibt sich für das REYNOLDS*'sche Transporttheorem*

$$\dot{E}(t) = \frac{d}{dt} \int\limits_{G(t)} e\, dG = \int\limits_{G(t)} \left[\frac{\partial e}{\partial t} + \operatorname{div}(\mathbf{v}e) \right] dG. \tag{2.4}$$

2.3 Allgemeine Bilanzgleichung

Wir betrachten ein System G mit einer Zustandsvariablen

$$E(t) = \int\limits_{G(t)} e(x,t)\, dG\,. \tag{2.5}$$

Die Zustandsvariable beschreibt den Zustand des Systems zum Zeitpunkt $t > t_0$. Mit $E(t_0) = E_0$ wird der Anfangszustand des Systems bezeichnet.

Wirken in einem System keine äußeren Einflüsse, so kann sich die Zustandsvariable zeitlich nicht ändern, d.h. Masse, Impuls und Energie bleiben erhalten und können nicht über die Systemgrenzen hinaus verloren gehen. Man erhält daher folgende allgemein gültige *Erhaltungsgleichung*

$$\frac{d}{dt}E(t) = \frac{d}{dt}\int\limits_{G(t)} e(x,t)\,dG = 0\,. \tag{2.6}$$

Wirken nun äußere Einflüsse (z.B. Flächen- oder Volumenkraft) auf das System G ein, so muss zu einer *Bilanzgleichung* übergegangen werden

$$\frac{d}{dt}\int\limits_{G(t)} e(x,t)\,dG = \underbrace{\int\limits_{G(t)} r(x,t)\,dG}_{\text{Term 1}} - \underbrace{\int\limits_{\partial G(t)} \mathbf{w}(x,t)\mathbf{n}(x,t)\,d\sigma}_{\text{Term 2}}\,. \tag{2.7}$$

Term 1 ist ein Volumenintegral und bewertet eine Größe, die an jedem Punkt wirkt, z.B. die Erdanziehungskraft. Term 2 hingegen ist ein Oberflächenintegral. Es beschreibt die Veränderung der Zustandsgröße dadurch, dass unterschiedliche Erhaltungsgrößen über die Oberfläche in das System hineinkommen, z.B. Energie durch anliegende Wärmestromdichte. Wenn etwas über die Oberfläche in das System eindringt, geschieht das entgegengesetzt zu der Richtung des äußeren Normalenvektors. Daher ist dieser mit einem negativen Vorzeichen versehen. Dadurch wird das, was in das System eintritt, positiv gewertet. Die Einheit von $r(x,t)$ ist die der Erhaltungsgröße pro Zeit pro Volumeneinheit und die Einheit von $\mathbf{w}(x,t)$ ist die der Erhaltungsgröße pro Zeit pro Oberflächeneinheit.

Wendet man das Reynolds'sche Transporttheorem auf die Gleichung an, kann die linke Seite in folgender Form geschrieben werden

$$\int\limits_{G(t)} \left[\frac{\partial e}{\partial t} + \operatorname{div}(\mathbf{v}e)\right] dG = \int\limits_{G(t)} r\,dG + \int\limits_{\partial G(t)} \mathbf{w}\,(-\mathbf{n})\;d\sigma. \tag{2.8}$$

Auf der linken Seite wird nun das Integral auseinander gezogen und der Gauss'sche Integralsatz angewandt, um das Volumenintegral in ein Oberflächenintegral zu überführen. Man erhält die *allgemeine Bilanzgleichung*

$$\int\limits_{G(t)} \frac{\partial e}{\partial t}\,dG = \int\limits_{G(t)} r\,dG - \int\limits_{\partial G(t)} \underbrace{(\mathbf{v}e + \mathbf{w})}_{=:\mathbf{F}}\,\mathbf{n}\,d\sigma. \tag{2.9}$$

$\mathbf{F}$ beschreibt den ein- oder austretenden Fluss über die Oberfläche $\partial G(t)$. $\mathbf{F}$ setzt sich zusammen aus:

- konvektivem Fluss $\mathbf{F}_{\mathrm{K}} = \mathbf{v}e$,
- diffusiv-dispersivem Fluss $\mathbf{F}_{\mathrm{D}} = \mathbf{w}$.

Durch erneutes Anwenden des GAUSS'schen Integralsatzes erhält man die *integrale Form der Bilanzgleichung*

$$\int\limits_{G(t)} \left[\frac{\partial e}{\partial t} + \operatorname{div}(\mathbf{F}) - r \right] dG = 0. \tag{2.10}$$

Die allgemeine Bilanzgleichung gilt für beliebige Gebiete G. Bei stetigem Integranden kann daher zur *Bilanzgleichung in differentieller Form* übergegangen werden

$$\frac{\partial e}{\partial t} + \operatorname{div}(\mathbf{F}) - r = 0. \tag{2.11}$$

Bei diesem Übergang wurde die Stetigkeit von $\frac{\partial e}{\partial t}$, $\operatorname{div}\mathbf{F}$ und $r(x,t)$ gefordert. Diese Stetigkeitsforderung kann unter bestimmten Umständen verletzt sein, z.B. durch Sprünge der Permeabilität an den Phasengrenzen. In solchen Fällen wird G in Teilgebiete zerlegt, in denen die Stetigkeitsforderung hinreichend erfüllt ist, und zusätzlich werden Sprungbedingungen an den Unstetigkeitsstellen formuliert.

2.4 Kontinuitätsgleichung je Phase

Die Kontinuitätsgleichung wird aus der Bilanz über die Fluidmasse m_{g} hergeleitet. Die Fluidmasse (extensive Größe) kann als Volumenintegral über die Massendichte ρ (intensive Größe) ausgedrückt werden. Die Porosität ϕ berücksichtigt, dass nur ein Teil des Volumens von G mit Fluid gefüllt ist

$$E = m_{\mathrm{g}} = \int\limits_{G} \phi\rho \, dG. \tag{2.12}$$

Der diffusiv-dispersiv wirkende Massenstrom $\mathbf{w}$ wird bei der folgenden Bilanzierung nicht weiter untersucht, da der mittlere Fluidmassenstrom sehr viel

größer ist als die Abweichung von diesem Mittel. Nach der Euler'schen Betrachtungsweise lässt sich die *allgemeine Kontinuitätsgleichung* formulieren

$$\int\limits_{G(t)} \left[\frac{\partial \phi \rho}{\partial t} + \operatorname{div}(\phi \rho \mathbf{v}_{\mathrm{a}}) - r \right] dG = 0 \quad \text{mit} \quad r = \rho q. \tag{2.13}$$

q bezeichnet die Volumenquelldichte mit der Einheit $\mathrm{m}^3/\mathrm{m}^3\mathrm{s} = 1/\mathrm{s}$. ρq wird als Massenquelldichte bezeichnet mit der Einheit $\mathrm{kg}/\mathrm{m}^3\mathrm{s}$. Ist $r > 0$, handelt es sich um eine Quelle und im Fall $r < 0$ um eine Senke. $\mathbf{v}_{\mathrm{a}}$ steht für die mittlere effektive Fließgeschwindigkeit oder auch Abstandsgeschwindigkeit genannt.

Wird der Porenraum durch mehrere Phasen ausgefüllt, so spricht man von einem Mehrphasensystem.

Der Herleitung der vorherigen Gleichung folgend erhält man eine Beschreibung für ein Mehrphasensystem, indem man für jede Phase α die Kontinuitätsgleichung aufstellt. Dabei wird die Porosität ϕ durch ϕ_α ersetzt, da die Phase α nicht den gesamten Porenraum ausfüllt. Die *Kontinuitätsgleichung für ein Mehrphasensystem* hat damit folgende Form

$$\int\limits_{G(t)} \left[\frac{\partial \phi_\alpha \rho_\alpha}{\partial t} + \operatorname{div}(\phi_\alpha \rho_\alpha \mathbf{v}_{\mathrm{a}\alpha}) - \rho_\alpha q_\alpha \right] dG = 0. \tag{2.14}$$

Aus Abschnitt 1.4 des vorherigen Vortrages ist

$$S_\alpha = \frac{\phi_\alpha}{\phi} \tag{2.15}$$

bekannt.

Aus dem Zusammenhang zwischen der Abstandsgeschwindigkeit sowie Darcy's Fließgeschwindigkeit (auch Filtergeschwindigkeit genannt) und der effektiven Porosität

$$\mathbf{v}_{\mathrm{a}} = \frac{\mathbf{v}}{\phi}, \qquad \text{bzw.} \quad \mathbf{v}_{\mathrm{a}\alpha} = \frac{\mathbf{v}_\alpha}{\phi_\alpha} \tag{2.16}$$

ergibt sich die *Kontinuitätsgleichung je Phase* α

$$\int\limits_{G(t)} \left[\frac{\partial (S_\alpha \phi \rho_\alpha)}{\partial t} + \operatorname{div}(\rho_\alpha \mathbf{v}_\alpha) - \rho_\alpha q_\alpha \right] dG = 0. \tag{2.17}$$

Hier kann mit derselben Argumentation wie bei der Bilanzgleichung zu der *differentiellen Form der Kontinuitätsgleichung je Phase* α übergegangen werden

$$\underbrace{\frac{\partial(S_\alpha \phi \rho_\alpha)}{\partial t}}_{\text{Term 1}} + \operatorname{div}(\rho_\alpha \mathbf{v}_\alpha) - \rho_\alpha q_\alpha = 0. \tag{2.18}$$

Mit Hilfe der Produktregel wird Term 1 differenziert:

$$\frac{\partial(S_\alpha \phi \rho_\alpha)}{\partial t} = \underbrace{S_\alpha \phi \frac{\partial \rho_\alpha}{\partial t}}_{\text{I}} + \underbrace{S_\alpha \rho_\alpha \frac{\partial \phi}{\partial t}}_{\text{II}} + \underbrace{\phi \rho_\alpha \frac{\partial S_\alpha}{\partial t}}_{\text{III}}. \tag{2.19}$$

Dabei tritt ein Speicher- (I), ein Korngerüst- (II) und ein Sättigungsterm (III) auf. Die ersten beiden Terme berücksichtigen die Kompressibilität des Fluides und des Korngerüstes. Die Speicherung der Phase α durch Änderung des Sättigungsgrades wird durch Term III ausgedrückt. Dieser tritt nur in Mehrphasensystemen auf.

Letztendlich erhält man folgende Form der Kontinuitätsgleichung je Phase α

$$S_\alpha \phi \frac{\partial \rho_\alpha}{\partial t} + S_\alpha \rho_\alpha \frac{\partial \phi}{\partial t} + \phi \rho_\alpha \frac{\partial S_\alpha}{\partial t} + \operatorname{div}(\rho_\alpha \mathbf{v}_\alpha) - \rho_\alpha q_\alpha = 0. \tag{2.20}$$

2.5 Fließgesetz von Darcy

Es gibt zwei Möglichkeiten, um das Fließgesetz von Darcy zu erhalten. Zum einen experimentell und zum anderen durch Herleitung, ausgehend von der Navier-Stokes-Gleichung. Letztere Möglichkeit wird hier nicht behandelt, da hierfür einige Annahmen über das System getroffen werden müssen, die jedoch die Eignung und Anwendbarkeit von Darcy's Gesetz einschränken.

2.5.1 Erweiterung des Fließgesetzes für Mehrphasenströmungen

Eine große Anzahl von Experimenten hat gezeigt, dass sich die Filtergeschwindigkeit für die Phase α in porösen Medien mit dem erweiterten Darcy-Gesetz beschreiben lässt

$$\mathbf{v}_\alpha = -\frac{1}{\mu_\alpha} \mathbf{K}_\alpha \left(\operatorname{grad} p_\alpha - \rho_\alpha \mathbf{g} \right). \tag{2.21}$$

Dabei ist μ_α die dynamische Viskosität mit der Einheit $^{\mathrm{kg}}/_{\mathrm{ms}}$. Mit Hilfe der relativen Permeabilität $k_{r\alpha}$ lässt sich die Permeabilität der Phase α mit der fluidunabhängigen Permeabilität $\mathbf{K}$ in Beziehung setzen

$$\mathbf{K}_\alpha = k_{r\alpha}\mathbf{K}. \tag{2.22}$$

Die relative Permeabilität $k_{r\alpha}$ wird in Messungen bestimmt. Weiterhin wird die Mobilität λ_α der Phase α eingeführt

$$\lambda_\alpha := \frac{k_{r\alpha}}{\mu_\alpha}. \tag{2.23}$$

Diese Beziehungen werden in Gleichung (2.21) eingesetzt, und damit erhält man folgendes *Fließgesetz von Darcy für ein Mehrphasensystem*

$$\mathbf{v}_\alpha = -\lambda_\alpha \mathbf{K} \left(\operatorname{grad} p_\alpha - \rho_\alpha \mathbf{g}\right). \tag{2.24}$$

2.6 Typeinteilung von linearen partiellen Differentialgleichungen zweiter Ordnung

Definition 2.1 *Als lineare partielle Differentialgleichung zweiter Ordnung bezeichnet man eine Differentialgleichung im $\mathbb{R}^n$, in der die zweiten Ableitungen linear auftreten.*

Allgemein lassen sich lineare partielle Differentialgleichungen 2. Ordnung wie folgt darstellen:

$$\underbrace{\sum_{j,k=1}^{n} A_{jk}(x)}_{\text{linearer Hauptteil}} \frac{\partial^2 u}{\partial x_j \partial x_k} + F(x, u, \nabla u) = 0; \tag{2.25}$$

mit der symmetrischen Koeffizientenmatrix A:

$$A_{jk}(x) = A_{kj}(x). \tag{2.26}$$

Aus der linearen Algebra ist bekannt, dass die Eigenwerte einer symmetrischen Matrix reell sind. Daher kann die Klassifikation nach den Vorzeichen der Eigenwerte der Koeffizientenmatrix erfolgen.

Definition 2.2

- *Die partielle Differentialgleichung 2. Ordnung heißt* elliptisch im Punkt $\mathbf{x} \in \mathbf{\Omega} \subset \mathbb{R}^{\mathbf{n}}$, *falls alle Eigenwerte das gleiche Vorzeichen haben.*
- *Die partielle Differentialgleichung 2. Ordnung heißt* hyperbolisch im Punkt $\mathbf{x} \in \mathbf{\Omega} \subset \mathbb{R}^{\mathbf{n}}$, *falls ein Eigenwert negativ und* $(n-1)$ *Eigenwerte positiv sind oder ein Eigenwert positiv und* $(n-1)$ *Eigenwerte negativ sind.*
- *Die partielle Differentialgleichung 2. Ordnung heißt* parabolisch im Punkt $\mathbf{x} \in \mathbf{\Omega} \subset \mathbb{R}^{\mathbf{n}}$, *falls ein Eigenwert gleich Null ist und die anderen* $(n-1)$ *Eigenwerte das gleiche Vorzeichen haben.*

Beispiele für partielle Differentialgleichungen 2. Ordnung

- Laplace-Gleichung

$$\Delta u = 0 \quad \text{bzw.} \quad \sum_{i=1}^{n} \frac{\partial^2 u}{\partial x_i^2} = 0, \qquad \mathbf{x} = (x_1, x_2, \ldots, x_n),$$
$$A(\mathbf{x}) = I = \begin{pmatrix} 1 & 0 & \ldots & 0 \\ 0 & \ddots & & 0 \\ \vdots & & \ddots & \vdots \\ 0 & 0 & \ldots & 1 \end{pmatrix}. \tag{2.27}$$

  Eigenwerte: $\lambda_i = 1, \quad i = 1, 2, ..., n-1, \quad \lambda_{\mathrm{n}} = 1.$
  Da alle Eigenwerte positiv sind, handelt es sich hierbei um eine elliptische Differentialgleichung 2. Ordnung.

- Wärmeleitungsgleichung

$$\frac{\partial u}{\partial t} - a^2 \Delta u = 0 \quad \text{bzw.} \quad \frac{\partial u}{\partial t} - \sum_{i=1}^{n-1} \frac{\partial^2 u}{\partial x_i^2} = 0, \quad \mathbf{x} = (x_1, x_2, ..., x_{n-1}, t),$$
$$A(\mathbf{x}) = \begin{pmatrix} -a^2 & 0 & \ldots & 0 & 0 \\ 0 & \ddots & & \vdots & \vdots \\ \vdots & & \ddots & \vdots & \vdots \\ 0 & 0 & \ldots & -a^2 & 0 \\ 0 & 0 & \ldots & 0 & 0 \end{pmatrix}.$$

(2.28)

Eigenwerte: $\lambda_i = -a^2, \quad i = 1, 2, ..., n-1, \quad \lambda_\mathrm{n} = 0.$
Bei der Aufstellung der Koeffizientenmatrix muss berücksichtigt werden, dass der Laplace-Operator nur die partielle zweite Ableitung der Ortsvariablen aufsummiert. In der Wärmeleitungsgleichung ist allerdings die Zeit die n-te Dimension. Da keine zweite Ableitung nach der Zeit vorhanden ist, ist der Eintrag $a_{nn} = 0$. Somit ist ein Eigenwert gleich Null und $n-1$ Eigenwerte sind negativ. Folglich handelt es sich bei der Wärmeleitungsgleichung um eine parabolische Differentialgleichung 2. Ordnung.

- Wellengleichung

$$\frac{\partial^2 u}{\partial t^2} - a^2 \Delta u = 0, \qquad \mathbf{x} = (x_1, x_2, ..., x_{n-1}, t),$$
$$A(\mathbf{x}) = \begin{pmatrix} -a^2 & 0 & \dots & 0 & 0 \\ 0 & \ddots & & \vdots & \vdots \\ \vdots & & \ddots & \vdots & \vdots \\ 0 & 0 & \dots & -a^2 & 0 \\ 0 & 0 & \dots & 0 & 1 \end{pmatrix}. \tag{2.29}$$

Eigenwerte: $\lambda_i = -a^2, \quad i = 1, 2, ..., n-1, \quad \lambda_\mathrm{n} = 1.$
Hier ist wie bei der Wärmeleitungsgleichung zu berücksichtigen, dass der Laplace-Operator keine zweite partielle Ableitung nach der Zeit bildet. In der Wellengleichung tritt jedoch die zweite partielle Ableitung nach der Zeit explizit auf. Daher ist der Eintrag $a_{nn} = 1$ in der Koeffizientenmatrix, und es handelt sich bei der Wellengleichung um eine hyperbolische Differentialgleichung 2. Ordnung.

2.7 Allgemeine Form der Mehrphasenströmungsdifferentialgleichung

Setzt man das DARCY-Gesetz (2.24) in die Kontinuitätsgleichung (2.20) ein, erhält man ein *Differentialgleichungssystem für ein Mehrphasensystem*

$$\begin{aligned}&\phi\rho_\alpha \frac{\partial S_\alpha}{\partial t} + \rho_\alpha S_\alpha \frac{\partial \phi}{\partial t} + \phi S_\alpha \frac{\partial \rho_\alpha}{\partial p}\frac{\partial p}{\partial t}\\ &- \operatorname{div}\left(\rho_\alpha \frac{k_{\mathrm{r}\alpha}}{\mu_\alpha}\mathbf{K}\left(\operatorname{grad} p_\alpha - \rho_\alpha \mathbf{g}\right)\right) - \rho_\alpha q_\alpha = 0,\end{aligned} \tag{2.30}$$

mit den Nebenbedingungen:

$$\sum_{\alpha=1}^{n} S_\alpha = 1, \qquad \text{wobei } n \text{ die Anzahl der Phasen ist;} \tag{2.31}$$

$$p_{\mathrm{c}\psi\alpha} = p_\psi - p_\alpha = f\left(S_\alpha\right). \tag{2.32}$$

Der Kapillardruck $p_{\mathrm{c}\psi\alpha}$ ist eine nichtlineare Funktion in S_α. Die relative Permeabilität $k_{\mathrm{r}\alpha}$ weist ebenfalls eine starke nichtlineare Abhängigkeit von der Sättigung S_α auf. Demzufolge handelt es sich bei obigem Differentialgleichungssystem um ein nichtlineares gekoppeltes dynamisches System, welches die gleichzeitige Bewegung zweier oder mehrerer nichtmischbarer Fluide in einem porösen Medium beschreibt.

Nichtlineare Systeme bereiten große Probleme bei ihrer Lösung. Daher wurden Formulierungen in Abhängigkeit von der Problemstellung und den zur Verfügung stehenden numerischen Verfahren entwickelt. Diese Formulierungen unterscheiden sich in der Wahl der Unbekannten.

- Druck-Formulierung
  - Wird in Abhängigkeit vom jeweiligen unbekannten Druck je Phase aufgestellt.
- Druck-Sättigungsformulierung
  - Wird in Abhängigkeit des Drucks der Phase mit der höchsten Affinität und der Sättigung der anderen Phasen aufgestellt.

- Sättigungsformulierung
  - Wird in Abhängigkeit der Sättigungen der jeweiligen Phasen aufgestellt.

Bei der Druck-Formulierung muss der Gradient des Kapillardrucks echt größer Null sein. Dies ist aber bei der hier vorliegenden Problemstellung nicht der Fall, weswegen nicht weiter auf diese Formulierung eingegangen wird.

Die beiden letzteren Formulierungen werden anhand von Zweiphasensystemen mit $\frac{\partial \phi}{\partial t} \equiv 0$ und isothermen Bedingungen (homogene Temperatur) aufgezeigt. Zusätzlich werden zwei weiter Annahmen getroffen:

- $\frac{\partial \phi}{\partial p} = 0$
  Veränderungen des Korngerüstes in Abhängigkeit vom Fluiddruck können wegen der geringen Druckdifferenz vernachlässigt werden.

- $\frac{\partial \phi}{\partial S} = 0$
  Das Korngerüst kann nicht, wie es z.B. bei Ton der Fall wäre, aufgrund veränderter Sättigungsgrade schrumpfen oder aufquellen.

2.7.1 Druck-Sättigungsformulierung

Man hat folgende Unbekannte:

- $p_\mathrm{w}, p_\mathrm{n}, S_\mathrm{w}, S_\mathrm{n}$, wobei n für die nicht-benetzende Phase und w für die benetzende Phase steht.

Aus den Nebenbedingungen (2.31) und (2.32) ist bekannt:

- $p_\mathrm{c} = p_\mathrm{n} - p_\mathrm{w}$,
- $S_\mathrm{w} + S_\mathrm{n} = 1$.

Daraus ergibt sich Folgendes:

$$\operatorname{grad} p_\mathrm{n} = \operatorname{grad}(p_\mathrm{w} + p_\mathrm{c}) = \operatorname{grad} p_\mathrm{w} + \operatorname{grad} p_\mathrm{c}, \tag{2.33}$$

$$\frac{\partial S_\mathrm{w}}{\partial t} = \frac{\partial}{\partial t}(1 - S_\mathrm{n}) = -\frac{\partial S_\mathrm{n}}{\partial t}. \tag{2.34}$$

Setzt man dies in Gleichung (2.30) ein, erhält man für die *benetzende Phase* (z.B. Wasser):

$$-\phi\frac{\partial(\rho_\mathrm{w}S_\mathrm{n})}{\partial t} - \operatorname{div}\left(\lambda_\mathrm{w}\rho_\mathrm{w}\mathbf{K}\left(\operatorname{grad} p_\mathrm{w} - \rho_\mathrm{w}\mathbf{g}\right)\right) - \rho_\mathrm{w}q_\mathrm{w} = 0 \tag{2.35}$$

und für die *nicht-benetzende Phase* (z.B. Gas oder NAPL):

$$\phi\frac{\partial(\rho_\mathrm{n}S_\mathrm{n})}{\partial t} - \operatorname{div}\left(\lambda_\mathrm{n}\rho_\mathrm{n}\mathbf{K}\left(\operatorname{grad} p_\mathrm{w} + \operatorname{grad} p_\mathrm{c} - \rho_\mathrm{n}\mathbf{g}\right)\right) - \rho_\mathrm{n}q_\mathrm{n} = 0. \tag{2.36}$$

Das vorliegende System ist ein stark gekoppeltes System von parabolischem Typ: Der Operator div(grad) entspricht dem Laplace-Operator. Daher treten zweite Ableitungen nach den Ortsvariablen auf, aber keine zweite Ableitung in der Zeit. Also ist ein Eigenwert der Koeffizientenmatrix Null, und es handelt sich somit nach Definition 2.2 um eine parabolische Differentialgleichung.

Der Vorteil dieser Formulierung liegt darin, dass der Kapillardruckgradient explizit auftritt. Somit eignet sich die Formulierung auch für Systeme mit Teilbereichen, in denen $\frac{\partial p_\mathrm{c}}{\partial S_\mathrm{w}}$ sehr klein ist. Es können daher homogene sowie heterogene Systeme beschrieben werden.

Die Druck-Sättigungsformulierung findet in der Erdölindustrie Anwendung, da dort häufig der Fall zweier inkompressibler Fluide (Wasser und Öl) vorliegt.

2.7.2 Sättigungsformulierung

Die hier vorgestellte Formulierung gilt nur für inkompressible Fluide, d.h. ρ ist konstant in Raum und Zeit. Man erhält die Zweiphasenströmungsgleichung, indem man die gleichen Nebenbedingungen wie bei der Druck-Formulierung in Gleichung (2.30) einsetzt:
benetzende Phase:

$$\phi\frac{\partial(\rho_\mathrm{w}S_\mathrm{w})}{\partial t} + \operatorname{div}\left(\rho_\mathrm{w}\mathbf{v}_\mathrm{w}\right) - \rho_\mathrm{w}q_\mathrm{w} = 0; \tag{2.37}$$

nicht-benetzende Phase:

$$\phi\frac{\partial\left(\rho_\mathrm{n}(1-S_\mathrm{w})\right)}{\partial t} + \operatorname{div}\left(\rho_\mathrm{n}\mathbf{v}_\mathrm{n}\right) - \rho_\mathrm{n}q_\mathrm{n} = 0. \tag{2.38}$$

Gleichung (2.37) wird durch ρ_w dividiert und analog Gleichung (2.38) durch ρ_n. Zusätzlich wird die Produktregel auf die jeweils ersten Summanden und

das Divergenzgesetz $\operatorname{div}(\rho_\mathrm{n}\mathbf{v}_\mathrm{n}) = \mathbf{v}_\mathrm{n} \cdot \operatorname{grad} \rho_\mathrm{n} + \rho_\mathrm{n} \operatorname{div} \mathbf{v}_\mathrm{n}$ angewandt. Durch anschließende Addition beider Gleichungen und Einführung der totalen Geschwindigkeit $\mathbf{v}_\mathrm{t} = \mathbf{v}_\mathrm{n} + \mathbf{v}_\mathrm{w}$ erhält man

$$\begin{aligned} \operatorname{div} \mathbf{v}_\mathrm{t} &= \operatorname{div}(\mathbf{v}_\mathrm{w} + \mathbf{v}_\mathrm{n}) \\ &= q_\mathrm{n} + q_\mathrm{w} - \frac{1}{\rho_\mathrm{n}} \mathbf{v}_\mathrm{n} \operatorname{grad} \rho_\mathrm{n} - \frac{1}{\rho_\mathrm{w}} \mathbf{v}_\mathrm{w} \operatorname{grad} \rho_\mathrm{w} \\ &\quad - \phi \left[\frac{(1 - S_\mathrm{w})}{\rho_\mathrm{n}} \frac{\partial \rho_\mathrm{n}}{\partial t} + \frac{S_\mathrm{w}}{\rho_\mathrm{w}} \frac{\partial \rho_\mathrm{w}}{\partial t} \right] \end{aligned} \tag{2.39}$$

Da beide Fluide inkompressibel sind, verschwinden alle Terme, in denen ρ_n bzw. ρ_w differenziert werden. Damit bleibt:

$$\operatorname{div} \mathbf{v}_\mathrm{t} = q_\mathrm{n} + q_\mathrm{w} = q_\mathrm{t}. \tag{2.40}$$

Wird nun das Darcy-Gesetz für $\mathbf{v}_\mathrm{n}$ und $\mathbf{v}_\mathrm{w}$ formuliert, und werden die Gleichungen geeignet kombiniert und diese wieder in die ursprüngliche Gleichung (2.37) eingesetzt, erhält man folgende resultierende Gleichung

$$\operatorname{div} \left[f_\mathrm{n} \mathbf{v}_\mathrm{t} - \overline{\lambda} \mathbf{K} \left(\operatorname{grad} p_\mathrm{c} + \rho_\mathrm{w} \mathbf{g} - \rho_\mathrm{n} \mathbf{g} \right) \right] = \phi \frac{\partial S_\mathrm{w}}{\partial t} + q_\mathrm{n}. \tag{2.41}$$

Mit den fraktionalen Durchflusskoeffizienten f_n und f_w sowie der Mobilität $\overline{\lambda}$:

$$f_\mathrm{n} := \frac{\lambda_\mathrm{n}}{\lambda_\mathrm{w} + \lambda_\mathrm{n}}, \tag{2.42}$$

$$f_\mathrm{w} := \frac{\lambda_\mathrm{w}}{\lambda_\mathrm{w} + \lambda_\mathrm{n}} \tag{2.43}$$

$$\Rightarrow f_\mathrm{w} + f_\mathrm{n} = 1 \tag{2.44}$$

und

$$\overline{\lambda} = \frac{\lambda_\mathrm{w} \lambda_\mathrm{n}}{\lambda_\mathrm{w} + \lambda_\mathrm{n}}. \tag{2.45}$$

Mit Hilfe des Umformungsgesetzes für die Divergenz und den Gradienten lassen sich einige Terme in Abhängigkeit von der Sättigung ausdrücken, so

dass man letztendlich die *Sättigungsdifferentialgleichung* erhält

$$\underbrace{-\operatorname{div}\left[\overline{\lambda}\mathbf{K}\frac{dp_{\mathrm{c}}}{dS_{\mathrm{w}}}\operatorname{grad}S_{\mathrm{w}}\right]}_{\text{Term 1}}\underbrace{-\left[\mathbf{v}_{\mathrm{t}}\frac{df_{\mathrm{w}}}{dS_{\mathrm{w}}}+\mathbf{K}\left(\rho_{\mathrm{w}}\mathbf{g}-\rho_{\mathrm{n}}\mathbf{g}\right)\frac{d\overline{\lambda}}{dS_{\mathrm{w}}}\right]\operatorname{grad}S_{\mathrm{w}}}_{\text{Term 2}}-$$
$$\underbrace{-\phi\frac{\partial S_{\mathrm{w}}}{\partial t}}_{\text{Term 3}}+\underbrace{\left(q_{\mathrm{w}}-f_{\mathrm{w}}q_{\mathrm{t}}\right)}_{\text{Term 4}}=0. \quad (2.46)$$

Die Zweiphasensättigungsdifferentialgleichung setzt sich aus dem dispersiven Anteil (Term 1), dem konvektiven Anteil (Term 2), dem Massenanteil (Term 3) und den Quellen- und Senktermen (Term 4) zusammen.

Für die Lösung dieser Gleichung ist wichtig, dass die totale Geschwindigkeit $\mathbf{v}_{\mathrm{t}}$ vorab bestimmt wurde.

Die Sättigungsgleichung ist eine parabolische Differentialgleichung, da der Operator div(grad) auftritt und dieser dem Laplace-Operator entspricht, jedoch keine zweite Ableitung nach der Zeit vorhanden ist. Es ist jedoch deutlich ersichtlich, dass dies nur der Fall ist, wenn der Kapillardruckgradient signifikant ist. Bei verschwindendem Kapillardruckgradient ($\frac{dp_{\mathrm{c}}}{dS_{\mathrm{w}}} \backsimeq 0$) kann Term 1 in obiger Gleichung vernachlässigt werden und die Sättigungsgleichung wird zu einer hyperbolischen Differentialgleichung erster Ordnung. Genauer ist es eine quasilineare Gleichung, da der fraktionale Durchflusskoeffizient f_{w} nichtlinear von der Sättigung abhängt. Daraus folgt, dass der Kapillardruckgradient ausschlaggebend für den Typ der Differentialgleichung ist.

Zusammenfassend hat man nun eine Differentialgleichung, die eine Mehrphasenströmung in einem porösen Medium in Abhängigkeit der Sättigung der benetzenden Phase beschreibt. Auf das Lösungsverhalten dieser Gleichung wird in Kapitel 4 eingegangen.

Literaturverzeichnis

[1] R. Helmig. *Multiphase Flow and Transport Processes in the Subsurface - A Contribution to the Modeling of Hydrosystems.* Springer Verlag, Berlin, Heidelberg, New York, 1995.

[2] A.M. Sändig. *Partielle Differentialgleichungen für Ingenieure.* Vorlesung, Universität Stuttgart, Wintersemester 2001/02.

Vortrag 3

Numerische Modellierung von Mehrphasenströmungen in porösen Medien

Ausgearbeitet von Astrid Pieringer.

Die Lösung der im zweiten Vortrag hergeleiteten Mehrphasengleichungen, die ein System von gekoppelten nichtlinearen partiellen Differentialgleichungen darstellen, ist im Allgemeinen nicht analytisch möglich. Man muss sich deshalb auf Näherungslösungen beschränken. Da nur begrenzte Ressourcen zur Verfügung stehen, können auch nur endlich viele Informationen berechnet werden, was mit einer Diskretisierung des Problems einhergeht.

In der Strömungsmechanik haben sich drei große Gruppen von numerischen Verfahren durchgesetzt: Finite-Differenzen-, Finite-Volumen- und Finite-Elemente-Verfahren. Um dem speziellen Charakter der Mehrphasengleichungen gerecht zu werden, müssen Abwandlungen der Standardverfahren eingesetzt werden. Insbesondere die Diskretisierung der nichtlinearen Konvektionsterme erfordert äußerste Sorgfalt.

3.1 Problemstellung: Diffusions-/Konvektionsterm

Die Differentialgleichungen der Mehrphasenströmungen enthalten sowohl diffusive als auch konvektive Flussterme. Bei der numerischen Modellierung bereitet insbesondere die Diskretisierung des konvektiven Terms Schwierigkeiten.

3.1.1 Konvektions-Diffusions-Gleichung

Um die speziellen Transporteigenschaften von Diffusions- und Konvektionsströmen näher kennenzulernen und mögliche Diskretisierungsmethoden vorzustellen, wollen wir zunächst die eindimensionale, stationäre Konvektions-Diffusions-Gleichung für die Bilanzgröße u betrachten. Quell- und Senkterme werden vernachlässigt:

$$\underbrace{\frac{d}{dx}\overbrace{(v\,u)}^{F_\mathrm{K}}}_{\text{Konvektiver Term}} = \underbrace{\frac{d}{dx}\overbrace{\left(D\frac{du}{dx}\right)}^{F_\mathrm{D}}}_{\text{Diffusiver Term}}. \tag{3.1}$$

v ist die Geschwindigkeit des konvektiven Transports, D der Diffusionskoeffizient. F_K bezeichnet den konvektiven Fluss, F_D den diffusiven Fluss.

Als Randbedingungen werden vorgegeben:

$$\begin{aligned} u(x=0) &= u_i, \\ u(x=h) &= u_j. \end{aligned} \tag{3.2}$$

Für konstantes v und D ($D \neq 0$) lässt sich Gleichung (3.1) umformen zu:

$$\frac{d^2u(x)}{dx^2} - \frac{v}{D}\frac{d\,u(x)}{dx} = 0. \tag{3.3}$$

Gleichung (3.3) ist eine homogene lineare gewöhnliche Differentialgleichung 2. Ordnung mit konstanten Koeffizienten. Ihre Lösung kann analytisch bestimmt werden:

$$\frac{u(x)-u_i}{u_j-u_i} = \frac{e^{Pe\,\frac{x}{h}}-1}{e^{Pe}-1}. \tag{3.4}$$

mit

$$Pe = \frac{v\ \Delta l}{D}. \tag{3.5}$$

Die Peclet-Zahl Pe ist ein Maß für das Verhältnis von Konvektion zu Diffusion. Δl steht für eine charakteristische Länge. Im vorliegenden Fall wurde $\Delta l = h$ gewählt.

Abbildung 3.1 zeigt den Verlauf der Lösung für unterschiedliche Peclet-Zahlen. Für kleine Peclet-Zahlen ($\mid Pe \mid \simeq 0$) liegt ein diffusionsdominierter Transportprozess vor. Die Größe u verläuft linear zwischen $x = 0$ und $x = h$. Für große Peclet-Zahlen ($\mid Pe \mid \gg 1$) ist der Prozess konvektionsdominiert. Der Oberstromwert von u dominiert.

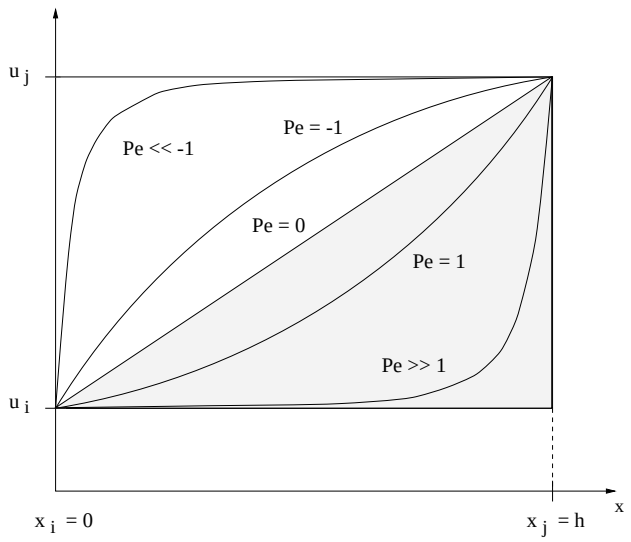

Abbildung 3.1: Analytische Lösung für die eindimensionale Konvektions-/ Diffusionsgleichung für unterschiedliche Peclet-Zahlen [3]

In Abbildung 3.2 sieht man eine mögliche Wiedergabe dieses Verhaltens in der Diskretisierung. Für diffusionsdominierte Prozesse bietet sich eine lineare Interpolation zwischen den Knoten i und j an. Bei dominierender Konvektion ist sogenannten *Upwind-Verfahren* der Vorzug zu geben. Zwischen i und j wird der Oberstromwert u_i für u angesetzt.

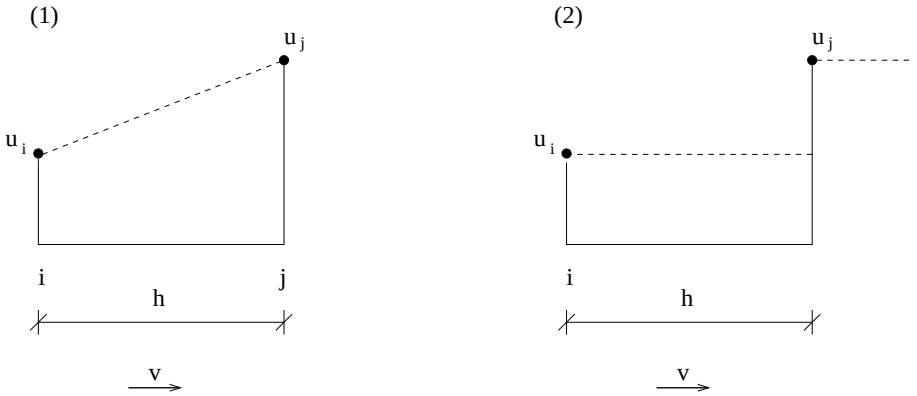

Abbildung 3.2: Mögliche Diskretisierung für diffusionsdominierte (1) und konvektionsdominierte (2) Prozesse

3.1.2 Mehrphasengleichung – Sättigungsformulierung

Um den Bogen zu den Mehrphasengleichungen zu spannen, erfolgt eine kurze Rückschau auf den zweiten Vortrag: In der Sättigungsformulierung der Mehrphasengleichungen für zwei Phasen (2.46) können diffusiver und konvektiver Anteil direkt identifiziert werden:

$$\underbrace{-\operatorname{div}\left[\bar{\lambda}\mathbf{K}\frac{dp_{\mathrm{c}}}{dS_{\mathrm{w}}}\operatorname{grad}S_{\mathrm{w}}\right]}_{\text{diffusiver Anteil}}\underbrace{-\left[\mathbf{v}_{\mathrm{t}}\frac{df_{\mathrm{w}}}{dS_{\mathrm{w}}}+\mathbf{K}\left(\rho_{\mathrm{w}}\mathbf{g}-\rho_{\mathrm{n}}\mathbf{g}\right)\frac{d\bar{\lambda}}{dS_{\mathrm{w}}}\right]\operatorname{grad}S_{\mathrm{w}}}_{\text{konvektiver Anteil}}-$$
$$-\underbrace{\phi\frac{\partial S_{\mathrm{w}}}{\partial t}}_{\text{Speicherterm}}+\underbrace{\left(q_{\mathrm{w}}-f_{\mathrm{w}}q_{\mathrm{t}}\right)}_{\text{Quell- und Senkterme}}=0 \quad (3.6)$$

(Gültigkeitsvoraussetzungen und Erläuterung der Variablen siehe Vortrag 2).

Für signifikante Kapillardruckgradienten $\frac{dp_{\mathrm{c}}}{dS_{\mathrm{w}}}$ ist die Differentialgleichung parabolisch. Kann der Kapillardruckgradient jedoch vernachlässigt werden ($\frac{dp_{\mathrm{c}}}{dS_{\mathrm{w}}} \simeq 0$), geht die Zweiphasensättigungsgleichung in eine hyperbolische Differentialgleichung über.

Werden weiterhin noch die Gravitation $\mathbf{g}$ sowie Quell- und Senkterme vernachlässigt, erhält man die hyperbolische Buckley-Leverett Gleichung,

die rein konvektiven Transport beschreibt:

$$\phi \frac{\partial S_{\mathrm{w}}}{\partial t} + \mathbf{v}_{\mathrm{t}} \frac{df_{\mathrm{w}}}{dS_{\mathrm{w}}} \cdot \operatorname{grad} S_{\mathrm{w}} = 0. \tag{3.7}$$

3.2 Schwache Formulierung

Die schwache Formulierung ist Ausgangsbasis für die Gruppe der Finite-Elemente-Verfahren. Die Herleitung erfolgt am Beispiel der allgemeinen Bilanzgleichung (3.8) für die Größe u in der lokalen Formulierung:

$$\frac{\partial u(\mathbf{x}, t)}{\partial t} + \operatorname{div}(\mathbf{F}(u(\mathbf{x}, t))) - r = 0. \tag{3.8}$$

$\mathbf{F}$ stellt den Flussvektor, $\mathbf{n}$ den Normaleneinheitsvektor dar.
Zur Lösung des Problems im Gebiet G mit dem Rand $\Gamma = \Gamma_{\mathrm{D}} \cup \Gamma_{\mathrm{N}}$ sei gegeben:

$$\begin{aligned} &u(\mathbf{x}, 0) = u_0(\mathbf{x}) \quad \text{für } t = 0, \mathbf{x} \in G, \\ &u(\mathbf{x}, t) = u_{\mathrm{D}}(\mathbf{x}, t) \quad \text{für } t \geq 0, \mathbf{x} \in \Gamma_{\mathrm{D}}, \\ &\mathbf{F}(u(\mathbf{x}, t)) \cdot \mathbf{n} = F_{\mathrm{N}}(u(\mathbf{x}, t)) \quad \text{für } t \geq 0, \mathbf{x} \in \Gamma_{\mathrm{N}}. \end{aligned} \tag{3.9}$$

Der Rand Γ_{D} auf dem die Funktion u selbst gegeben ist, heißt Dirichlet-Rand. Auf dem Neumann-Rand Γ_{N} ist die Normalenableitung des Flusses der Größe u vorgegeben, was dem Fluss senkrecht über den Rand entspricht.

Setzt man in (3.8) eine Näherung $\tilde{u}$ für u ein, ist die Differentialgleichung nicht mehr exakt erfüllt. Der auftretende Fehler wird als Residuum ε bezeichnet:

$$\frac{\partial \tilde{u}(\mathbf{x}, t)}{\partial t} + \operatorname{div}(\mathbf{F}(\tilde{u})) - r = \varepsilon. \tag{3.10}$$

Man fordert, dass das gewichtete Residuum im Mittel verschwinden möge. Dazu wählt man eine Wichtungsfunktion $W(\mathbf{x})$ mit $W(\mathbf{x}) = 0$ auf Γ_{D} und integriert das gewichtete Residuum über das Gebiet G:

$$\int_G W \varepsilon \, dG = \int_G W \frac{\partial \tilde{u}}{\partial t} \, dG + \int_G W \operatorname{div}(\mathbf{F}(\tilde{u})) \, dG - \int_G W r \, dG \stackrel{!}{=} 0. \tag{3.11}$$

Die Anwendung der Beziehung

$$\operatorname{div}(a\mathbf{b}) = \mathbf{b} \cdot \operatorname{grad}(a) + a \operatorname{div}(\mathbf{b}) \tag{3.12}$$

liefert:

$$\int_G W \frac{\partial \tilde{u}}{\partial t}\, dG + \int_G \operatorname{div}(W\mathbf{F})\; dG - \int_G \operatorname{grad}(W) \cdot \mathbf{F}\, dG - \int_G W r\, dG = 0. \quad (3.13)$$

Mit Hilfe des Integralsatzes von Gauss

$$\int_G \operatorname{div}(\mathbf{b})\; dG = \int_\Gamma \mathbf{b} \cdot \mathbf{n}\, d\sigma \quad (3.14)$$

lässt sich (3.13) schreiben als

$$\int_G W \frac{\partial \tilde{u}}{\partial t}\, dG + \int_\Gamma (W\mathbf{F}) \cdot \mathbf{n}\, d\sigma - \int_G \operatorname{grad}(W) \cdot \mathbf{F}\, dG - \int_G W r\, dG = 0. \quad (3.15)$$

Wählt man die beliebige Wichtungsfunktion W so, dass $W = 0$ für $\mathbf{x} \in \Gamma_\mathrm{D}$ ist, ergibt sich die schwache Formulierung der Bilanzgleichung (3.8):

$$\int_G W \frac{\partial \tilde{u}}{\partial t}\, dG + \int_{\Gamma_\mathrm{N}} W F_\mathrm{N}\, d\sigma - \int_G \operatorname{grad}(W) \cdot \mathbf{F}\, dG - \int_G W r\, dG = 0. \quad (3.16)$$

In der schwachen Formulierung (3.16) sind die Differenzierbarkeitsanforderungen an u gegenüber der Bilanzgleichung (3.8) „halbiert“. Zum Einsetzen in (3.8) wird $u \in C^2(G)$ benötigt. Für (3.16) genügt dagegen schon $u \in C^1(G)$.

Um aus der schwachen Formulierung (3.16) ein Lösungsverfahren zu konstruieren, wählt man als Näherungsansatz

$$\tilde{u} = \sum_{j=1}^{n} \hat{u}_j(t)\, N_j(\mathbf{x})\,. \quad (3.17)$$

Die Koeffizienten $\hat{u}_j$ hängen nur von der Zeit ab, die Ansatzfunktionen N_j, die ausreichend glatt und untereinander linear unabhängig sein müssen, nur vom Ort.

Unter der Annahme eines rein konvektiven Flusses $\mathbf{F} = \mathbf{v}u$ erhält man durch Einsetzten von (3.17) in (3.16) die diskretisierte Form der Differenti-

algleichung:

$$\int_G W \frac{d\left(\sum_{j=1}^n \hat{u}_j N_j\right)}{dt}\, dG + \int_{\Gamma_\mathrm{N}} W F_\mathrm{N}\, d\sigma - \\ - \int_G \mathrm{grad}\,(W) \cdot \mathbf{v} \sum_{j=1}^n \hat{u}_j N_j\, dG - \int_G W r\, dG = 0. \quad (3.18)$$

Nach weiterer Umformung entsteht schließlich:

$$\sum_{j=1}^n \frac{d\hat{u}_j}{dt} \int_G W N_j\, dG + \int_{\Gamma_\mathrm{N}} W F_\mathrm{N}\, d\sigma - \\ - \sum_{j=1}^n \hat{u}_j \int_G \mathrm{grad}\,(W) \cdot \mathbf{v} N_j\, dG - \int_G W r\, dG = 0. \quad (3.19)$$

Um die n Unbekannten Koeffizienten $\hat{u}_j$ bestimmen zu können, wählt man n voneinander linear unabhängige Wichtungsfunktionen W_i. Die Lösung der partiellen Differentialgleichung (3.8) wird somit durch die Lösung eines Systems von n gewöhnlichen Differentialgleichungen angenähert.

3.3 Spezielle numerische Verfahren

Die einzelnen FE-Verfahren unterscheiden sich durch die Wahl der Wichtungsfunktionen W_i. Hier werden das Standard-Galerkin- und das Petrov-Galerkin-Verfahren vorgestellt und im Hinblick auf ihre Eignung für verschiedene Transportprozesse untersucht.

3.3.1 Standard-Galerkin-FE-Methode

Zur exemplarischen Ableitung des Standard-Galerkin-Verfahrens wird die lokale Bilanzgleichung (3.8) weiter vereinfacht: Die Strömung sei stationär ($\frac{\partial u}{\partial t} = 0$) und quell- und senkenfrei ($r = 0$). Das Gebiet G wird als eindimensional angenommen ($0 \leq x \leq L$).
Lässt man konvektiven Fluss (F_K) und diffusiven Fluss (F_D) zu,

$$F = F_\mathrm{K} + F_\mathrm{D} = vu - D\frac{du}{dx} \quad \text{mit } v,\, D \text{ konstant}, \quad (3.20)$$

ergibt sich das Randwertproblem:

$$v\frac{du}{dx} - D\frac{d^2u}{dx^2} = 0. \tag{3.21}$$

Als Randbedingung wird gewählt:

$$\begin{aligned} u &= 0 \quad \text{für } x = 0, \\ u &= 1 \quad \text{für } x = L. \end{aligned} \tag{3.22}$$

Die Schwache Formulierung des Problems lautet dann:

$$\int_0^L W_i \left(v\frac{du}{dx} - D\frac{d^2u}{dx^2} \right) dx = 0. \tag{3.23}$$

Durch partielle Integration erhält man (3.24). Der erste Summand verschwindet, da die Wichtungsfunktionen so gewählt werden, dass sie am Dirichlet-Rand null sind:

$$\underbrace{\left[W_i \left(vu - D\frac{du}{dx} \right) \right]_0^L}_{=0} - \int_0^L \frac{dW_i}{dx} \left(vu - D\frac{du}{dx} \right) dx = 0. \tag{3.24}$$

Mit dem Näherungsansatz

$$\tilde{u} = \sum_{j=1}^{n} \hat{u}_j N_j(x) \tag{3.25}$$

entsteht die diskretisierte Form der Differentialgleichung:

$$\sum_{j=1}^{n} \hat{u}_j \int_0^L \frac{dW_i}{dx} \left(vN_j - D\frac{dN_j}{dx} \right) dx = 0. \tag{3.26}$$

Beim Standard-Galerkin-Verfahren wählt man nun die Wichtungsfunktionen gleich den Ansatzfunktionen:

$$W_i = N_i. \tag{3.27}$$

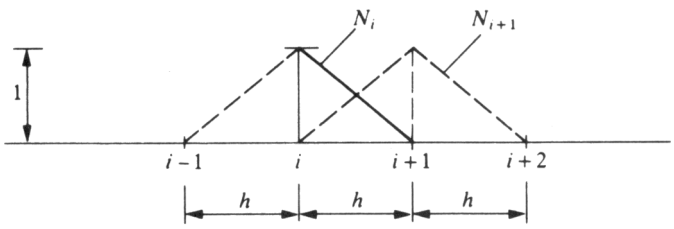

Abbildung 3.3: Eindimensionale lineare Ansatzfunktion N_i [5]

Die linearen Ansatzfunktionen N_i (und somit auch die Wichtungsfunktionen) nehmen jeweils am Knoten i den Wert 1 an und sind an allen anderen Knoten 0. Abbildung 3.3 zeigt ihren Verlauf.

Wertet man die Integrale (3.26) für den Knoten i aus, erhält man mit $Pe = \frac{vh}{2D}$ die Lösung:

$$(-Pe - 1)\,\hat{u}_{i-1} + 2\hat{u}_i + (Pe - 1)\,\hat{u}_{i+1} = 0. \tag{3.28}$$

Das gleiche Ergebnis erhält man übrigens, wenn man die Näherung eines Zentralen-Finite-Differenzen-Verfahrens für die erste und zweite Ableitung (3.29) in das Randwertproblem (3.21) eingesetzt.

$$\begin{aligned} \frac{du}{dx} &\approx \frac{\hat{u}_{i+1} - \hat{u}_{i-1}}{2h}, \\ \frac{d^2u}{dx^2} &\approx \frac{\hat{u}_{i+1} - 2\hat{u}_i + \hat{u}_{i-1}}{h^2}. \end{aligned} \tag{3.29}$$

Ist das Standard-Galerkin-Verfahren nun für konvektive Transportprozesse geeignet? Zur Beantwortung dieser Frage teilt man (3.28) durch die Peclet-Zahl und führt den Grenzübergang für $Pe \to \infty$ durch.

$$\lim_{Pe\to\infty} \left[\underbrace{\frac{-Pe-1}{Pe}}_{\to -1} \hat{u}_{i-1} + \underbrace{\frac{2}{Pe}}_{\to 0} \hat{u}_i + \underbrace{\frac{Pe-1}{Pe}}_{\to 1} \hat{u}_{i+1} \right] = 0 \tag{3.30}$$

$$\Rightarrow \quad \hat{u}_{j+1} = \hat{u}_{j-1}$$

Die Lösung oszilliert stark und hat nichts mehr mit dem zu Grunde liegenden Problem zu tun. In Abbildung 3.4 veranschaulichen die Kurven mit $\alpha = 0$ das Verhalten der Lösung für unterschiedliche Peclet-Zahlen. Gleichung (3.30) ist unter den gemachten Voraussetzungen überhaupt nur dann lösbar, wenn eine ungerade Anzahl an Knoten vorliegt. Bei gerader Knotenzahl gibt es keine eindeutige Lösung. Das bedeutet, dass bei konvektiven Strömungen statt zweier Randbedingungen nur eine einzige vorgegeben werden kann.
Schlussfolgerung: Das Standard-Galerkin-Verfahren ist zur korrekten Wiedergabe von konvektionsdominierten Transportprozessen nicht geeignet.

3.3.2 Petrov-Galerkin-FE-Methode

Die bisherigen Erkenntnisse legen nahe, anders als in (3.29) eine einseitige (Upwind-)Finite-Differenzen-Näherung für die erste Ableitung zu verwenden, um das Transportverhalten einer konvektiven Strömung besser abbilden zu können.

$$\begin{aligned} \frac{du}{dx} &\approx \frac{\hat{u}_i - \hat{u}_{i-1}}{h}, \\ \frac{d^2u}{dx^2} &\approx \frac{\hat{u}_{i+1} - 2\hat{u}_i + \hat{u}_{i-1}}{h^2}. \end{aligned} \tag{3.31}$$

Eingesetzt in die Differentialgleichung (3.21) ergibt sich die diskretisierte Gleichung

$$(-2Pe - 1)\,\hat{u}_{i-1} + (2 + 2Pe)\,\hat{u}_i - \hat{u}_{i+1} = 0. \tag{3.32}$$

Mit dieser Upwind-Näherung erhält man für alle Peclet-Zahlen realistische Ergebnisse, wie die Kurven in Abbildung 3.4, die mit $\alpha = 1$ bezeichnet sind, zeigen.

Die Idee einer Upwind-Näherung wird nun bei der Konstruktion eines für konvektionsdominierte Transportprobleme geeigneten FE-Verfahrens verwendet. Statt der linearen Wichtungsfunktionen des Standard-Galerkin-Verfahrens werden Wichtungsfunktionen der Form

$$W_i = N_i + \alpha \tilde{W}_i \tag{3.33}$$

eingesetzt. $\tilde{W}_i$ ist üblicherweise ein Polynom niedriger (Abbildung 3.5, unteres Bild) oder höherer Ordnung (Abbildung 3.5, oberes Bild) als N_i. Den

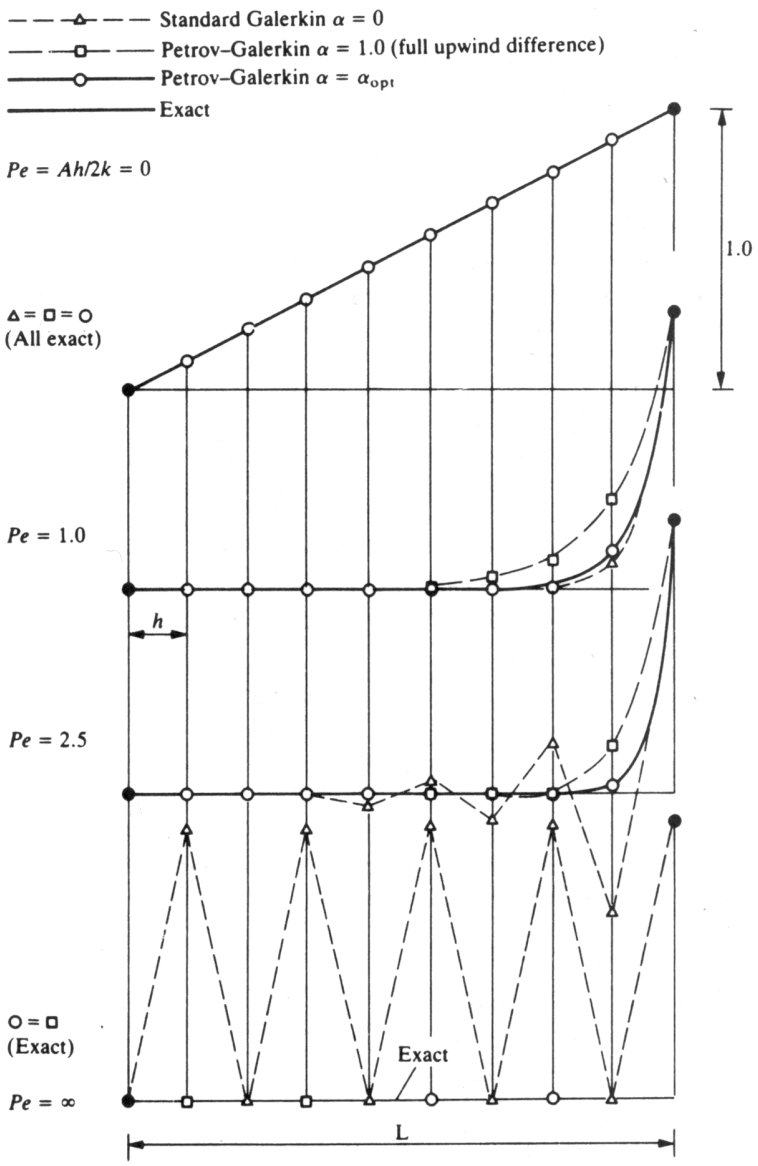

Abbildung 3.4: Näherungslösung für die Transportgleichung (3.21) für unterschiedliche Peclet-Zahlen [5]

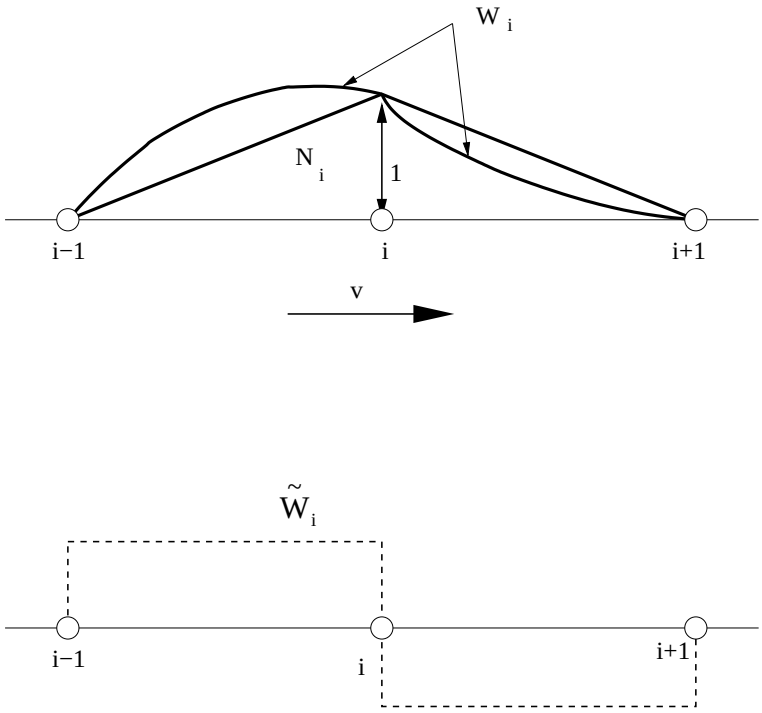

Abbildung 3.5: Wichtungsfunktionen des Petrov-Galerkin-Verfahrens [3]

Oberstromwerten wird durch den Verlauf der Wichtungsfunktionen ein größeres Gewicht beigemessen. Die so entstehenden FE-Verfahren werden als Petrov-Galerkin-Verfahren bezeichnet.

Die gebräuchlichste Wichtungsfunktion wird mit folgender einfacher Funktion gebildet:

$$\alpha \tilde{W}_i = \alpha \frac{h}{2} \frac{dN_i}{dx} \mathrm{sign}\,(v) \tag{3.34}$$

Die gesamte Wichtungsfunktion W_i ist in Abbildung 3.6 dargestellt. Das Petrov-Galerkin-Verfahren mit dieser Wichtungsfunktion heißt Streamline-Petrov-Galerkin-Methode. Wertet man die Integrale (3.26) mit der Wich-

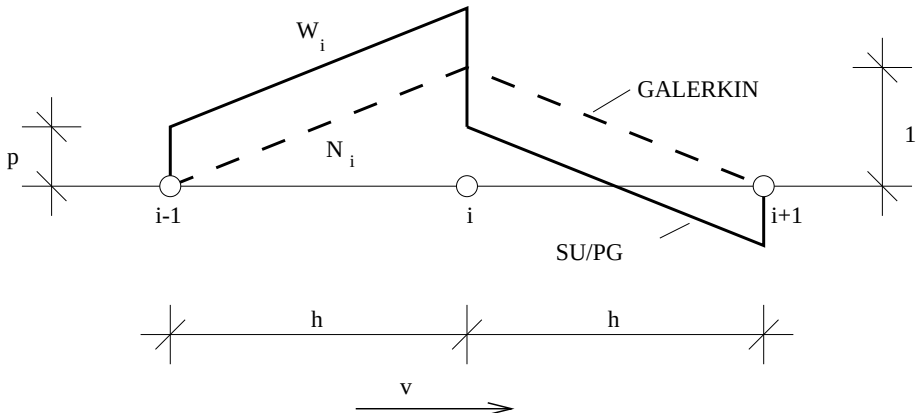

Abbildung 3.6: Wichtungsfunktionen des Streamline-Petrov-Galerkin-Verfahrens [3]

tungsfunktion (3.34) für den Knoten i aus, erhält man die Lösung:

$$[-Pe\,(\alpha+1)-1]\,\hat{u}_{i-1} + [2+2\alpha Pe]\,\hat{u}_i + [-Pe\,(\alpha-1)-1]\,\hat{u}_{i+1} = 0. \tag{3.35}$$

Setzt man in Gleichung (3.35) $\alpha = 0$ erhält man die Lösung des Standard-Galerkin-Verfahrens (3.28). Für $\alpha = 1$ ergibt sich die Upwind-Differenzen Lösung (3.32).

Nach [5] gibt es ein optimales α, für das das Petrov-Galerkin-Verfahren exakte Knotenwerte für alle Peclet-Zahlen liefert:

$$\alpha_{\mathrm{opt}} = \coth|Pe| - \frac{1}{|Pe|}. \tag{3.36}$$

Auch die Lösungen für α_{opt} sind in Abbildung 3.4 dargestellt.

Oszillationen unterbleiben, wenn α größer als ein kritischer Wert α_{crit} gewählt wird [5]:

$$\alpha > \alpha_{\text{crit}} = 1 - \frac{1}{|Pe|}. \tag{3.37}$$

Die Funktionen für α_{opt} und α_{crit} zeigt Abbildung 3.7.

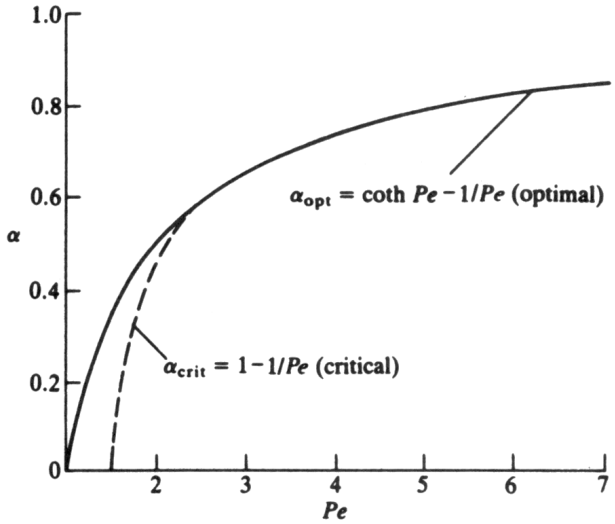

Abbildung 3.7: Kritische und optimale Werte für den Upwind-Parameter α beim Streamline Petrov-Galerkin-Verfahren [5]

3.4 Vergleich der Verfahren am Buckley-Leverett-Problem

Das Standard-Galerkin-Verfahren und das Petrov-Galerkin-Verfahren sollen nun abschließend an Hand des Buckley-Leverett-Problems, d.h. eines rein konvektiven Transportprozesses verglichen werden. Betrachtet wird ein eindimensionales horizontales System (Abbildung 3.8), in dem die nicht-benetzende Phase Öl (Index n) von der benetzenden Phase Wasser (Index w) verdrängt wird.

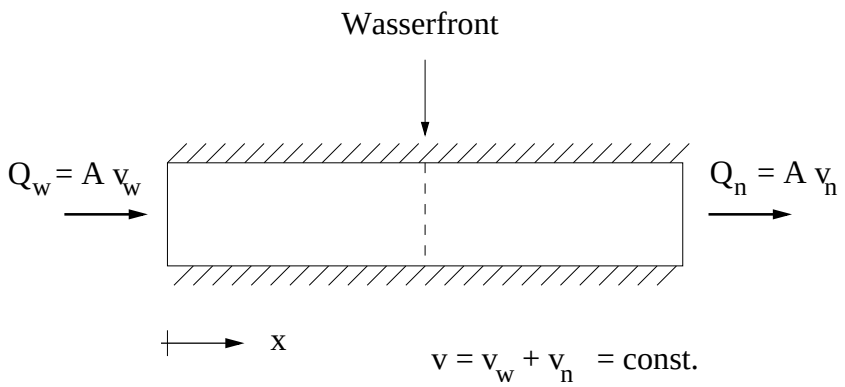

Abbildung 3.8: Buckley-Leverett-Problem [3]

Die Fluideigenschaften und Simulationsparameter sind in Tabelle 3.1, die Eigenschaften der Festkörpermatrix sowie die konstitutiven Beziehungen in Tabelle 3.2 aufgeführt.

Wählt man für die Relative-Permeabilitäts-Sättigungs-Beziehung einen linearen Ansatz gemäß Abbildung 3.9, so ergibt sich der Verlauf der Wasserfront mit den einzelnen FE-Verfahren wie in Abbildung 3.10 dargestellt. Beim Standard-Galerkin-Verfahren (SG-FE) – das in zwei verschiedenen Varianten angewendet wurde – sind im Bereich zwischen 0 und 100 m Oszillationen erkennbar. Im weiteren Verlauf wird die analytische Lösung jedoch recht gut angenähert. Das Petrov-Galerkin-Verfahren (PG-FE) liefert ebenfalls brauchbare Ergebnisse. Auf die Unterschiede zwischen den beiden SG-FE-Verfahren sowie die anderen in der Abbildung dargestellten Verfahren, kann im Rahmen dieses Vortrags nicht eingegangen werden.

Bei Verwendung der Relativen-Permeabilitäts-Sättigungs-Beziehung nach Brooks-Corey (Abbildung 3.11) ergeben sich die in Abbildung 3.12 dargestellten Lösungen für die einzelnen Verfahren. Während die PG-FE-Methode die analytische Lösung sehr gut approximiert, ist die Unterlegenheit der SG-FE-Verfahren hier klar erkennbar. Zum einen treten starke Oszillationen auf, zum anderen liegt die mit SG-FE berechnete Wasserfont deutlich hinter der Wasserfront der analytischen Lösung zurück.

Tabelle 3.1: Fluideigenschaften und Simulationsparameter

Fluideigenschaften	
Dichte Wasser	$\varrho_\mathrm{w} = 1000\,{}^{\mathrm{kg}}/_{\mathrm{m}^3}$
Dichte Öl	$\varrho_\mathrm{n} = 1000\,{}^{\mathrm{kg}}/_{\mathrm{m}^3}$
Dynamische Viskosität Wasser	$\mu_\mathrm{w} = 0.001\,{}^{\mathrm{kg}}/_{\mathrm{m\,s}}$
Dynamische Viskosität Öl	$\mu_\mathrm{n} = 0.001\,{}^{\mathrm{kg}}/_{\mathrm{m\,s}}$
Randbedingungen	
Rand $x = 0\,\mathrm{m}$:	
Wassersättigung	$S_\mathrm{w} = 0.8$
Öldruck	$p_\mathrm{n} = 2 \cdot 10^5\,\mathrm{Pa}$
Rand $x = 300\,\mathrm{m}$:	
Wassersättigung	$S_\mathrm{w} = 0.2$
Flussrate Öl	$q_\mathrm{n} = -1.5 \cdot 10^{-4}\,{}^{\mathrm{kg}}/_{\mathrm{m}^2\,\mathrm{s}}$
Anfangsbedingungen	
Wassersättigung	$S_\mathrm{w} = 0.2$
Räumliche Diskretisierung	
Schrittweite	$\Delta x = 9.375\,\mathrm{m}$
Länge ($32\Delta x$)	$L = 300\,\mathrm{m}$
Zeitliche Diskretisierung	
Schrittweite	$\Delta t = 5\,\mathrm{d}$
Zeitraum ($300\Delta t$)	$T = 1500\,\mathrm{d}$

Tabelle 3.2: Eigenschaften der Festkörpermatrix und konstitutive Beziehungen

Intrinsische Permeabilität	$k = 10^{-7}\,\mathrm{m}^2$	
Porosität	$\phi = 0.20$	
Porengrößenverteilungsindex	$\lambda = 2.00$	
Restsättigung Wasser	$S_\mathrm{wr} = 0.20$	
Restsättigung Öl	$S_\mathrm{nr} = 0.20$	
Relative Permeabilität	$k_\mathrm{r}(S_\mathrm{w})$	(a) Linearer Ansatz (Abb. 3.9)
		(b) Brooks–Corey Modell (Abb. 3.11)

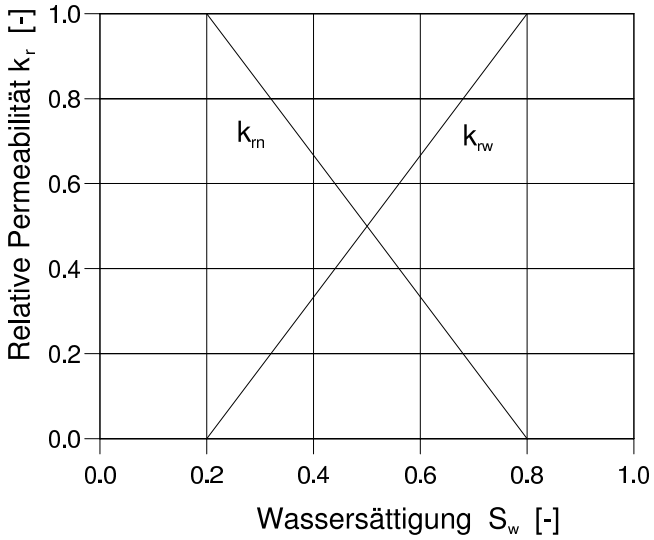

Abbildung 3.9: Linearer Ansatz für die Relative-Permeabilitäts-Sättigungs-Beziehung [3]

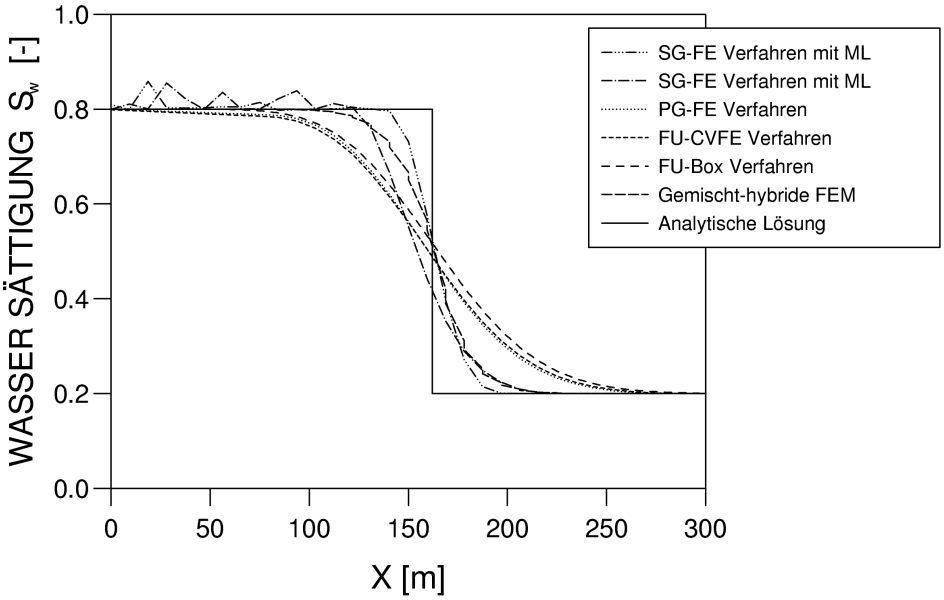

Abbildung 3.10: Lösung des Buckley-Leverett-Problems (linear) [3]

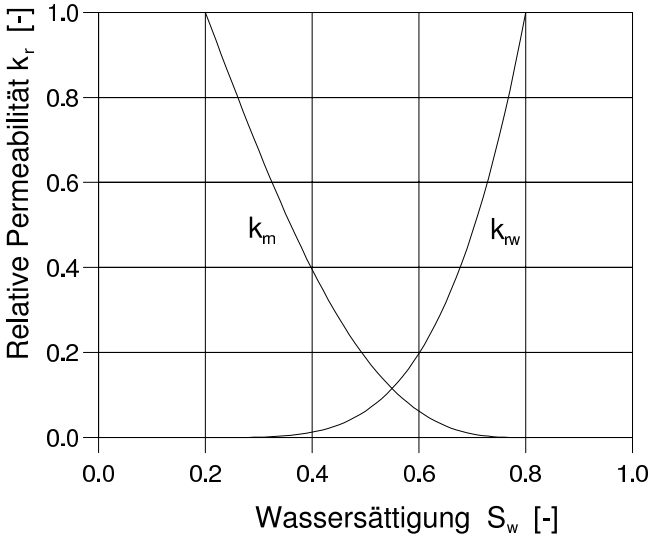

Abbildung 3.11: Relative-Permeabilitäs-Beziehung nach Brooks-Corey [3]

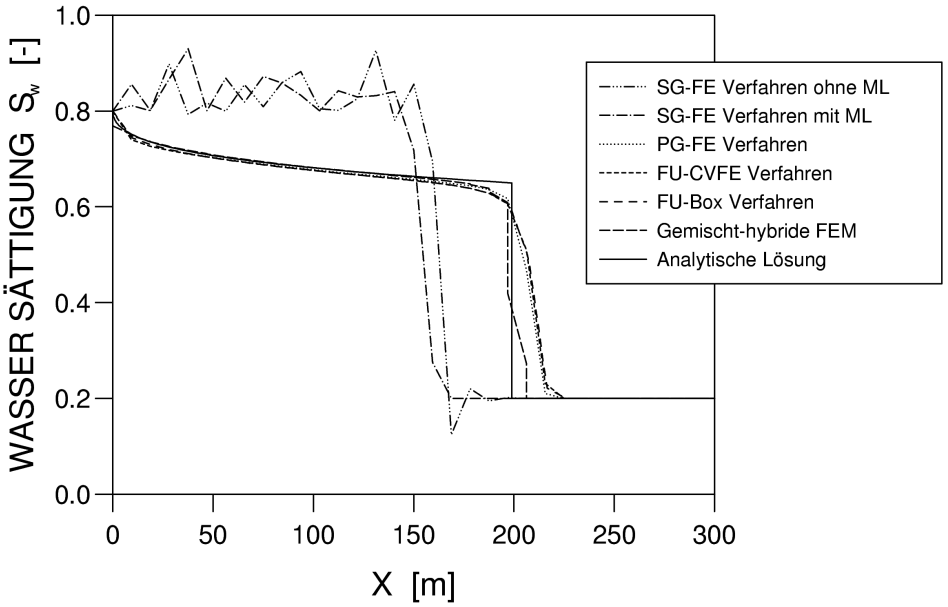

Abbildung 3.12: Lösung des Buckley-Leverett-Problems (Brooks-Corey) [3]

Literaturverzeichnis

[1] R.H. Brooks, A.T. Corey. *Hydraulic Properties of Porous Media.* Hydrol. Pap., volume 3, Fort Collins, Colorado State University, 1964.

[2] M.T. Van Genuchten. *A Closed-Form Equation for Predicting the Hydraulic Conductivity of Unsaturated Soils.* Soil Sci. Soc. Am. J., 44:892-898, 1980.

[3] R. Helmig. *Multiphase Flow and Transport Processes in the Subsurface - A Contribution to the Modeling of Hydrosystems.* Springer Verlag, Berlin, Heidelberg, New York, 1995.

[4] R. Helmig. *Modellierung von Hydrosystemen.* Vorlesung, Universität Stuttgart, Wintersemester 2001/02.

[5] O.C. Zienkiewicz, R.L. Taylor. *The Finite Element Method*, volume 2. *Solid and Fluid Mechanics Dynamics and Non-Linearity.* McGraw-Hill, London, 1991.

Vortrag 4

Diskussion der instationären hyperbolischen Transportgleichung

Ausgearbeitet von Iris Pflieger.

In Kapitel 2.7.2 wurde die Sättigungsgleichung für ein Zwei-Phasen-System hergeleitet:

$$- \operatorname{div}\left[\overline{\lambda}\mathbf{K}\frac{dp_{\mathrm{c}}}{dS_{\mathrm{w}}}\operatorname{grad} S_{\mathrm{w}}\right] - \left[\mathbf{v}_{\mathrm{t}}\frac{df_{\mathrm{w}}}{dS_{\mathrm{w}}} + \mathbf{K}\left(\rho_{\mathrm{w}}\mathbf{g} - \rho_{\mathrm{n}}\mathbf{g}\right)\frac{d\overline{\lambda}}{dS_{\mathrm{w}}}\right]\operatorname{grad} S_{\mathrm{w}} - \\ - \phi\frac{\partial S_{\mathrm{w}}}{\partial t} + \left(q_{\mathrm{w}} - f_{\mathrm{w}}q_{\mathrm{t}}\right) = 0. \quad (4.1)$$

Vernachlässigt man in der Sättigungsgleichung Kapillardruck- und Gravitationseffekte sowie Quell- und Senkterme, so führt dies auf das so genannte Buckley-Leverett-*Problem*

$$\phi\frac{\partial S_{\mathrm{w}}}{\partial t} + \mathbf{v}_{\mathrm{t}}\frac{df_{\mathrm{w}}}{dS_{\mathrm{w}}}\operatorname{grad} S_{\mathrm{w}} = 0. \quad (4.2)$$

Hierbei handelt es sich um eine quasi-lineare hyperbolische partielle Differentialgleichung erster Ordnung mit dem nichtlinearen Koeffizienten $\frac{df_{\mathrm{w}}}{dS_{\mathrm{w}}}$.

Mit der Lösung dieses Problems wird sich dieses Kapitel befassen.

4.1 Klassifizierung hyperbolischer Differentialgleichungen erster Ordnung

Die allgemeine Form von hyperbolischen Differentialgleichungen 1. Ordnung, bei der die ersten Ableitungen linear auftreten, lautet im zweidimensionalen Fall: $p(x,t,u)\frac{\partial u}{\partial x} + q(x,t,u)\frac{\partial u}{\partial t} = r(x,t,u)$. Sie werden anhand ihrer Koeffizienten in vier verschiedene Klassen eingeteilt. Man unterscheidet:

- *strikt linear*:
  - Die Koeffizienten p, q, r sind keine Funktion in u

$$p(x,t)\frac{\partial u}{\partial x} + q(x,t)\frac{\partial u}{\partial t} = r(x,t), \tag{4.3}$$

- *linear*:
  - r ist eine lineare Funktion in u

$$p(x,t)\frac{\partial u}{\partial x} + q(x,t)\frac{\partial u}{\partial t} = r(x,t,u), \tag{4.4}$$

- *semilinear*:
  - r ist eine nichtlineare Funktion in u

$$p(x,t)\frac{\partial u}{\partial x} + q(x,t)\frac{\partial u}{\partial t} = r(x,t,u), \tag{4.5}$$

- *quasilinear*:
  - p, q, r können nichtlineare Funktionen in u sein

$$p(x,t,u)\frac{\partial u}{\partial x} + q(x,t,u)\frac{\partial u}{\partial t} = r(x,t,u). \tag{4.6}$$

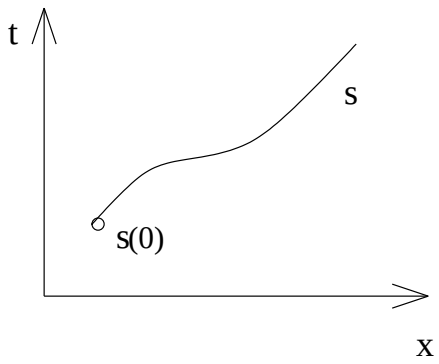

Abbildung 4.1: Beliebiger Weg $s = s(\eta)$ mit Anfangsbedingung $s(0) = (x_0, t_0)$.

4.2 Charakteristikenmethode

Die Charakteristikenmethode ist eine leicht verständliche Methode zur Lösung hyperbolischer Differentialgleichungen 1. Ordnung. Die Grundidee der Charakteristikenmethode ist, dass ein geeigneter Weg $s(\eta)$ in der x,t-Ebene gesucht wird, entlang derer die partielle Differentialgleichung

$$p(x,t,u)\frac{\partial u}{\partial x} + q(x,t,u)\frac{\partial u}{\partial t} = r(x,t,u) \tag{4.7}$$

zu einer gewöhnlichen Differentialgleichung reduziert wird.

Man wählt sich einen zunächst beliebigen Weg $s(\eta)$ (siehe Abbildung 4.1)

$$s(\eta) = \begin{pmatrix} x(\eta) \\ t(\eta) \end{pmatrix}, \qquad s(0) = \begin{pmatrix} x(0) \\ t(0) \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} x_0 \\ t_0 \end{pmatrix}. \tag{4.8}$$

Betrachtet man jetzt einmal die Veränderung der Lösung von (4.7) entlang dieses Weges, ausgedrückt durch das Differential

$$\frac{du(s(\eta))}{d\eta} = \frac{du(x(\eta),t(\eta))}{d\eta} = \frac{\partial u}{\partial x}\frac{dx}{d\eta} + \frac{\partial u}{\partial t}\frac{dt}{d\eta}, \tag{4.9}$$

kann Ähnlichkeit zu Gleichung (4.7) festgestellt werden. Durch Koeffizientenvergleich von Gleichung (4.7) mit Gleichung (4.9) erhält man ein System

gewöhnlicher Differentialgleichungen, das äquivalent zur partiellen Differentialgleichung (4.7) ist:

$$\frac{dx}{d\eta} = p(x,t,u), \tag{4.10}$$

$$\frac{dt}{d\eta} = q(x,t,u), \tag{4.11}$$

$$\frac{du}{d\eta} = r(x,t,u). \tag{4.12}$$

Dabei bestimmen die Gleichungen (4.10)-(4.12) die Wahl des Weges $s(\eta)$. Diese Kurve wird *Charakteristik* genannt. Insbesondere beschreibt Gleichung (4.12) das Verhalten der Funktion $u(x,t)$ entlang der Charakteristik. Die Charakteristiken besitzen folgende Eigenschaften:

- Informationstransport erfolgt nur entlang der Charakteristiken und nur in Richtung von zunehmendem η.

- Entlang der Charakteristik ist die Funktion $u(x,t)$ durch den Wert an einem Anfangspunkt (x_0, t_0) bestimmt. Daraus ergibt sich eine Kurve von Anfangsbedingungen, die jede Charakteristik nur einmal schneiden und die auch nicht parallel zu einer Charakteristik verlaufen darf, damit das Ausgangsproblem eindeutig lösbar ist.

- Charakteristiken dürfen sich nicht schneiden! An Schnittpunkten ist die Rückverfolgbarkeit zum Anfangspunkt (x_0, t_0) nicht mehr eindeutig und somit auch die Lösung nicht.

4.3 Lineare hyperbolische Transportgleichung

In diesem Abschnitt wird die lineare hyperbolische Transportgleichung

$$\frac{\partial u}{\partial t} + v\frac{\partial u}{\partial x} = 0, \qquad v = \text{const} \tag{4.13}$$

untersucht. Hierbei kann $u(x,t)$ z.B. eine Konzentration sein, die mit konstanter Geschwindigkeit transportiert wird.

Wendet man nun die Charakteristikenmethode auf die lineare Transportgleichung an, führt dies zu folgendem System gewöhnlicher Differentialgleichungen

$$\frac{\partial x}{\partial \eta} = v, \tag{4.14}$$

$$\frac{\partial t}{\partial \eta} = 1, \tag{4.15}$$

$$\frac{\partial u}{\partial \eta} = 0, \tag{4.16}$$

mit den Anfangsbedingungen $x(0) = x_0$, $t(0) = t_0$ und $u(x_0, t_0)$.

Aus Gleichung (4.16) ist sofort ersichtlich, dass $u(x,t)$ konstant auf den Charakteristiken ist. Die sehr einfachen gewöhnlichen Differentialgleichungen (4.14) und (4.15) lassen sich mit Lösungsverfahren für gewöhnliche Differentialgleichungen, z.B. Trennung der Variablen, sehr schnell lösen:

$$x(\eta) = v\eta + c_1, \tag{4.17}$$

$$t(\eta) = \eta + c_2. \tag{4.18}$$

Setzt man die Anfangsbedingungen ein, können die Integrationskonstanten c_1 und c_2 bestimmt werden

$$x(\eta) = v\eta + x_0, \tag{4.19}$$

$$t(\eta) = \eta + t_0. \tag{4.20}$$

Eliminieren von η aus dieser Parameterdarstellung der Charakteristiken liefert eine Darstellung als Funktion

$$x(t) = vt + x_0, \quad \text{bzw.} \quad t(x) = \frac{1}{v}x + t_0. \tag{4.21}$$

In diesem Fall sind die Charakteristiken Geraden. Da v konstant ist, sind alle Charakteristiken parallel zueinander.

Bekannt ist, dass $u(x,t)$ konstant auf den Charakteristiken

$$x - vt = c \tag{4.22}$$

ist. Daraus ergibt sich für $u(x,t)$

$$u(x,t) = \text{const} = g(c) = g(x - vt) \tag{4.23}$$

entlang den Charakteristiken. Dabei ist g eine zunächst beliebige Funktion. Diese kann jedoch mit Hilfe der Anfangsbedingungen eindeutig bestimmt werden. In dem hier zu untersuchenden Fall werden Riemann-Anfangsbedingungen gewählt. Man spricht dann auch von einem Riemann-Problem:

$$u(x,0) = u_0(x) = \begin{cases} \tilde{u}_0 & x \leq x_1 \\ 0 & x > x_1. \end{cases} \tag{4.24}$$

Einsetzen der Anfangsbedingungen in Gleichung (4.23) liefert:

$$\begin{aligned} & u(x,0) = g(x) = u_0(x), \\ \Rightarrow \quad & u(x,t) = u_0(x - vt), \\ \Rightarrow \quad & u(x,t) = \begin{cases} \tilde{u}_0 & x - vt \leq x_1 \\ 0 & x - vt > x_1. \end{cases} \end{aligned} \tag{4.25}$$

Diese Lösung enthält eine Unstetigkeit, d.h. sie genügt nicht dem klassischen Problem, da sie entlang der Charakteristik durch die Sprungstelle $(x_1, 0)$ nicht differenzierbar ist. Sie ist jedoch Lösung des Problems in integraler Form (siehe Vortrag 2, z.B. Gleichung (2.17)). Sie wird *schwache Lösung* genannt.

Die Anfangsbedingungen und die Charakteristiken, auf denen die Lösung u konstant ist, sind in Abbildung 4.2 dargestellt.

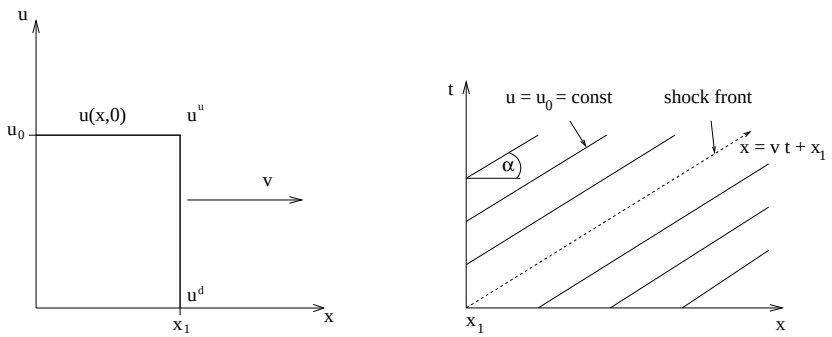

Abbildung 4.2: Anfangsbedingungen und die Charakteristiken der linearen hyperbolischen Transportgleichung

Die Gerade, die als Schockfront bezeichnet wird, ist die Charakteristik, entlang derer sich die Unstetigkeit mit konstanter Geschwindigkeit v fortbe-

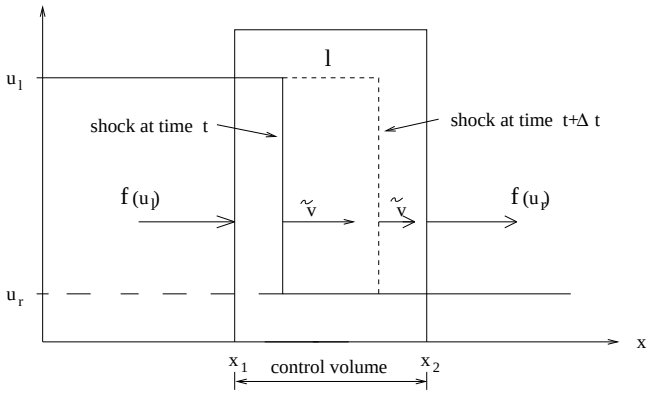

Abbildung 4.3: Diskontinuität einer Schockfront

wegt. Da die Charakteristiken alle parallel sind, beschreiben sie eine eindeutige Lösung, denn jedem Punkt (x, t) kann eindeutig eine Konzentration u zugeordnet werden.

Allgemein lässt sich mit Hilfe der *Rankine-Hugoniot-Bedingung* (Abbildung 4.3) die Geschwindigkeit, mit der sich die Unstetigkeit fortbewegt, bestimmen.

Da die Massenbilanz am Stoß erfüllt sein muss, gilt:

$$[f(u_\mathrm{l}) - f(u_\mathrm{r})]\,\Delta t = (u_\mathrm{l} - u_\mathrm{r})\,l.$$

Daraus folgt

$$\frac{l}{\Delta t} = \frac{f(u_\mathrm{l}) - f(u_\mathrm{r})}{u_\mathrm{l} - u_\mathrm{r}} = \tilde{v}. \tag{4.26}$$

Die Rankine-Hugoniot-Bedingung (4.26) zeigt, dass der Sprung der Funktion am Schock die Frontgeschwindigkeit in Abhängigkeit der Flussfunktion beschreibt.

4.4 Quasilineare hyperbolische Transportgleichung

Das Buckley-Leverett-Problem

$$\phi\frac{\partial S_\mathrm{w}}{\partial t} + v_\mathrm{t}\frac{df_\mathrm{w}}{dS_\mathrm{w}}\frac{\partial S_\mathrm{w}}{\partial x} = 0 \tag{4.27}$$

stellt eine quasilineare hyperbolische Transportgleichung dar, da $\frac{df_\mathrm{w}}{dS_\mathrm{w}}$ im Allgemeinen eine nichtlineare Funktion in S_w ist.

Wie ist aus Kapitel 2.7.2 bekannt ist, bezeichnet

$$v_\mathrm{t} = v_\mathrm{w} + v_\mathrm{n} \tag{4.28}$$

die totale Geschwindigkeit, und für die fraktionale Durchflussfunktion gilt:

$$f_\mathrm{w} = \frac{\frac{k_\mathrm{rw}(S_\mathrm{w})}{\mu_\mathrm{w}}}{\frac{k_\mathrm{rw}(S_\mathrm{w})}{\mu_\mathrm{w}} + \frac{k_\mathrm{rn}(S_\mathrm{n})}{\mu_\mathrm{n}}}. \tag{4.29}$$

Die Divergenz der totalen Geschwindigkeit ist die Summe der Quell- und Senkterme. Da diese jedoch beim Buckley-Leverett-Problem vernachlässigt wurden, folgt daraus, dass $v_\mathrm{t} = \mathrm{const}$ ist, da man nur eine Raumdimension beim Buckley-Leverett-Problem betrachtet. Weiterhin wird angenommen, dass die Porosität ϕ konstant ist, d.h. der Anteil des Porenvolumens am Gesamtvolumen ändert sich nicht. Zur Vereinfachung werden die konstanten Größen vernachlässigt, da durch sie die Lösung nur um einen konstanten Faktor beeinflusst wird. Mit diesen Überlegungen genügt die Betrachtung der Gleichung (4.27) in Form von

$$\frac{\partial S_\mathrm{w}}{\partial t} + \frac{df_\mathrm{w}}{dS_\mathrm{w}} \frac{\partial S_\mathrm{w}}{\partial x} = 0. \tag{4.30}$$

Wendet man hierauf die Charakteristikenmethode an, erhält man folgendes Differentialgleichungssystem:

$$\frac{dx}{d\eta} = f'_\mathrm{w}, \tag{4.31}$$

$$\frac{dt}{d\eta} = 1, \tag{4.32}$$

$$\frac{dS_\mathrm{w}}{d\eta} = 0. \tag{4.33}$$

Dieses System gewöhnlicher Differentialgleichungen kann nicht, wie im linearen Fall, einfach gelöst werden, denn f'_w ist von der Lösung abhängig und beeinflusst diese wiederum. Im zweidimensionalen Fall kann jedoch folgendes Lemma angewandt werden.

Lemma 4.1 *Es sei das folgende Anfangswertproblem für $u = u(x,t)$ und eine stetig differenzierbare Funktion f gegeben:*

$$\begin{aligned} \frac{\partial u}{\partial t} + f'(u)\frac{\partial u}{\partial x} &= 0 \quad \text{in } \mathbb{R} \times \mathbb{R}^+, \\ u(x,0) &= u_0(x). \end{aligned} \tag{4.34}$$

Charakteristiken von (4.34) *können als Lösungen des Anfangswertproblems*

$$\begin{aligned} \frac{dx(t)}{dt} &= \frac{\partial f(u(x,t))}{\partial u} \quad \text{für } t \geq 0, \\ x(0) &= x_0 \end{aligned} \tag{4.35}$$

gewonnen werden. Unter Berücksichtigung der Anfangsbedingung sind sie Geraden der Gestalt

$$x(t) = x_0 + \frac{\partial f(u_0(x_0))}{\partial u} t = x_0 + f'(u_0(x_0))t. \tag{4.36}$$

Die lokale Lösung des Anfangswertproblems (4.34) *lautet:*

$$u(x,t) = u_0(x - f'(u_o(x_0))t). \tag{4.37}$$

Mit Lemma 4.1 ergeben sich die Charakteristiken des Buckley-Leverett-Problems auch im quasilinearen Fall zu

$$t = \frac{1}{f'_{\mathrm{w}}} x + t_0. \tag{4.38}$$

Wichtig hierbei ist, dass die Charakteristiken jetzt unterschiedliche Steigungen haben können und damit der Fall auftreten kann, dass sie sich schneiden.

Aus Gleichung (4.38) kann die Geschwindigkeit $\tilde{v}$ für eine gegebene Wassersättigung abgelesen werden. Diese entspricht f'_{w}. Daraus folgt, dass die fraktionale Durchflussfunktion und somit die rel. Permeabilitäten $k_{\mathrm{r}\alpha}(S_\alpha)$ das Ausbreitungs- bzw. Verdrängungsverhalten eines Mehrphasensystems kontrollieren. Zwei Funktionsverläufe der fraktionalen Durchflussfunktion werden im Folgenden diskutiert.

Als Anfangsbedingung ist ein Riemann-Problem gegeben

$$S_{\mathrm{w}}(x,0) = \begin{cases} 1 - S_{\mathrm{nr}} & x \leq x_0 \\ S_{\mathrm{wr}} & x > x_0. \end{cases} \tag{4.39}$$

Dabei bezeichnen S_{wr} und S_{nr} die Restsättigungen, d.h. den Fluidanteil der Phase im porösen Medium, der durch Fließeffekte nicht den Porenraum verlassen kann.

Bevor die Lösung des Buckley-Leverett-Problems betrachtet wird, werden noch kurz mögliche Probleme der Charakteristikenmethode aufgezeigt, um das spätere Verständnis zu erleichtern.

4.5 Grenzen der Charakteristikenmethode

Es wird die Burger-Gleichung

$$\frac{\partial u}{\partial t} + u\frac{\partial u}{\partial x} = 0 \tag{4.40}$$

betrachtet.

Nach Lemma 1 sind die Charakteristiken folgende Geraden

$$t = \frac{1}{u_0}x + t_0 \qquad \text{mit} \quad f(u) = \frac{1}{2}u^2. \tag{4.41}$$

Es wird wieder ein Riemann-Problem als Anfangsbedingung betrachtet:

$$u_0(x) = \begin{cases} u_{\mathrm{l}} & x \leq 0 \\ u_{\mathrm{r}} & x > 0. \end{cases} \tag{4.42}$$

1. Fall: $u_{\mathrm{l}} > u_{\mathrm{r}}$:
   Wie aus (4.41) ersichtlich ist, hängt die Steigung der Charakteristiken von u_0 ab. Da beim Riemann-Problem $u_0 \neq \text{const}$ ist, schneiden sich die Charakteristiken jetzt und die Lösung ist nicht mehr eindeutig. Die Geschwindigkeit $\tilde{v}$ der Unstetigkeit kann mittels der Rankine-Hugoniot-Bedingung bestimmt werden:

   $$\tilde{v} = \frac{f(u_{\mathrm{l}}) - f(u_{\mathrm{r}})}{u_{\mathrm{l}} - u_{\mathrm{r}}} = \frac{\frac{1}{2}(u_{\mathrm{l}}^2 - u_{\mathrm{r}}^2)}{u_{\mathrm{l}} - u_{\mathrm{r}}} = \frac{1}{2} \qquad \text{mit} \quad u_{\mathrm{l}} = 1, u_{\mathrm{r}} = 0. \tag{4.43}$$

2. Fall: $u_{\mathrm{l}} < u_{\mathrm{r}}$:
   Hier tritt der Fall auf, dass es einen Bereich gibt, der nicht durch die Charakteristiken abgedeckt wird, d.h. die Lösungen sind hier nicht eindeutig definiert. Der Raum kann jedoch ausgefüllt werden; dies geschieht nicht in eindeutiger Weise. Zum einen kann ein stetiger Übergang gewählt werden, ein so genannter Verdünnungsfächer, oder eine

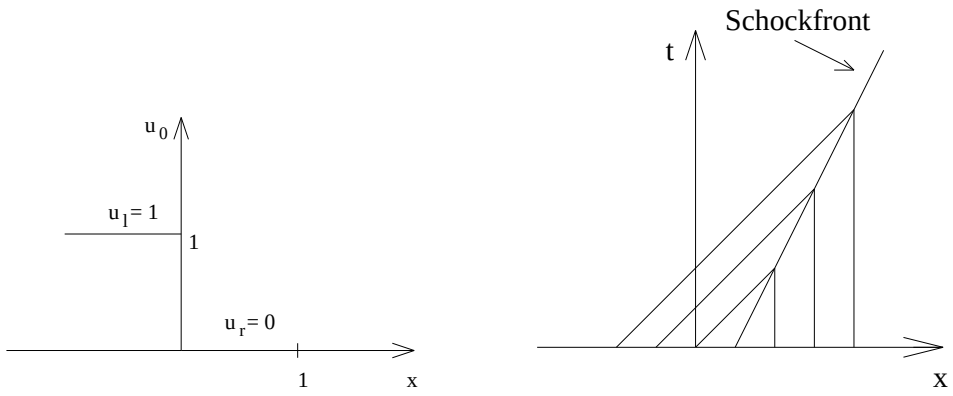

Abbildung 4.4: Anfangsbedingungen und Charakteristiken für Fall 1

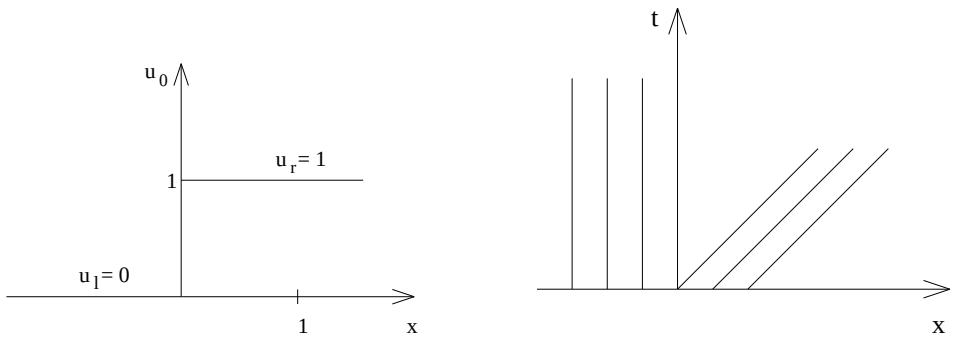

Abbildung 4.5: Anfangsbedingungen und Charakteristiken für Fall 2

Unstetigkeit, die der Rankine-Hugoniot-Bedingung genügt, die Verdünnungsstoß genannt wird. Beide Möglichkeiten sind in Abbildung 4.6 dargestellt.

Im Fall des Verdünnungsfächers lässt sich ein stetiger Übergang durch $u(x,t) = \frac{x}{t}$ erreichen. Im Falle des Verdünnungsstoßes kann mit Hilfe von Gleichung (4.26) die Geschwindigkeit der Unstetigkeit bestimmt werden: $\tilde{v} = \frac{1}{2}$. Da die Charakteristiken nicht wie im Fall 1 in die Unstetigkeit hineinlaufen, sondern heraus, bedeutet dies physikalisch, dass die Stoßfront auseinander läuft.

In Fall 1 sowie in Fall 2 ist die Lösung nicht eindeutig. Es wird deutlich, dass eine weitere Bedingung benötigt wird, die aus allen möglichen Lösungen die

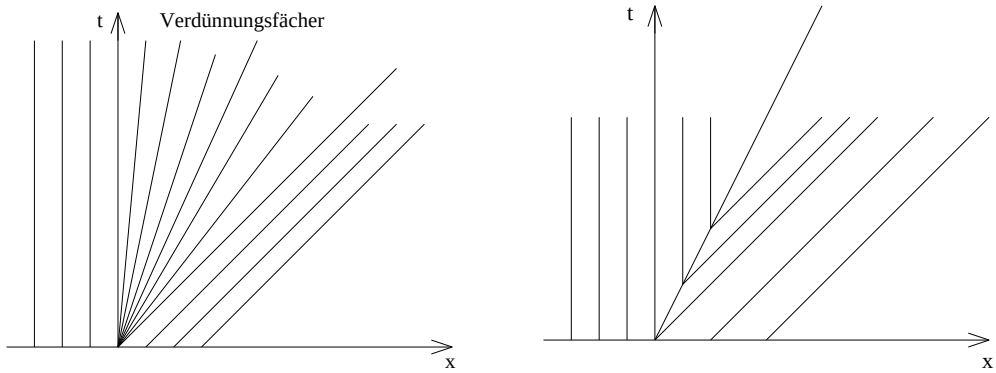

Abbildung 4.6: Verdünnungsfächer und Verdünnungsstoß; beide füllen den nicht definierten Bereich auf.

herausgreift, welche den physikalischen Prozess beschreibt.

4.6 Lösung des Buckley-Leverett-Problems

In diesem Abschnitt werden wir uns mit der Lösung des Buckley-Leverett-Problems befassen. Wie in Abschnitt (4.4) erläutert wurde, sind die relativen Permeabilitäten entscheidend für das Ausbreitungs- und Verdrängungsverhalten eines Mehrphasensystems. Zwei unterschiedliche Ansätze für relative Permeabilität-Sättigungs-Beziehungen werden untersucht: ein linearer und ein quadratischer. Es wird sich zeigen, dass erstere Beziehung sehr schnell zu einer Lösung führt, während bei der zweiten eine Mehrdeutigkeit der Lösung entsteht und in diesem Zusammenhang näher darauf eingegangen wird, wie eine physikalisch sinnvolle Lösung gefunden werden kann.

4.6.1 Lineare relative Permeabilität-Sättigungs-Beziehung

Die lineare relative Permeabilität-Sättigungs-Beziehung ist in Abbildung 4.7 dargestellt. Aufgrund der Linearität gilt: $k_{\mathrm{rw}}(S_{\mathrm{w}}) + k_{\mathrm{rn}}(S_{\mathrm{n}}) = 1$.

In diesem Fall und unter der Voraussetzung, dass man von Fluiden mit gleicher Viskosität ausgeht ($\mu_{\mathrm{w}} = \mu_{\mathrm{n}}$), ist die fraktionale Durchflussfunktion

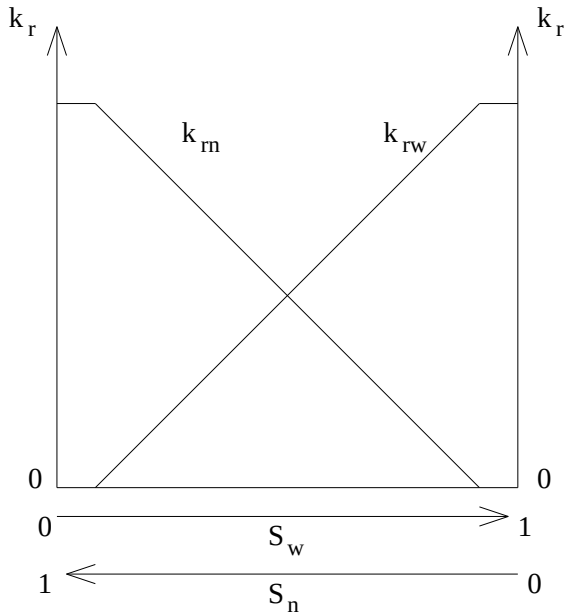

Abbildung 4.7: Lineare relative Permeabilität-Sättigungsbeziehung.

gleich der relativen Permeabilität

$$f_\mathrm{w}(S_\mathrm{w}) = k_\mathrm{rw}(S_\mathrm{w}), \tag{4.44}$$

denn:

$$f_\mathrm{w} = \frac{\frac{k_\mathrm{rw}(S_\mathrm{w})}{\mu_\mathrm{w}}}{\frac{k_\mathrm{rw}(S_\mathrm{w})}{\mu_\mathrm{w}} + \frac{k_\mathrm{rn}(S_\mathrm{n})}{\mu_\mathrm{n}}} \quad \text{mit} \quad \mu_\mathrm{w} = \mu_\mathrm{n} \tag{4.45}$$

$$= \frac{\frac{k_\mathrm{rw}(S_\mathrm{w})}{\mu_\mathrm{w}}}{\frac{k_\mathrm{rw}(S_\mathrm{w})+k_\mathrm{rn}(S_\mathrm{n})}{\mu_\mathrm{w}}} \tag{4.46}$$

$$= \frac{\frac{k_\mathrm{rw}(S_\mathrm{w})}{\mu_\mathrm{w}}}{\frac{1}{\mu_\mathrm{w}}} \tag{4.47}$$

$$= k_\mathrm{rw}(S_\mathrm{w}). \tag{4.48}$$

Aus Gleichung (4.38) sind die Charakteristiken und ihre Steigung $\frac{1}{f'_\mathrm{w}}$ bekannt. Da eine lineare Beziehung gegeben ist, ist $f'_\mathrm{w} = \mathrm{const}$ und somit sind

die Charakteristiken parallel zueinander. Die Lösung ist eindeutig und die Buckley-Leverett-Gleichung zeigt das gleiche Verhalten wie die lineare Transportgleichung aus Abschnitt 4.3. Die fraktionale Durchflussfunktion sowie ihre Ableitung und die Lösung im linearen Fall werden in den Abbildungen 4.8 und 4.9 dargestellt.

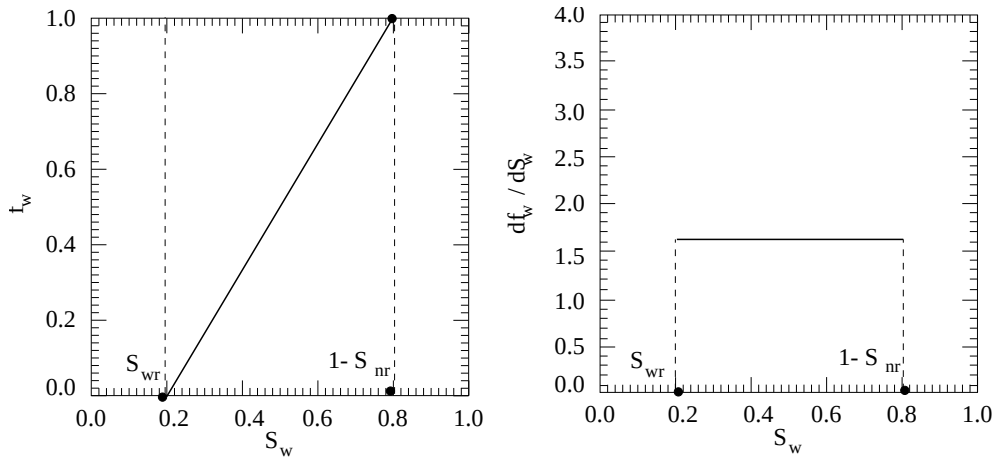

Abbildung 4.8: Fraktionale Durchflussfunktion $f_{\mathrm{w}}(S_{\mathrm{w}})$ und ihre Ableitung im Fall einer linearen relativen Permeabilität-Sättigungs-Beziehung

4.6.2 Quadratische relative Permeabilität-Sättigungs-Beziehung

Für die relativen Permeabilitäten wird folgender Ansatz gemacht (siehe Abbildung 4.10):

$$\begin{aligned} k_{\mathrm{rw}} &= \left(\frac{S_{\mathrm{w}} - S_{\mathrm{wr}}}{1 - S_{\mathrm{wr}} - S_{\mathrm{nr}}}\right)^2, \\ k_{\mathrm{rn}} &= \left(\frac{1 - S_w - S_{\mathrm{nr}}}{1 - S_{\mathrm{wr}} - S_{\mathrm{nr}}}\right)^2. \end{aligned} \tag{4.49}$$

Es liegt wieder ein Riemann-Problem vor und die Charakteristiken haben

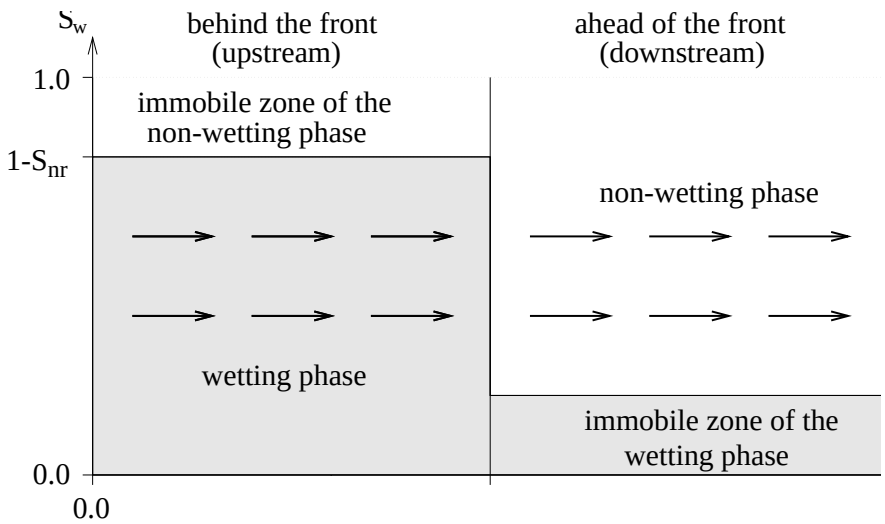

Abbildung 4.9: Lösung des Buckley-Leverett-Problems im linearen Fall

nach Lemma 1 die Gestalt (siehe (4.38)):

$$t = \frac{1}{f'_{\mathrm{w}}} x + t_0. \tag{4.50}$$

Für die Steigung der Charakteristiken ist die Ableitung der fraktionalen Durchflussfunktion entscheidend. Sie und ihre Ableitung sind in Abbildung 4.11 dargestellt. f'_{w} ist jetzt nicht mehr konstant wie bei der linearen relativen Permeabilität-Sättigungs-Beziehung. Dies führt dazu, dass die Charakteristiken anfangen, sich zu schneiden (siehe Abbildung 4.12), und die Lösung nicht mehr eindeutig ist. Die Rückverfolgbarkeit zu einem Anfangspunkt geht verloren. Physikalisch gesehen muss jedoch die Sättigung zu jedem Zeitpunkt und an jedem Ort zu einem Anfangspunkt zurückverfolgt werden können. Daher muss jetzt eine zusätzliche Bedingung formuliert werden, die aus der Vielzahl der Lösungen die herausgreift, die den physikalischen Prozess beschreibt. Diese Bedingung wird Entropiebedingung genannt.

Unterschied zwischen Rankine-Hugoniot-Bedingung und Entropiebedingung:

Mit Hilfe der Rankine-Hugoniot-Bedingung lassen sich die schwachen Lösungen charakterisieren. Da die Rankine-Hugoniot-Bedingung bereits aus der

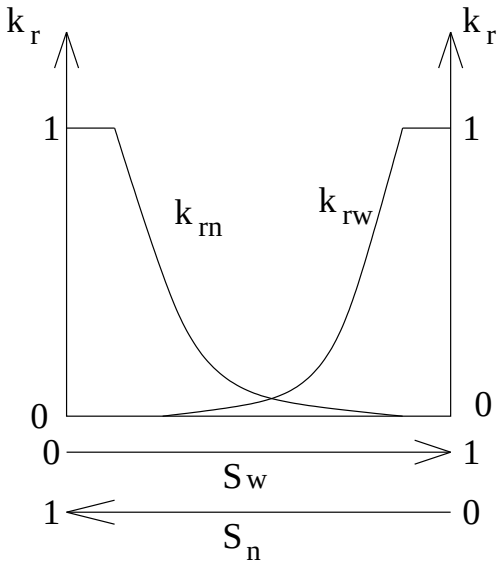

Abbildung 4.10: Quadratische relative Permeabilität-Sättigungs-Beziehung

Formulierung des Problems folgt, ist sie notwendige Voraussetzung einer schwachen Lösung. Die Rankine-Hugoniot-Bedingung gibt aber keine Auskunft darüber, ob eine physikalisch eindeutige Lösung an der Stoßfront vorliegt. Dazu benötigt man die Entropiebedingung.

Entropiebedingung:

Zu Anfang dieses Kapitels wurden die diffusiven Terme vernachlässigt. Betrachtet man nun aber die Differentialgleichung, in der die diffusiven Terme enthalten sind, liegt folgende Gleichung vor:

$$\frac{\partial S_{\mathrm{w}}}{\partial t} + \frac{v_{\mathrm{t}}}{\phi}\frac{\partial f_{\mathrm{w}}}{\partial x} = \varepsilon \frac{\partial^2 S_{\mathrm{w}}}{\partial x^2}. \tag{4.51}$$

Für Gleichung (4.51) berechnet man die Lösungen in Abhängigkeit von ε. Man kann zeigen, dass die Lösungen von (4.51) für $\varepsilon \to 0$ gegen eine Grenzfunktion konvergieren, die schwache Lösung der hyperbolischen Differentialgleichung ist und zusätzlich den physikalischen Prozess beschreibt. Diese Lösung wird *Entropielösung* genannt und genügt folgender *Entropiebedin-*

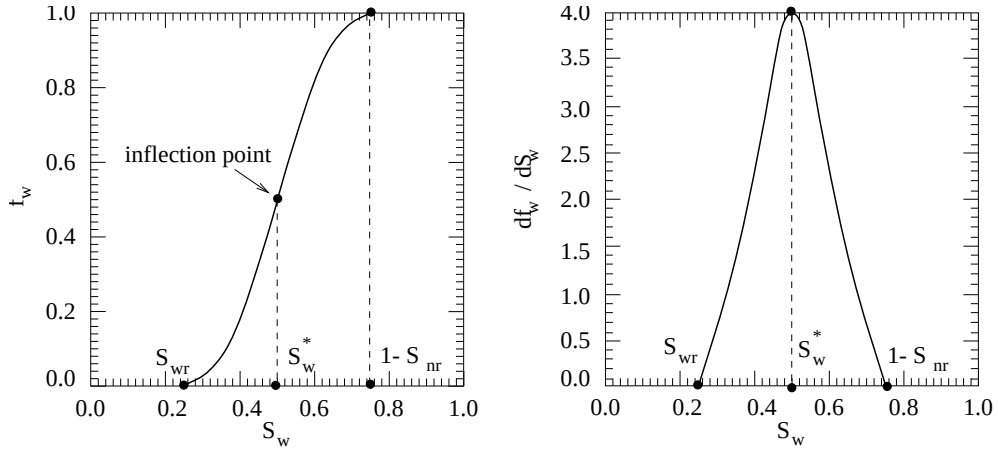

Abbildung 4.11: Fraktionale Durchflussfunktion $f_\mathrm{w}(S_\mathrm{w})$ und ihre Ableitung im Fall einer quadratischen relativen Permeabilität-Sättigungs-Beziehung

gung:

$$\frac{f_\mathrm{w}(S_\mathrm{w}) - f_\mathrm{w}(S_\mathrm{w}^\mathrm{u})}{S_\mathrm{w} - S_\mathrm{w}^\mathrm{u}} \geq v_\mathrm{Schock} \geq \frac{f_\mathrm{w}(S_\mathrm{w}) - f_\mathrm{w}(S_\mathrm{w}^\mathrm{d})}{S_\mathrm{w} - S_\mathrm{w}^\mathrm{d}}, \quad \forall S_\mathrm{w} \in \left[S_\mathrm{w}^\mathrm{d}, S_\mathrm{w}^\mathrm{u}\right]. \quad (4.52)$$

Satz 4.1 *(ohne Beweis)*
Es gibt genau eine schwache Lösung, die die Entropiebedingung erfüllt.

Im nachfolgenden Abschnitt werden Beispiele für die Entropiebedingung gezeigt und mit ihrer Hilfe eine Lösung konstruiert.

Beispiele:

Im Fall b) aus Abbildung 4.13 ist die Entropiebedingung nicht erfüllt. Für die Geschwindigkeit an der Schockfront $\tilde{v}$ gilt: $\tilde{v} = f'_\mathrm{w}$. In diesem Fall ist die Unterstromgeschwindigkeit v_d kleiner als die Oberstromgeschwindigkeit v_u, daher gilt:

$$f'_\mathrm{w}(S_\mathrm{w}^\mathrm{d}) > f'_\mathrm{w}(S_\mathrm{w}^\mathrm{u}). \quad (4.53)$$

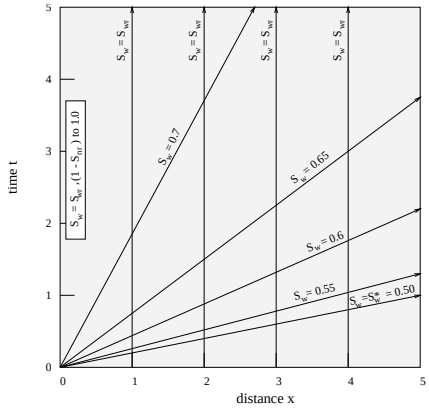

Abbildung 4.12: Charakteristiken für eine nicht-physikalische Lösung des Buckley-Leverett-Problems

Betrachtet man nun die Entropiebedingung (4.52) und bildet auf der linken Seite sowie auf der rechten Seite den Grenzübergang $S_\mathrm{w} \to S_\mathrm{w}^\mathrm{u}$ und $S_\mathrm{w} \to S_\mathrm{w}^\mathrm{d}$, erhält man

$$f_\mathrm{w}'(S_\mathrm{w}^\mathrm{u}) \geq v_\mathrm{Schock} \geq f_\mathrm{w}'(S_\mathrm{w}^\mathrm{d}). \tag{4.54}$$

Die Voraussetzung (4.53) erfüllt die Bedingung (4.54) nicht und genügt somit nicht der Entropiebedingung.

Konstruktion einer Lösung mit Hilfe der Entropiebedingung:

Die Entropiebedingung gilt für alle $S_\mathrm{w} \in \left[S_\mathrm{w}^\mathrm{d}, S_\mathrm{w}^\mathrm{u}\right]$. In diesem Fall kann S_w geschrieben werden als:

$$S_\mathrm{w} = \alpha S_\mathrm{w}^\mathrm{d} + (1-\alpha) S_\mathrm{w}^\mathrm{u}, \qquad \alpha \in [0,1]\,. \tag{4.55}$$

Elementare Umformungen liefern:

$$S_\mathrm{w}^\mathrm{u} - S_\mathrm{w} = S_\mathrm{w}^\mathrm{u} - \left(\alpha S_\mathrm{w}^\mathrm{d} + (1-\alpha) S_\mathrm{w}^\mathrm{u}\right) = \alpha\left(S_\mathrm{w}^\mathrm{u} - S_\mathrm{w}^\mathrm{d}\right), \tag{4.56}$$

$$S_\mathrm{w}^\mathrm{d} - S_\mathrm{w} = (1-\alpha)\left(S_\mathrm{w}^\mathrm{d} - S_\mathrm{w}^\mathrm{u}\right). \tag{4.57}$$

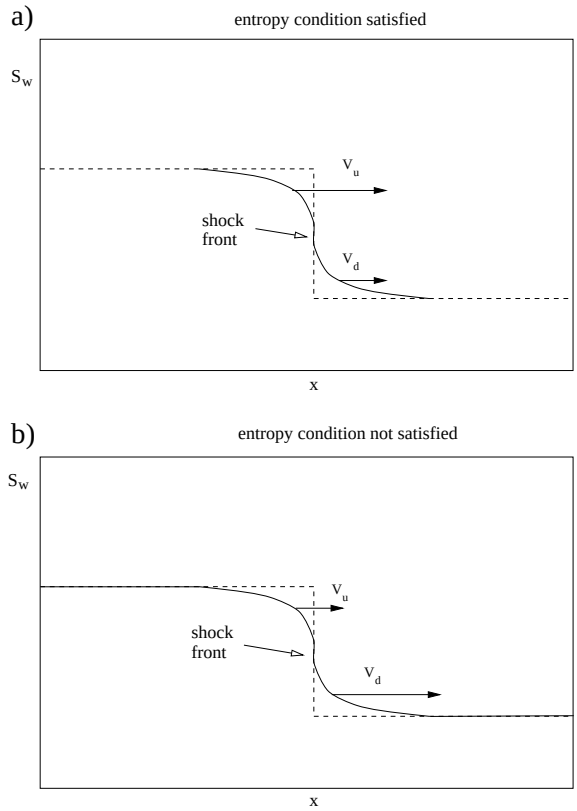

Abbildung 4.13: Entropiebedingung für eine diffusive Front

Daraus folgt eingesetzt in Gleichung (4.52)

$$\frac{f_{\mathrm{w}}(S_{\mathrm{w}}^{\mathrm{u}}) - f_{\mathrm{w}}(S_{\mathrm{w}})}{\alpha\,(S_{\mathrm{w}}^{\mathrm{u}} - S_{\mathrm{w}}^{\mathrm{d}})} \geq v_{\mathrm{Schock}} \geq \frac{f_{\mathrm{w}}(S_{\mathrm{w}}) - f_{\mathrm{w}}(S_{\mathrm{w}}^{\mathrm{d}})}{(1-\alpha)\,(S_{\mathrm{w}}^{\mathrm{u}} - S_{\mathrm{w}}^{\mathrm{d}})},$$

$$(1-\alpha)\,(f_{\mathrm{w}}(S_{\mathrm{w}}^{\mathrm{u}}) - f_{\mathrm{w}}(S_{\mathrm{w}})) \geq \alpha\left(f_{\mathrm{w}}(S_{\mathrm{w}}) - f_{\mathrm{w}}(S_{\mathrm{w}}^{\mathrm{d}})\right),$$

$$f_{\mathrm{w}}(S_{\mathrm{w}}) \leq (1-\alpha) f_{\mathrm{w}}(S_{\mathrm{w}}^{\mathrm{u}}) + \alpha f_{\mathrm{w}}(S_{\mathrm{w}}^{\mathrm{d}}) \quad \text{für } \alpha \in [0,1]\,. \tag{4.58}$$

Die rechte Seite von Ungleichung (4.58) beschreibt die Verbindungsgerade zwischen $(S_{\mathrm{w}}^{\mathrm{u}}, f_{\mathrm{w}}(S_{\mathrm{w}}^{\mathrm{u}}))$ und $(S_{\mathrm{w}}^{\mathrm{d}}, f_{\mathrm{w}}(S_{\mathrm{w}}^{\mathrm{d}}))$. Daraus folgt, dass der Graph der fraktionalen Durchflussfunktion unterhalb dieser Geraden verlaufen muss, siehe Abbildung 4.14.

Nun werden drei Beispiele betrachtet, um den Verlauf der Sättigung,

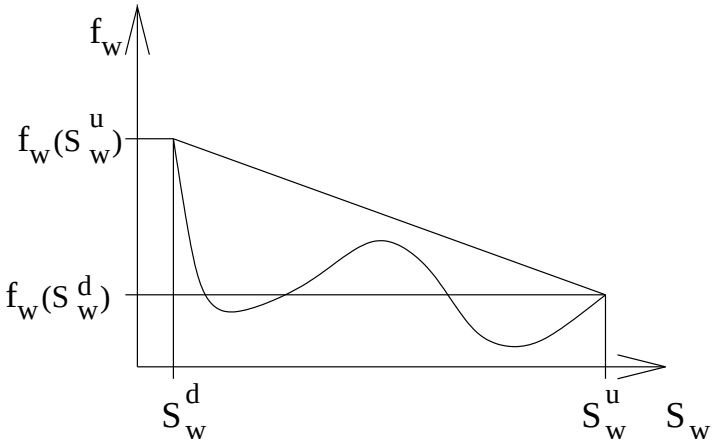

Abbildung 4.14: Beispielhafter Verlauf der fraktionalen Durchflussfunktion, bei dem die Entropiebedingung erfüllt ist.

der von der Massenbilanz an der Schockfront (Rankine-Hugoniot-Bedingung) und der Entropiebedingung abhängt, zu beschreiben. Das erste Beispiel wird den Fall aufzeigen, dass die Entropiebedingung nicht erfüllt ist und ein zweites Beispiel wird die Rankine-Hugoniot-Bedingung nicht erfüllen. Das dritte Beispiel wird dann die physikalisch korrekte Lösung zeigen. Für die Wassersättigungen Ober- bzw. Unterstrom ist gegeben: $S_{\mathrm{w}}^{\mathrm{u}} = 0.7$ bzw. $S_{\mathrm{w}}^{\mathrm{d}} = 0.25$.

Beispiel 1: Entropiebedingung ist nicht erfüllt.

Der Verlauf der fraktionalen Durchflussfunktion sowie ihre Ableitung sind in Abbildung 4.15 dargestellt. Wie aus Ungleichung (4.58) folgt, muss der Graph der fraktionalen Durchflussfunktion unterhalb der Verbindungsgeraden zwischen $f_{\mathrm{w}}(S_{\mathrm{w}}^{\mathrm{u}})$ und $f_{\mathrm{w}}(S_{\mathrm{w}}^{\mathrm{d}})$ verlaufen, damit die Entropiebedingung erfüllt ist. Wählen wir nun $S_{\mathrm{w}} > S_{\mathrm{w}}^{\mathrm{t}}$, erkennt man, dass Gleichung (4.58) verletzt und somit die Entropiebedingung nicht erfüllt ist.

Beispiel 2: Rankine-Hugoniot ist nicht erfüllt.

In diesem Fall wird versucht, einen Verdünnungsfächer zu konstruieren, der bis zum Wendepunkt der fraktionalen Durchflussfunktion verdünnt.Erst da-

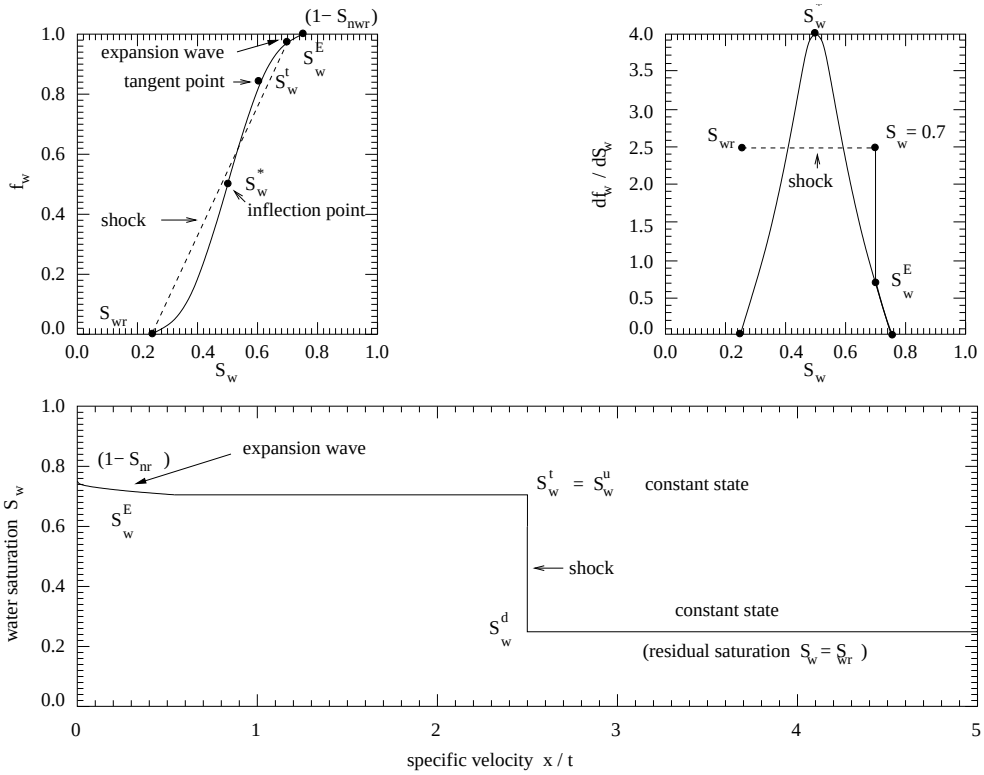

Abbildung 4.15: Entropiebedingung ist nicht erfüllt.

nach soll der Sprung stattfinden. In Abbildung 4.17 wird deutlich, dass dann die Rankine-Hugoniot-Bedingung nicht erfüllt sein kann. Die Charakteristiken würden sich das erste Mal entlang der Charakteristik schneiden, entlang derer die Sättigung den Wert $S_{\mathrm{w}}^{*} = 0.50$ hat. Dies würde bedeuten, dass sich die Unstetigkeit entlang dieser Charakteristik ausbreitet, was jedoch die Rankine-Hugoniot-Bedingung verletzt. Denn diese gibt vor, welche Steigung die Gerade haben muss, entlang derer sich die Unstetigkeit ausbreitet. Abbildung 4.16 zeigt ebenfalls, dass die Rankine-Hugoniot-Bedingung verletzt ist, z.B. hat man an der Stelle $\frac{x}{t} = 3$ eine Mehrdeutigkeit der Lösung, die nicht zulässig ist.

Hieraus folgt, dass die Verdünnung maximal bis zum Tangentenpunkt $S_{\mathrm{w}}^{\mathrm{t}}$ stattfinden darf.

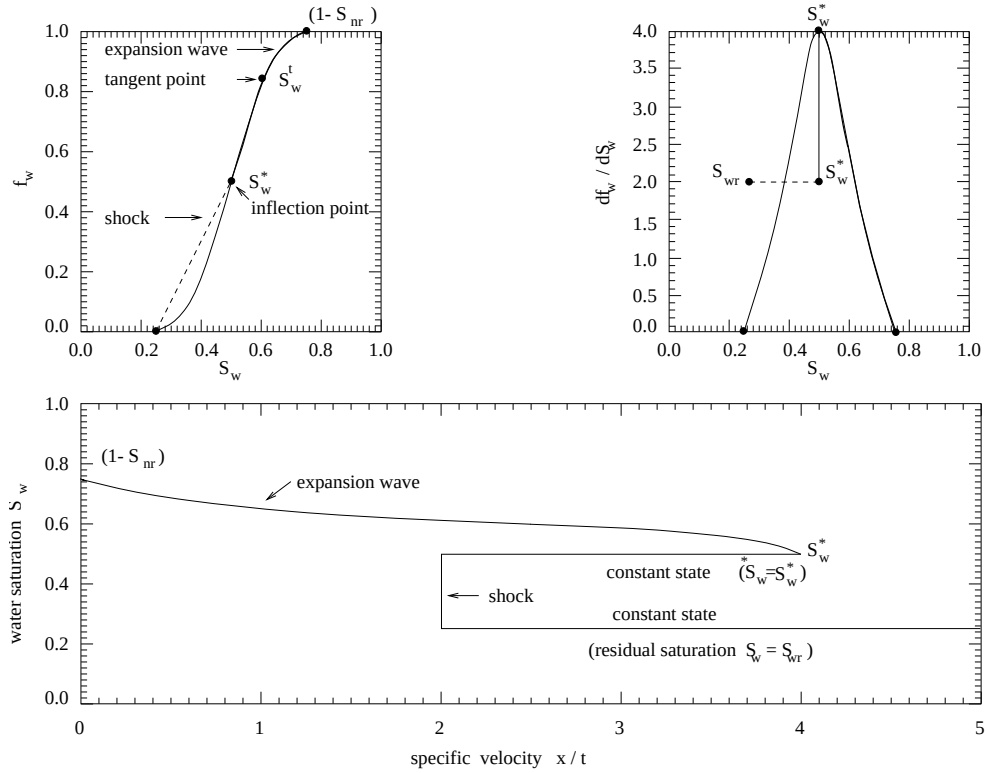

Abbildung 4.16: Rankine-Hugoniot-Bedingung ist nicht erfüllt.

Beispiel 3: Physikalische Lösung.

Aus den beiden vorherigen Beispielen wurde deutlich, dass die Entropie- sowie die Rankine-Hugoniot-Bedingungen Einschränkungen an $S_{\mathrm{w}}^{\mathrm{u}}$ vorgeben.

Eine physikalisch korrekte Lösung muss folgende Punkte berücksichtigen:

- Die Entropiebedingung ist erfüllt, falls gilt
  $S_{\mathrm{w}}^{\mathrm{u}} \leq S_{\mathrm{w}}^{\mathrm{t}}$.

- Die Rankine-Hugoniot-Bedingung ist erfüllt, falls gilt
  $S_{\mathrm{w}}^{\mathrm{u}} \geq S_{\mathrm{w}}^{\mathrm{t}}$.

Man erhält eine physikalische Lösung falls $S_{\mathrm{w}}^{\mathrm{u}} = S_{\mathrm{w}}^{\mathrm{t}}$ ist, d.h. der Sprung der Anfangsbedingungen von S_{wr} nach $1 - S_{\mathrm{nr}}$ kann nicht auf einmal stattfinden, dennoch muss dieser Bereich überbrückt werden. Aus obigen Überlegungen

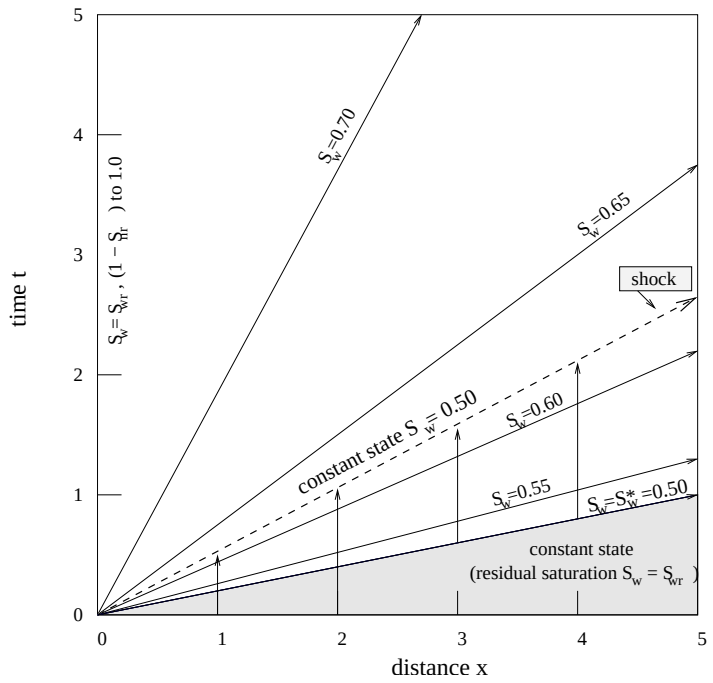

Abbildung 4.17: Charakteristiken für den Fall, dass die Rankine-Hugoniot-Bedingung nicht erfüllt ist.

folgt, dass ein Sprung nur bis zum Tangentenpuntk S_w^t stattfinden kann, danach tritt ein Verdünnungsfächer auf.

Somit wurde eine mathematisch und physikalisch korrekte Lösung gefunden. Die Sprungunstetigkeit breitet sich entlang einer Charakteristik aus und die Sprunghöhe bleibt auf alle Zeit unverändert (siehe Abbildungen 4.18 und 4.19).

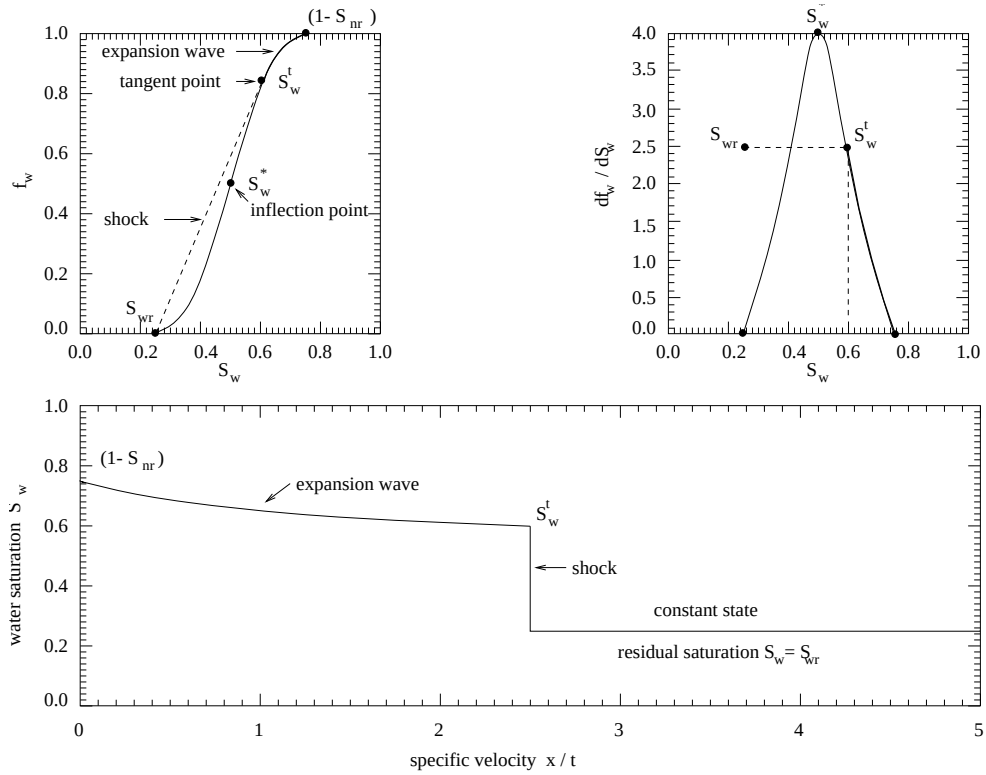

Abbildung 4.18: Physikalisch korrekte Lösung.

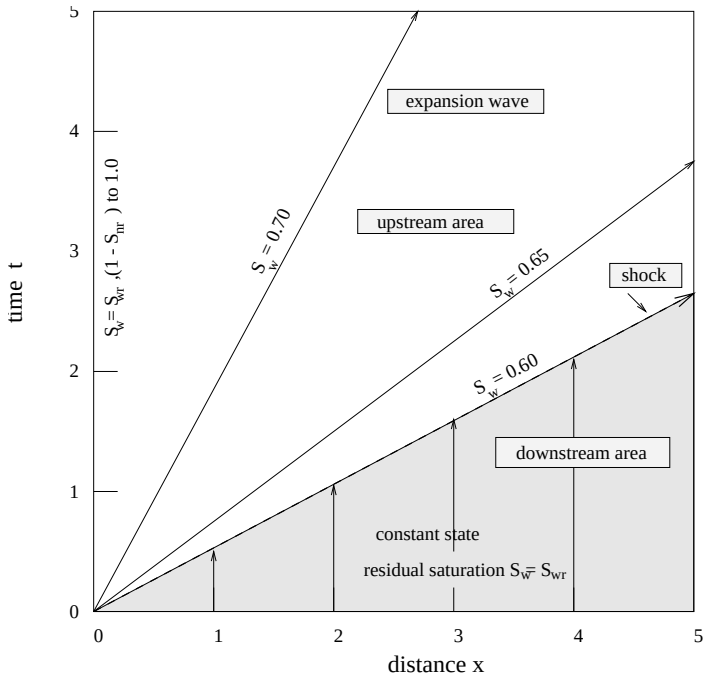

Abbildung 4.19: Charakteristiken der physikalischen Lösung.

Literaturverzeichnis

[1] R. Helmig. *Multiphase Flow and Transport Processes in the Subsurface - A Contribution to the Modeling of Hydrosystems*. Springer Verlag, Berlin, Heidelberg, New York, 1995.

[2] A.M. Sändig. *Partielle Differentialgleichungen für Ingenieure*. Vorlesung, Universität Stuttgart, Wintersemester 2001/02.

[3] Th. Sonar. *Mathematische Einführung in die Strömungsmechanik*. Vorlesung, TU Clausthal, Wintersemester 1995/96.

[4] R.J. LeVeque. *Numerical Methods for Conservation Laws*. Birkhäuser Verlag, Basel, Boston, Berlin, 1992.

Teil II

Modellierung von Sedimentations-Konsolidationsvorgängen

Vortrag 5

Modellgleichungen für Sedimentations-Konsolidations-Prozesse

Ausgearbeitet von Hartmut Eichel.

5.1 Einleitung und Gliederung

Der kombinierte Effekt von Sedimentation und Konsolidation ist ein vielgenutzter industrieller Prozess, um Suspensionen in ihre flüssigen und festen Bestandteile zu trennen. In dieser Arbeit soll die phänomenologische Theorie mit den dazugehörenden Erhaltungsgleichungen skizziert werden. [1]

Zuerst werden die Bilanzgleichungen vorgestellt, die im weiteren Verlauf mit Hilfe der konstitutiven Beziehungen umformuliert und anschließend mittels der Dimensionsanalyse vereinfacht werden. Zum Schluß wird das Gleichungssystem auf eine eindimensionale Betrachtung reduziert.

5.2 Erhaltungsgleichungen

5.2.1 Annahmen

Es werden die folgenden Annahmen getroffen: Alle Partikel sind klein im Verhältnis zum Behälter und haben die gleiche Dichte. Sowohl die Partikel als auch die Flocken sind inkompressibel. Es gibt keinen Massenaustausch zwischen den Phasen. Gravitation ist die einzige Volumenkraft.

5.2.2 Massen- und Impulserhaltung

Es werden die folgenden Variablen verwendet: die volumetrische Feststoffdichte ϕ, die Geschwindigkeiten der Komponenten $\mathbf{v}_\mathrm{s}$ und $\mathbf{v}_\mathrm{f}$, die Cauchyschen Spannungstensoren $\mathbf{T}_\mathrm{s}$ und $\mathbf{T}_\mathrm{f}$, die externe Körperkraft $\mathbf{b}$ und die Fest-Flüssig Interaktionskraft $\mathbf{m}$.

"Die allgemeinen nicht material-spezifischen Bilanzgleichungen lauten"

1a) Kontinuitätsgleichung für den Feststoff:

$$\frac{\partial \phi}{\partial t} + \nabla \cdot (\phi \mathbf{v}_\mathrm{s}) = 0 \tag{5.1}$$

1b) Kontinuitätsgleichung für das Fluid:

$$\frac{\partial (1-\phi)}{\partial t} + \nabla \cdot ((1-\phi)\mathbf{v}_\mathrm{f}) = 0 \tag{5.2}$$

Verwendet man die volumengemittelte Geschwindigkeit der Mischung $\mathbf{q} := \phi \mathbf{v}_\mathrm{s} + (1-\phi)\mathbf{v}_\mathrm{f}$ dann erhält man die Kontinuitätsgleichung der Mischung.

1c) Kontinuitätsgleichung für die Mischung:

$$\nabla \cdot \mathbf{q} = 0, \tag{5.3}$$

2a) Impuls–Gleichung für den Feststoff:

$$\rho_\mathrm{s} \phi \frac{\mathrm{D}\mathbf{v}_\mathrm{s}}{\mathrm{Dt}} = \nabla \cdot \mathbf{T}_\mathrm{s} + \rho_\mathrm{s} \phi \mathbf{b} + \mathbf{m}, \tag{5.4}$$

2b) Impuls–Gleichung für das Fluid:

$$\rho_\mathrm{f} (1-\phi) \frac{\mathrm{D}\mathbf{v}_\mathrm{f}}{\mathrm{Dt}} = \nabla \cdot \mathbf{T}_\mathrm{f} + \rho_\mathrm{f} (1-\phi) \mathbf{b} - \mathbf{m} \tag{5.5}$$

5.3 Konstitutive Beziehungen

5.3.1 Konstitutive Variablen

Bis jetzt wurden noch keine Annahmen zu den Materialeigenschaften getroffen. Diese gehen nun über konstitutive Beziehungen in die Gleichungen ein.

Es wird postuliert, dass alle Variablen, die bestimmt werden sollen, isotrope Funktionen der konstitutiven Variablen sind. Diese werden ausgewählt.

$$\tilde{C} = \{\phi, \nabla\phi, \rho_\mathrm{s}, \rho_\mathrm{f}, \mathbf{v}_\mathrm{s}, \mathbf{v}_\mathrm{f}, \nabla\mathbf{v}_\mathrm{s}, \nabla\mathbf{v}_\mathrm{f}, \partial_t\mathbf{v}_\mathrm{s}, \partial_t\mathbf{v}_\mathrm{f}\}. \tag{5.6}$$

Im folgenden wird nun ein Satz objektiver Variablen ausgewählt, d.h. Variablen die unabhängig vom Beobachter sind. Die Relativgeschwindigkeit zum Beispiel ist unabhängig vom betrachteten Koordinatensystem, ebenso ihre Ableitungen.

$$\tilde{C} = \{\phi, \nabla\phi, \rho_\mathrm{s}, \rho_\mathrm{f}, \mathbf{v}_\mathrm{r}, (\mathbf{v}_\mathrm{r}\cdot\nabla)\mathbf{v}_\mathrm{r}, \nabla\mathbf{v}_\mathrm{s}+(\nabla\mathbf{v}_\mathrm{s})^T, \nabla\mathbf{v}_\mathrm{f}+(\nabla\mathbf{v}_\mathrm{f})^T, D_t^r\mathbf{v}_\mathrm{r}\} \tag{5.7}$$

Es wird angenommen, dass die konstitutiven Gleichungen für den Cauchyschen Spannungstensor und die Fest-Flüssig-Interaktionskräfte linear in bezug zum Geschwindigkeitsfeld sind.

$$\mathbf{T}_\mathrm{s} = -p_\mathrm{s}\mathbf{I} + \mu_\mathrm{s}[\nabla\mathbf{v}_\mathrm{s} + (\nabla\mathbf{v}_\mathrm{s})^T] + \lambda_\mathrm{s}(\nabla\mathbf{v}_\mathrm{s})\mathrm{I}, \tag{5.8}$$

$$\mathbf{T}_\mathrm{f} = -p_\mathrm{f}I + \mu_\mathrm{f}[\nabla\mathbf{v}_\mathrm{f} + (\nabla\mathbf{v}_\mathrm{f})^T] + \lambda_\mathrm{f}(\nabla\mathbf{v}_\mathrm{f})\mathrm{I}, \tag{5.9}$$

$$\mathbf{m} = -\alpha\mathbf{v}_\mathrm{r} + \beta\nabla\phi + \gamma\frac{\mathrm{D}\mathbf{v}_\mathrm{r}}{\mathrm{Dt}}. \tag{5.10}$$

α, β und γ sind skalare Funktionen, die abhängig von ϕ sind.

5.3.2 Porendruck und Feststoffspannungsanteil

Die bisher verwendeten Drücke p_s und p_f sind die Komponentendrücke, d.h. nicht messbare theoretische Größen, die nun durch den Porendruck und den Feststoffschubspannungsanteil ersetzt werden.

$$p := p_\mathrm{s} + p_\mathrm{f} = \tilde{p} + \sigma_\mathrm{e} \tag{5.11}$$

Um dies zu erreichen wird die folgende Überlegung angestellt. Wenn S_f der Anteil eines Querschnitts S ist, der von Fluid ausgefüllt wird, und die Oberflächenporosität definiert ist als $\varepsilon := |S_\mathrm{f}| \,/\, |S|$, d.h $dS_\mathrm{f} = \varepsilon\, dS$, dann ist der

wirkende Druck auf das Fluid in einem Querschnitt im Sediment

$$\int_{\mathrm{s}} p_{\mathrm{f}}\, dS = \int_{S_{\mathrm{f}}} \tilde{p}\, dS_{\mathrm{f}} = \int_{\mathrm{s}} \tilde{p}(\varepsilon\, dS). \tag{5.12}$$

Wenn man nun weiterhin annimmt, dass die Oberflächenporosität eine Funktion der Volumenporosität ist, die sich kontinuierlich mit der Tiefe verändert, dann kann man, wenn man keine spezielle Form der Flocken annimmt, eine möglichst einfache Funktion wählen, die den Anforderungen entspricht.

Der Einfachheit halber wird hier $\varepsilon = 1 - \phi$ angenommen. Damit ergibt sich in Gleichung (5.12)

$$\int_{\mathrm{s}} p_{\mathrm{f}}\, dS = \int_{\mathrm{s}} \tilde{p}(1-\phi)\, dS. \tag{5.13}$$

Daraus folgt dann

$$p_{\mathrm{f}} = (1-\phi)\tilde{p} \tag{5.14}$$

und mit Gleichung (5.11)

$$p_{\mathrm{s}} = \phi\tilde{p} + \sigma_{\mathrm{e}}. \tag{5.15}$$

Die Impulserhaltungsgleichungen lauten nun:

$$\rho_{\mathrm{s}}\phi\frac{\mathrm{D}\mathbf{v}_{\mathrm{s}}}{\mathrm{Dt}} = -\nabla(\phi\tilde{p}\ - \nabla\sigma_{\mathrm{e}} + \nabla\cdot\mathbf{T}_{\mathrm{s}}^{\mathrm{E}} - \rho_{\mathrm{s}}\phi g\mathbf{k} + \mathbf{m}, \tag{5.16}$$

$$\rho_{\mathrm{f}}(1-\phi)\frac{\mathrm{D}\mathbf{v}_{\mathrm{f}}}{\mathrm{Dt}} = -\nabla((1-\phi)\tilde{p}) + \nabla\cdot\mathbf{T}_{\mathrm{f}}^{\mathrm{E}} - \rho_{\mathrm{f}}(1-\phi)g\mathbf{k} - \mathbf{m}. \tag{5.17}$$

Da die Strömung der Flüssigkeit vom Porendruck, der über den hydrostatischen Druck hinausgeht, angetrieben wird, ist es sinnvoll, den Porenüberdruck

$$p_{\mathrm{e}} := \tilde{p} - \rho_{\mathrm{f}} g(H - z) \tag{5.18}$$

zu verwenden. Diese Substitution wird zum Schluß durchgeführt.

5.3.3 Fest-Flüssig-Interaktionskraft

Die Fest-Flüssig-Interaktionskraft besteht aus zwei Anteilen, einem hydrostatischen $\mathbf{m}_{\mathrm{b}}$ und einem dynamischen $\mathbf{m}_{\mathrm{d}}$. Aus der Impulserhaltungsgleichung (5.17) kann

$$\mathbf{m}_{\mathrm{b}} = \beta\nabla\phi = \tilde{p}\nabla\phi \tag{5.19}$$

bgeleitet werden.

5.4 Relativgeschwindigkeit und Impulsgleichung der Mischung

5.4.1 Relativgeschwindigkeit

Die beiden Impulserhaltungsgleichungen (5.16) und (5.17) werden nun nach dem Porendruck bzw. dem Feststoffspannungsanteil aufgelöst und die Gleichung (5.19) eingesetzt. Mann erhält dann

$$\nabla\sigma_\mathrm{e} = -\rho_\mathrm{s}\phi\frac{\mathrm{D}\mathbf{v}_\mathrm{s}}{\mathrm{Dt}} - \phi\nabla\tilde{p} + \nabla\cdot\mathbf{T}_\mathrm{s}^\mathrm{E} - \rho_\mathrm{s}\phi g\mathbf{k} + \alpha\mathbf{v}_\mathrm{r} + \gamma\frac{\mathrm{D}\mathbf{v}_\mathrm{r}}{\mathrm{Dt}}, \tag{5.20}$$

$$\nabla\tilde{p} = -\rho_\mathrm{f}\frac{\mathrm{D}\mathbf{v}_\mathrm{f}}{\mathrm{Dt}} - \rho_\mathrm{f}g\mathbf{k} + \frac{1}{1-\phi}\left[\nabla\cdot\mathbf{T}_\mathrm{f}^\mathrm{E} + \alpha\mathbf{v}_\mathrm{r} - \gamma\frac{\mathrm{D}\mathbf{v}_\mathrm{r}}{\mathrm{Dt}}\right]. \tag{5.21}$$

Um nun einen Ausdruck für $\mathbf{v}_\mathrm{r}$ zu erhalten, setzen wir Gleichung (5.21) in (5.20) ein und erhalten:

$$\begin{aligned}\mathbf{v}_\mathrm{r} = &-\frac{1-\phi}{\alpha(\phi)}\nabla\sigma_\mathrm{e} - \frac{\Delta\rho g\phi(1-\phi)}{\alpha(\phi)}\mathbf{k} + \frac{1-\phi}{\alpha(\phi)}\nabla\mathbf{T}_\mathrm{s}^\mathrm{E} - \frac{\phi}{\alpha(\phi)}\nabla\mathbf{T}_\mathrm{f}^\mathrm{E}\\ &+\frac{(1-\phi)\phi}{\alpha(\phi)}\left(\rho_\mathrm{s}\frac{\mathrm{D}\mathbf{v}_\mathrm{s}}{\mathrm{Dt}} - \rho_\mathrm{f}\frac{\mathrm{D}\mathbf{v}_\mathrm{f}}{\mathrm{Dt}}\right) - \frac{1}{\alpha(\phi)}\gamma(\phi)\frac{\mathrm{D}\mathbf{v}_\mathrm{r}}{\mathrm{Dt}}\end{aligned} \tag{5.22}$$

Um später die Formel leichter vereinfachen zu können, führen wir nun die Kynchsche Flussdichtefunktion f_bk ein

$$f_\mathrm{bk}(\phi) := -\frac{\Delta\rho g\phi^2(1-\phi)^2}{\alpha(\phi)}, \tag{5.23}$$

und erhalten einen neuen Ausdruck für $\mathbf{v}_\mathrm{r}$:

$$\begin{aligned}\mathbf{v}_\mathrm{r} = -&\frac{f_\mathrm{bk}(\phi)}{\Delta\rho g\phi^2(1-\phi)}\left[\nabla\sigma_\mathrm{e} - \phi\Delta\rho g\mathbf{k} + \mathbf{T}_\mathrm{s}^\mathrm{E} - \frac{1}{1-\phi}\nabla\mathbf{T}_\mathrm{f}^\mathrm{E}\right.\\ &\left.+\phi(\rho_\mathrm{s}\frac{\mathrm{D}\mathbf{v}_\mathrm{s}}{\mathrm{Dt}} - \rho_\mathrm{f}\frac{\mathrm{D}\mathbf{v}_\mathrm{f}}{\mathrm{Dt}}) - \frac{1}{1-\phi}\gamma(\phi)\frac{\mathrm{D}\mathbf{v}_\mathrm{r}}{\mathrm{Dt}}\right].\end{aligned} \tag{5.24}$$

5.4.2 Impulserhaltung der Mischung

Wir erhalten die Impulserhaltungsgleichung der Mischung, wenn wir die Gleichungen der Komponenten (5.4) und (5.5) addieren:

$$\rho(\phi)\frac{\mathrm{D}\mathbf{v}}{\mathrm{Dt}} = -\nabla p + \nabla\cdot\mathbf{T}^\mathrm{E} - \rho(\phi)g\mathbf{k}, \tag{5.25}$$

wobei $\rho(\phi) = \rho_\mathrm{s}\phi + \rho_\mathrm{f}(1-\phi)$ die lokale Dichte der Mischung ist und

$$\mathbf{v} = \frac{1}{\rho(\phi)}(\rho_\mathrm{s}\phi\mathbf{v}_\mathrm{s} + \rho_\mathrm{f}(1-\phi)\mathbf{v}_\mathrm{f}) \tag{5.26}$$

die massengemittelte Geschwindigkeit ist. In Gleichung (5.25) kann man nun den viskosen Spannungstensor durch in [1] abgeleitete, hier nicht aufgeführte Umformungen explizit angeben. Dann kommt man zu folgender Reformulierung von Gleichung (5.25).

$$\begin{aligned}\rho(\phi)\frac{\mathrm{D}\mathbf{v}}{\mathrm{Dt}} + \nabla\cdot\left(\frac{\rho_\mathrm{s}\rho_\mathrm{f}\phi(1-\phi)}{\rho(\phi)}\mathbf{v}_\mathrm{r}\mathbf{v}_\mathrm{r}\right) &= -\rho(\phi)g\mathbf{k} - \\ -\nabla p + \mu_\mathrm{mix}(\phi)\nabla^2\mathbf{q} + (\nabla\mu_\mathrm{mix}(\phi))\cdot[\nabla\mathbf{q} + (\mathbf{q})^T] &- \bar{\boldsymbol{\Psi}}(D_x^a\phi).\end{aligned} \tag{5.27}$$

Der Term $\bar{\Psi}$ ist eine stark nicht lineare Funktion, die höhere Ableitungen von ϕ enthält.

5.5 Dimensionsanalyse

Es wird nun eine Dimensionsanalyse durchgeführt, um die Größe der Terme in den Gleichungen (5.24) und (5.27) abzuschätzen. Für die Tiefe des Sedimentationstanks wird dabei eine charakteristische Länge L angenommen und ein dimensionsloser Strömungsgradient defininiert als $\nabla^* u = L\nabla u$. Die Größe der Flocken d soll viel kleiner sein als die Länge L ($L \gg d$). Es müssen zwei Geschwindigkeiten definiert werden. Eine Geschwindigkeit U, die die volumengemittelte Geschwindigkeit der Mischung $\mathbf{q}$ darstellt und u_∞, die die relative Geschwindigkeit $\mathbf{v}_\mathrm{r}$ repräsentiert.

Damit ergeben sich die beiden dimensionslosen Geschwindigkeiten $\mathbf{q}^* = U^{-1}\mathbf{q}$ und $\mathbf{v}_\mathrm{r}^* = u_\infty^{-1}\mathbf{v}_\mathrm{r}$. Da in diesem speziellen Fall die Strömung ausschließlich durch die Schwerkraft angetrieben wird, kann man $U = u_\infty$ setzen und eine charakteristische Zeit mit $t_0 = L/u_\infty$ wählen. Die Dichten und Viskositäten werden mit der Dichte und der dynamischen Viskosität des Fluids dimensionslos gemacht. Hieraus ergeben sich die beiden dimensionslosen Kennzahlen: die Froude-Zahl und die Reynolds-Zahl der Sedimentation.

$$\mathrm{Fr} := \frac{U^2}{gL} = \frac{u_\infty^2}{gL}, \qquad \mathrm{Re}_\mathrm{sed} := \frac{du_\infty}{\nu_0} \tag{5.28}$$

mit $\nu_0 = \mu_\mathrm{f}/\rho_\mathrm{f}$ als typische kinematische Viskosität.

Für den hier betrachteten Fall werden die folgenden Größenordungen angenommen $u_\infty = 10^{-4}$ m/s (Sinkgeschwindigkeit einer einzelnen Flocke), $d = 10^{-4}$ m (angenommener Durchmesser einer Flocke), $L = 1$ m (Höhe des Sedimentationstanks), $\nu_0 = 10^{-6}$ m^2/s (kinematische Viskosität von Wasser) und $g = 10$ m/s^2 (Erdbeschleunigung). Damit ergeben sich die folgenden Größen der Kennzahlen

$$\mathrm{Fr} = 10^{-9}, \qquad \mathrm{Re}_{\mathrm{sed}} = 10^{-2}, \qquad \frac{d}{L}\frac{\mathrm{Fr}}{\mathrm{Re}_{\mathrm{sed}}} = 10^{-11}. \tag{5.29}$$

Mit diesem Ergebnis können wir nun die Gleichung der relativen Geschwindigkeit vereinfachen. Sie ist nun nur noch eine Funktion von ϕ und $\nabla\sigma_{\mathrm{e}}$:

$$\mathbf{v}_{\mathrm{r}} = \frac{f_{\mathrm{bk}}(\phi)}{\Delta\rho g\phi^2(1-\phi)}[\nabla\sigma_{\mathrm{e}}(\phi) + \Delta\rho g\phi\mathbf{k}]. \tag{5.30}$$

Wenn man sich entschließt, sowohl die advektiven Beschleunigungsterme als auch die viskosen Spannungsterme zu vernachlässigen, welche mit der Froudezahl bzw. mit $d\mathrm{Fr}\mathrm{Re}_{\mathrm{sed}}^{-1}L{-}1$ multipliziert werden, erhalten wir die folgende Gleichung

$$\nabla p = \rho(\phi)g\mathbf{k}$$

oder wenn wir den totalen Druck ersetzen mit dem Porenüberdruck p_{e} und dem Feststoffschubspannungsanteil σ_{e}

$$\nabla p_{\mathrm{e}} = -\nabla(\sigma_{\mathrm{e}}(\phi)) - \Delta\rho g\phi\mathbf{k}. \tag{5.31}$$

In dieser Gleichung tritt nun $\mathbf{q}$ nicht mehr auf. Diese Größe kann also nicht mehr aus den Gleichungen bestimmt werden.

5.6 Endgültige Form der Gleichungen

Wir haben nun den folgenden Satz von Gleichungen erhalten, wenn wir die Gleichung (5.27) nicht vereinfachen.

Die Kontinuitätsgleichungen lauten dann

$$\frac{\partial\phi}{\partial t} + \nabla\cdot(\phi\mathbf{q} + f_{\mathrm{bk}}(\phi)\mathbf{k}) = \nabla\cdot(a(\phi)\nabla\phi), \tag{5.32}$$

$$\nabla\cdot\mathbf{q} = 0. \tag{5.33}$$

Die Gleichung (5.27) wird noch umgeschrieben, um die Analogie zur Navier-Stokes-Gleichung zu verdeutlichen:

$$\begin{aligned}
&-\rho(\phi)\frac{\mathrm{D}\mathbf{q}}{\mathrm{Dt}} + \mu_{\mathrm{mix}}(\phi)\Delta\mathbf{q} - \nabla p_{\mathrm{e}} = \\
&\quad \nabla\sigma_{\mathrm{e}}(\phi) + \Delta\rho g\phi\mathbf{k} + \rho(\phi)((\mathbf{q}\cdot\nabla)(r(\phi)\mathbf{v}_{\mathrm{r}}) + ((r(\phi)\mathbf{v}_{\mathrm{r}})\cdot\nabla)\mathbf{q}) - \\
&\quad - \nabla(\mu_{\mathrm{mix}}(\phi))\cdot[\nabla\mathbf{q} + (\nabla\mathbf{q})^T] + \mathbf{\Psi}_1(D_x^{a_1}\phi) + \mathbf{\Psi}_2\left(D_x^{a_2}\phi, \frac{\partial\phi}{\partial t}\right), \quad (5.34)
\end{aligned}$$

wobei Ψ_1 und Ψ_2 nicht lineare Funktionen sind, die physikalisch gesehen, die Interaktion des Konzentrationsfeldes ϕ mit dem Geschwindigkeitsfeld $\mathbf{q}$ und der Porenüberdruckverteilung p_{e} beschreiben.

Die letzte Gleichung ist dann die durch die Dimensionsanalyse vereinfachte Gleichung (5.30), die die relative Geschwindigkeit beschreibt

$$\mathbf{v}_{\mathrm{r}} = \frac{f_{\mathrm{bk}}(\phi)}{\Delta\rho g\phi^2(1-\phi)}[\nabla\sigma_{\mathrm{e}}(\phi) + \Delta\rho g\phi\mathbf{k}]. \quad (5.35)$$

5.6.1 Eindimensionaler Fall

Im eindimensionalen Fall ergibt Gleichung (5.33), dass q nur noch von t abhängt. Damit lautet die Kontinuitätsgleichung

$$\frac{\partial\phi}{\partial t} + \frac{\partial}{\partial z}(\phi q(t) + f_{\mathrm{bk}}(\phi)) = \frac{\partial}{\partial z}\left(a(\phi)\frac{\partial\phi}{\partial z}\right) \quad (5.36)$$

und für die Impulserhaltung

$$\begin{aligned}
\frac{\partial p_{\mathrm{e}}}{\partial z} = &-\frac{\partial(\sigma_{\mathrm{e}}(\phi))}{\partial z} - \Delta\rho g\phi + \mathbf{\Psi}_1 + \mathbf{\Psi}_2 - \\
&- \frac{\rho(\phi)q(t)}{g}\frac{\partial}{\partial z}\left(\frac{f_{\mathrm{bk}}(\phi)}{\rho(\phi)\phi}\left(\frac{\partial(\sigma_{\mathrm{e}}(\phi))}{\partial z} + \Delta\rho g\phi\right)\right). \quad (5.37)
\end{aligned}$$

5.7 Diskussion

Zuerst betrachtet man Gleichung (5.32). Man nimmt an, dass f_{bk} die folgenden Bedingungen erfüllt: $f_{\mathrm{bk}}(0) = f_{\mathrm{bk}}(\phi_{\max}) = 0$ und $f_{\mathrm{bk}}(\phi) < 0$ für

$0 < \phi < \phi_{\max}$. Die rechte Seite der Gleichung zeigt dann, dass diese Gleichung *stark entartet parabolisch* oder *parabolisch-hyberpolisch* ist, weil

$$a(\phi) \begin{cases} = 0 & \text{für} \quad \phi \leq \phi_c \text{ und } \phi = \phi_{\max} : \text{Gleichung (5.32) ist hyperbolisch,} \\ < 0 & \text{für} \quad \phi_c < \phi < \phi_{\max} : \text{Gleichung (5.32) ist parabolisch.} \end{cases}$$

Die Lösungen sind meistens diskontinuierlich, was zum einen an der hyberbolischen Form der Gleichungen liegt zum anderen aber auch an der nichtlinearen Flußfunktion. Weger dieser Nichtlinearitäten können selbst bei glatten Anfangs- und Randbedingungen Unstetigkeiten auftreten.

Dies wiederum erfordert schwache Lösungen und damit verbundene Entropiebedingungen. Ein typisches Beispiel einer solchen Diskontinuität ist die Grenzfläche zwischen der Suspension und dem Sediment, die sich während des Absetzvorgangs bildet.

Literaturverzeichnis

[1] R. Bürger, W. Wendland, F. Concha. *Model equations for gravitational sedimentation-consolidation processes*. Zeitschrift für Angewandte Mathematik und Mechanik, 80, 79-92.

Vortrag 6

Skalare hyperbolische Erhaltungsgleichungen

Ausgearbeitet von Stefan Berres.

Die Modellierung von Sedimentationsprozessen durch partielle Differentialgleichung, die auf Kynch zurückgeht, ist im skalaren Fall inzwischen ausgiebig behandelt worden [1]. Im Sedimentationsmodell von Kynch wird angenommen, daß die Absetzgeschwindigkeit von Teilchen in einer Suspension, also einer viskosen Flüssigkeit mit fein verteilten ('dispergierten') Feststoffteilchen, ausschließlich vom lokalen Volumenanteil der Teilchen abhängt, so daß man unter zusätzlichen natürlichen Voraussetzungen eine skalare Massenerhaltungsgleichung in einer Raumdimension erhält. Die Behandlung spannender Anwendungen wie Zenrifugation, Druckfiltration, Sedimentation in Behältern mit variablen Querschnitten, Fluidisierung oder die Modellierung polydisperser Suspensionen stellt eine Herausforderung an die Entwicklung und Anpassung analytischer sowie numerischer Methoden dar.

6.1 Sedimentation mit Kompression

Man unterscheidet ideale Suspensionen, die aus starren Kugeln bestehen, von ausgeflockten Suspensionen, bei der sich die Partikel (Feststoffflocken) bei

Berührung verformen können und deswegen kompressible Sedimentschichten bilden.

Für die Modellierung der Sedimentation mit Kompression in einem unten geschlossenen Behälter betrachtet man das eindimensionale Modellproblem

$$\frac{\partial u(x,t)}{\partial t} + \frac{\partial f(u(x,t))}{\partial x} = \frac{\partial^2 A(u(x,t))}{\partial x^2} \tag{6.1}$$

$$u(x,0) = u_0(x) \tag{6.2}$$

mit $(x,t) \in (0,L) \times (0,T),\ T > 0$ und $A(u) = \int_0^u a(s)ds,\ a(\cdot) \geq 0$. Außerdem soll $u_0 \in L_1(\mathbb{R}) \cap L^\infty(\mathbb{R})$ und f sowie A lipschitzstetig sein.

Die Feststoffflußdichtefunktion für *schubweisen Betrieb* sei durch

$$f(u) = f_{\mathrm{bk}}(u) = u_\infty u \left(1 - \frac{u}{u_{\max}}\right)^{\mathrm{C}} \tag{6.3}$$

mit der Stokesgeschwindigkeit u_∞, der maximalen Packungsdichte $u_{\max}$ und dem Richardson-Zaki-Exponenten n bestimmt und der Diffusionskoeffizient durch

$$a(u) = -\frac{f_{\mathrm{bk}}(u)\sigma_{\mathrm{e}}'(u)}{\Delta\rho g u} \tag{6.4}$$

$$\sigma_{\mathrm{e}} = \begin{cases} 0 & \text{für } u \leq u_{\mathrm{c}}, \\ \sigma_0 \left[\left(\frac{u}{u_{\mathrm{c}}}\right)^n - 1 \right] & \text{für } u > u_{\mathrm{c}} \end{cases} \tag{6.5}$$

mit der effektiven Spannung σ_{e}, der Dichtedifferenz zwischen Feststoff und Flüssigkeit $\Delta\rho$ und der Fallbeschleunigung g sowie den Konstanten $\sigma_0 > 0, n > 0, u_{\mathrm{c}} \in (0, u_{\max})$ bestimmt. Die kritische Konzentration u_c zeigt dan Schwellenwert für die Konzentration an, ab dem sich die Teilchen berühren.

6.2 Typeneinteilung für Evolutionsgleichungen

Aus der stückweisen Definition der effektiven Spannung folgt, daß der Diffusionskoeffiezient der Fallunterscheidung

$$a(u) \begin{cases} = 0 & \text{für } u \leq u_{\mathrm{c}}; \quad u = u_{\max}, \\ < 0 & \text{für } u_{\mathrm{c}} < u < u_{\max}. \end{cases} \tag{6.6}$$

genügt, also die Gleichung (6.1) für $a(u) = 0$ hyperbolisch ist und für $a(u) > 0$ parabolisch, so daß ein Beispiel einer stark entartenden hyperbolisch-parabolischen Gleichung vorliegt. Insbesondere sei darauf hingewiesen, daß σ_{e}' und damit auch $a(u)$ an der Stelle u_{c} unstetig sein kann.

Im Rest dieses Abschnittes wollen wir uns auf den inkompressiblen Fall ($a \equiv 0$) beschränken und mit der Konstruktion von Lösungen skalarer *hyperbolischer* Erhaltungsgleichungen der Form

$$\frac{\partial u}{\partial t} + \frac{\partial f(u)}{\partial x} = 0, \quad 0 \leq x \leq L, \quad t \geq 0 \tag{6.7}$$

befassen.

6.3 Integral- und Differentialform von Erhaltungsgleichungen

Wir betrachten die Erhaltungsgröße $u(x,t)$ (z.B. eine Massendichte oder ein Impuls) in einer Raumdimension. Sei $\int_{x_1}^{x_2} u(x,t)dx$ die Gesamtmasse im Intervall $[x_1, x_2]$ zum Zeitpunkt t und $f(u(x,t))$ der Massenfluß (z.B. $f(u(x,t)) = u(x,t)v(x,t)$ mit $v(x,t)$ als lokaler Geschwindigkeit), dann ergibt sich die Massenveränderung im Intervall $[x_1, x_2]$ aus der Differenz der Flüsse in x_1 und x_2,

$$\frac{d}{dt}\int_{x_1}^{x_2} u(x,t)dx = \int_{t_1}^{t_2} f(x_1,t)dt - \int_{t_1}^{t_2} f(x_2,t)dt. \tag{6.8}$$

Neben dieser zeitlich semidiskreten Integralform ergibt sich *die* Integralform der Erhaltungsgleichung aus der anschließenden Integration über das Zeitintervall $[t_1, t_2]$,

$$\int_{x_1}^{x_2} u(x,t_2)dx = \int_{x_1}^{x_2} u(x,t_1)dx + \int_{t_1}^{t_2} f(x_1,t)dt - \int_{t_1}^{t_2} f(x_2,t)dt. \tag{6.9}$$

Zur Herleitung der Differentialform der Erhaltungsgleichung wird die Differenzierbarkeit von $u(x,t)$ und $f(u)$ angenommen. Mit

$$u(x,t_2) - u(x,t_1) = \int_{t_1}^{t_2} \frac{\partial}{\partial t} u(x,t)dt \tag{6.10}$$

und

$$f(x_2,t) - f(x_1,t) = \int_{x_1}^{x_2} \frac{\partial}{\partial x} f(x,t)dx \tag{6.11}$$

folgt

$$\int_{t_1}^{t_2} \int_{x_1}^{x_2} \left\{ \frac{\partial}{\partial t} u(x,t) + \frac{\partial}{\partial x} f(u(x,t)) \right\} dxdt = 0 \tag{6.12}$$

Da dies für alle Abschnitte $[x_1, x_2]$ sowie Zeitintervalle $[t_1, t_2]$ gilt, schließen wir, daß der Integrand verschwinden muß, und erhalten so die differentielle Form der Erhaltungsgleichung,

$$\frac{\partial}{\partial t} u(x,t) + \frac{\partial}{\partial x} f(u(x,t)) = 0. \tag{6.13}$$

6.4 Schwache Lösungen einer skalaren Erhaltungsgleichung

Wir betrachten das Anfangswertproblem (Cauchy-Problem)

$$\frac{\partial u}{\partial t} + \frac{\partial f(u)}{\partial x} = 0 \tag{6.14}$$

$$u(x,0) = u_0(x) \text{ für } x \in \mathbb{R} \tag{6.15}$$

auf $\Omega = \{(z,t) | z \in \mathbb{R}, t > 0\}$. Eine Funktion $u(x,t) \in BV(\Omega) \cap L^\infty$ heißt *schwache Lösung* der nichtlinearen skalaren Erhaltungsgleichung (6.7), wenn für alle Testfunktionen $\psi \in C_0^\infty(\Omega)$ gilt:

$$\begin{aligned} \int_0^\infty \int_{-\infty}^\infty \left(u(x,t) \frac{\partial \psi(x,t)}{\partial t} + f(u(x,t)) \frac{\partial \psi(x,t)}{\partial x} \right) dxdt \\ + \int_{-\infty}^\infty \psi(x,0) u(x,0) dx = 0. \end{aligned} \tag{6.16}$$

Die schwache Form erhält man durch Multiplikation von (6.7) mit der Testfunktion $\psi \in C_0^\infty(\Omega)$, Integration über Ω und anschließender partieller Integration.

6.5 Das Charakteristikenverfahren

Wir nehmen zunächst an, daß die Lösung $u(\cdot, t_0)$ glatt ist. Dann definiert man die Charakteristik als Lösung des Anfangswertproblemes

$$\frac{d}{dt}x(t) = f'(u(x(t), t)), \tag{6.17}$$

$$x(t_0) = x_0. \tag{6.18}$$

Dann ist wegen

$$\frac{d}{dt}u(x(t), t) = \frac{\partial}{\partial t}u(x(t), t) + \frac{\partial}{\partial x}u(x(t), t)\frac{d}{dt}x(t) \tag{6.19}$$

$$= \frac{\partial u(x(t), t)}{\partial t} + f'(u(x(t), t))\frac{\partial u(x(t), t)}{\partial x} \tag{6.20}$$

$$= \frac{\partial u(x(t), t)}{\partial t} + \frac{\partial f(u(x(t), t))}{\partial x} = 0 \tag{6.21}$$

die Lösung längs einer Charakteristik konstant (d.h. für die Charakteristik $(x(t), t)$ gilt $u(x(t), t) = u(x_0, t_0)$) und eine Charakteristik ist eine Gerade mit der Steigung $f'(x_0, t_0)$,

$$x(t) = x_0 + f'(u_0(x_0))t. \tag{6.22}$$

Falls die stückweise konstanten Anfangsdaten voneinander verschieden sind, können sich die konstruierten Charakteristiken schneiden oder auseinanderlaufen. Das Verfahren würde mehrwertige oder mehrfache Lösungen liefern.

6.6 Das Riemann-Problem

Die Erhaltungsgleichung mit stückweise konstanten Anfangsdaten

$$u(x, 0) = \begin{cases} u_{\mathrm{l}} \text{ für } x > 0, \\ u_{\mathrm{r}} \text{ für } x < 0, \end{cases} \tag{6.23}$$

die nur eine einzige Unstetigkeit haben, ist als *Riemann-Problem* bekannt.

Im Fall konvexer Flußfunktionen treten bei einer Konstruktion nach der Charakteristikenmethode für $u_l < u_r$ dreiwertige Lösungen auf und für $u_l > u_r$ ist die Lösung uneindeutig.

6.7 Stoßgeschwindigkeit

Die Fortpflanzungsgeschwindigkeit eines Stoßes kann aus der Erhaltungseigenschaft bestimmt werden. Seien x_l und x_r so gewählt, daß $x_\mathrm{l} < st < x_\mathrm{r}$ gilt, dann kann die Erhaltungsgleichung in zeitlich semidiskreter Integralform (6.8) als

$$\frac{d}{dt}\int_{x_\mathrm{l}}^{x_\mathrm{r}} u(x(t),t) = f(u(x_\mathrm{l}),t) - f(u(x_\mathrm{r}),t) = f(u_\mathrm{l}) - f(u_\mathrm{r}) \tag{6.24}$$

geschrieben werden. Andererseits gilt auch

$$\int_{x_\mathrm{l}}^{x_\mathrm{r}} u(x(t),t) = \int_{x_\mathrm{l}}^{st} u(x,t)dx + \int_{st}^{x_\mathrm{r}} u(x,t)dx \tag{6.25}$$

$$= u_\mathrm{l}(st + x_\mathrm{l}) + u_\mathrm{r}(st + x_\mathrm{r}) \tag{6.26}$$

und somit

$$\frac{d}{dt}\int_{x_\mathrm{l}}^{x_\mathrm{r}} s(u_\mathrm{l} + u_\mathrm{r}) = s(u_\mathrm{l} - u_\mathrm{r}). \tag{6.27}$$

Aus dem Vergleich von (6.24) und (6.27) ergibt sich die Sprungbedingung von Rankine-Hugoniot

$$f(u_\mathrm{l}) - f(u_\mathrm{r}) = s(u_\mathrm{l} - u_\mathrm{r}). \tag{6.28}$$

6.7.1 Entropielösungen

Eine Entropielösung des Cauchyproblems (6.14) ist eine Funktion, die der Anfangsbedingung $u(x,0) = u_0(x)$ für $x \in \mathbb{R}$ genügt. An Stetigkeitspunkten genügt die Entropielösung der Differentialgleichung $\frac{\partial u}{\partial t} + \frac{\partial f(u)}{\partial x} = 0$, an Unstetigkeitspunkten der Rankine-Hugoniot-Bedingung (6.28) und der Entropiebedingung von Oleinik

$$\frac{f(u) - f(u_l)}{u - u_l} \leq s \leq \frac{f(u) - f(u_r)}{u - u_r} \quad \forall u \in (\min(u_l, u_r), \max(u_r, u_l)). \tag{6.29}$$

gilt. Auf konvexen Hüllen einer Flußfunktion reduziert sich die Entropiebedingung von Oleinik auf die Entropiebedingung von Lax,

$$f'(u_l) \leq s \leq f'(u_r). \tag{6.30}$$

6.8 Geometrische Deutung der Entropiebedingung

Graphisch veranschaulicht ist s die Steigung derjenigen Geraden, die in einem Diagramm der Flußfunktion die beiden Punkte $(u_l, f(u_l))$ und $(u_r, f(u_r))$ miteinander verbindet und die Entropiebedingung ist erfüllt, falls für $u_l < u_r$ diese Gerade vollständig oberhalb oder für $u_l > u_r$ vollständig unterhalb des Funktionsgraphen liegt.

Durch das Aufspannen der konvexen bzw. konkaven Hülle zwischen u_l und u_r im Graphen können die Bereiche ermittelt werden, in denen die Entropiebedingung erfüllt ist (nämlich dort, wo die Hülle nicht mit dem Graph übereinstimmt) und wo deshalb entweder Stoß sein darf oder die Entropiebedingung verletzt ist, und eine kontinuierliche Lösung eingefügt werden muß (s.u.).

6.9 Viskositätsansatz

Der Möglichkeit mehrwertiger oder mehrfacher Lösungen kann durch den *Viskositätsansatz*

$$\frac{\partial u^\varepsilon}{\partial t} + \frac{\partial f(u^\varepsilon)}{\partial x} = \varepsilon \frac{\partial^2 u^\varepsilon}{\partial x^2}, \quad x \in \mathbb{R},\ t \geq 0 \tag{6.31}$$

$$u^\varepsilon(x, 0) = u_0(x) \tag{6.32}$$

bei dem die Gleichung (6.7) durch einen Diffusionsterm auf der rechten Seite regularisiert wird, ausgeschlossen werden, da der Diffusionsterm bewirkt, daß die regularisierte Lösung u^ε glatt ist und der Grenzwert $\lim_{\varepsilon \to 0} u^\varepsilon$ eindeutig bestimmt ist. Die Gleichung (6.31) ist strikt parabolisch; hier sind Existenz- und Eindeutigkeitsresultate klassisch [2, 4]

Aus dem Viskositätsansatz läßt sich die *Entropieungleichung*

$$\frac{\partial \eta(u)}{\partial t} + \frac{\partial \psi(u)}{\partial x} \leq 0, \tag{6.33}$$

die freilich nur im schwachen Sinn gelten kann, herleiten, indem (6.31) mit der ersten Ableitung einer konvexen Funktion η multipliziert wird, man eine weitere Funktion ψ einführt, die die Verträglichkeitsbedingung

$$\psi'(u) = \eta'(u) f'(u) \tag{6.34}$$

erfüllen soll und schliesslich die Kettenregel anwendet.

Die Entropieungleichung ergibt sich daraus, daß die rechte Seite von

$$\frac{\partial \eta(u)}{\partial t} + \frac{\partial \psi(u)}{\partial x} = \varepsilon \frac{\partial}{\partial x}\left(\frac{\partial \eta}{\partial x}\right) - \varepsilon \left(\frac{\partial u}{\partial x}\right)^2 \eta(u)'' \tag{6.35}$$

wegen der Konvexität von η ($\eta(u)'' > 0$) sowie der Tatsache, daß der linke Term der rechten Seite schneller verschwindet, negativ ist. Das Paar (η, ψ) wird auch Entropie-Entropiefluß-Paar genannt. Das Ungleichheitszeichen gilt im Falle eines Sprunges, für glatte Lösungen gilt das Gleichheitszeichen wegen

$$\frac{\partial \eta(u)}{\partial t} + \frac{\partial \psi(u)}{\partial x} = \eta'(u)\frac{\partial u}{\partial t} + \psi'(u)\frac{\partial u}{\partial x} = \eta'(u)\left(\frac{\partial u}{\partial t} + \frac{\partial f(u)}{\partial x}\right) = 0. \tag{6.36}$$

6.10 Konstruktion globaler Lösungen

Mithilfe der Charakteristikenmethode unter Berücksichtigung der Entropiebedingung läßt sich die Lösung von jedem Anfangwertproblem bzw. *Cauchyproblem* mit stückweise konstanten Anfangsdaten konstruieren.

In der Sedimentation kann man das Verhalten einer Suspension mit homogener Anfangskonzentration u_0 in einem Behälter der Höhe L als Cauchyproblem auffassen. Und zwar gilt (6.7) mit einer Flußfunktion wie z.B. (6.3) sowie die Anfangsbedingung

$$u(x,0) = \begin{cases} 0 & \text{für } x > L, \\ u_0 & \text{für } 0 \le x \le L, \\ u_{\max} & \text{für } x < 0. \end{cases} \tag{6.37}$$

Die Geschlossenheit des Behälters wird hier dadurch ausgedrückt, daß der Behälter am Boden (und darunter) die maximale Konzentration $u_{\max}$ hat. Der Behälter ist bis zur Höhe L mit einer homogenen Anfangskonzentration u_0 gefüllt, oberhalb der Höhe L befindet sich kein Feststoff.

Falls man die Flußfunktion durch eine stückweise lineare Funktion ersetzt, kann die Lösung durch wiederholte Lösung von Riemann-Problemen konstruiert werden. Aus dieser Konstruktionsmethode läßt sich auch ein numerisches Verfahren entwickeln. [3].

6.11 Lösung von Riemann-Problemen mit konvexer Flußfunktion

Sei f eine konkave Flußfunktion und h die Umkehrfunktion von f'. Dann ist die Lösung des Riemann-Problemes (6.23) für $u_\mathrm{l} < u_\mathrm{r}$ ein Stoß mit der Fortpflanzungsgeschwindigkeit s gemäß der Rankine-Hugoniot-Bedingung (6.28),

$$u(x,t) = \begin{cases} u_\mathrm{l} \text{ für } x \leq st \\ u_\mathrm{r} \text{ für } x > st. \end{cases} \tag{6.38}$$

und für $u_\mathrm{l} > u_\mathrm{r}$ erhält man den Verdünnungsfächer

$$u(x,t) = \begin{cases} u_\mathrm{l} \text{ für } x \leq f'(u_l)t \\ h(x/t) \text{ für } f'(u_\mathrm{l})t < x/t \leq f'(u_\mathrm{r})t \\ u_\mathrm{r} \text{ für } x > f'(u_\mathrm{r})t. \end{cases} \tag{6.39}$$

6.12 Lösung eines Riemann-Problems mit einer Flußfunktion mit zwei Wendepunkten

Sei

$$\sigma(u,v) = \frac{f(u) - f(v)}{u - v} \tag{6.40}$$

die Steigung der Sekante einer Funktion zwischen u und v und

$$\begin{aligned} \mathscr{S}(u,v) := \{(x,y) :& x \in [\min(u,v), \max(u,v)], \\ & y = f(u) + \sigma(u,v) \cdot (y - u)\} \end{aligned}$$

die Sekante. Ein Riemann-Problem für eine Flußfunktion f mit zwei Wendepunkten und $\lim_{x\to\infty} f(x) = \infty$ sei so konstruiert, daß die Sekante zwischen u_l und u_r die Flußfunktion zweimal schneidet. Dann sind $u_\mathrm{l}^* < u_\mathrm{r}^*$ mit

$$u_\mathrm{l}^* := \sup\{u > \eta : \sigma(\eta,v) < \sigma(\eta,v) \text{ für alle } v \in (\eta,u)\} \tag{6.41}$$

$$u_\mathrm{r}^* := \sup\{u < \eta : \sigma(\eta,v) < \sigma(\eta,v) \text{ für alle } v \in (u,\eta)\} \tag{6.42}$$

Tangenten von u_l und u_r an die Flußfunktion.

Die Sehnen $\mathscr{S}(u_\mathrm{l}, u_\mathrm{l}^*)$, $\mathscr{S}(u_\mathrm{l}^*, u_\mathrm{r}^*)$ und $\mathscr{S}(u_\mathrm{r}^*, u_\mathrm{r})$ liegen vollständig auf einer Seite des Graphen von f. Allerdings ist die Entropiebedingung von Lax auf $(u_\mathrm{l}^*, u_\mathrm{r}^*)$ verletzt.

Die beiden Konstanten Zustände u_l und u_r werden durch die beiden Kontaktunstetigkeiten

$$z_1(t) = f'(u_\mathrm{l}^*)t = \sigma(u_l, u_\mathrm{l}*)t, \tag{6.43}$$
$$z_2(t) = f'(u_\mathrm{r}^*)t = \sigma(u_r^*, u_\mathrm{r})t, \tag{6.44}$$

sowie eine dazwischen liegende Verdünnungswelle getrennt. Wegen

$$f'(u_\mathrm{l}) < \sigma(u_l, u_\mathrm{l}*) = f'(u_\mathrm{l}^*) \tag{6.45}$$
$$f'(u_\mathrm{r}^*)t = \sigma(u_r^*, u_\mathrm{r}) < f'(u_\mathrm{r}) \tag{6.46}$$

sind $z_1(t)$ und $z_2(t)$ tatsächlich Kontaktunstetigkeiten. Die globale Lösung lautet also

$$u(x,t) = \begin{cases} u_\mathrm{l} \text{ für } z_1(t) \leq z \\ h(x/t) \text{ für } z_2(2) \leq z \leq z_1(t) \\ u_\mathrm{r} \text{ für } z < z_2(t). \end{cases} \tag{6.47}$$

Literaturverzeichnis

[1] Bustos, M.C., Concha, F., Bürger, R. and Tory, E.M., *Sedimentation and Thickening: Phenomenological Foundation and Mathematical Theory*, Kluwer Acad. Publ. Dordrecht 1999.

[2] Friedman, A., *Partial Differential Equations of Parabolic Type*, Prentice Hall, Englewood Cliffs, NJ, USA, 1964.

[3] Holden, H. and Risebro, N.H., *Front Tracking for Conservation Laws*, Springer-Verlag, New York, 2002.

[4] Ladyženskaja, O.A., Solonnikov, V.A. and Ural'ceva, N.N., *Linear and Quasilinear Equations of Parabolic Type*, AMS Translations of Mathematical Monographs, vol. 23, Providence, Rhode Island, USA, 1968.

[5] Shu, C.-W. and Osher, S., Efficient implementation of essentially non-oscillatory shock-capturing schemes, *J. Comp. Phys.* **77** (1988), 439–471.

Vortrag 7

Mathematisches Modell der Druckfiltration

Ausgearbeitet von Hartmut Eichel.

7.1 Einleitung und Gliederung

Filtration ist ein gängiger Prozess zur Trennung von Flüssigkeiten und Feststoffen in verschiedenen industriellen Prozessen. Das erste Modell zur Filterströmung ist das von Darcy formulierte Darcy-Gesetz 1856. In den Siebziger Jahren des zwanzigsten Jahrhunderts wurde dann ein weiterer Ansatz einer wissenschaftlichen Beschreibung des Phänomens unternommen.

Im folgenden wird zuerst das physikalische Modell erläutert. Diese Modellvorstellungen werden dann mit Hilfe der Bilanzgleichungen in einem mathematischen Modell abgebildet. Abschließend werden einige numerische Simulationen mit verschiedenen Parametern gerechnet und diskutiert.

7.2 Physikalisches Modell

Die Filtration wird mit einer Drucknutsche durchgeführt, die einen semipermeablen Boden besitzt. Das bedeutet, dass das Fluid die Nutsche durch den Filter verlassen kann, während der Feststoff zurückgehalten wird. Weiterhin wird von oben ein Druck aufgebracht, um den Filtrationsvorgang zu beschleunigen. Dies kann entweder durch einen Kolben oder durch Druckluft erreicht werden.

Man kann drei Zustände während des Filtrationsprozesses unterscheiden. Im Ausgangszustand ist eine homogene Verteilung der Suspension im gesamten Kolben vorgegeben, wobei u die volumetrische Feststoffkonzentration angibt.

$$u(z,0) = u_0 \quad \text{für} \quad 0 \leq z \leq h_0 \tag{7.1}$$

Im weiteren Verlauf können mehrere Zonen unterschieden werden. Eine Klarwasserzone direkt unterhalb des Kolbens $u = 0$, eine Zone mit geringerer Konzentration als die Ausgangskonzentration, eine Zone mit der Ausgangskonzentration $u = u_0$, eine zweite Übergangszone sowie eine Zone in der die kritische Konzentration überschritten ist. Als kritische Konzentration u_c wird die Konzentration bezeichnet, bei der die Flocken sich gegenseitig berühren. Dies ist auch die Konzentration bei der sich der Filterkuchen zu bilden beginnt (Abb.7.1b).

Im dritten und letzten Abschnitt wird der Filterkuchen ausgepresst. Der Kolben sitzt auf dem Filterkuchen auf. Es existiert lediglich noch eine Zone mit $u > u_\mathrm{c}$ in der eine Kompaktierung stattfindet.

7.3 Mathematisches Modell

7.3.1 Annahmen

Es werden die folgenden Annahmen für das Modell getroffen. Am Anfang ist die Konzentration im Medium gleichverteilt.

$$u(z,0) = u_0 \qquad \text{für} \qquad 0 \leq z \leq h_0$$

Des weiteren wird angenommen, dass alle Partikel klein sind im Verhältnis zum Behälter und die gleiche Dichte haben. Sowohl die Partikel als auch die Flocken sind inkompressibel. Es treten keine Flockungsprozesse zwischen

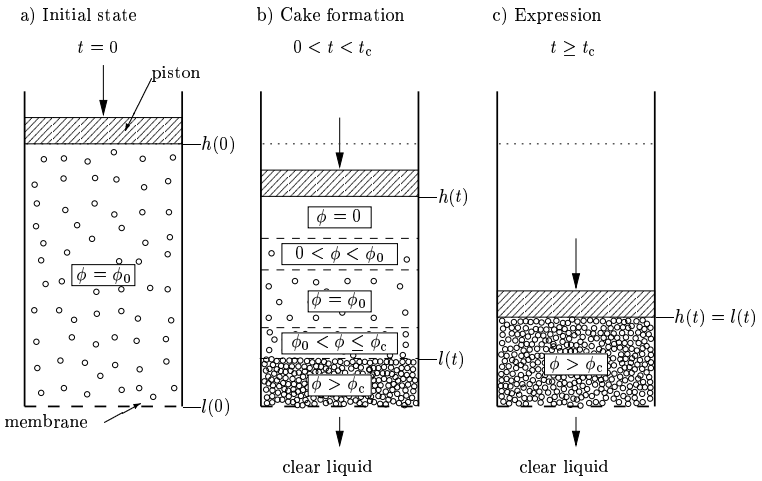

Abbildung 7.1: Stufen des Filtrationsvorganges

den Partikeln auf und es gibt keinen Massenaustausch zwischen den Phasen. Wir nehmen an, dass Gravitation die einzige Volumenkraft ist. Der Behälter hat undurchlässige, reibungsfreie Seitenwände sowie einen semipermeablen Boden, wie bereits vorher beschrieben.

7.3.2 Bilanzgleichungen

Für das folgende Feststoff- und Flüssigkeitssystem können vier Erhaltungsgleichungen formuliert werden – jeweils zwei Massen- und zwei Impulserhaltungsgleichungen. Die beiden Komponenten werden dabei als überlagerte Kontinua angesehen.

1a) Kontinuitätsgleichung für den Feststoff:

$$\frac{\partial u}{\partial t} + \frac{\partial}{\partial z}(u v_{\mathrm{s}}) = 0 \tag{7.2}$$

1b) Impuls–Gleichung für den Feststoff:

$$\frac{\partial \sigma_{\mathrm{e}}(u)}{\partial z} = -\Delta\rho g u + \frac{m_{\mathrm{d}}}{1-u}, \tag{7.3}$$

mit m_{d} als der Flüssig-Feststoff Interaktionskraft.

2a) Kontinuitätsgleichung für die Mischung:

$$\frac{\partial q}{\partial z} = 0 \quad \text{mit} \quad q := uv_\mathrm{s} + (1-u)v_\mathrm{f} \equiv v_\mathrm{s} + (1-u)v_\mathrm{r} \tag{7.4}$$

2b) Impuls–Gleichung für das Fluid:

$$\frac{\partial p}{\partial z} = -\rho_\mathrm{f} g - \frac{m_\mathrm{d}}{1-u} \tag{7.5}$$

Damit sind sechs Unbekannte u, σ_e, v_s, q (*oder* v_f), p und m_d zu bestimmen. Bis jetzt stehen uns aber nur vier Gleichungen zur Verfügung. σ_e kann aus den konstitutiven Beziehungen bestimmt werden und alle anderen Parameter, d.h die Dichten sind Stoffkonstanten, die bekannt sind.

7.3.3 Filterkuchenbildung und Kompaktierung

7.3.3.1 Sedimentationsprozess

In der Sedimentationstheorie wird oft the Kynchsche Feststoffflussdichtefunktion definiert als:

$$f_\mathrm{bk}(u) := -\frac{\Delta\rho g u^2 (1-u)^2}{\alpha(u)} \tag{7.6}$$

mit dem Widerstandskoeffizienten $\alpha(u)$ aus der konstitiven Beziehung

$$m_\mathrm{d} = -\alpha(u) v_\mathrm{r}. \tag{7.7}$$

Aus der Impulsgleichung (7.3) und (7.6) ergibt sich folgende Gleichung:

$$uv_\mathrm{s} = qu + f_\mathrm{bk}(u)\left(1 + \frac{\sigma_e'(u)}{\Delta\rho g u}\frac{\partial u}{\partial z}\right) \tag{7.8}$$

Setzt man dies in (7.2) unter Berücksichtigung von (1.4) ein, so folgt

$$\frac{\partial u}{\partial t} + \frac{\partial}{\partial z}(q(t)u + f_\mathrm{bk}(u)) = \frac{\partial}{\partial z}\left(-\frac{f_\mathrm{bk}(u)\sigma_e'(u)}{\Delta\rho g u}\frac{\partial u}{\partial z}\right). \tag{7.9}$$

Diese Gleichung beschreibt das Absetzen des Feststoffes bei der Sedimentation.

Die Umformung der Impulsgleichung (7.5) mit der Kynchschen Flußdichtefunktion (7.6) liefert

$$\frac{\partial p}{\partial z} = -\rho_{\mathrm{f}} g - \frac{\Delta\rho g u^2(1-u)}{f_{\mathrm{bk}}(u)} v_{\mathrm{r}}. \tag{7.10}$$

Diese Gleichung kann genutzt werden um den Porendruck p a posteriori zu berechnen. Damit braucht nur Gleichung (7.9) gelöst zu werden.

7.3.3.2 Konstitutive Beziehungen

Um zu zeigen, dass die Gleichungen von stark entartetem parabolischen Typ sind, werden hier die konstitutiven Beziehungen noch einmal aufgezeigt. Man nimmt an, dass σ_{e} für $u < u_{\mathrm{c}}$ verschwindet und dass die Ableitung σ'_{e} für $u > u_{\mathrm{c}}$ positiv ist.

Die Funktion f_{bk} soll die folgenden Eigenschaften haben:

$$f_{\mathrm{bk}}(0) = f_{\mathrm{bk}}(u_{\max}) = 0, \tag{7.11}$$

$$f_{\mathrm{bk}}(u) < 0 \quad \text{für} \quad 0 < u < u_{\max}, \tag{7.12}$$

$$f'_{\mathrm{bk}}(0) < 0, \quad f'_{\mathrm{bk}}(u_{\max}) \geq 0. \tag{7.13}$$

Damit ist Gleichung (7.9) in den Intervallen $u \leq u_{\mathrm{c}}$ und $u = u_{\max}$ hyperbolisch und auf dem Intervall $u_{\mathrm{c}} < u \leq u_{\max}$ parabolisch.

In Abb. 7.2 sieht man den Verlauf der Kynchsche Flußdichtefunktion, die durch die vier hier genannten Funktionen gebildet wird. Die Funkion $\mathscr{S}_3(u)$ ist eine kubische Spline Funktion, die die anderen beiden Funktionen verbindet.

$$f_{\mathrm{bk}}(u) = \begin{cases} 0 & \textit{für } u \leq 0,03, \\ f^1_{\mathrm{bk}}(u) := -5,9303 \times 10^{-4} u(1-u)/0.3)^{22} m/s & \textit{für } 0 < u \leq 0,03, \\ \mathscr{S}_3(u) & \textit{für } 0,03 \leq u \leq 0,21, \\ f^2_{\mathrm{bk}}(u) := -4,9758 \times 10^{-12} u^{-5,1} m/s & \textit{für } u > 0,21. \end{cases}$$

Der Feststoffspannungsanteil wird durch die folgende Funktion abgebildet:

$$\sigma_{\mathrm{e}}(u) = \begin{cases} 0 & \textit{für} \quad u \leq u_{\mathrm{c}} := 0,25, \\ 19000((u/u_{\mathrm{c}})^{11,1} - 1) Pa & \textit{für} \quad u > u_{\mathrm{c}}. \end{cases}$$

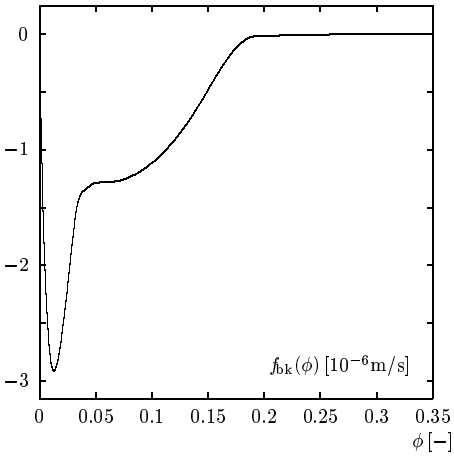

Abbildung 7.2: Kynchsche Flussdichtefunktion

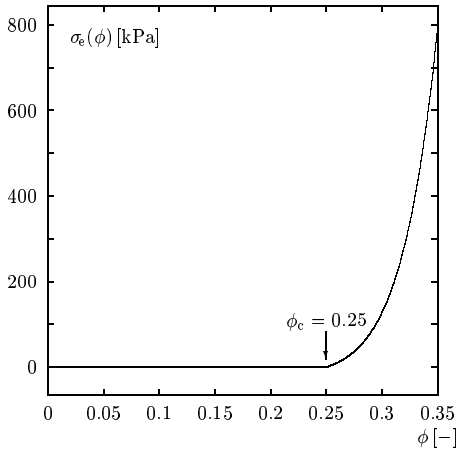

Abbildung 7.3: Feststoffspannungsanteil

7.3.3.3 Filterdurchströmung

Bei Filterströmungen oder Strömungen in porösen Medien allgemein wird das Konzept der Porosität $\varepsilon \equiv 1 - u$ eher verwendet als die volumetrische Feststoffkonzentration. Mit der Porosität lautet Gleichung (7.5)

$$\frac{\partial p}{\partial z} = -\rho_\mathrm{f} g - \frac{m_\mathrm{d}}{\varepsilon}. \tag{7.14}$$

Nun wird im Gegensatz zur Sedimentation die Widerstandskraft m_d mit Hilfe einer anderen konstitutiven Beziehung beschrieben, dem Gesetz von Darcy:

$$m_\mathrm{d} = -\frac{\mu_\mathrm{f}}{k(\varepsilon)} H(\varepsilon) v_\mathrm{r}. \tag{7.15}$$

Wir können beim Filterkuchen, d.h in der Zone in der $u > u_\mathrm{c}$ ist, davon ausgehen, dass der Feststoff sich nicht mehr bewegt. Daraus folgt $v_\mathrm{s} \equiv 0$ und deshalb $v_\mathrm{r} = -v_\mathrm{f}$ und $q = \varepsilon v_\mathrm{f}$. Eingesetzt in (7.14) ergibt sich

$$\frac{\partial p}{\partial z} = -\rho_\mathrm{f} g - \frac{\mu_\mathrm{f}}{k(\varepsilon)} \frac{H(\varepsilon)}{\varepsilon^2} q. \tag{7.16}$$

Der Vergleich mit dem klassischen Resultat

$$\frac{\partial p}{\partial z} = -\rho_\mathrm{f} g - \frac{\mu_\mathrm{f}}{k(\varepsilon)} q \tag{7.17}$$

liefert $H(\varepsilon) = \varepsilon^2$.

Äquivalent zur Formulierung (7.17) ist die Gleichung

$$\frac{\partial p}{\partial z} = -\rho_\mathrm{f} g + \frac{\mu_\mathrm{f}\varepsilon}{k(\varepsilon)} v_\mathrm{r}. \tag{7.18}$$

Von der in der Umweltschutztechnik bekannteren Form der Gleichung von Darcy:

$$q = -k_\mathrm{f} \frac{\partial h}{\partial z} \tag{7.19}$$

bei der q die Geschwindigkeit und h die Piezometerhöhe darstellt, kommt man auch zur hier verwendeten Form. Die Piezometerhöhe, die definiert ist als Summe aus der Druckhöhe und der geodätischen Höhe

$$h = \frac{p}{\rho_\mathrm{f} g} + z$$

und der k_f-Wert der definiert ist als

$$k_\mathrm{f} = \frac{\rho_\mathrm{f} g}{\mu_\mathrm{f}} k(\varepsilon),$$

werden eingesetzt. Daraus folgt

$$q = -\frac{\rho_\mathrm{f} g}{\mu_\mathrm{f}} k(\varepsilon) \frac{\partial}{\partial z} \left(\frac{p}{\rho g} + z \right). \tag{7.20}$$

Mit $\frac{\partial z}{\partial z} = 1$ ergibt sich

$$q = -\frac{k(\varepsilon)}{\mu_\mathrm{f}} \frac{\partial p}{\partial z} - \frac{\rho_\mathrm{f} g}{\mu_\mathrm{f}} k(\varepsilon). \tag{7.21}$$

Aufgelöst nach $\frac{\partial p}{\partial z}$ ergibt sich dann Gleichung (7.17)

$$\frac{\partial p}{\partial z} = -\rho_\mathrm{f} g - \frac{\mu_\mathrm{f}}{k(\varepsilon)} q. \tag{7.22}$$

7.3.4 Verknüpfung und Lösung der Systeme

Wenn man nun die beiden Gleichungen (7.10) und (7.17) gegenüberstellt, sieht man, dass sie die rechten Seiten an der Grenze zwischen Suspension und Filterkuchen äquivalent sein müssen, um den Druckverlauf richtig zu beschreiben. An diesem Übergang müssen die Gleichungen von umströmten, festsitzenden Kugeln (Darcy-Gesetz) und in der Flüssigkeit sinkendem Feststoff sich einander annähren.

$$-\frac{\Delta\rho g u^2(1-u)}{f_{\mathrm{bk}}(u)} v_{\mathrm{r}} = -\frac{\mu_{\mathrm{f}}\varepsilon}{k(\varepsilon)} v_{\mathrm{r}} \tag{7.23}$$

Nach f_{bk} aufgelöst ergibt sich

$$f_{\mathrm{bk}}(u) = -\frac{k(\varepsilon)}{\mu_{\mathrm{f}}} \Delta\rho g u^2. \tag{7.24}$$

Die konstitutive Beziehung $k = k(\varepsilon)$ bestimmt den Teil der Kynschen Feststoffflussdichtefunktion für $u > u_{\mathrm{c}}$. An dieser Stelle findet der Übergang von der Beschreibung der Sedimentation einer Suspension in eine Filterströmung statt. Hier wird nun aus zwei Gleichungen eine, die beide Systeme beschreibt und auch den Übergang korrekt abbildet.

Die Flußrate $q = q(t)$ kann direkt aus den Randbedingungen bestimmt werden. Dann muß lediglich eine Feldgleichung

$$\frac{\partial u}{\partial t} + \frac{\partial}{\partial z}(q(t)u + f_{\mathrm{bk}}(u)) = \frac{\partial}{\partial z}(-\frac{f_{\mathrm{bk}}(u)\sigma_e'(u)}{\Delta\rho g u}\frac{\partial u}{\partial z}) \tag{7.25}$$

gelöst werden, um die Konzentrationsverteilung zu bestimmen. Anschließend kann aus der modifizierten Druckgleichung

$$\frac{\partial p}{\partial z} = -\rho(u)g - \frac{\partial \sigma_{\mathrm{e}}'(u)}{\partial z} \tag{7.26}$$

die Druckverteilung berechnet werden.

7.3.5 Randbedingungen

7.3.5.1 Kinematische Randbedingungen

Kinematische Randbedingungen für t > 0:
Die erste Randbedingung folgt daraus, dass die Geschwindigkeit der Suspen-

sion direkt unterhalb des Kolbens durch die Kolbengeschwindigkeit aufgeprägt wird:

$$q = q(t) = h'(t) := \frac{dh(t)}{dt}. \tag{7.27}$$

Direkt oberhalb des Filters ($z = 0$) ist die Geschwindigkeit des Feststoffs null, da der Filter den Feststoff zuruckhält.

$$v_{\mathrm{s}}|_{z=0} = 0 \text{ führt zu } \left(f_{\mathrm{bk}}(u) - \frac{\partial A(u)}{\partial z}\right)(0,t) = -h'(t)u(0,t). \tag{7.28}$$

Direkt unterhalb des Kolbens ist die Feststoffgeschwindigkeit durch den Kolben vorgegeben.

$$v_{\mathrm{s}}|_{z=h} = h'(t) \text{ führt zu } \left(f_{\mathrm{bk}}(u) - \frac{\partial A(u)}{\partial z})(h(t),t\right) = 0. \tag{7.29}$$

Die beiden letzten Randbedingungen (7.28) und (7.29)lassen sich aus der folgenden Gleichung ableiten:

$$uv_{\mathrm{s}} = qu + f_{\mathrm{bk}}(u)\left(1 + \frac{\sigma_e'(u)}{\Delta\rho g u}\frac{\partial u}{\partial z}\right) = qu + f_{\mathrm{bk}}(u) - \frac{\partial A(u)}{\partial z} \tag{7.30}$$

7.3.5.2 Beziehung Druck-Kolbenhöhe

Abhängig von der Betriebsweise der Drucknutsche wird entweder die Kolbenbahn und damit die Filtrationsrate oder der angewandte Druck vorgegeben. Ist der Druck vorgegeben, wird die Kolbenhöhe aus dem Druckgleichgewicht berechnet. Ist hingegen die Kolbenhöhe vorgegeben muss der jeweils nötige Druck ausgerechnet werden. Zuerst müssen die zwei Größen zueinander in Beziehung gesetzt werden.

$$\frac{\partial p_{\mathrm{t}}}{\partial z} = -\rho(u)g \tag{7.31}$$

mit dem totalen Druck $p_{\mathrm{t}}(z,t) = p(z,t) + \sigma_{\mathrm{e}}(u(z,t))$.

Integrieren der Gleichung (7.31) über z liefert:

$$p_{\mathrm{t}}(0,t) = \sigma(t) + g\int_0^{h(t)} \rho(u(\xi,t))d\xi \tag{7.32}$$

$$= \sigma(t) + g(m_0 - \rho_{\mathrm{f}}(h_0 - h(t))) \tag{7.33}$$

wenn $\sigma(t)$ der aufgebrachte Druck des Kolbens ist, der direkt am Kolben dem totalen Druck entspricht und m_0 die durch den Behälterquerschnitt geteilte Systemsausgangsmasse ist. Einsetzen liefert:

$$\sigma(t) = \sigma_{\mathrm{e}}(u(0,t)) - g(m_0 + \rho_{\mathrm{f}}(h(t) - h_0)) + p(0,t). \tag{7.34}$$

Mit dem Darcy-Gesetz kann der Druck $p(0,t)$ berechnet werden. Dabei werden Variablen direkt oberhalb des Filtermediums mit "0^+" und direkt unterhalb des Filtermediums mit "0^-" bezeichnet [1].

$$-v_{\mathrm{f}}(0^-,t) = \frac{k_{\mathrm{m}}}{\mu_{\mathrm{f}}}\frac{\partial p}{\partial z}(0^-,t) \tag{7.35}$$

$$= \frac{k_{\mathrm{m}}}{\mu_{\mathrm{f}} h_{\mathrm{m}}}(p(0^-,t) - p_{\mathrm{atm}}) \tag{7.36}$$

Der Atmosphärendruck kann als Bezugsdruck zu Null gesetzt werden. Die Größe h_{m} beschreibt die Schichtdicke des Filters, die als sehr klein angesehen werden kann. Mit den folgenden Gleichungen kann man die Fluidgeschwindigkeit durch die Kolbengeschwingigkeit ausdrücken und somit $p(0,t)$ aus der Gleichung eliminieren. Direkt unterhalb des Filters gibt es nur die flüssige Komponente:

$$u(0^-,t) = 0 \tag{7.37}$$

Um die Kontinuität der Flüssigkeit zu gewährleisten, muss gelten:

$$(1 - u(0^+,t))v_{\mathrm{f}}(0^+,t) = (1 - u(0^-,t))v_{\mathrm{f}}(0^-,t), \tag{7.38}$$

oder mit Hilfe der Kolbengeschwindigkeit ausgedrückt:

$$(1 - u(0^-,t))v_{\mathrm{f}}(0^+,t) = h'(t). \tag{7.39}$$

Dies führt unter Berücksichtigung von (1.37) zu

$$v_{\mathrm{f}}(0^-,t) = h'(t). \tag{7.40}$$

Damit kann nun die Gleichung (7.34) wie folgt formuliert werden:

$$\sigma(t) = \sigma_{\mathrm{e}}(u(0,t)) - g(m_0 + \rho_{\mathrm{f}}(h(t) - h_0)) - \mu_{\mathrm{f}} R_{\mathrm{m}} h'(t), \tag{7.41}$$

mit $R_{\mathrm{m}} = h_{\mathrm{m}}/k_{\mathrm{m}}$. Diese Gleichung ist nun die Verbindung der Kolbendrucks und der Filtrationsrate bzw. Kolbengeschwindigkeit.

7.3.6 Betriebsarten

Es sind, wie oben erwähnt, zwei verschiedene Betriebsarten möglich. Die mathematisch einfachere der beiden, wie unten ausgeführt, dass die Filtrationsrate eine Funktion der Zeit ist, ist gleichzeitig die in der Praxis selten auftretende. Normalerweise wird der Kolbendruck als u.U. konstante Funktion der Zeit vorgegeben sein.

1. Die Filterrate ist eine vorgegebene Funktion der Zeit

Es ergibt sich ein Anfangs-Randwertproblem.
Die Konzentrationsverteilung kann berechnet werden und anschließend kann der Kolbendruck bestimmt werden.

2. Der Kolbendruck ist eine vorgegebene Funktion der Zeit

Damit muss ein freies Randwertproblem gelöst.
Nun treten die Konzentrationsverteilung und die Filtrationsrate in nichtlinearer Form auf, und die Gleichungen müssen simultan gelöst werden. Der obere Rand $h(t)$ ist Teil der Lösung. Eine exakte Lösung scheidet i.a. aus, man kann dieses Problem nur numerisch lösen.

7.4 Numerische Simulation

Die Lösungen sind aufgrund der Nichtlinearität der Gleichungen im allgemeinen unstetig und müssen deshalb in ihrer schwachen Form interpretiert werden.

Die konservative Form der Gleichungen und das verwendete "Upwind"-Verfahren erlauben eine diskrete Entropiebedingung.

Stabile Verfahren müssen nicht notwendigerweise richtig sein, da schwache Lösungen physikalisch nicht relevant sein können.

7.4.1 Modellrechnungen

Die hier gezeigten Ergebnisse zeigen den Vergleich numerischer Simulation (durchgezogene Linien) mit Experimenten (verschiedene Symbole).

Die Anfangskonzentration beträgt $u_0 = 0,03$ bzw. $u_0 = 0,09$.

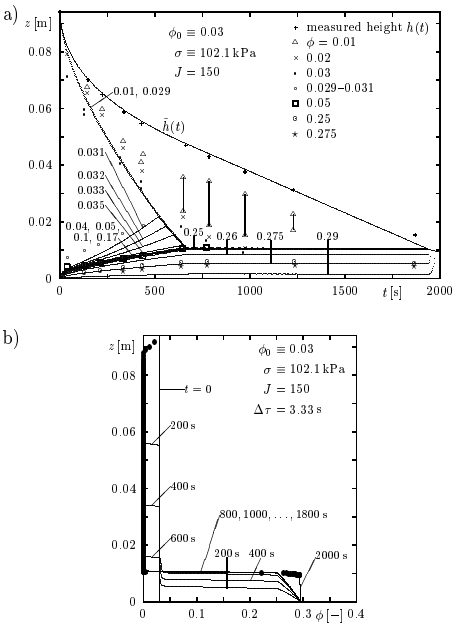

Abbildung 7.4: a) Isokonzentrationslinien b) Konzentrationsprofile

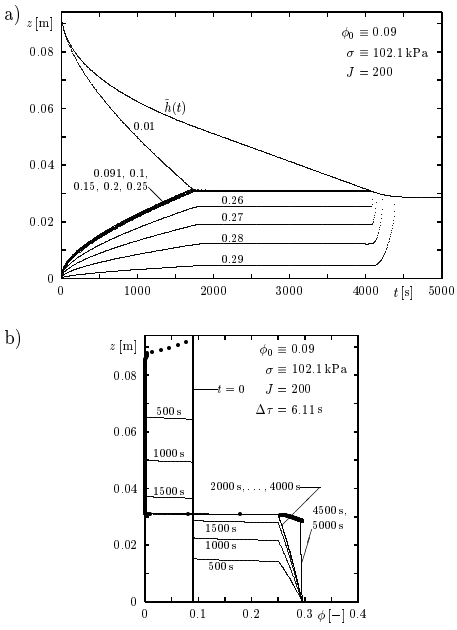

Abbildung 7.5: a) Isokonzentrationslinien b) Konzentrationsprofile

Man sieht in Abb. 7.4a) unten links den Verdünnungsfächer und ganz rechts eine Kompaktionszone. Die obere Linie zeigt den Verlauf des Kolbens. In Abb. 7.4b) sieht man ebenfalls rechts unten die Kompaktionszone, während man links das Absinken der Grenzfläche der Klarwasserzone sehen kann. Bei höheren Ausgangskonzentrationen Abb. 7.5 bildet sich kein Verdünnungsfächer aus, sondern es ergibt sich ein direkter Übergang von der Ausgangskonzentration zum Filterkuchen.

Die Anfangskonzentration beträgt $u_0 = 0,09$ und der aufgebrachte Druck wird schrittweise erhöht.

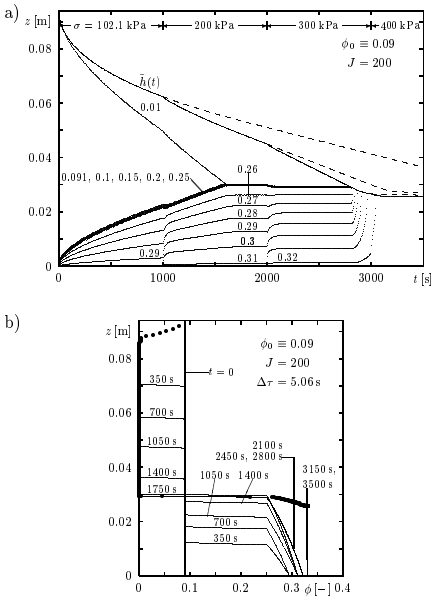

Abbildung 7.6: a) Isokonzentrationslinien b) Konzentrationsprofile

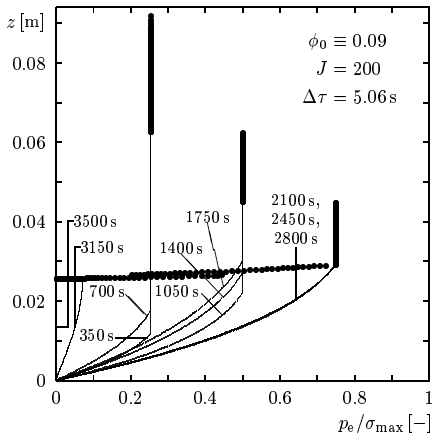

Abbildung 7.7: Porenüberdruckprofile zu bestimmten Zeiten

Bei einer schrittweisen Druckerhöhung treten mehrere Effekte auf. Erstens nimmt die Filtrationsrate zu, wenn der Druck erhöht wird. Zweitens wird der Filterkuchen kompaktiert, was bewirkt, dass die Oberfläche des Filterkuchens absinkt und die Konzentration direkt oberhalb des Filters steigt.
In Abb. 7.7 sieht man, wie der Porenüberdruck zunächst mit jeder Druckerhöhung ansteigt und dann zurückgeht, wenn der Filterkuchen ausgepresst wird.

Die Anfangskonzentration entspricht der kritischen Konzentration $u_0 = u_c = 0,25$.

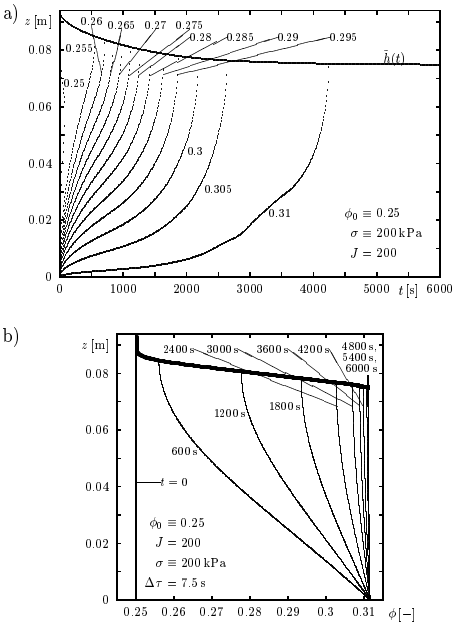

Abbildung 7.8: a) Isokonzentrationslinien b) Konzentrationsprofile

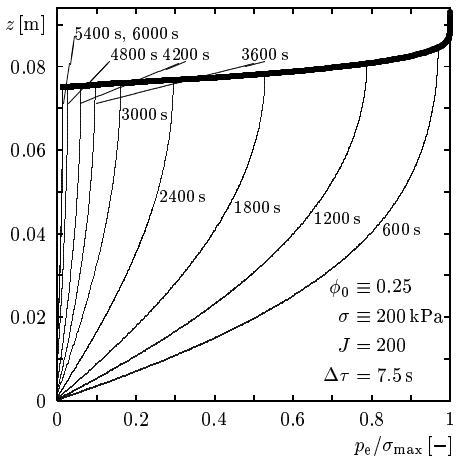

Abbildung 7.9: Porenüberdruckprofile zu bestimmten Zeiten

Bei einer derart hohen Anfangskonzentration können sich keine Zonen mehr ausbilden. Der Filterkuchen ist von Anfang an vorhanden und es tritt lediglich eine Kompaktion auf.

7.5 Zusammenfassung

In dieser Arbeit wurden Sedimentation und Filtration zu einer erweiterten Theorie zusammengefaßt. Hierbei entsteht ein zusätzlicher Transportterm sowie die Verbindungsgleichung zwischen Kolbengeschwindigkeit und aufgebrachtem Druck.

Der Vorteil einer solchen Formulierung liegt im Lösungsverfahren, welches konservativ ist. Es ist nicht mehr notwendig, die Lage der Grenzflächen zu verfolgen, sondern sie sind vielmehr Bestandteil der Lösung.

Literaturverzeichnis

[1] K.A. Landman, W.B. Russel. *Filtration of large pressures for strongly flocculated suspensions.* Physics of Fluids A, 3, 1495-1509.

[2] R. Bürger, F. Concha, K.H. Karlsen. *Phenomological model of filtration processes: Cake formation and expression.* Chemical Engineering Science 56 (2001) 4537-4553.

Vortrag 8

Finite Differenzenverfahren

Ausgearbeitet von Stefan Berres.

In diesem Abschnitt werden finite Differenzenverfahren für das Modellproblem (6.1) vorgestellt [1, 2].

8.1 Verfahren erster Ordnung

Zur numerischen Lösung führt man das Gitter $(x_j, t_n) = (j\Delta x, \Delta t)$ mit $n = 0, \ldots, N$ und $j \in \mathbb{Z}$ ein, bezeichnet mit u_j^n das Zellmittel

$$u_j^n \approx \frac{1}{\Delta} \int_{x_{j-1/2}}^{j+1/2} u(\xi, t_n) d\xi \tag{8.1}$$

und approximiert die partiellen Ableitungen in (6.1) durch finite Differenzen,

$$\frac{u^{n+1} - u_j^n}{\Delta t} + \frac{f(u_j^n, u_{j+1}^n) - f(u_{j-1}^n, u_j^n)}{\Delta x} = \frac{A(u_{j+1}^n) - 2A(u_j^n) + A(u_{j+1}^n)}{(\Delta x)^2}. \tag{8.2}$$

Hierbei bezeichnet $f(u, v)$ einen numerischen Fluß, der konsistent zur Flußfunktion sein muß, $f(u, u) = f(u)$. Beispiele für numerische Flüsse ist der

üpwindFluß $f(u,v) = f(u)$, der Lax-Friedrichs-Fluß

$$f(u,v) = 1/2(f(u) + f(v)) - 1/(2\lambda)(v-u) \tag{8.3}$$

oder der Engquist-Osher-Fluß

$$f(u,v) = \frac{1}{2}\left(f(u) + f(v) + \int_u^v |f_u(s)|ds\right) \tag{8.4}$$

$$= f(0) + \int_0^u \max(f'(s),0)ds + \int_0^v \min(f'(s),0)ds, \tag{8.5}$$

der wegen

$$f(u_j^n, u_{j+1}^n) = f(u_j^n) \text{ falls } f'(u) > 0 \text{ für alle } u \tag{8.6}$$

$$f(u_j^n, u_{j+1}^n) = f(u_{j+1}^n) \text{ falls } f'(u) < 0 \text{ für alle } u \tag{8.7}$$

$$\tag{8.8}$$

ein verallgemeinerter Upwind-Fluß ist. Für Flußfunktionen mit genau einem Minimum u_m und ohne lokalem Maximum vereinfacht sich der Enquist-Osher-Fluß zu

$$f_\mathrm{bk}^\mathrm{EO}(u,v) = \begin{cases} f_\mathrm{bk}(v) & \text{für } u \le u_\mathrm{m}, v \le u_\mathrm{m} \\ f_\mathrm{bk}(u) + f_\mathrm{bk}(v) - f_\mathrm{bk}(u_\mathrm{m}) & \text{für } u > u_\mathrm{m}, v \le u_\mathrm{m} \\ f_\mathrm{bk}(u_\mathrm{m}) & \text{für } u \le u_\mathrm{m}, v > u_\mathrm{m} \\ f_\mathrm{bk}(u) & \text{für } u > u_\mathrm{m}, v > u_\mathrm{m} \end{cases} \tag{8.9}$$

8.1.1 Verfahren zweiter Ordnung

Ein Verfahren zweiter Ordung

$$\frac{u_j^{n+1} - u_j^n}{\Delta t} + \frac{f^{EO}(u_j^\mathrm{R}) - f^{EO}(u_{j+1}^\mathrm{L})}{\Delta x} = \frac{A(u_{j-1}^n) - 2A(u_{j-1}^n) + A(u_{j+1}^n)}{\left(\Delta x\right)^2} \tag{8.10}$$

kann durch lineare Rekonstruktion der Lösung

$$u^n(x) = u_j^n + s_j^n(x - x_j) \text{ für } x \in (x_{j-1/2}, x_{j+1/2}) \tag{8.11}$$

und insbesondere

$$u_j^{\mathrm{L}} := u_j^n - \frac{\Delta x}{2} s_j^n \tag{8.12}$$

$$u_j^{\mathrm{R}} := u_j^n + \frac{\Delta x}{2} s_j^n \tag{8.13}$$

mithilfe der Limiter-Funktion

$$s_j^n = MM\left(\frac{u_j^n - u_{j-1}^n}{\Delta x}, \frac{u_{j+1}^n - u_j^n}{\Delta x}\right) \tag{8.14}$$

und des Minmod-Limiters

$$MM(a,b) = \begin{cases} \min(a,b) & \text{falls } a,b > 0 \\ \max(a,b) & \text{falls } a,b < 0 \\ 0 & \text{sonst} \end{cases} \tag{8.15}$$

konstruiert werden.

8.1.2 Zeitdiskretisierung zweiter Ordnung

Um ein Verfahren zweiter Ordnung zu erhalten, muß sowohl der räumliche Operator als auch der zweitliche in zweiter Ordnung approximiert werden. [5]

Dazu wird der räumliche Operator $\mathscr{L}$

$$\frac{\partial u}{\partial t} + \mathscr{L}(u) = 0 \tag{8.16}$$

aus (6.1) durch $L(u) = \mathscr{L}(u) + O(\Delta x^3)$, wie in (8.10) konstruiert, approximiert. Explizite Runge-Kutta-Methoden lassen sich allgemein schreiben als

$$u^{(i)} = u^{(0)} + \Delta t \sum_{k=0}^{i} c_{ik} L(u^{(k)}), \quad i = 1, \ldots, m \tag{8.17}$$

$$u^{(0)} = u^{(n)}, \quad u^{(m)} = u^{n+1}. \tag{8.18}$$

Für ein Verfahren zweiter Ordnung hat ein Rung-Kutta-Verfahren expliziter Art die Form

$$u^{(1)} = u^{(0)} + \Delta t\big(\mathscr{L} u^{(0)}\big) \tag{8.19}$$

$$u^{(2)} = \frac{1}{2}\big(u^{(0)} + u^{(1)}\big) + \frac{1}{2}\Delta t \mathscr{L}\big(u^{(1)}\big). \tag{8.20}$$

8.1.3 Eigenschaften des Verfahrens

Da aufgrund der Nichtlinearität der Flußdichtefunktion $f(u)$ sowie der Entartung des Diffusionskoeffizienten $a(u)$ die Lösungen von (6.1) generell unstetig sind, müssen Entropielösungen betrachtet werden. Das hier beschriebene Verfahren hat die eingebaute Eigenschaft, diese Unstetigkeiten geeignet nachzubilden, ohne sie explizit verfolgen zu müssen. Für eine größenerhaltende Diskretisierung und der konvektive Fluß durch einen Upwind-Fluß und der Term zweiter Ordnung zentral diskretisiert. Das Verfahren ist konsistent wegen $f^{\mathrm{EO}}(u,u) = f(u)$ für alle $u \in \mathbb{R}$. Da das Verfahen erster Ordnung monoton ist erfüllt es auch die diskrete Entropie-Ungleichung.

8.2 Dimensions-Zerlegung

Ein räumlich zweidimensionales Problem kann dadurch gelöst werden, indem es auf einem rechteckigen Gitter in zwei eindimensionale Teilprobleme zerlegt wird, die dann pro Zeitschritt nacheinander gelöst werden.

Dazu approximiert man die Anfangsbedingung $u_0 \in L^1(\mathbb{R}^2) \cup L^\infty(\mathbb{R}^1)$ auf den Rechtecken $R_{j,k} := [x_{j-1/2}, x_{j+1/2}] \times [y_{k-1/2}, y_{k+1/2}],\ j = 1, \ldots, J, k = 1, \ldots, K$ durch stückweise konstante Anfangswerte

$$u_{j,k} := \frac{1}{\Delta x \Delta y} \int_{R_{j,k}} u_0(x,y)dxdy. \tag{8.21}$$

Damit das Verfahren konsistent ist, muß es in Erhaltungsform

$$u_{j,k}^{n+1/2} := u_{j,k}^n - \lambda_y \big[g(u_{j,k}^n, u_{j,k+1}^n) - g(u_{j,k-1}^n, u_{j,k}^n)\big], \tag{8.22}$$

$$\lambda_y := \frac{\Delta t}{\Delta y} \tag{8.23}$$

$$u_{j,k}^{n+1} := u_{j,k}^{n+1/2} - \lambda_x \big[g(u_{j,k}^{n+1/2}, u_{j+1,k}^{n+1/2}) - g(u_{j-1,k}^{n+1/2}, u_{j,k}^{n+1/2})\big], \tag{8.24}$$

$$\lambda_x := \frac{\Delta t}{\Delta x} \tag{8.25}$$

geschrieben werden können, die numerischen Flüsse $f(u,v)$ und $g(u,v)$ müßen zu den entsprechenden Flußfunktionen $f(u)$ und $g(u)$ konsistent sein ($f(u,u) = f(u), g(u,u) = g(u)$. Außerdem muß das Verfahren muß monoton sein, also

in der Form

$$u_{j,k}^{n+1/2} := G(u_{j,k-1}^n, u_{j,k}^n, u_{j,k+1}^n) \tag{8.26}$$

$$u_{j,k}^{n+1} := H(u_{j,k-1}^{n+1/2}, u_{j,k}^{n+1/2}, u_{j,k+1}^{n+1/2}) \tag{8.27}$$

darf G, H in seinen Variablen nicht abnehmend sein.

Das grundsätzliche Vorgehen beim Dimensions-Splitting kann man anhand linearer Flußfunktionen erklären. Die lineare Advektionsgleichung in zwei Raumdimensionen

$$\frac{\partial u}{\partial t} + a\frac{\partial u}{\partial x} + b\frac{\partial u}{\partial y} = 0, \quad a, b \in \mathbb{R} \tag{8.28}$$

$$u(x, y, 0) = u_0(x, y) \tag{8.29}$$

wird in die zwei eindimensionalen Probleme

$$\frac{\partial v}{\partial t} + a\frac{\partial v}{\partial x} = 0 \tag{8.30}$$

$$v(x, y, 0) = u_0(x, y) \tag{8.31}$$

sowie

$$\frac{\partial w}{\partial t} + b\frac{\partial w}{\partial y} = 0 \tag{8.32}$$

$$v(x, y, 0) = v(x, y, \Delta t) \tag{8.33}$$

aufgeteilt. Die Lösung von (8.30), $v(x, y, \Delta t) = u_0(x-a, y)$, und anschliesend von (8.32), $w(x, y, \Delta t) = w(x, y-b\Delta t, 0)$ ergibt zusammengesetzt die Lösung von (8.28), $u_0(x - a\Delta t, y - b\Delta t)$, wie man durch Einsetzen bestätigen kann.

Dieses Vorgehen läst sich auf beliebige Flusfunktionen f, g für die räumlich zweidimensionale Erhaltungsgleichung

$$\frac{\partial}{\partial t}u + \frac{\partial}{\partial x}f(u) + \frac{\partial}{\partial y}g(u) = 0, \quad u(\cdot, 0) = 0 \tag{8.34}$$

verallgemeinern, indem man die beiden Teilschritte

$$\frac{\partial}{\partial t}v + \frac{\partial}{\partial x}f(v) = 0 \quad v(\cdot, 0) = u_0 \tag{8.35}$$

und

$$\frac{\partial}{\partial t}w + \frac{\partial}{\partial y}g(w) = 0, \quad u(\cdot, 0) = 0 \quad w(\cdot, 0) = v(\cdot, \Delta t) \tag{8.36}$$

nacheinander löst. Führt man die Lösungsoperatoren S^x und S^y für (8.35) und (8.36) mit den Eigenschaften $v(t) = S^x(t)u_0$ und $w(t) = S^y(t)v(\Delta t)$, dann kann die durch den formalen Operator S beschriebene Gesamtlösung von (8.34) zum Zeitpunkt $T := n\Delta t$ durch n-maliges hintereinanderausführen von S^x und S^y approximiert werden,

$$u(T) = S(T)u_0 \approx \left[S^y(\Delta t)S^x(\Delta t)\right]^n u_0. \tag{8.37}$$

Literaturverzeichnis

[1] Bürger, R., Evje, S.,Karlsen, K.H. and Lie, K.-A., Numerical methods for the simulation of the settling of flocculated suspensions, *Chem. Eng. J.* **80** (2000), 91–104.

[2] Bürger, R. and Karlsen, K.H., On some upwind schemes for the phenomenological sedimentation-consolidation model, *J. Eng. Math.* **41** (2001), 145–166.