

**„Stofftransportvorgänge in Festgesteinsaquiferen:
Analyse von Tracerdurchbruchskurven
zur Identifikation eines geeigneten Mehrkontinuum-Ansatzes“**

Von der Fakultät für Bauingenieurwesen
der Rheinisch-Westfälischen Technischen Hochschule Aachen
zur Erlangung des akademischen Grades eines
Doktors der Ingenieurwissenschaften
genehmigte Dissertation

vorgelegt von

Vincent Robert Lagendijk

aus

Nettetal

Berichter:

Universitätsprofessor Dr.-Ing. Jürgen Köngeter
Professor Dr.-Ing. Rainer Helmig

Tag der mündlichen Prüfung: 30.01.2004

„Diese Dissertation ist auf den Internetseiten der
Hochschulbibliothek online verfügbar.“

Vorwort

Mehrkontinuum-Modelle sind effiziente numerische Hilfsmittel zur Simulation von Strömungs- und Stofftransportprozessen in Kluftaquiferen. Obwohl entsprechende Simulatoren verfügbar sind, ist die Anwendbarkeit der Mehrkontinuum-Modelle für Kluftaquifere erst dann gegeben, wenn eine Methode zur Identifikation des integralen Stofftransportverhaltens zur Verfügung steht. In der vorliegenden Arbeit wird eine Erweiterung der bestehenden Methode zur Identifikation eines multiporösen Systems präsentiert. Die vorhandene Methode beruht auf charakteristischen Größen, die die Wertigkeit der Austauschprozesse zwischen den beteiligten Komponenten beschreiben. Neben den charakteristischen Größen existieren typisierte Tracerdurchbruchskurven zu einer zeitlich unbegrenzten Tracereinleitung, die bei der Identifikation des Systems zur Verfügung stehen. Bis heute ist es in Feld- und Laborversuchen sehr schwierig, mögliche beteiligte Komponenten getrennt zu untersuchen. Eine geeignete Zuordnung von Materialparametern für ein Mehrkontinuum-Modell wird dadurch erschwert.

Die vorliegende Arbeit entstand während meiner Tätigkeit als Wissenschaftlicher Mitarbeiter am Institut für Wasserbau und Wasserwirtschaft der RWTH Aachen in den Jahren 2001 bis 2002. Der Grundstein wurde durch die Mitarbeit innerhalb des durch die DFG geförderten Forschungsverbundprojektes „Festgesteinsaquiferanalog: Experimente und Modellierung“ in den Jahren 1997 bis 2001 gelegt. Herrn Universitätsprofessor Dr.-Ing. J. Köngeter möchte ich für seine großzügige Unterstützung während meiner Forschungsarbeiten sowie für die Übernahme des Hauptreferates danken. Für die fachlichen Anregungen, Diskussionen und die Übernahme des Koreferates danke ich Herrn Professor Dr.-Ing. R. Helmig des Instituts für Wasserbau der Universität Stuttgart.

Ein besonderer Dank für viele inhaltliche Diskussionen und Anregungen gilt meinen Kollegen Dipl.-Ing. T. Vogel, Dipl.-Phys. M. Spiller, Dr.-Ing. D. Jansen und Dr.-Ing. J. Birkhözer. Weiterer Dank gilt meiner Familie, meinen Kollegen und studentischen Mitarbeitern, die durch ihre vielfältige Unterstützung zum Gelingen dieser Arbeit beigetragen haben.

Aachen, im Februar 2004

Vincent Lagendijk

Abstract

Characterizing flow and transport processes in fractured porous media is an essential issue to the modeling and experimental community. This thesis focuses on the analysis of tracer breakthrough curves in such media. The basic idea is to develop a method which allows for using tracer pulses as boundary conditions with respect to transport and transforming the given signal (breakthrough curve) of the effluent to that signal provided by infinite tracer injection. The necessity for this transformation arises because of the better comparability for breakthrough curves due to continuous injection. For those breakthrough curves a variety of studies has been performed identifying the number of components relevant for flow and transport in fractured porous media. In this thesis now a method to transform pulse signals to continuous signals and corresponding criteria for validity is presented. The transformed signals are then used to characterize the medium under consideration. With this characterization (i.e. single porous and single permeable, double porous and single permeable, double porous and double permeable, etc.) a multicontinuum approach is chosen. The results of the multicontinuum model are then compared to those of a discrete modeling approach. The data of the discrete model are supposed to be the field data.

Inhaltsverzeichnis

1	Einleitung	1
1.1	Einführung in die Problemstellung	1
1.2	Zielsetzung	4
2	Methoden zur Identifikation des Mehrkontinuum-Modells	6
2.1	Einführung	6
2.2	Charakteristische Formen bei zwei Komponenten . . .	7
2.3	Charakteristische Formen bei drei Komponenten	9
2.4	Charakteristische Größen zur Beschreibung von ge- klüfteten porösen Formationen	12
2.5	Anwendbarkeit der Methoden	15
3	Erkundung und Parameterbestimmung eines Festgesteinsaquifers	17
3.1	Einführung	17
3.2	Der Festgesteins-Aquiferanalog-Ansatz	18
3.3	Zielsetzung und Arbeitsteilung im Projektverbund . .	19
3.4	Bohrkernskala	22
3.4.1	Übersicht	22
3.4.2	Versuche an kleinskaligen Bohrkernen	23
3.4.3	Versuche an Bench-Scale-Proben	23
3.4.4	Numerische Experimente an Bench-Scale-Proben	25
3.5	Skala des Laborversuchsblocks	26
3.5.1	Übersicht	26
3.5.2	1m-Laborversuchsblock	26
3.5.3	Numerische Experimente an dem 1m- Laborversuchsblock	27
3.6	Skala des Feldversuchsblocks	29
3.6.1	Übersicht	29
3.6.2	Messungen am Feldversuchsblock	29

3.6.3	Numerische Untersuchungen am Feldversuchsblock	31
3.7	Diskussion	31
4	Transformation der Durchbruchskurve bei impulsartiger Tracerzugabe	32
4.1	Einführung	32
4.2	Analytische Lösung für die 1D Transportfeldgleichung	33
4.2.1	Zugrunde liegende Gleichungen	33
4.2.2	Anfangs- und Randbedingungen der analytischen Lösung	35
4.2.3	Transformation der Lösung	35
4.3	Vorstellung der systematischen Untersuchungen	37
4.4	Auswertung der Ergebnisse	38
4.5	Zusammenfassung	53
5	Numerische Untersuchungen zur erweiterten Typisierungsmethode	55
5.1	Übersicht	55
5.2	Untersuchungsgebiet	56
5.3	Numerische Experimente mit dem Trägerfluid Wasser .	58
5.3.1	Parameter der Untersuchungen mit Wasser . . .	58
5.3.2	Erläuterung der Darstellungen	61
5.3.3	Kennzahlen zur Beurteilung der Approximation aus Impulsmessungen	61
5.3.4	Randbedingungen	62
5.3.5	Ergebnisse	63
5.4	Numerische Experimente mit dem Trägerfluid Luft . .	75
5.4.1	Parameter der Untersuchungen mit Luft	75
5.4.2	Randbedingungen	79
5.4.3	Ergebnisse	79
5.5	Zusammenfassung	86
6	Strömungs- und Transportexperimente mit diskreten Modellansätzen	89
6.1	Übersicht	89
6.2	Beschreibung des Untersuchungsgebietes	90
6.2.1	Allgemeines	90

6.2.2	Geometrische Parameter des Untersuchungsgebietes	91
6.2.3	Einrichtung des Messfeldes	91
6.2.4	Geostatistische Beschreibung des Untersuchungsgebietes	95
6.3	Versuchsdurchführung am diskreten Modell	101
6.3.1	Materialparameter der diskreten Berechnung . .	101
6.3.2	Strömungsrandbedingungen	102
6.3.3	Transportrandbedingungen	102
6.4	Versuchsauswertung	102
6.4.1	Bestimmung der äquivalenten Kluftdurchlässigkeit	102
6.4.2	Analyse der Tracerdurchbruchskurven	108
6.5	Auswahl geeigneter Mehrkontinuum-Konzepte	126
6.5.1	Vorgehensweise	126
6.5.2	Identifikation des Mehrkontinuum-Ansatzes zu den Varianten 1-5	128
6.6	Zusammenfassung der Untersuchungen mit diskreten Modellansätzen	135
7	Strömungs- und Transportexperimente mit Mehrkontinuum-Ansätzen	136
7.1	Allgemeines	136
7.1.1	Vorgehensweise	136
7.1.2	Erläuterung der Ergebnisdarstellung	137
7.1.3	Finite-Elemente-Diskretisierung	137
7.2	DPSP-Ansatz	138
7.2.1	Allgemeines	138
7.2.2	Modellaufbau	141
7.2.3	Modellprognose	155
7.3	DPDP-Ansatz	163
7.3.1	Allgemeines	163
7.3.2	Modellaufbau	165
7.3.3	Modellprognose	177
7.4	SPSP-Ansatz	182
7.4.1	Allgemeines	182
7.4.2	Modellaufbau und -prognose	184

7.5	Zusammenfassung der Untersuchungen mit Mehrkontinuum-Ansätzen	187
8	Zusammenfassung	188
	Literaturverzeichnis	193
A	Finite-Elemente-Programm STRAFE6	204
A.1	Übersicht	204
A.2	Entwicklung des Mehrkontinuum-Modells	204
A.3	Beschreibende Gleichungen für das Mehrkontinuum-Modell	206
A.3.1	Übersicht	206
A.3.2	Abbildung der Komponenten	206
A.4	Austausch zwischen den Komponenten	212
A.4.1	Übersicht	212
A.4.2	Linearansatz	212
A.4.3	Gradientenansatz	214

Verzeichnis der Formelzeichen und Symbole

Funktionen

δ	DIRAC-Funktion
erf	Fehlerfunktion
erfc	komplementäre Fehlerfunktion

Koordinaten, Indizes, Vereinbarungen

α	übergeordnetes Kontinuum	
β	untergeordnetes Kontinuum	
$\square^F, \square^M$	Kluft- bzw. Matrixkontinuum	
$\square_\alpha, \square_\beta$	Nummer des Kontinuums	
τ	Zeitkoordinate	$[T]$
t	Zeitkoordinate	$[T]$
x_i	globale Koordinaten	$[L]$

Skalare Größen

α_C	Austauschkoeffizient für Stofftransport	$[L^2 T^{-1}]$
------------	---	----------------

α_l	longitudinale Dispersivität	$[L]$
α_Q	Austauschkoeffizient für Strömung	$[LT^{-1}]$
α_t	transversale Dispersivität	$[L]$
ϵ	geometrischer Best-Fit-Parameter für Austauschkoeffizienten	$[-]$
η	dynamische Viskosität	$[ML^{-1}T^{-1}]$
γ_{el}	zeitlicher Tracerdurchgangskoeffizient	$[T/T]$
Ω_0	spezifische Oberfläche	$[L^{-1}]$
ρ	Dichte	$[ML^{-3}]$
θ	Kluftorientierung	$[^\circ]$
A_0	Interfacefläche	$[L^2]$
A_{0i}	Kluftlänge	$[L]$
b_i	halbe Kluftöffnungsweite	$[L]$
C	Konzentration	$[ML^{-3}]$
C_0	Randbedingungswert der Konzentration	$[ML^{-3}]$
C_c	Krümmungszahl	$[-]$
C_R	Konzentration eines Randeinstroms	$[ML^{-3}]$
D	Kluftdichte	$[L^{-2}]$
D_{mol}	effektiver Diffusionskoeffizient	$[L^2T^{-1}]$
k	fluidunabhängige Permeabilität	$[L^2]$

K	Durchlässigkeitsbeiwert	$[LT^{-1}]$
L	Abbaulänge	$[L]$
L^*	bezogene Abbaulänge	$[L/L]$
L_A	advektive Abbaulänge	$[L]$
L_A^*	bezogene advektive Abbaulänge	$[L/L]$
L_D	diffusive Abbaulänge	$[L]$
L_D^*	bezogene diffusive Abbaulänge	$[L/L]$
M_D	diffusiver Massenstrom	$[MT^{-1}]$
M_{Ar}	regional advektiver Massenstrom	$[MT^{-1}]$
n	Porosität	$[L^3/L^3]$
N_M	Mobilitätszahl	$[L^3T^{-1}/L^3T^{-1}]$
N_{DA}	Diffusions-Advektionszahl	$[MT^{-1}/MT^{-1}]$
$Q_{Q,S}$	volumenbezogener Quell-/Senkenterm	$[T^{-1}]$
s	Penetrationstiefe	$[L]$
s_{max}	maximale Penetrationstiefe	$[L]$
S_S	spezifischer Speicherkoeffizient	$[L^{-1}]$
T^*	Aufladezeit	$[T]$
T_A^*	advektive Aufladezeit	$[T]$
T_D^*	diffusive Aufladezeit	$[T]$

U	Ungleichförmigkeitszahl	$[-]$
v_f	Filtergeschwindigkeit	$[LT^{-1}]$

Tensorielle Größen

$\Omega_{w,ij}$	Tensor der spezifischen Kluftfläche	$[L^{-1}]$
D_{ij}	Tensor der hydrodynamischen Dispersion	$[L^2 T^{-1}]$
K_{ij}	Tensor der hydraulischen Durchlässigkeit	$[LT^{-1}]$
q_i	Vektor der Filtergeschwindigkeit	$[LT^{-1}]$
v_i	Vektor der Porengeschwindigkeit	$[LT^{-1}]$

Es gilt die Einsteinsche Summenkonvention, dass über sich wiederholende Indizes aufsummiert wird.

$$\sum_j A_{ij} x_j \equiv A_{ij} x_j$$

Es gilt das KRONECKER-Symbol mit:

$$\delta_{ij} = \begin{cases} 1 & : i = j \\ 0 & : i \neq j \end{cases}$$

Weitere Formelzeichen und Symbole werden an der Stelle ihres Auftretens definiert.

Abbildungsverzeichnis

2.1	Typisierung des integralen Stofftransportverhaltens eines triple porösen, triple permeablen Systems nach JANSEN (1999)	10
3.1	Aufbau der Aquiferanalogstudie aus JANSEN (1999) . .	20
3.2	DFG-Verbundprojekt „Festgesteins-Aquiferanalog“: Projektpartner und Projektstruktur nach SILBERHORN-HEMMINGER (2002)	22
3.3	Aufbau zur Durchführung von Gasströmungs- und Transportversuchen nach MCDERMOTT (1999)	24
3.4	Räumliche Lage der ausgewählten Ports; 3D-Ansicht (links) und Topfläche (rechts) nach KÖNGETER ET AL. (2000)	25
3.5	Ansicht des Laborversuchsblocks von oben und unten mit Port-Raster nach KÖNGETER ET AL. (2000)	28
3.6	Ansicht des Feldversuchsblocks von Süden (links) und von Osten (rechts) nach HÖTZL ET AL. (2000)	29
3.7	Ansicht des Feldversuchsblocks mit Markierung ausgewählter Bohrungen nach HÖTZL ET AL. (2000)	30
4.1	Tracerdurchbruchskurven für die Variante 1, lineare Darstellung; $x_0 = 1.0\text{ m}$ und $t_0 = 1\text{ d}$	40
4.2	Tracerdurchbruchskurven und Differenzen für die Variante 1; oben: $x_0 = 1.0\text{ m}$ und $t_0 = 1\text{ d}$; unten: $x_0 = 1.0\text{ m}$ und $t_0 = 50\text{ d}$	42
4.3	Tracerdurchbruchskurven und Differenzen für $x_0 = 5.0\text{ m}$ und $t_0 = 50\text{ d}$; oben: Variante 1; unten: Variante 6	44

4.4	Tracerdurchbruchskurven und Differenzen für oben: Variante 8 ($x_0 = 15.0\text{ m}$ und $t_0 = 10\text{ d}$); unten: Variante 3 ($x_0 = 45.0\text{ m}$ und $t_0 = 500\text{ d}$)	45
4.5	C/C_0 -Gültigkeitsbereiche (dreidimensional); Variante 1: t_0 -Schnitt: $t_0 = 100\text{ d}$; x_0 -Schnitt: $x_0 = 10.0\text{ m}$	48
4.6	Differenzendarstellung (dreidimensional); Variante 1: t_0 -Schnitt: $t_0 = 100\text{ d}$; x_0 -Schnitt: $x_0 = 10.0\text{ m}$	49
4.7	C/C_0 -Gültigkeitsbereiche (dreidimensional); Variante 3: t_0 -Schnitt: $t_0 = 100\text{ d}$; x_0 -Schnitt: $x_0 = 10.0\text{ m}$	51
4.8	Differenzendarstellung (dreidimensional); Variante 3: t_0 -Schnitt: $t_0 = 100\text{ d}$; x_0 -Schnitt: $x_0 = 10.0\text{ m}$	52
5.1	Untersuchungsgebiet und Berechnungsausschnitt nach BIRKHÖLZER (1994b)	57
5.2	Tracerdurchbruchskurven und Differenzen für Variante 1; oben: MQS02 ($x_0 = 1.0\text{ m}$) und $t_0 = 1\text{ d}$; unten: MQS02 ($x_0 = 1.0\text{ m}$) und $t_0 = 50\text{ d}$	64
5.3	Tracerdurchbruchskurven und Differenzen für MQS10 ($x_0 = 5.0\text{ m}$) und $t_0 = 50\text{ d}$ oben: Variante 1; unten: Variante 4	65
5.4	Tracerdurchbruchskurven und Differenzen für oben: Variante 2, MQS30 ($x_0 = 15.0\text{ m}$) und $t_0 = 500\text{ d}$; unten: Variante 3, MQS90 ($x_0 = 45.0\text{ m}$) und $t_0 = 500\text{ d}$.	66
5.5	Variante 1 für Wasser, Kennzahlen: $U, C_c, T_a : T_i, T_p : T_i$.	69
5.6	Variante 2 für Wasser, Kennzahlen: $U, C_c, T_a : T_i, T_p : T_i$.	70
5.7	Variante 3 für Wasser, Kennzahlen: $U, C_c, T_a : T_i, T_p : T_i$.	71
5.8	Variante 4 für Wasser, Kennzahlen: $U, C_c, T_a : T_i, T_p : T_i$.	72
5.9	Varianten 1 bis 4 für Wasser; typische Durchbruchskurven (lineare Darstellung) . . .	74
5.10	Variante 1 für Luft, Kennzahlen: $U, C_c, T_a : T_i, T_p : T_i$. .	81
5.11	Variante 2 für Luft, Kennzahlen: $U, C_c, T_a : T_i, T_p : T_i$. .	82
5.12	Variante 3 für Luft, Kennzahlen: $U, C_c, T_a : T_i, T_p : T_i$. .	83
5.13	Variante 4 für Luft, Kennzahlen: $U, C_c, T_a : T_i, T_p : T_i$. .	84
5.14	Variante 1 und 4 für Luft; qualitative Gegenüberstellung der Durchbruchskurven	85
6.1	Kluftnetzwerk und Lage der Randbedingungs-Ports; Finite-Elemente-Diskretisierung eines Bereichs	94

6.2	Häufigkeitsverteilungen für die Interfacefläche A_{0j} (oben) und die maximale Penetrationstiefe s_{maxj} (unten)	97
6.3	Räumliche Verteilung der Blockgrößen	99
6.4	Tensor der spezifischen Kluftfläche $\Omega_{w,ij}$	100
6.5	Tensoren der äquivalenten Durchlässigkeit K_{ij}	107
6.6	Variante 1: Konfiguration 1-2, Rekonstruktion der 1d- und 10d-Impulskurve	112
6.7	Variante 1: Konfiguration 1-2, Rekonstruktion der 100d-Impulskurve und normierte Summenkurven	113
6.8	Variante 1: Konfiguration 3-5, Rekonstruktion der 1d- und 10d-Impulskurve	114
6.9	Variante 1: Konfiguration 3-5, Rekonstruktion der 100d-Impulskurve und normierte Summenkurven	115
6.10	Variante 2: Konfiguration 2-4, Rekonstruktion der 1d- und 10d-Impulskurve	117
6.11	Variante 2: Konfiguration 2-4, Rekonstruktion der 100d-Impulskurve und normierte Summenkurven	118
6.12	Variante 3: Konfiguration 1-5, Rekonstruktion der 1d- und 10d-Impulskurve	119
6.13	Variante 3: Konfiguration 1-5, Rekonstruktion der 100d-Impulskurve und normierte Summenkurven	120
6.14	Variante 4: Konfiguration 1-3, Rekonstruktion der 1d- und 10d-Impulskurve	121
6.15	Variante 4: Konfiguration 1-3, Rekonstruktion der 100d-Impulskurve und normierte Summenkurven	122
6.16	Variante 5: Konfiguration 4-5, Rekonstruktion der 1d- und 10d-Impulskurve	123
6.17	Variante 5: Konfiguration 4-5, Rekonstruktion der 100d-Impulskurve und normierte Summenkurven	124
6.18	Variante 1: Kennzahlen U , C_C und γ_{el}	129
6.19	Variante 2: Kennzahlen U , C_C und γ_{el}	130
6.20	Variante 3: Kennzahlen U , C_C und γ_{el}	131

6.21	Variante 4: Kennzahlen U , C_C und γ_{el}	133
6.22	Variante 5: Kennzahlen U , C_C und γ_{el}	134
7.1	Durchbruchskurven zu Variante 1: DPSP-Port-Port, Konfiguration 3-5, <i>Kluftufer</i>	142
7.2	Durchbruchskurven zu Variante 1: DPSP-Port-Port, Matrix, t logarithmisch, <i>Kluftufer</i>	143
7.3	Durchbruchskurven zu Variante 1: DPSP-Port-Port, Konfiguration 2-3, <i>Kluftufer</i> , <i>MIN</i> , <i>MAX</i>	145
7.4	Durchbruchskurven zu Variante 1: DPSP-Port-Port, Matrix, t logarithmisch, <i>Kluftufer</i> , <i>MIN</i> , <i>MAX</i>	146
7.5	Durchbruchskurven zu Variante 1: DPSP-Port-Port, Konfiguration 2-4, <i>MIN</i> , <i>MEAN</i> , <i>MAX</i>	147
7.6	Durchbruchskurven zu Variante 1: DPSP-Port-Port, Matrix, t logarithmisch, <i>MIN</i> , <i>MEAN</i> , <i>MAX</i>	148
7.7	Durchbruchskurven zu Variante 2: DPSP-Port-Port, Matrix, t logarithmisch, <i>Kluftufer</i>	150
7.8	Durchbruchskurven zu Variante 2: DPSP-Port-Port, Matrix, t logarithmisch, <i>Kluftufer</i> , <i>MIN</i> , <i>MAX</i>	151
7.9	Durchbruchskurven zu Variante 3: DPSP-Port-Port, Konfiguration 3-4, <i>MIN</i>	153
7.10	Durchbruchskurven zu Variante 3: DPSP-Port-Port, Matrix, t logarithmisch, <i>MIN</i>	154
7.11	Durchbruchskurven zu Variante 1: DPSP-Profil-Profil, t logarithmisch, <i>Kluftufer</i>	156
7.12	Durchbruchskurven zu Variante 1: DPSP-Profil-Profil, t logarithmisch, <i>Kluftufer</i> , <i>MIN</i> , <i>MAX</i>	157
7.13	Durchbruchskurven zu Variante 2: DPSP-Profil-Profil, t logarithmisch, <i>Kluftufer</i>	159
7.14	Durchbruchskurven zu Variante 2: DPSP-Profil-Profil, t logarithmisch, <i>Kluftufer</i> , <i>MIN</i> , <i>MAX</i>	160
7.15	Durchbruchskurven zu Variante 3: DPSP-Profil-Profil, t logarithmisch, <i>Kluftufer</i> , <i>MIN</i>	162
7.16	Durchbruchskurven zu Variante 3: DPDP-Port-Port, Konfiguration 1-5, ϵ	167
7.17	Durchbruchskurven zu Variante 3: DPDP-Port-Port, Matrix, t logarithmisch, ϵ	168

7.18	Durchbruchskurven zu Variante 3: DPDP-Port-Port, Konfiguration 2-3, n_1, n_2	169
7.19	Durchbruchskurven zu Variante 3: DPDP-Port-Port, Matrix, t logarithmisch, n_1, n_2	170
7.20	Durchbruchskurven zu Variante 4: DPDP-Port-Port, Konfiguration 1-4	172
7.21	Durchbruchskurven zu Variante 4: DPDP-Port-Port, Matrix, t logarithmisch	173
7.22	Durchbruchskurven zu Variante 5: DPDP-Port-Port, Konfiguration 1-3	175
7.23	Durchbruchskurven zu Variante 5: DPDP-Port-Port, Matrix, t logarithmisch	176
7.24	Durchbruchskurven zu Variante 3: DPDP-Profil-Profil, t logarithmisch, n_1, n_2	178
7.25	Durchbruchskurven zu Variante 4: DPDP-Profil-Profil, t logarithmisch	180
7.26	Durchbruchskurven zu Variante 5: DPDP-Profil-Profil, t logarithmisch	181
7.27	Durchbruchskurven zu Variante 4: SPSP-Profil-Profil, t logarithmisch	185
7.28	Durchbruchskurven zu Variante 5: SPSP-Profil-Profil, t logarithmisch	186
A.1	Räumliche Mittelungsvorgänge bei der Homogenisierung der Komponenten nach JANSEN (1999)	207

Tabellenverzeichnis

2.1	Charakteristische Durchbruchskurven für Doppelkontinuum-Modelle nach JANSEN (1999)	8
2.2	Charakteristische Durchbruchskurven für Dreikontinuum-Modelle nach JANSEN (1999)	11
4.1	Zuordnung der Aquiferparameter zu den Varianten 1- 9 für die Untersuchung mit der analytischen Lösung .	37
5.1	Basisparameter für die Finite-Elemente-Untersuchung mit Wasser	59
5.2	Variation der Parameter für die Finite-Elemente-Untersuchung mit Wasser	60
5.3	Bezogene Abbaulänge für die Finite-Elemente- Untersuchung mit Wasser	60
5.4	Basisparameter für die Finite-Elemente-Untersuchung mit Luft	76
5.5	Variation der Parameter für die Finite-Elemente- Untersuchung mit Luft	77
5.6	Bezogene Abbaulänge für die Finite-Elemente- Untersuchung mit Luft	78
6.1	Geometrische Parameter der diskret abgebildeten Kluftkomponente	92
6.2	Port-Mittelpunkte	93
6.3	Geometrische Parameter der diskret abgebildeten Ma- trixkomponente	95
6.4	Materialparameter der diskreten Berechnung	101
6.5	Konfiguration der Profil-Profil-Messungen für Strömung	104
6.6	Wahl eines Mehrkontinuum-Ansatzes zu den Vari- anten 1 bis 5	132

7.1	Basiswerte der Materialtypen der DPSP-Berechnung . .	139
7.2	Basiswerte der Materialtypen der DPDP-Berechnung .	164
7.3	Basiswerte der Materialtypen der SPSP-Berechnung . .	182

Kapitel 1

Einleitung

1.1 Einführung in die Problemstellung

Festgesteinsaquifere, auch Kluftgrundwasserleiter oder Kluftaquifere genannt, zeichnen sich insbesondere dadurch aus, dass innerhalb der Trennflächen (Klüfte) die Fließgeschwindigkeit des Grundwassers bis zu mehreren Größenordnungen über derjenigen in der angrenzenden Gesteinsmatrix liegen kann. Bedingt durch diesen Kontrast ergeben sich bevorzugte Fließwege innerhalb der Klüfte. Die umgebende Gesteinsmatrix wirkt hingegen bei Transportprozessen meist als Speichermedium. Diese ausgeprägten Heterogenitäten werden bei Labor- und Feldversuchen oft als „Abnormalitäten“ in der Durchbruchskurve erkannt. Solche „Abnormalitäten“ können z. B. ausgeprägtes Tailing, plötzliche Neigungswechsel o.ä. sein. Die Ausprägung der Charakteristika ist dabei neben den hydraulischen Eigenschaften der beteiligten Komponenten (Trennflächen und Gesteinsmatrix) abhängig von der Skala (Transportentfernung) und Art der Versuchsdurchführung.

Die Bedeutung für Prognosewerkzeuge zur Bestimmung des Schadstofftransportes in solchen Systemen ergibt sich aus der Standortsuche für mögliche Endlagerstätten sowie aus dem Bereich der Lagerstättenforschung. Bedingt durch die Abnahme des Wasserdargebots gewinnen Kluftaquifere zunehmend an Bedeutung für wasserwirtschaftliche Fragestellungen wie z. B. die Trinkwassergewinnung. Für den erst- und letztgenannten Bereich ist es von besonderem Interesse, eine Aussage über Transportzeiten und -entfernungen treffen zu können, wohingegen für die Lagerstättenforschung eher die Frage der Mobilisierung von vorhandenen Ressourcen innerhalb der wenig durchlässigen Bereiche im Vordergrund steht. Unabhängig von der Fragestellung stellt die Modellierung aufgrund der ausgeprägten Heterogenitäten sehr hohe Anforderungen an die Messtechnik und die daran gekoppelte Datengrundlage wie auch an das eigentliche Modell.

Als Prognosewerkzeug kommen mehrere verschiedene Ansätze in Betracht. Für einfache Systeme stehen analytische Lösungen zur Berechnung des Schadstofftransportes bereit. Diese können jedoch aufgrund der limitierten Einsatzbereiche meist nur für Überschlagsrechnungen herangezogen werden. Für die in praktischen Fragestellungen auftretenden äußerst komplexen Systeme stehen verschiedene numerische Modelle zur Verfügung. Die Wahl des geeigneten Modells ist von vielen Faktoren abhängig. In diesem Zusammenhang sind im Wesentlichen zu nennen:

- Art der Fragestellung
- Anforderungen an die Modellaussage
- Größe des Untersuchungsgebietes

- Erkundungsmöglichkeit des Systems
- zur Verfügung stehende Daten

Für kleinräumige Fragestellungen bei einer sehr hohen Datendichte bezüglich der geologischen Formation bieten sich diskrete Modelle an. In diesen Modellen können die in der Natur vorliegenden Strukturen diskret abgebildet werden. Dabei erfolgt die Abbildung meist aus einer Kombination eines deterministischen mit einem stochastischen Strukturmodell (vgl. SILBERHORN-HEMMINGER, 2002). Für großräumige Fragestellungen sind diskrete Modelle weniger geeignet aufgrund der benötigten hohen Datendichte und dem damit verbundenen hohen Rechenzeit- und Speicherbedarf. Je nach Art der Fragestellung bieten hier Mehrkontinuum-Modelle eine mögliche Alternative. Diese Modelle zeichnen sich dadurch aus, dass sie die großräumige heterogene Struktur des Systems durch die Kopplung einzelner Kontinua abbilden können. Für ein Kluft-Matrix-System könnten dies ein Kluftkontinuum und ein Matrixkontinuum mit entsprechenden äquivalenten Parametern sein. Für eine qualitativ hochwertige Mehrkontinuum-Modellierung ist jedoch genau wie für das diskrete Modell eine sehr gute Primärdatengrundlage erforderlich, um hydraulisch wirksame Komponenten und ihre Interaktion identifizieren zu können. Ein Festgesteinsaquifer mit zwei Komponenten könnte z. B. als doppelt poröses und single permeables (DPSP), als doppelt poröses und doppelt permeables (DPDP) oder als single poröses und single permeables (SPSP) System identifiziert werden. Der englische Begriff „single“ wird stellvertretend für „einfach“ verwendet, um eine Konsistenz mit der englischsprachigen Fachliteratur zu gewährleisten.

1.2 Zielsetzung

Bis heute ist es in Feld- und Laborversuchen sehr schwierig, mögliche beteiligte hydraulische / geologische Komponenten getrennt zu untersuchen. Eine geeignete Zuordnung von Materialparametern für ein Mehrkontinuum-Modell wird dadurch erschwert. Die bestehenden Typisierungsmethoden eines Festgesteinsaquifers zur Identifikation eines geeigneten Mehrkontinuum-Ansatzes gehen von getrennt nach Komponenten vorliegenden Parametern aus. Innerhalb dieser Arbeit wird eine Methodik zur Identifikation von Transportcharakteristika in Festgesteinsaquiferen anhand von Tracerdurchbruchskurven entwickelt und überprüft. Die Methodik berücksichtigt die limitierten Erkundungsmöglichkeiten im Feld und stellt ein Bindeglied zwischen den bereits mittels numerischer Experimente entwickelten Identifikationsverfahren (vgl. BIRKHÖLZER, 1994b; JANSEN, 1999) und experimentell bestimmbaren Größen dar.

Im Rahmen der wissenschaftlichen Arbeiten zur Mehrkontinuum-Modellierung entwickeln BIRKHÖLZER (1994b) und JANSEN (1999) Methoden zur Identifikation des Mehrkontinuum-Modells (DPSP, DPDP oder SPSP) für Kluft-Matrix- bzw. Kluft-Kluft-Systeme. Die Methodik beruht auf charakteristischen Größen zur Beschreibung der Wechselwirkung (diffusiver und advektiver Austausch) zweier Komponenten. Für die Methodik wird dabei vorausgesetzt, dass Parameter wie Porosität, Permeabilität, Trennflächengeometrie, Klufthäufigkeit und -dichte, Diffusionskoeffizient und Dispersion für die im betrachteten System vorhandenen Komponenten getrennt ermittelt werden können. Die entwickelten charakteristischen Tracerdurchbruchskurven sind für eine zeitlich unbegrenzte Tracerzugabe gültig. Aus dem Defizit der vorhandenen Methodik, dass für die System-

identifikation eine getrennte Parameterermittlung bzw. die Messung von Tracerdurchbruchskurven bei einer unendlichen Tracerzugabe erforderlich ist, ergibt sich das Ziel, eine Methodik zu finden, die diese Lücke schließt. Dabei ist die Aufgabe, ein Modell zu finden, welches die hydraulischen Eigenschaften des zu untersuchenden Systems bestmöglich abbildet. Die Methodik zur Identifikation beruht auf der systematischen Analyse von Tracerdurchbruchskurven bei zeitlich begrenzter Tracerzugabe. Die in dieser Arbeit neu entwickelte Methode zur Auswertung der Durchbruchskurven transformiert die Ergebnisse in eine Form, die die Anwendung der bereits vorhandenen Methodik zur Identifikation eines geeigneten Mehrkontinuum-Modells zulässt.

Die Methodik wird abschließend an einem Fallbeispiel überprüft. Für das Fallbeispiel wird ein synthetischer Festgesteinsaquifer generiert. Für diesen Festgesteinsaquifer wird ein diskretes numerisches Modell aufgebaut, an dem eine begrenzte Anzahl an „Labor- und Feldversuchen“ durchgeführt wird. Mit den Ergebnissen dieser Versuche und der neu entwickelten Methode wird dann ein geeignetes Mehrkontinuum-Modell identifiziert und an diesen Versuchsergebnissen kalibriert. Anschließend werden weitere Versuche am diskreten Modell durchgeführt, mittels derer eine Validierung des Mehrkontinuum-Modells vorgenommen wird.

Wegen der Analogie der Prozesse und Eigenschaften ist eine Übertragung der Ergebnisse der vorliegenden Arbeit auf heterogene Lockergesteinsaquifere unmittelbar möglich.

Kapitel 2

Methoden zur Identifikation des Mehrkontinuum-Modells

2.1 Einführung

Im vorliegenden Kapitel wird eine kurze Übersicht über den Stand der Forschung hinsichtlich der Identifikation und Typisierung des Mehrkontinuum-Modells zur Simulation des Stofftransportes in multiporösen Festgesteinsaquiferen gegeben. Am Ende wird die Schwierigkeit einer Anwendung auf reale Systeme aufgezeigt und die notwendige Erweiterung erläutert.

Wie bereits in Kapitel 1.1 beschrieben, werden heterogene Systeme wie z.B. Kluft-Matrix-Systeme mit einer begrenzten Anzahl beteiligter Komponenten (z.B. Makro-, Mikroklüfte und umgebende Gesteinsmatrix) betrachtet. Die vorgestellten Methoden und Modellansätze sind prinzipiell auch für strukturierte Lockergesteinsaquifere anwendbar. In diesen Systemen würden z.B. Makro-, Meso- und Mikroporen betrachtet. Der Einfachheit halber wird im weiteren Verlauf grundsätzlich der Begriff Festgesteinsaquifer zusammen mit den Begriffen Klüften und Matrix verwendet. Klüfte stehen dabei repräsen-

tativ für Trennflächen, Matrix steht für das die Klüfte umgebende Gestein.

2.2 Charakteristische Formen des integralen Stofftransportverhaltens bei zwei gekoppelten Komponenten

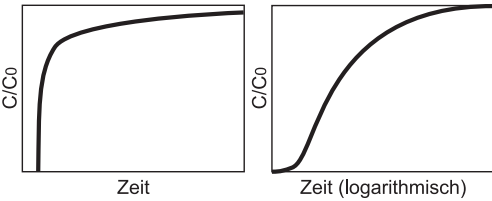
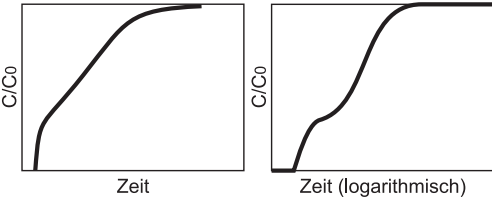
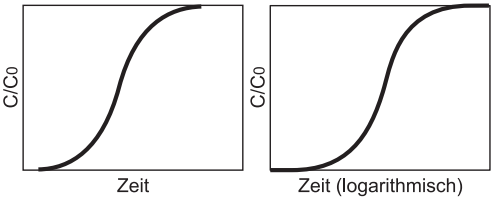
Die charakteristischen Formen des integralen Stofftransportes werden anhand der Tracerdurchbruchskurven für eine zeitlich unbegrenzte Tracerzugabe identifiziert (vgl. Tabelle 2.1) und dienen ebenso wie die charakteristischen Größen Mobilitätszahl N_M und bezogene Abbaulänge L^* (Kapitel 2.4) der Typisierung des Mehrkontinuum-Modells (BIRKHÖLZER, 1994b; JANSEN, 1999). Entsprechend dem qualitativen Verlauf der Tracerdurchbruchskurven wird jedes Paar gekoppelter Komponenten des Mehrkontinuum-Modells identifiziert als

1. single porös, single permeabel (SPSP)
2. doppelt porös, single permeabel (DPSP)
3. doppelt porös, doppelt permeabel (DPDP).

Wird ein doppelt poröser Aquifer als SPSP-System identifiziert, ist eine getrennte Modellierung der Komponenten nicht erforderlich. Innerhalb eines DPSP-Systems dominieren die diffusiven Austauschprozesse, und die Mobilität der untergeordneten Komponente ist vernachlässigbar. Die gekoppelten Komponenten werden in diesem Fall als Speichermodell abgebildet. Bei DPDP-Modellen ist der Anteil des

Fluidstroms in der untergeordneten Komponente zu berücksichtigen. Dies erfolgt durch die Abbildung des Systems als Mobilitätsmodell. In Abhängigkeit davon, ob ein Mobilitätsmodell oder ein Speichermodell zur Anwendung kommt, geben BIRKHÖLZER (1994b) und JANSEN (1999) bevorzugte Modelle zur numerischen Formulierung an (vgl. Anhang A.4).

Tabelle 2.1: Charakteristische Durchbruchkurven für Doppelkontinuum-Modelle nach JANSEN (1999)

Form der Tracerdurchbruchskurve	Charakteristische Größen	Austauschmodell
	$N_M \leq 0.001$ und $L^* > 1$	DPSP
	$0.001 < N_M \leq 0.5$ und $L^* > 1$	DPDP
	$N_M > 0.5$ oder $L^* \leq 1$	SPSP

BIRKHÖLZER (1994b) identifiziert für Kluft-Matrix-Systeme drei typisierte Verläufe für die Tracerdurchbruchskurve in Abhängigkeit von den charakteristischen Größen. Er wählt eine lineare Skalierung der Zeitachse. Die logarithmische Skalierung der Zeitachse ist eine weitere übliche Methode bei der Interpretation von Ganglini-

en und wird deshalb von JANSEN (1999) ebenfalls berücksichtigt (vgl. auch ABDASSAH & ERSHAGHI, 1986; BOULTON & STRELTSOVA, 1977; OSTENSEN, 1998; REIS, 1998; SAUVEPLANE, 1984; STRELTSOVA-ADAMS, 1978; WEIR, 1999). Mit Hilfe der logarithmischen Darstellung lassen sich die unterschiedlichen Zeitskalen besser abbilden. Die typisierten Verläufe und die dazugehörigen Größenordnungen der charakteristischen Größen, welche in den nachfolgenden Unterkapiteln vorgestellt werden, sind in Tabelle 2.1 aufgeführt.

2.3 Charakteristische Formen des integralen Stofftransportverhaltens bei drei gekoppelten Komponenten

JANSEN (1999) stellt in seiner Arbeit numerische Stofftransportberechnungen für einen Festgesteinsaquifer im Stubensandstein vor, für den ein Makrokluftsystem f_1 , ein Mikrokluftsystem f_2 und eine hydraulisch durchlässige und hochporöse Gesteinsmatrix m als hydraulische Aquiferkomponenten identifiziert werden. Die hierarchischen Kluftklassen f_1 und f_2 und die Gesteinsmatrix m werden als Dreikontinuum-System abgebildet und die Stofftransportberechnungen mit dem Mehrkontinuum-Modell STRAFE6 durchgeführt.

Im Mittelpunkt der Berechnungen steht die Untersuchung des integralen Stofftransportverhaltens für das Mehrkontinuum-System bei zeitlich unbegrenzter Tracerzugabe. Dazu werden in einer Parameterstudie für eine vereinfachte eindimensionale Betrachtung typische Stofftransportcharakteristika identifiziert.

Für das integrale Stofftransportverhalten des multiporösen Systems

werden drei Transportphasen identifiziert (vgl. Abbildung 2.1, „triple“ als Synonym zu „dreifach“). Die erste Phase ist durch einen raschen Anstieg („schnelles Durchschlagen“) der Konzentration am Beobachtungspunkt als Folge des schnellen Stofftransportes in der übergeordneten Komponente gekennzeichnet. Die zweite Phase ist durch die Austauschprozesse zwischen den Komponenten gekennzeichnet und wird in JANSEN (1999) als Interaktionsphase bezeichnet. Die dritte Phase wird als Homogenisierungsphase bezeichnet und ist durch einen homogenen Stofftransport im Aquifer als Folge des Abbaus der Konzentrationsgradienten zwischen den Komponenten gekennzeichnet.

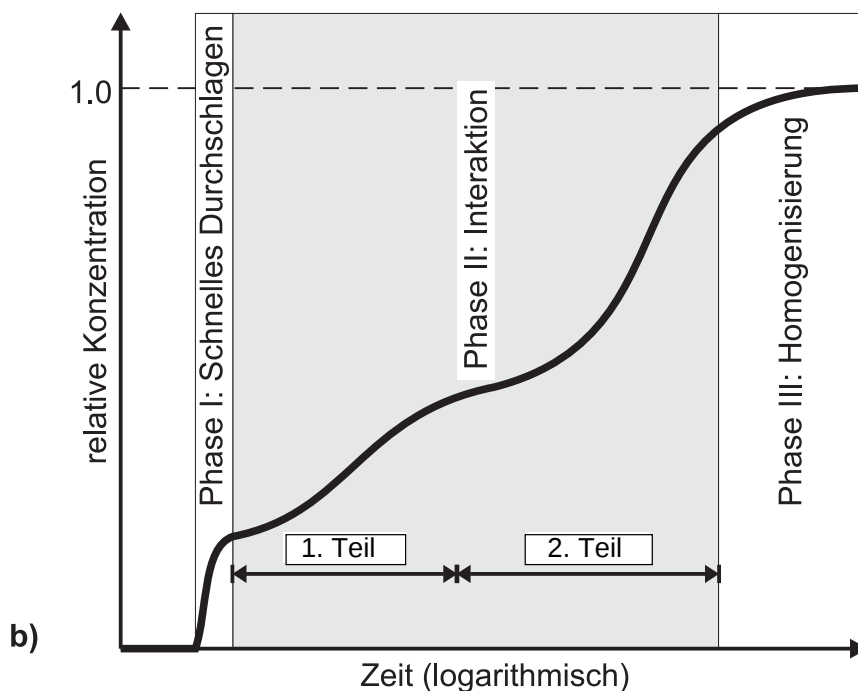
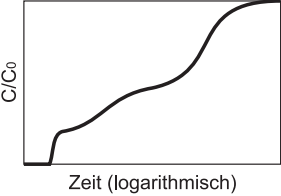
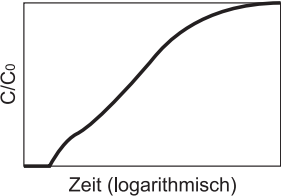
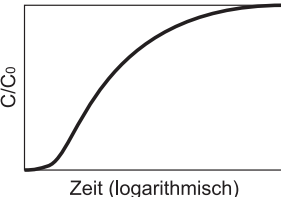


Abbildung 2.1: Typisierung des integralen Stofftransportverhaltens eines triple porösen, triple permeablen Systems nach JANSEN (1999)

Die Ergebnisse der Untersuchungen zum integralen Stofftransportverhalten fasst JANSEN (1999) wie folgt zusammen (vgl. auch Tabelle 2.2):

Tabelle 2.2: Charakteristische Durchbruchkurven für Dreikontinuum-Modelle nach JANSEN (1999)

Form der Tracerdurchbruchskurve	Charakteristische Größen	Austauschmodell
 Zeit (logarithmisch)	$0.001 \leq N_M < 0.5$ und $n_\alpha < n_\beta \wedge K_\alpha > K_\beta$ für $(\alpha = 2 \wedge \beta = 3) \vee (\alpha = 3 \wedge \beta = 2)$	TPTP
 Zeit (logarithmisch)	$0.001 \leq N_{M_{12}} < 0.5$ und $N_{M_{13}} \leq 0.001$ und $N_{M_{23}} \leq 0.001$	TPDP
 Zeit (logarithmisch)	$N_{M_{12}} < 0.001$ und $N_{M_{13}} < 0.001$	TPSP

1. TPTP-Systeme (triple porös, triple permeabel) weisen bei logarithmischer Skalierung der Zeitachse eine deutliche Unterteilung der Tracerdurchbruchskurve während der Interaktionsphase auf, wenn eine der untergeordneten Komponenten die höhere hydraulische Durchlässigkeit besitzt und die andere untergeordnete Komponente dagegen die höhere Porosität aufweist. Anderenfalls entspricht der Kurvenverlauf einem DPDP-System.
2. TPDP-Systeme (triple porös, doppelt permeabel) weisen bei logarithmischer Skalierung der Zeitachse einen nahezu linearen Verlauf der Tracerdurchbruchskurve auf.

3. TPSP-Systeme (triple porös, single permeabel) weisen einen raschen Anstieg der Tracerdurchbruchskurve und ein langes Tailing auf. Der Kurvenverlauf entspricht dem für DPSP-Modelle.
4. Während der Interaktionsphase werden die räumlichen Konzentrationsverteilungen in den Komponenten eindeutig von den Austauschprozessen bestimmt.

2.4 Charakteristische Größen zur Beschreibung von geklüfteten porösen Formationen

BIRKHÖLZER (1994b) führt zur Bestimmung der hydrogeologischen Eigenschaften der betrachteten Formationen verschiedene charakteristische Größen ein, die nachfolgend kurz vorgestellt und erläutert werden. Die betrachteten Formationen bestehen dabei aus maximal einer Kluft- und einer Matrixkomponente. JANSEN (1999) überprüft die Anwendbarkeit der Methode auch für Kluft-Kluft-Systeme und gliedert die paarweise Untersuchung mittels der charakteristischen Größen in eine systematische Typisierung von Systemen mit einer theoretisch unbegrenzten Anzahl beteiligter Komponenten ein.

Die charakteristischen Größen sind die Mobilitätszahl N_M , die Diffusions-Advektionszahl N_{DA} , die Aufladezeit T^* und die Abbaulänge L .

Die **Mobilitätszahl** N_M ist definiert als das Verhältnis der äquivalenten Strömungsgeschwindigkeiten in der untergeordneten (β) und übergeordneten (α) Komponente. Die Mobilitätszahl N_M ermöglicht die Charakterisierung der gekoppelten Komponenten bzgl. der Mo-

bilität des Fluids in der untergeordneten Komponente β und ist somit entscheidend für die Zuordnung eines Speicher- oder Mobilitätsmodells (vgl. Anhang A.3.2).

$$N_M = \frac{q_\beta}{q_\alpha} \quad (2.1)$$

Die **Diffusions-Advektionszahl** N_{DA} ist definiert als das Verhältnis von diffusiv und regional advektiv transferierter Masse in der untergeordneten Komponente. Dieser Parameter erlaubt die Charakterisierung der Wertigkeit der Austauschprozesse. Bei dieser Definition des Parameters wird eine stationäre Strömungssituation betrachtet, für die ein Massentransfer infolge lokaler Advektion nicht auftritt.

$$N_{DA} = \frac{M_D}{M_{Ar}} \quad (2.2)$$

Die **Aufladezeit** T^* ist ein charakteristischer Zeitmaßstab für die Dauer der Wechselwirkung zwischen den Komponenten. Zur Berechnung der Aufladezeit T^* wird die Kombination der Zeiten berücksichtigt, die ein Tracerpartikel benötigt, um den Weg der Länge s_{max} von der Blockoberfläche bis zur Blockmitte advektiv (T_A^*) bzw. diffusiv (T_D^*) zurückzulegen.

$$T^* = \frac{1}{\frac{1}{T_A^*} + \frac{1}{T_D^*}} \quad (2.3)$$

Die Aufladezeit ist abhängig von der Geometrie der Formation sowie von der Strömungsrichtung innerhalb des Untersuchungsgebietes.

Die **Abbaulänge** L ist ein charakteristischer Längenmaßstab zur Abschätzung der Transportentfernung, für den die Unterscheidung der Komponenten erforderlich ist. Die Bedeutung der Abhängigkeit des Modelltyps vom räumlichen Betrachtungsmaßstab der Modellierung zeigen z.B. auch TEUTSCH & SAUTER (1992). Nach einem empirischen Ansatz ist die Abbaulänge definiert als die Transportentfernung, für die am Einleitquerschnitt vorgegebene Konzentrationswerte der übergeordneten Komponente durch Austausch mit der untergeordneten Komponente auf 0.1% des Ausgangswertes abgebaut werden. Dabei werden die advective und die diffusive Abbaulänge berücksichtigt, die sich als Abbaulängen bei ausschließlicher Berücksichtigung der regionalen Advektion bzw. des diffusiven Stofftransfers ergeben. In der vorliegenden Arbeit wird die Abbaulänge zusätzlich in dimensionsloser Form verwendet und auf die betrachtete Transportentfernung zwischen Einlass und Messquerschnitt normiert. Die zu den bezogenen Abbaulängen gehörenden Formelzeichen sind L^* , L_A^* und L_D^* .

$$L = \frac{1}{\frac{1}{L_A} + \frac{1}{L_D}} \quad (2.4)$$

Detaillierte Ausführungen zu den charakteristischen Größen und deren Berechnung finden sich in den Arbeiten von BIRKHÖLZER (1994b) und JANSEN (1999).

2.5 Anwendbarkeit der Methoden

In der Fachliteratur sind eine Vielzahl von Tracerexperimenten auf der Labor- und Feldskala beschrieben (z.B. BECKER & SHAPIRO, 2000; BERKOWITZ ET AL., 2000; BIANCHI-MOSQUERA & MACKAY, 1994; CALLAHAN ET AL., 2000; DELAY ET AL., 1997; FEEHLEY ET AL., 2000; JACQUES ET AL., 1998; OSTENSEN, 1998). Diese beschreiben sowohl Versuche mit natürlichen Gradienten als auch mit erzwungenen Gradienten. Eine getrennte Identifikation der Komponenten oder die Aufzeichnung einer Durchbruchskurve zu zeitlich unbegrenzter Tracerzugabe ist innerhalb der Labor- und Feldexperimente oft nicht möglich. Gleiches gilt für das in Kapitel 3 vorgestellte Forschungsverbundprojekt „Festgesteins-Aquiferanalog“ (vgl. HEMMINGER ET AL., 1997; HÖTZL ET AL., 2000, 1998; KÖNGETER ET AL., 1997, 2000; NEUNHÄUSER ET AL., 2000; SAUTER ET AL., 2000; TEUTSCH ET AL., 1997). Für die Bestimmung der in Kapitel 2.4 vorgestellten charakteristischen Größen ist die getrennte Parameterbestimmung jedoch Voraussetzung. Daraus ergibt sich, dass die Methode der charakteristischen Größen nicht uneingeschränkt anwendbar ist. Die durch BIRKHÖLZER (1994b) und JANSEN (1999) gefundenen charakteristischen Durchbruchskurven (siehe Tabellen 2.1 und 2.2) könnten für eine erste Wahl eines geeigneten Modelltyps auch ohne die Möglichkeit der Bestimmung charakteristischer Größen verwendet werden, jedoch ist die experimentelle Ermittlung von Durchbruchskurven für eine zeitlich unbegrenzte Tracerzugabe in Feldversuchen eher schwierig zu realisieren. Eine derartige Versuchsdurchführung würde eine große Menge Tracer erfordern. Dies hätte Auswirkung auf die Kosten der Versuche und würde für weitere Versuche die Problematik der Reinigung des Versuchskörpers verursachen. Die Versuchsdauer ist nicht ausschlaggebend, da für die Aufzeichnung einer Tracerdurchbruchs-

kurve zu einer Impulseinleitung für eine vollständige Rückgewinnung die gleiche Versuchsdauer wie bei einer unbegrenzten Traceinleitung erforderlich ist.

Ziel der vorliegenden Arbeit ist es deshalb, die bestehende Methodik dahingehend zu erweitern, dass sie auch bei einer eingeschränkten Möglichkeit der Parametererkundung angewendet werden kann. Die Anwendbarkeit der durch BIRKHÖLZER (1994b) und JANSEN (1999) vorgestellten charakteristischen Durchbruchskurven für Zwei- bzw. Drei-Komponenten-Systeme steht dabei im Vordergrund.

Kapitel 3

Erkundung und Parameterbestimmung eines Festgesteinsaquifers

3.1 Einführung

Strömungs- und Transportprozesse in geklüfteten Festgesteinsaquiferen lassen sich unter natürlichen Bedingungen nur sehr schwer untersuchen. So ist aufgrund großer hydraulischer Kontraste zwischen gut durchlässigen Klüften bzw. Trennflächen und der meist nur sehr gering durchlässigen Gesteinsmatrix eine detaillierte Erkundung der Strömungs- und Transportpfade mit herkömmlichen Verfahren und Auswertemethoden, wie z.B. über Pumpversuche, oft nicht möglich. Dies ist zum einen darauf zurückzuführen, dass diese Untersuchungsmethoden stets integrale Werte der Strömungs- und Transportparameter, d. h. über Kluft- und Matrixanteile gemittelte Werte, für das Untersuchungsgebiet liefern. Zum anderen ist die Ausdehnung des mit den Messungen erfassten Bereiches nur schwer quantifizierbar, da es in Festgesteinsaquiferen aufgrund des im Allgemeinen größeren Durchlässigkeitskontrastes zu einer wesentlich stärkeren Ausbildung von bevorzugten Fließ- und Transportwegen als in Lockergesteinsaquiferen kommt. Hier kann teilweise mit alternativen

Untersuchungsansätzen, wie z. B. mit tomographischen geophysikalischen Methoden, eine höhere räumliche Auflösung in der Erkundung erreicht werden. In Festgesteinsaquiferen können jedoch auch mit diesen Methoden die einzelnen Fließpfade nur bedingt detektiert werden.

Nachfolgend wird am Beispiel des Forschungsverbundprojektes „Festgesteins-Aquiferanalog“ der Deutschen Forschungsgemeinschaft (HEMMINGER ET AL., 1997; HÖTZL ET AL., 2000, 1998; KÖNGETER ET AL., 1997, 2000; NEUNHÄUSER ET AL., 2000; SAUTER ET AL., 2000; TEUTSCH ET AL., 1997) ein Einblick in die Erkundung und Parameterbestimmung eines Festgesteinsaquifers durch Labor- und Feldexperimente kombiniert mit numerischen Untersuchungen gegeben.

3.2 Der Festgesteins-Aquiferanalog-Ansatz

Der Festgesteins-Aquiferanalog-Ansatz basiert auf der Betrachtung eines gut zugänglichen Aufschlussbereichs (Steinbruch), dessen lithologische und sedimentologische Eigenschaften analog auf natürliche Aquiferbereiche, die nicht oder nur über einige wenige Bohrungen zugänglich sind, übertragen werden können. Im Aquifer-Analog können aufgrund der relativ einfachen Erkundung sehr hochwertige, hochauflösende Datensätze gewonnen werden. Diese enthalten sowohl geometrische Informationen zum Kluftinventar und zur Gesteinsmatrix in verschiedenen Messskalen als auch die dazugehörigen hydraulischen und transportrelevanten Kennwerte. Besonders wichtig ist dabei, dass die dazugehörigen Experimente unter gut kontrollierten Bedingungen in verschiedenen Untersuchungsmaßstäben

(Labor- bis Feldmaßstab) durchgeführt werden können.

Die interaktiven numerischen und hydrogeologischen Untersuchungen für den Aquiferanalog umfassen alle relevanten Skalen und bieten in ihrer Gesamtheit eine sehr hohe Datendichte zur Beschreibung der Strömungs- und Transporteigenschaften des Aquifers. Abbildung 3.1 verdeutlicht den Aufbau der Aquiferanalog-Studie. Zudem erlaubt die hohe Datendichte des Aquiferanalog, durch aufeinander abgestimmte experimentelle und numerische Untersuchungen zu beurteilen, welche Daten bzw. Parameter mit hydrogeologischen Methoden in einem realen Aquifer tatsächlich erfassbar sind und inwiefern numerische Modelle auf der Basis einer geringen Datendichte zuverlässige Modellprognosen erstellen können.

3.3 Zielsetzung und Arbeitsteilung im Projektverbund

Die Zielsetzung des Projektverbundes „Festgesteins-Aquiferanalog“ besteht in der Verbesserung des Verständnisses der Abhängigkeit der Strömungs- und Transportprozesse von verschiedenen Aquiferparametern sowie von deren räumlicher Variabilität. Die Projektziele sollen über die Verknüpfung von Experiment und Modellierung erreicht werden. In sämtliche Untersuchungen eingebunden sind dabei die Identifizierung der wichtigsten Prozesse, die Vertiefung des Verständnisses der Skalenwechselwirkung, d. h. des Zusammenhanges zwischen den effektiven Parameterwerten kleiner und großer Gesteinsbereiche, sowie ganz allgemein die Weiterentwicklung von Erkundungsmethoden und Modellierungsansätzen zur Charakterisierung von Festgesteinsaquiferen. Um diese Arbeiten erfolgreich durchführen zu können, ist eine möglichst genaue Kenntnis der

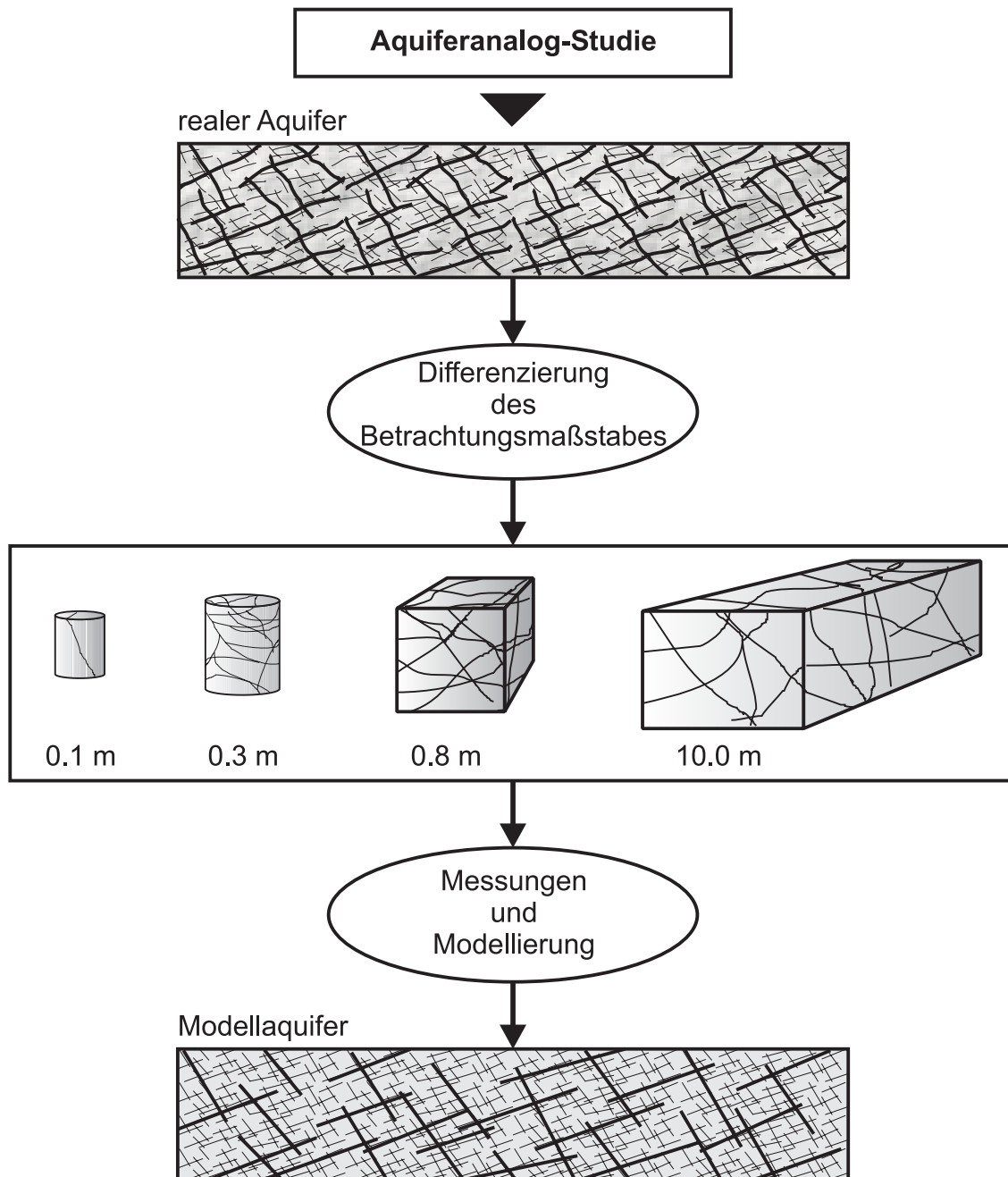


Abbildung 3.1: Aufbau der Aquiferanalogstudie aus JANSEN (1999)

Kluft-Matrix-Verteilung und Kluftgeometriecharakteristik erforderlich. Da diese Parameter in situ kaum eindeutig bestimmt werden können, wird für die Untersuchungen im Rahmen des Projektverbundes der sogenannte Festgesteins-Aquiferanalog-Ansatz verwendet. Dieser bietet den Vorteil, dass hochaufgelöste, naturnahe Referenzdatensätze unter kontrollierten Bedingungen geschaffen werden können. Zur Erreichung der Zielsetzung des Projektverbundes haben sich vier Projektpartner zusammengeschlossen (vgl. Abbildung 3.2). Die experimentellen Untersuchungen auf der Labor- und Feldskala werden von den Teilprojekten (TP) Tübingen und Karlsruhe durchgeführt (vgl. HÖTZL ET AL., 2000, 1998; SAUTER ET AL., 2000; TEUTSCH ET AL., 1997). Auf den Längenskalen werden sowohl unterschiedliche Messtechniken erprobt und weiterentwickelt als auch Datensätze zur strukturellen und prozessorientierten Charakterisierung (Geometriedaten, Materialeigenschaften, Strömungs- und Transportparameter) gewonnen. Die Modelluntersuchungen der Teilprojekte Aachen und Stuttgart basieren auf diesen Daten (vgl. HEMMINGER ET AL., 1997; KÖNGETER ET AL., 1997, 2000; NEUNHÄUSER ET AL., 2000). Die Aufgaben der Teilprojekte und die Interaktion zwischen den Teilprojekten kann Abbildung 3.2 entnommen werden.

Der Schwerpunkt der vorliegenden Arbeit liegt auf der Charakterisierung eines Aquifers anhand von Tracerdurchbruchskurven zur Identifikation eines geeigneten Mehrkontinuum-Ansatzes unter Berücksichtigung limitierter Erkundungsmöglichkeiten. In den folgenden Unterkapiteln werden dementsprechend die experimentellen Untersuchungen auf den verschiedenen Längenskalen vorgestellt.

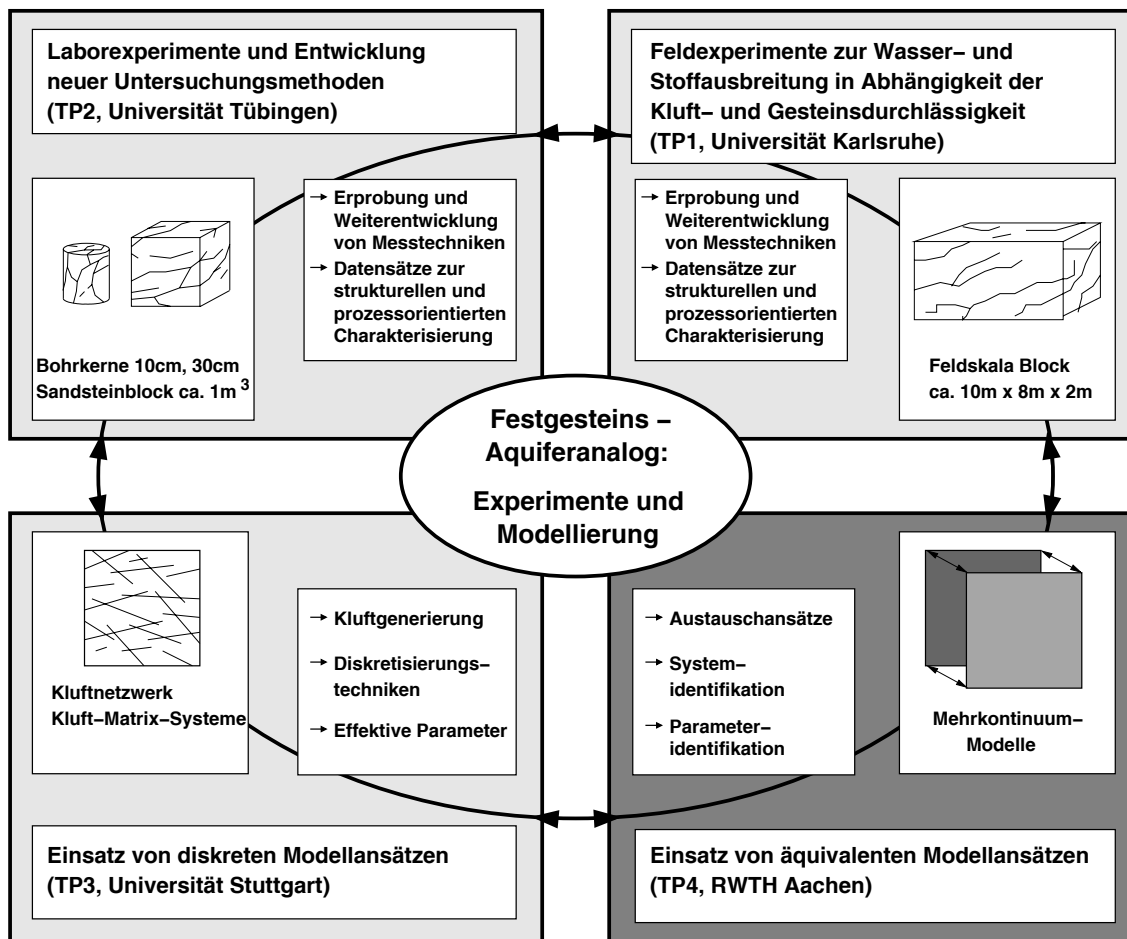


Abbildung 3.2: DFG-Verbundprojekt „Festgesteins-Aquiferanalog“: Projektpartner und Projektstruktur nach SILBERHORN-HEMMINGER (2002)

3.4 Bohrkernskala

3.4.1 Übersicht

Die Experimente auf der Bohrkernskala erfolgen an Proben mit 10 cm und 30 cm Durchmesser. Die Untersuchungen im kleinskaligen Bohrkernmaßstab dienen zum Vergleich der Ermittlung von Durchlässigkeitswerten mit und ohne Kenntnis über die Kluftnetzstruktur der Proben. Für die kleinskaligen Bohrkernkerne werden sowohl Versu-

che mit Gas als auch mit Wasser durchgeführt, um Zusammenhänge zwischen pneumatisch und hydraulisch bestimmten Permeabilitäten quantifizieren zu können (vgl. BARAKA-LOKMANE, 1999). An den 30cm-Proben (Bench-Scale) werden Versuche durchgeführt, die eine dreidimensionale Charakterisierung der räumlichen Parametervariabilität zulassen. Die angewandte Versuchstechnik (vgl. MCDERMOTT, 1999; TEUTSCH ET AL., 1997) entspricht einem dreidimensionalen tomographischen Verfahren.

3.4.2 Versuche an kleinskaligen Bohrkernen

Die effektiven Parameter des Kluft-Matrix-Systems werden in einer speziell konstruierten Versuchszelle bestimmt, die auf der Grundlage einer Triaxialzelle entwickelt worden ist (TEUTSCH ET AL., 1997). Es werden Durchströmungsversuche bei stationärer Potentialdifferenz zwischen Probenein- und Probenausgang gefahren. Aus den Versuchen wird die Permeabilität der Proben bestimmt. Für die kleinskaligen Bohrkern wird des Weiteren mittels Harzausgusstechnik und Bildanalyse die diskrete Kluftnetzstruktur bestimmt.

3.4.3 Versuche an Bench-Scale-Proben

Zur Bestimmung der Strömungs- und Transportparameter der Bench-Scale-Proben mit einem Durchmesser von ca. 30cm und einer Höhe von ca. 40cm werden Gase und Gastracer als Testfluide verwendet. Die Konzeption der Versuche lässt eine dreidimensionale Charakterisierung der räumlichen Parametervariabilität zu. Der Aufbau zur Durchführung von Gasströmungs- und Transportver-

suchen kann Abbildung 3.3 entnommen werden. Der grundlegende Vorteil dieses Versuchsaufbaus besteht in der Gestaltung der Versuchszelle (MIOJ - Multi Input Output Jacket) und wird detailliert in MCDERMOTT (1999) beschrieben. Die Versuchszelle schließt die Probe fest ein und lässt dreidimensionale Untersuchungen zu. Die aus der Gummiummantelung ausgeschnittenen Bereiche (Ports) werden für die Zugabe bzw. Entnahme des Trägerfluids sowie des Tracers benutzt. Mit dieser Messanordnung kann durch Kombination von verschiedenen Ports die Orientierung des Fließfeldes geändert und somit die hydraulische Durchlässigkeit für unterschiedliche Raumrichtungen bestimmt werden.

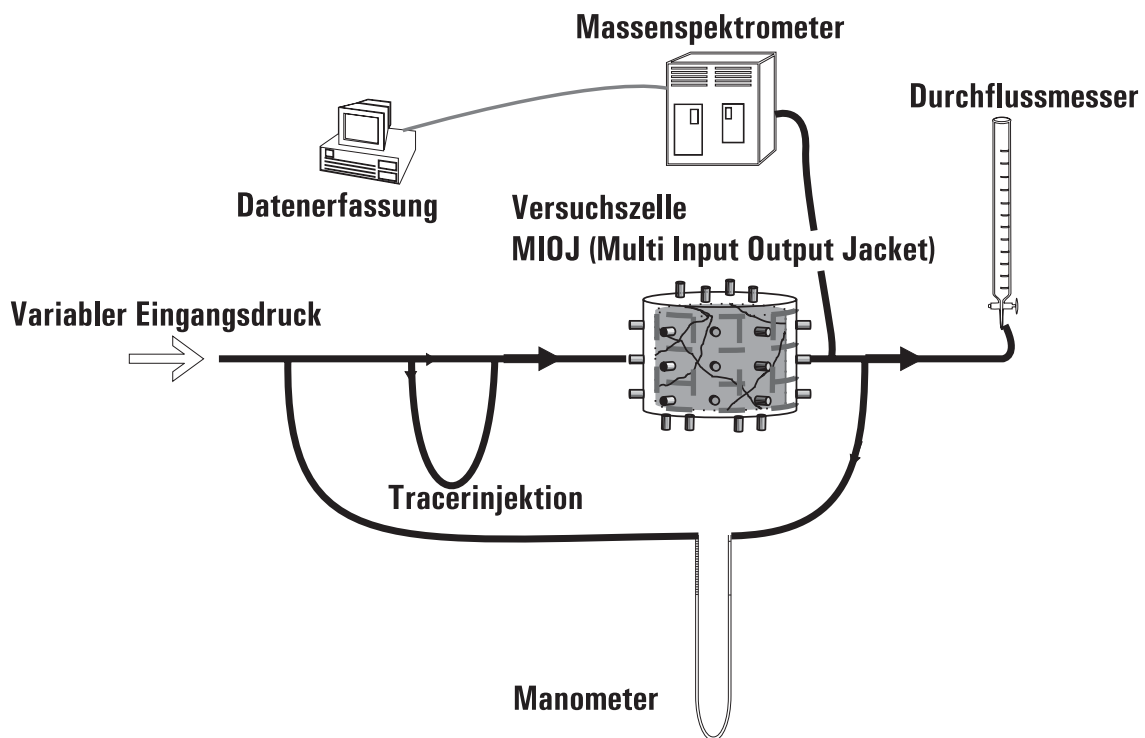


Abbildung 3.3: Aufbau zur Durchführung von Gasströmungs- und Transportversuchen nach MCDERMOTT (1999)

3.4.4 Numerische Experimente an Bench-Scale-Proben

Zu einem ausgewählten Bohrkern präsentieren die Teilprojekte Stuttgart und Aachen verschiedene numerische Untersuchungen (KÖNGETER ET AL., 2000; NEUNHÄUSER ET AL., 2000). Für die numerischen Modelle wird die in Abbildung 3.4 dargestellte Topfläche der Probe *He2* (aus einem Steinbruch in Herrenberg bei Tübingen, Probe 2 von 5) in einer Dicke von 0.05 m zu einem zweidimensionalen Modellgebiet aufgebaut. In dieser obersten Bohrkernschicht befinden sich insgesamt neun Ports. Zu den in Abbildung 3.4 gekennzeichneten Ports 1, 4, 10 und 16 werden im Labor Durchfluss und Tracerdurchbruchskurven zu den Konfigurationen 1-4, 1-10 und 1-16 gemessen. Die Tracerzugabe erfolgt als Impulszugabe nach dem Aufbau eines stationären Strömungsfeldes durch die Zugabe eines definierten Tracervolumens mit einem Bypass. Diese drei Konfigurationen werden im numerischen Experiment nachgebildet.

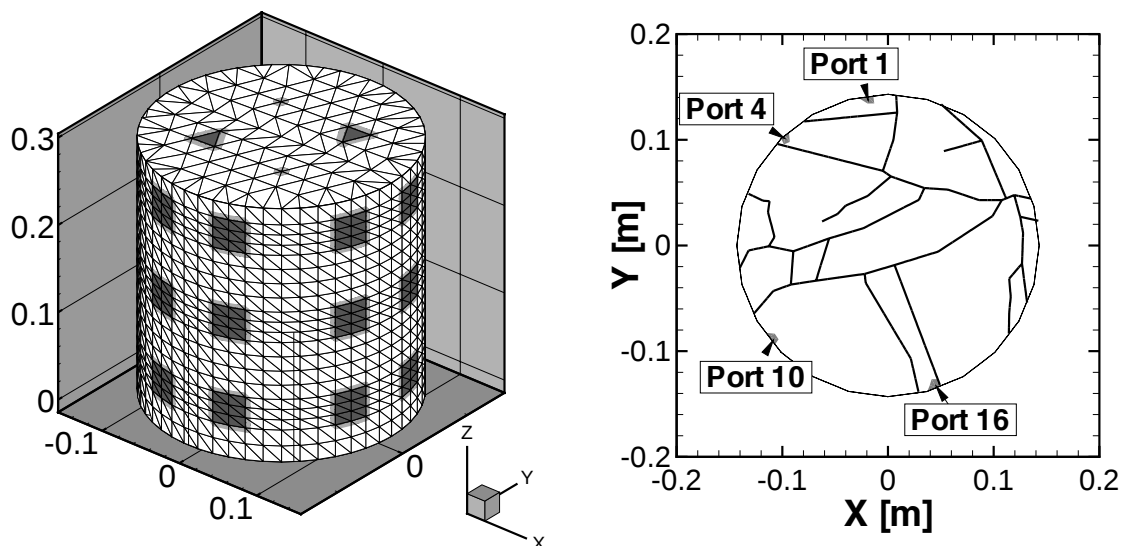


Abbildung 3.4: Räumliche Lage der ausgewählten Ports; 3D-Ansicht (links) und Topfläche (rechts) nach KÖNGETER ET AL. (2000)

Die numerischen Untersuchungen dienen der Verbesserung des Prozessverständnisses und der Ermittlung äquivalenter hydraulischer Parameter. Es werden sowohl numerische Gastracertests als auch Tests mit dem Trägerfluid Wasser durchgeführt. Eine Charakterisierung der Proben als DPSP-, DPDP bzw. SPSP-System erfolgt ausschließlich auf der Basis der diskreten numerischen Untersuchungen mit einer kontinuierlichen Tracerzugabe (KÖNGETER ET AL., 2000; NEUNHÄUSER ET AL., 2000).

3.5 Skala des Laborversuchsblocks

3.5.1 Übersicht

Die nächstgrößere betrachtete Skala innerhalb des Verbundprojektes bilden zwei präparierte Laborversuchsblöcke. Der erste Block hat die Abmessungen $0.8\text{ m} \times 0.9\text{ m} \times 0.8\text{ m}$ (1 m-Laborversuchsblock) und der zweite, zum Ende der zweiten Projektphase hergestellte Block, hat die Abmessungen $0.6\text{ m} \times 0.6\text{ m} \times 0.6\text{ m}$ (DIETRICH ET AL., 2000; SAUTER ET AL., 2000). Die nachfolgenden Ausführungen beziehen sich auf den erstgenannten Block. Zu dem Block mit einer einheitlichen Kantenlänge von 0.6 m sind die Untersuchungen noch nicht abgeschlossen und bislang nicht veröffentlicht.

3.5.2 1m-Laborversuchsblock

Die Aufnahme des Kluftnetzwerkes des ersten Blocks (1 m-Laborversuchsblock) vor der Harzeinkapselung kann Abbildung 3.5 entnommen werden. Die durchgezogenen schwarzen Linien kennzeichnen

verfüllte und offene Kluftstrukturen. Das Raster markiert die Lage der 16 auf jeder Seite zur Versuchsdurchführung präparierten Ports. Die unterbrochenen Linien zeigen Ausbruchstellen oder Schichtgrenzen an. Die kreisförmigen Ports (nicht gesondert dargestellt) haben einen Durchmesser von 3 cm. Eine Abdichtung des Blocks erfolgt durch eine Harzummantelung. An dem Laborversuchsblock werden zwei Typen von Experimenten durchgeführt, und zwar tomographische Gasströmungs- und Transportversuche analog zu den Bench-Scale-Proben und Strömungsexperimente mit radialsymmetrischen Fließfeldern. Die Tracerzugabe erfolgt wie bereits für die Bench-Scale-Proben nach dem Aufbau eines stationären Strömungsfeldes zwischen den Eingabe- und Entnahmeports durch die Zugabe eines definierten Tracervolumens über einen Bypass.

3.5.3 Numerische Experimente an dem 1m-Laborversuchsblock

KÖNGETER ET AL. (2000) präsentieren erste numerische Untersuchungen an dem 1 m-Laborversuchsblock. Diskrete Berechnungsergebnisse zum Laborversuchsblock liegen bislang nicht vor. Die Parameterermittlung für ein zunächst untersuchtes Einkontinuum-Modell erfolgt direkt aus den Laboruntersuchungen.

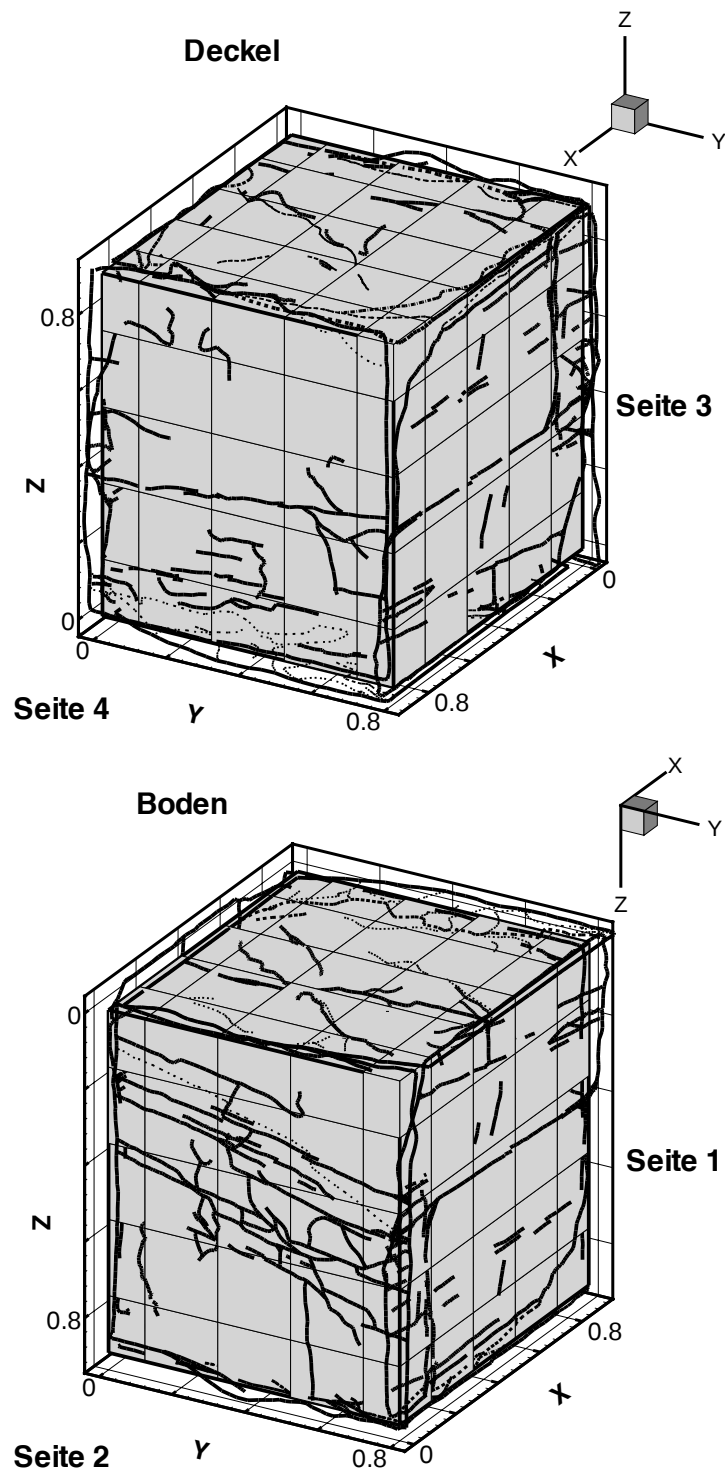


Abbildung 3.5: Ansicht des Laborversuchsblocks von oben und unten mit Port-Raster nach KÖNGETER ET AL. (2000)

3.6 Skala des Feldversuchsblocks

3.6.1 Übersicht

Die größte untersuchte Skala (10 m) innerhalb des Forschungsprojektes „Festgesteins-Aquiferanalog“ wird durch den Feldversuchsblock gebildet. Angaben zur Herstellung des Feldversuchsblocks finden sich in HÖTZL ET AL. (2000, 1998). Abbildung 3.6 zeigt zwei Ansichten des Feldversuchsblocks vor der Einkapselung.



Abbildung 3.6: Ansicht des Feldversuchsblocks von Süden (links) und von Osten (rechts) nach HÖTZL ET AL. (2000)

3.6.2 Messungen am Feldversuchsblock

Zunächst werden zusätzlich zur bereits bestehenden Bohrung *B1* ausschließlich in den Randbereichen des Feldversuchsblocks die fünf in Abbildung 3.7 dargestellten Bohrungen abgeteuft, um das Fließfeld für die Versuche nicht durch künstliche Wegsamkeiten zu stören. Die Bohrungen können wiederum als Tracerinjektions- bzw. Tracerdetek-

tionspunkte dienen. Für weitere Untersuchungen sind zusätzliche Bohrungen im Block vorgesehen.

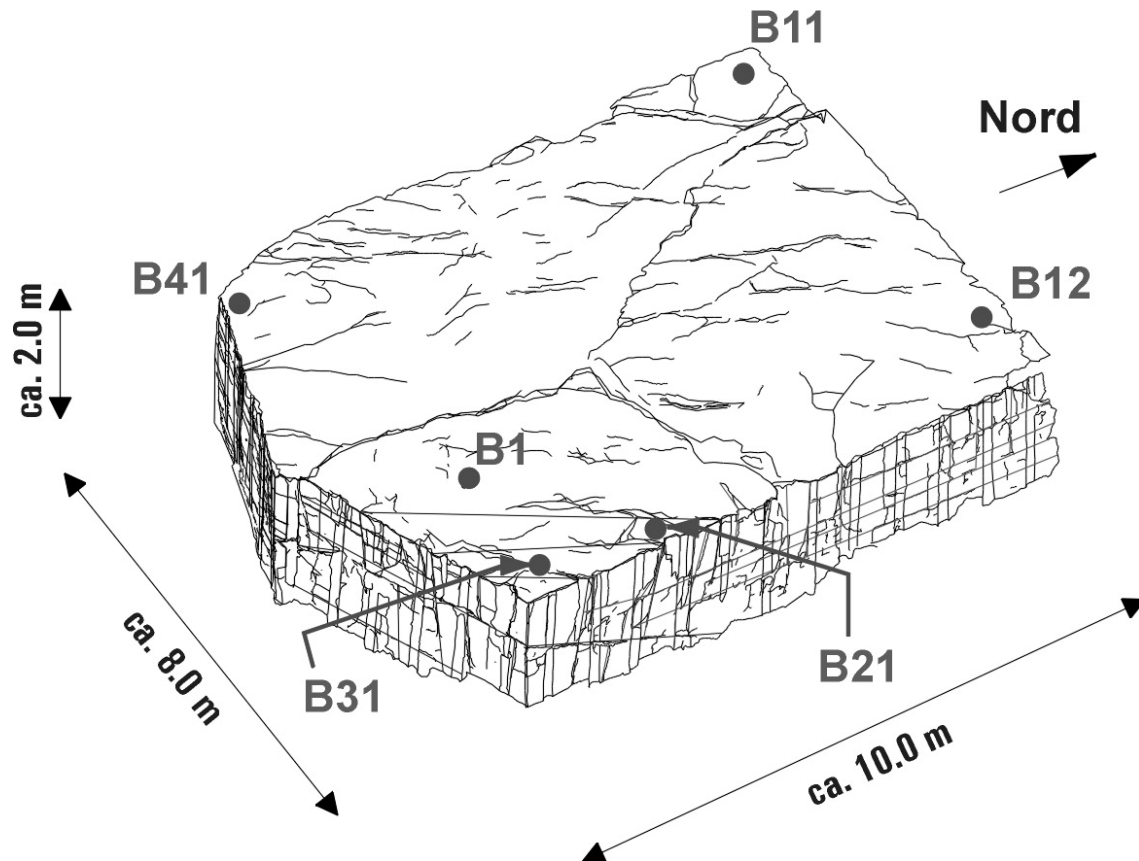


Abbildung 3.7: Ansicht des Feldversuchsblocks mit Markierung ausgewählter Bohrungen nach HÖTZL ET AL. (2000)

Die Aufnahme der Kluftspuren des Feldversuchsblocks erfolgt vor der Einkapselung durch Scanline-Messungen und stereophotogrammetrische Aufnahmen. Zusätzlich erfolgen am abgedichteten Feldversuchsblock Georadar-Messungen zur Detektion von Trennflächen und Sedimentstrukturen.

Die Gastracerversuche werden in Analogie zu den Laborversuchen des Teilprojektes Tübingen als Tomographie des Feldversuchsblocks durchgeführt. In dem ungesättigten Feldversuchsblock wird

ein Fließfeld durch die Förderung von Luft an einem Absaugbrunnen erzeugt, während ein zweiter Brunnen als Eingabebrunnen dient, in den der Tracer drucklos eingegeben wird. Die Tracerzugabe erfolgt bei konstanter Zuflussrate für eine vorgegebene Zeit.

3.6.3 Numerische Untersuchungen am Feldversuchsblock

NEUNHÄUSER ET AL. (2000) und SILBERHORN-HEMMINGER (2002) stellen die Entwicklung eines Kluftstrukturmodells für den Feldversuchsblock vor. Aus dem dreidimensionalen Kluftnetzwerk wird zunächst eine zweidimensionale Ebene, die sich zwischen den Bohrungen B21 und B31 aufspannt, extrahiert. Für diesen Bereich werden numerische Untersuchungen mit einem diskreten Modellansatz durchgeführt.

3.7 Diskussion

Es zeigt sich für das Beispiel der Erkundung und Parameterbestimmung eines Festgesteinsaquifers auf der Grundlage des Forschungsverbundprojektes „Festgesteins-Aquiferanalog“, dass die Charakterisierung eines Aquifers anhand von Tracerdurchbruchskurven bei zeitlich begrenzter Tracerzugabe sinnvoll ist. Für die Untersuchungen auf den unterschiedlichen Skalen liegen jeweils Tracerdurchbruchskurven bei Impulseinleitung vor, jedoch keine Experimente mit zeitlich unbegrenzter Tracerzugabe. Eine getrennte Ermittlung von Kluft- bzw. Matrixparametern zur Bestimmung der charakteristischen Größen (vgl. Kapitel 2.4) ist nur bedingt möglich.

Kapitel 4

Transformation der Durchbruchskurve bei impulsartiger Tracerzugabe

4.1 Einführung

In diesem Kapitel werden Untersuchungen an einem eindimensionalen Untersuchungsgebiet zur Analyse von Tracerdurchbruchskurven vorgestellt. Den Untersuchungen geht eine Betrachtung der allgemeinen Advektions-Dispersions-Gleichung voraus. Eine analytische Lösung für einfache hydraulische Systeme wird vorgestellt und für die systematischen Untersuchungen angewendet.

Analytische Lösungen der Advektions-Dispersions-Gleichung existieren für eine Vielzahl verschiedener Problemstellungen mit unterschiedlichen Formen der Schadstoffquelle bei Berücksichtigung verschiedener räumlicher Dimensionen. Als Referenz seien z.B. genannt: GONZALEZ-HERRERA (2001); LEIJ ET AL. (1991, 1993); LINDSTROM F.T. & BOERSMA L. (1989); OGATA & BANKS (1961); PARK & ZHAN (2001); PARKER & VAN GENUCHTEN (1984); SUDICKY & FRIND (1982); VAN GENUCHTEN & ALVES (1982); ZOPPOU & KNIGHT (1997, 1999)

Die nachfolgenden Untersuchungen führen zu einer Verallgemeinerung bzw. Erweiterung der Typisierungsmethode multiporöser Aquifersysteme. Das Ziel der Erweiterung der bestehenden Typisierungsmethode ist die Transformation des Antwortsignals einer Impulseinleitung in das bereits detailliert untersuchte Antwortsignal einer zeitlich unbegrenzten Tracerzugabe (vgl. BIRKHÖLZER, 1994b; JANSEN, 1999), um so die bestehende Methode zur Identifikation der Anzahl der beteiligten Komponenten anwenden zu können.

Im folgenden Abschnitt wird für die systematische Erweiterung der Typisierungsmethode zunächst ein stark vereinfachtes hydraulisches System betrachtet. Das zugrunde gelegte System besteht aus einem semifiniten eindimensionalen, homogenen, isotropen Aquifer mit einem stationären Strömungsfeld. Für diesen Aquifer werden Transportkonfigurationen mit zeitlich unbegrenzter Tracereinleitung und Impulseinleitung am Rand untersucht. Den Untersuchungen liegt eine analytische Lösung für die eindimensionale Transportfeldgleichung zugrunde.

4.2 Analytische Lösung für die 1D Transportfeldgleichung

4.2.1 Zugrunde liegende Gleichungen

Die allgemeine Advektions-Dispersions-Gleichung für ein Kontinuum lautet unter der Annahme konstanter Porosität (vgl. z. B. FREEZE & CHERRY, 1979):

$$n \frac{\partial C}{\partial t} + q \frac{\partial C}{\partial x_i} - \frac{\partial}{\partial x_i} D_{ij} \frac{\partial C}{\partial x_j} + Q_{Q,S}(C_R - C) = 0 \quad (4.1)$$

Für die vorliegende Arbeit wird bei der Formulierung der Konzentration C die flussgemittelte Konzentration verwendet. Eine weitere übliche Formulierung ist die volumengemittelte Konzentration. Eine ausführliche Diskussion zum Ansatz der fluss- bzw. volumengemittelten Konzentration in Zusammenhang mit der Formulierung analytischer Lösungen findet sich z.B. in PARKER & VAN GENUCHTEN (1984).

Für eine eindimensionale Problemstellung ohne Quell-/Senkenterm und nach Division durch die Porosität n reduziert sich Gleichung (4.1) zu:

$$\frac{\partial C}{\partial t} + v \frac{\partial C}{\partial x} - \frac{\partial}{\partial x} D_{eff} \frac{\partial C}{\partial x} = 0 \quad (4.2)$$

In Gleichung (4.2) bezeichnet v die Abstandsgeschwindigkeit und D_{eff} den effektiven Dispersionskoeffizienten, der sich zu

$$D_{eff} = \alpha_l \frac{v^2}{|v|} + D_{mol} \quad (4.3)$$

ergibt.

Der effektive Diffusionskoeffizient D_{mol} eines Stoffes im Gestein ergibt sich aus der Tortuosität und dem stoffspezifischen Diffusionskoeffizienten. Dabei wird der Tortuositätskoeffizient von der Struktur und Textur des Gefüges bestimmt (vgl. BIRKHÖLZER, 1994b; EINSELE & SAUTER, 1992).

4.2.2 Anfangs- und Randbedingungen der analytischen Lösung

PARKER & VAN GENUCHTEN (1984) formulieren zu Gleichung (4.2) folgende Rand- und Anfangsbedingungen für die Herleitung der analytischen Lösungen zu einer Impulseinleitung:

$$C(x, 0) = 0 \quad (4.4)$$

$$\frac{\partial C}{\partial x}(\infty, t) = 0 \quad (4.5)$$

$$C(0, t) = \begin{cases} C_0 & : 0 < t \leq t_0 \\ 0 & : t > t_0 \end{cases} \quad (4.6)$$

Die Lösung für Gleichung (4.2) mit den Rand- und Anfangsbedingungen nach den Gleichungen (4.4) bis (4.6) geben PARKER & VAN GENUCHTEN (1984) wie folgt an:

$$C(x, t) = \begin{cases} C_0 B(x, t) & : 0 < t \leq t_0 \\ C_0 B(x, t) - C_0 B(x, t - t_0) & : t > t_0 \end{cases} \quad (4.7)$$

mit

$$B(x, t) = \frac{1}{2} \operatorname{erfc} \left[\frac{x - vt}{2\sqrt{D_{eff}t}} \right] + \frac{1}{2} e^{\frac{vx}{D_{eff}}} \operatorname{erfc} \left[\frac{x + vt}{2\sqrt{D_{eff}t}} \right] \quad (4.8)$$

4.2.3 Transformation der Lösung

Für die vorliegende Problemstellung der Transformation der Lösung einer Impulseinleitung in die Lösung der zeitlich unbegrenzten Tracerzugabe besteht der Grundgedanke darin, den Faltungssatz anzu-

wenden. Für eine gesuchte Funktion $C_f(x, t)$ gilt unter Anwendung des Faltungssatzes (vgl. z. B. STÖCKER, 1995; SUDICKY, 1989):

$$C_f(x, t) = \int_0^t C_\delta(x, \tau) C_{f0}(0, t - \tau) d\tau \quad (4.9)$$

Dabei bedeuten C_δ die Lösung für einen DIRAC-Impuls und C_{f0} eine beliebige Randbedingungsfunktion zur gesuchten Funktion C_f . Ist die gesuchte Funktion die Lösung für eine unendlich lange Tracerzugabe, so gilt zu jedem Zeitpunkt t , dass die Randbedingungsfunktion $C_{f0} = C_0 = \text{konstant}$ ist. Daraus folgt dann, dass sich die Lösung für eine unendlich lange Tracerzugabe direkt aus der Integration der Lösung eines DIRAC-Impulses über t ergibt.

$$C_{f\infty}(x, t) = C_0 \int_0^t C_\delta(x, \tau) d\tau \quad (4.10)$$

Für Labor- und Feldversuche sowie auch für das in dieser Arbeit zur Anwendung kommende Finite-Elemente-Modell STRAFE6 ist ein echter DIRAC-Impuls nicht realisierbar. Je kleiner jedoch die Zeit t_0 bei einer Impulszugabe wird, umso ähnlicher ist dieser einem echten DIRAC-Impuls. Es gilt also folglich zu untersuchen, für welche t_0 bei einer gegebenen Parameterkombination (x_0, v, D_{eff}) , bzw. für welche x_0 (Transportentfernung) bei vorgegebener Impulsdauer, eine Integration über die Messdauer t hinreichend genau die Lösung der unendlichen Tracerzugabe liefert. Im Folgenden werden also die Lösung der unendlichen Tracerzugabe

$$\frac{C_{f\infty}(x, t)}{C_0} = B(x, t) \quad (4.11)$$

und die aufintegrierte, normierte Lösung für eine Impulseinleitung der Dauer t_0 , bezeichnet als

$$I_C = \frac{1}{t_0} \int_0^t \begin{array}{ll} B(x, \tau) d\tau & : 0 < \tau \leq t_0 \\ [B(x, \tau) - B(x, \tau - t_0)] d\tau & : \tau > t_0 \end{array} \quad (4.12)$$

einander gegenübergestellt.

4.3 Vorstellung der systematischen Untersuchungen

Die nachfolgend vorgestellten Untersuchungen mit der analytischen Lösung nach PARKER & VAN GENUCHTEN (1984) werden mit den in Tabelle 4.1 aufgeführten Parametern durchgeführt. Die gewählte Größenordnung der Filtergeschwindigkeiten v_f und Dispersivitäten entspricht der des später präsentierten synthetischen Kluftaquifers (Kapitel 5.2) im Falle einer Einkontinuum-Modellierung mit einem homogenen Ersatzmedium.

Tabelle 4.1: Zuordnung der Aquiferparameter zu den Varianten 1-9 für die Untersuchung mit der analytischen Lösung

VAR1-9			
Porosität	n	$[-]$	6.20e-02
effektiver Diffusionskoeffizient	D_{mol}	$[m^2/s]$	4.60e-09
Dispersionskoeffizient und Filtergeschwindigkeit			
$\alpha_l [m] \setminus v_f [m/s]$	1.00e-08	5.00e-08	1.00e-07
3.50e+01	VAR1	VAR4	VAR7
5.00e+00	VAR2	VAR5	VAR8
5.00e-01	VAR3	VAR6	VAR9

Für die hier mit der analytischen Lösung untersuchte Fragestellung steht zunächst nicht der direkte Bezug zu einem Festgesteinsaquifer im Vordergrund. Vielmehr werden verschiedene Charakteristika der Tracerdurchbruchskurven durch die entsprechende Parameterwahl abgedeckt. Es ergeben sich neun Varianten, die sich hinsichtlich der Geschwindigkeiten und Dispersivitäten unterscheiden. Tabelle 4.1 kann entnommen werden, dass die in einer Zeile aufgeführten Varianten, z. B. VAR2, VAR5 und VAR8, jeweils die gleiche Dispersivität aufweisen. Die in einer Spalte angeordneten Varianten, z. B. VAR7, VAR8 und VAR9, besitzen jeweils die gleiche Geschwindigkeit. Die Porosität und der Diffusionskoeffizient werden konstant gehalten.

4.4 Auswertung der Ergebnisse

Die Auswertung der Ergebnisse erfolgt jeweils für eine bestimmte Messstrecke in Strömungsrichtung x in Form von Durchbruchskurven sowie durch dreidimensionale Darstellungen der Abhängigkeit Messdauer-Impulsdauer-Messstrecke. Mit Hilfe dieser Darstellungsart kann eine Aussage zur Qualität der Approximation einer kontinuierlichen Einleitung aus der Messung einer Impulseinleitung für definierte Parameterkonfigurationen (x_0, t_0) getroffen werden.

Eine explizite Formulierung für I_C (Gleichung 4.12) liegt nicht vor. Die Berechnung erfolgt numerisch mit Hilfe eines Fortran77-Programms unter Einbindung der NAG Fortran Library (NUMERICAL ALGORITHMS GROUP, 1999). Die Messstrecke wird durch die Angabe der doppelten Entfernung benannt. So ist die Angabe 02 gleichbedeutend mit einer Transportentfernung bzw. Messstrecke von $x_0 = 1.0\text{ m}$. Die gewählte Benennung geschieht aus

Konsistenzgründen vorausgreifend auf die in Kapitel 5 vorgestellten numerischen Untersuchungen mit STRAFE6.

In Abbildung 4.1 werden zunächst zur Veranschaulichung der untersuchten Zusammenhänge Ergebnisse für die Variante 1 in einer von den übrigen Darstellungen etwas abweichenden Form präsentiert. Die Darstellung der Zeitachse erfolgt hier im Gegensatz zur weiteren Auswertung nicht logarithmisch sondern linear, und es wird nur ein Ausschnitt bis zu $t=7.5e+05s$ vorgestellt. Die Angabe der Impulsdauer erfolgt in der Legende in Tagen $[d]$. Insgesamt sind vier Kurven aufgetragen:

- die Durchbruchskurve für unbegrenzte Tracerzugabe ab dem Zeitpunkt $t_0 = 0d$ (durchgezogene Linie, $B_1(02, t)$),
- die normierte Summenkurve für die Impulseinleitung (punktierte Linie, $I_{C1}(02, t, 1d)$),
- die Durchbruchskurve für unbegrenzte Tracerzugabe ab dem Zeitpunkt $t_0 = 1d$ (gestrichelte Linie, $B_1(02, t - 1d)$)
- und die Durchbruchskurve für die Impulseinleitung mit einer Dauer von $t_0=1d$ (punktierte Linie mit Symbol, $C_{Impuls}(02, t, 1d)$)

Die Durchbruchskurve der Impulseinleitung ergibt sich aus der Subtraktion der dargestellten Durchbruchskurven der unendlichen Tracerzugabe ($B_1(02, t) - B_1(02, t - 1d)$). Es kann der Abbildung 4.1 entnommen werden, dass bis zu dem Zeitpunkt t_0 die Kurven für die Impulseinleitung und die unbegrenzte Tracerzugabe ($B_1(02, t)$) per Definition identisch sind. Die mit $\frac{1}{C_0 t_0}$ normierte Summenkurve I_{C1} weicht von der „Wunschkurve“ $B(02, t)$ für die dargestellte Variante 1 am Messquerschnitt 02 deutlich ab. Eine Annäherung er-

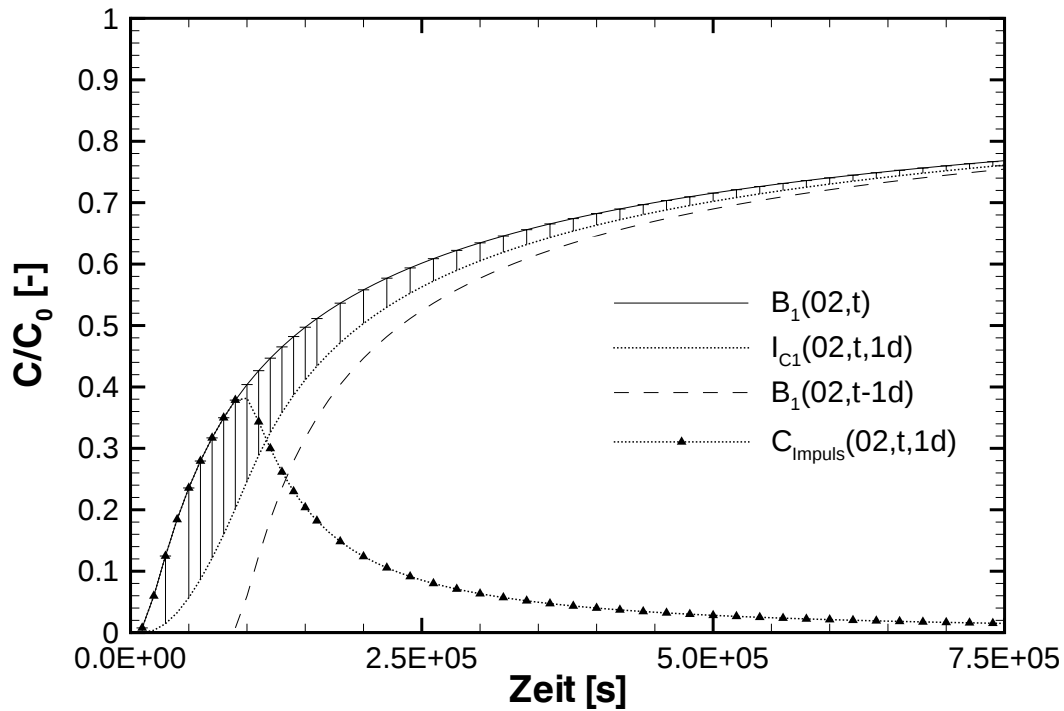


Abbildung 4.1: Tracerdurchbruchskurven für die Variante 1, lineare Darstellung; $x_0 = 1.0 \text{ m}$ und $t_0 = 1 \text{ d}$

folgt erst für späte Zeitpunkte. Es gilt nun zu untersuchen, für welche Konfigurationen die Approximation hinreichend genau ist.

In den Abbildungen 4.2 bis 4.4 sind jeweils dargestellt:

- die Durchbruchskurve der unendlichen Tracerzugabe (dünne durchgezogene Linie, B),
- die normierte Summenkurve der Impulseinleitung (unterbrochene Linie, I_C),

- die Differenz der tatsächlichen Lösung für unbegrenzte Tracerzugabe und der Approximation dieser Lösung durch die normierte Summenkurve (dicke durchgezogene Linie und schraffierter Bereich, $B - I_C$)
- und die Durchbruchskurve der Impulseinleitung (Linie mit Symbol, C_{Impuls})

Die Achsenbeschriftung $err [-]$ bezieht sich auf die Differenzenkurve. Der Wertebereich dieser Achse ist identisch zur primären Y-Achse (C/C_0). Die Darstellung erfolgt in jedem Diagramm für jeweils eine Variante an einem Messquerschnitt.

In Abbildung 4.2 sind die Ergebnisse zu Variante 1 an Messquerschnitt 02 für die Impulsdauer $t_0 = 1d$ (oben) und die Impulsdauer $t_0 = 50d$ (unten) aufgetragen. Die Differenzen der normierten Summenkurve der Impulseinleitung und der Durchbruchskurve der unendlichen Tracerzugabe sind zusätzlich zu der Kurve $B_1 - I_{C1}$ als Schraffur zwischen den beiden Durchbruchskurven dargestellt. Für die gegenübergestellten Parameterkonfigurationen sieht man deutlich, dass für eine zunehmende Impulsdauer bei gleicher Messentfernung die Differenz zunimmt.

Für die Varianten 1 und 6 sind in Abbildung 4.3 die Ergebnisse zu einer Impulsdauer von $50d$ an Messquerschnitt 10 aufgetragen. Für den Vergleich der Differenzen findet man, obwohl die relative Konzentration für beide Varianten maximal um 0.3 abweicht, für die Variante 6 eine wesentlich bessere Übereinstimmung der Kurvenverläufe als für Variante 1. Die Unterschiede zwischen der approxiierten Lösung und der tatsächlichen Durchbruchskurve der unbegrenzten Tracereinleitung erscheinen für eine logarithmische Skalie-

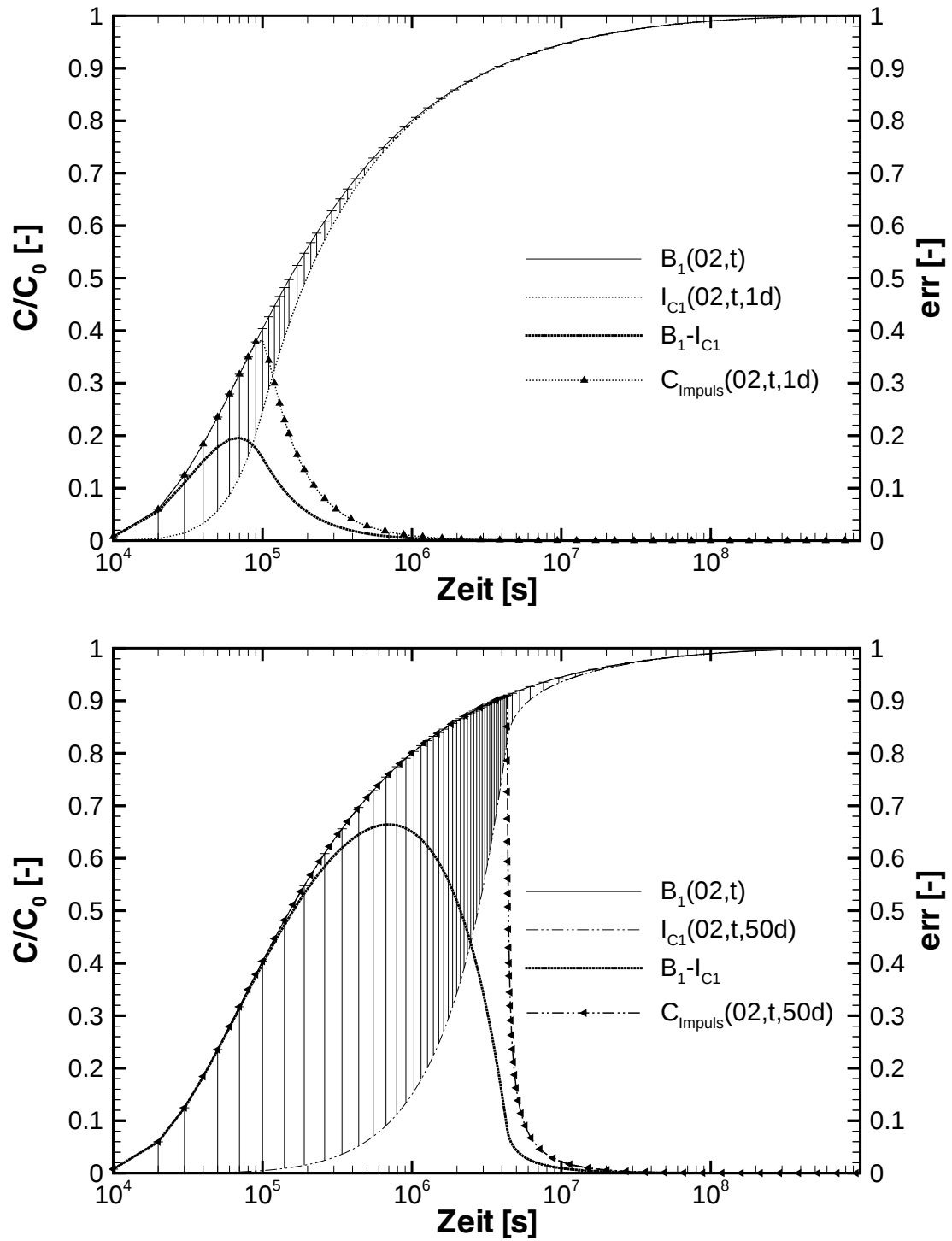


Abbildung 4.2: Tracerdurchbruchkurven und Differenzen ($err = B_1 - I_C$)
für die Variante 1;
oben: $x_0 = 1.0\text{ m}$ und $t_0 = 1\text{ d}$;
unten: $x_0 = 1.0\text{ m}$ und $t_0 = 50\text{ d}$

rung der Zeitachse für Variante 6 als Parallelverschiebung entlang der Zeitachse. Die Durchbruchskurve der approximierten Lösung liegt dabei per Definition immer unterhalb der tatsächlichen Durchbruchskurve bzw. der Durchbruch erfolgt später. Für die Typisierung der Durchbruchskurven anhand der vorliegenden Methodik für zeitlich unbegrenzte Tracerzugabe ist die absolute Differenz, wie sie für Variante 6 ermittelt wird, nicht ausschlaggebend. Die gefundene Form der approximierten Lösung entspricht qualitativ sehr gut der Form der Durchbruchskurve einer unendlichen Tracerzugabe. Eine Typisierung anhand der Form ist für diese Konfiguration also möglich.

Bei einer Impulsdauer von $50d$ bzw. $500d$ sind in Abbildung 4.4 zu Variante 8 an Messquerschnitt 30 und zu Variante 3 an Messquerschnitt 90 die mit Hilfe der analytischen Lösung erhaltenen Ergebnisse einander gegenübergestellt. Für beide Varianten zeigt sich sowohl eine sehr gute qualitative Übereinstimmung der Kurvenverläufe für die Lösung der unendlichen Tracerzugabe und die aus der Durchbruchskurve der Impulseinleitung approximierten Lösung, als auch eine sehr geringe absolute Differenz der relativen Konzentrationen für $B - I_C$. Ähnlich wie bereits für Variante 6 an Messquerschnitt 10 ergibt sich die normierte Summenkurve I_C bei logarithmischer Darstellung der Zeitachse für Variante 3 als Parallelverschiebung. Für die Variante 8 sind die Differenzen zu frühen Zeitpunkten des Durchbruchs deutlich größer als zu späten Zeitpunkten.

Insgesamt lässt sich aus den in den Abbildungen 4.2 bis 4.4 dargestellten Ergebnissen zu den unterschiedlichen Parameterkonfigurationen ablesen, dass die qualitative Übereinstimmung der tatsächlichen Durchbruchskurve unendlicher Tracerzugabe mit der Approximation durch die normierte Summenkurve einer Impulseinleitung zunimmt für:

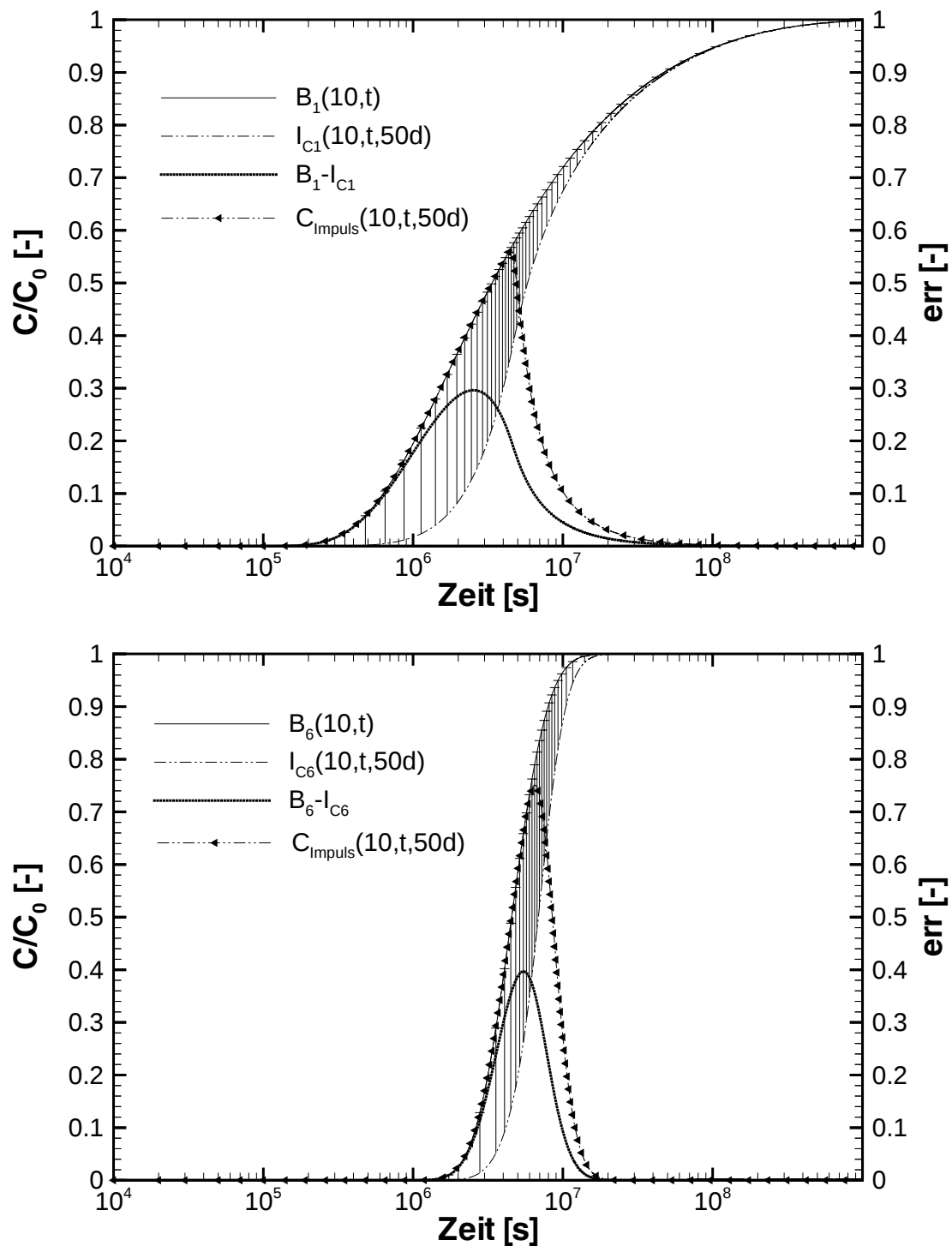


Abbildung 4.3: Tracerdurchbruchkurven und Differenzen ($err = B_1 - I_C$)
für $x_0 = 5.0$ m und $t_0 = 50$ d;
oben: Variante 1; unten: Variante 6

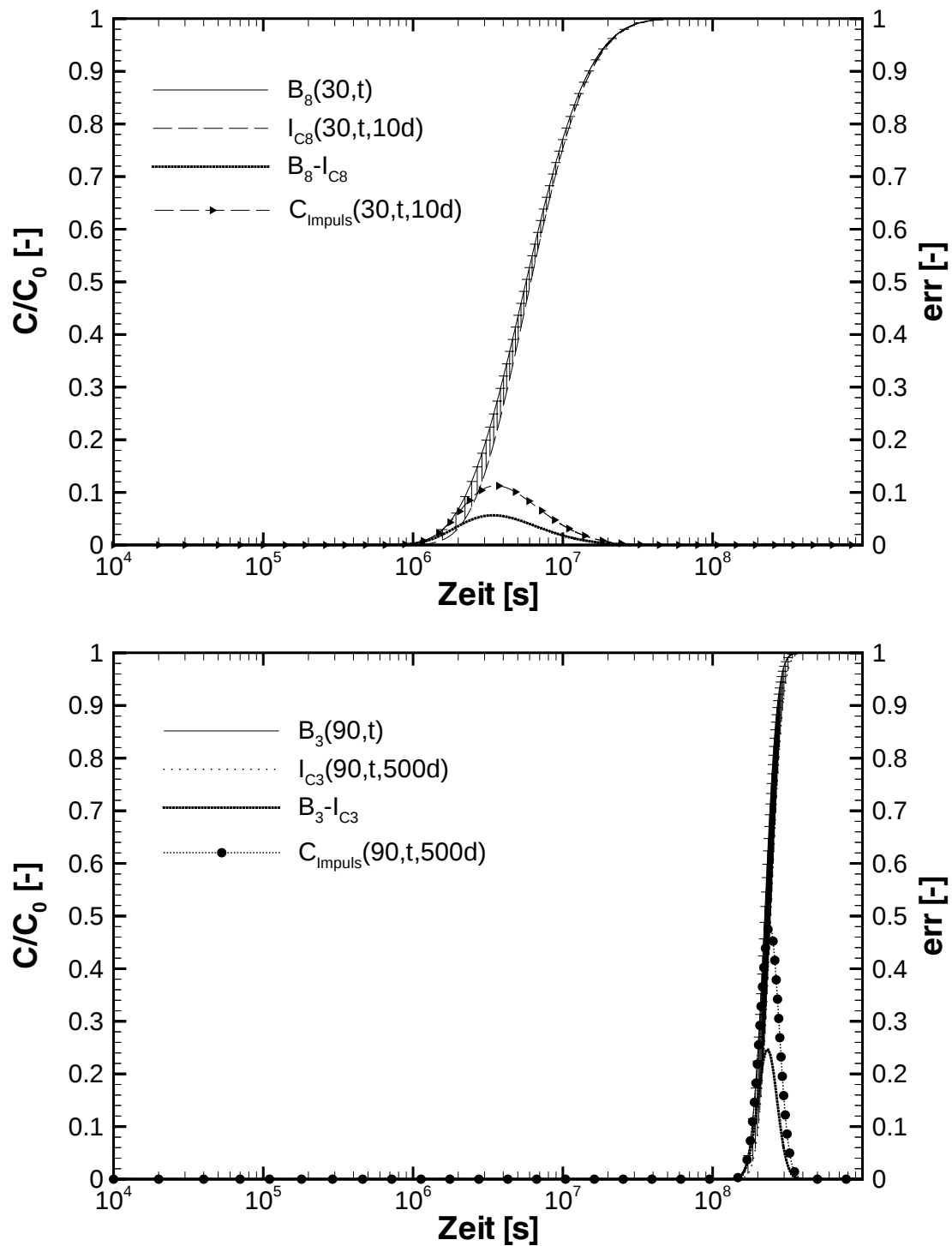


Abbildung 4.4: Tracerdurchbruchskurven und Differenzen ($err = B_1 - I_C$) für
 oben: Variante 8 ($x_0 = 15.0\text{ m}$ und $t_0 = 10\text{ d}$);
 unten: Variante 3 ($x_0 = 45.0\text{ m}$ und $t_0 = 500\text{ d}$)

- kürzer werdende Impulsdauern,
- größere Messstrecken,
- geringer werdende maximale relative Konzentration für die Durchbruchskurve C_{Impuls}
- und geringere Dispersionskoeffizienten

Eine Abgrenzung für die Gültigkeit der Annahme, dass die normierte Summenkurve der Impulseinleitung nahezu gleich der Durchbruchskurve der unendlich langen Tracerzugabe ist, erfolgt in der weiteren Auswertung.

In den Abbildungen 4.5 bis 4.8 sind die Ergebnisse der Untersuchungen mit der analytischen Lösung in dreidimensionaler Form zu der Abhängigkeit Messdauer-Impulsdauer-Messstrecke für die Übereinstimmung der normierten Summenkurve mit der Lösung einer unendlichen Tracerzugabe dargestellt. Die Zeitachse ist jeweils der logarithmierte Sekundenwert der Zeitkoordinate. Im Text werden die Zeiten in Tagen $[d]$ angegeben. Aus der dreidimensionalen Darstellung werden weiterhin zwei Schnittdarstellungen entnommen, eine zu einer festen Impulsdauer t_0 und eine zu einem vorgegebenen Messquerschnitt an einer Stelle x_0 . Zur besseren Orientierung finden sich die Schnittlinien des jeweils anderen Schnittes in der entsprechenden Abbildung wieder.

Die Präsentation der Auswertung erfolgt in der vorliegenden Arbeit für die Varianten 1 und 3 durch die Darstellung der relativen Konzentrationen zu C_{Impuls} und die Darstellung der Differenzen $B - I_C$. Die hier nicht dargestellten Varianten zeigen ähnliche Ergebnisse. Unter Berücksichtigung der bereits diskutierten Ergebnisse wird die

Annahme getroffen, dass für Differenzen, die kleiner als 0.05 sind, eine hinreichend genaue Übereinstimmung zwischen der tatsächlichen Lösung für eine unendliche Tracerzugabe und der Approximation aus der Lösung für einen Tracerimpuls vorliegt. Um auch ohne Kenntnis der „Wunschkurve“ (tatsächliche Durchbruchskurve bei zeitlich unbegrenzter Tracerzugabe) in der Lage zu sein beurteilen zu können, ob eine hinreichend genaue Näherung vorliegt, wird weiterhin die Annahme getroffen, dass die Forderung nach einer Differenz kleiner 0.05 für solche Durchbruchskurven gegeben ist, bei denen die relative Konzentration für die Durchbruchskurve der Impulseinleitung 0.10 nicht überschreitet. Dass diese Forderung die Aufweitung der Durchbruchskurve nicht berücksichtigt, ist offensichtlich, jedoch liegt durch die Wahl der Varianten 1 bis 9 ein breites Spektrum an Formen der Durchbruchskurven vor. So zeigt sich z. B. bereits in Abbildung 4.3 für Variante 6 eine gute Übereinstimmung, obwohl das Maximum der relativen Konzentration bei 0.50 und die absolute Abweichung mit 0.25 deutlich über der Forderung einer maximalen Differenz von 0.05 liegt.

Der Vergleich der Abbildungen 4.5 und 4.6 zeigt, dass die Wahl der Begrenzung für die relative Konzentration und den maximalen Fehler zu nahezu identischen Gültigkeitsbereichen für die Approximation von I_C führt. Die „ausgeblendeten“ Bereiche in den Darstellungen zeigen solche Bereiche auf, für die die Forderung jeweils nicht mehr erfüllt ist. Aus Abbildung 4.5 bzw. 4.6 lässt sich z. B. für Variante 1 ablesen, dass die Approximation für I_C mit hinreichender Genauigkeit durchgeführt werden kann. Die Genauigkeit ist gegeben bei Konfigurationen mit einer Impulsdauer von $t_0 \leq 100d$ und einer Transportentfernung von $x_0 > 30.0m$ bzw. bei einer Transportentfernung von $x_0 \geq 10m$ und Impulsdauern von $t_0 < 9d$. Die Markierung erfolgt durch eine mit Richtungsangabe der Gültigkeit versehenen Linie.

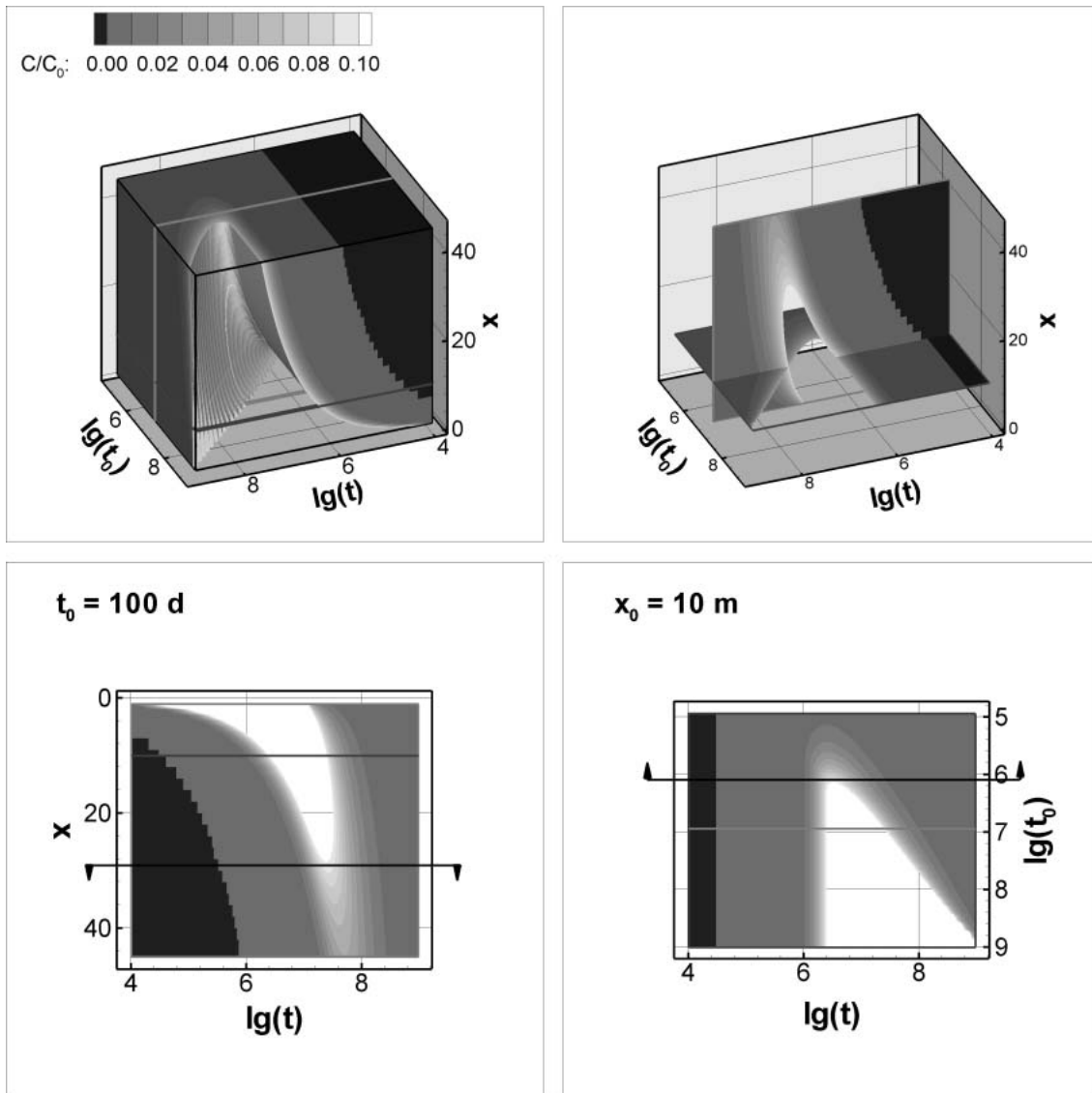


Abbildung 4.5: C/C_0 -Gültigkeitsbereiche (dreidimensional);
 Variante 1: t_0 -Schnitt: $t_0 = 100 \text{ d}$; x_0 -Schnitt: $x_0 = 10.0 \text{ m}$

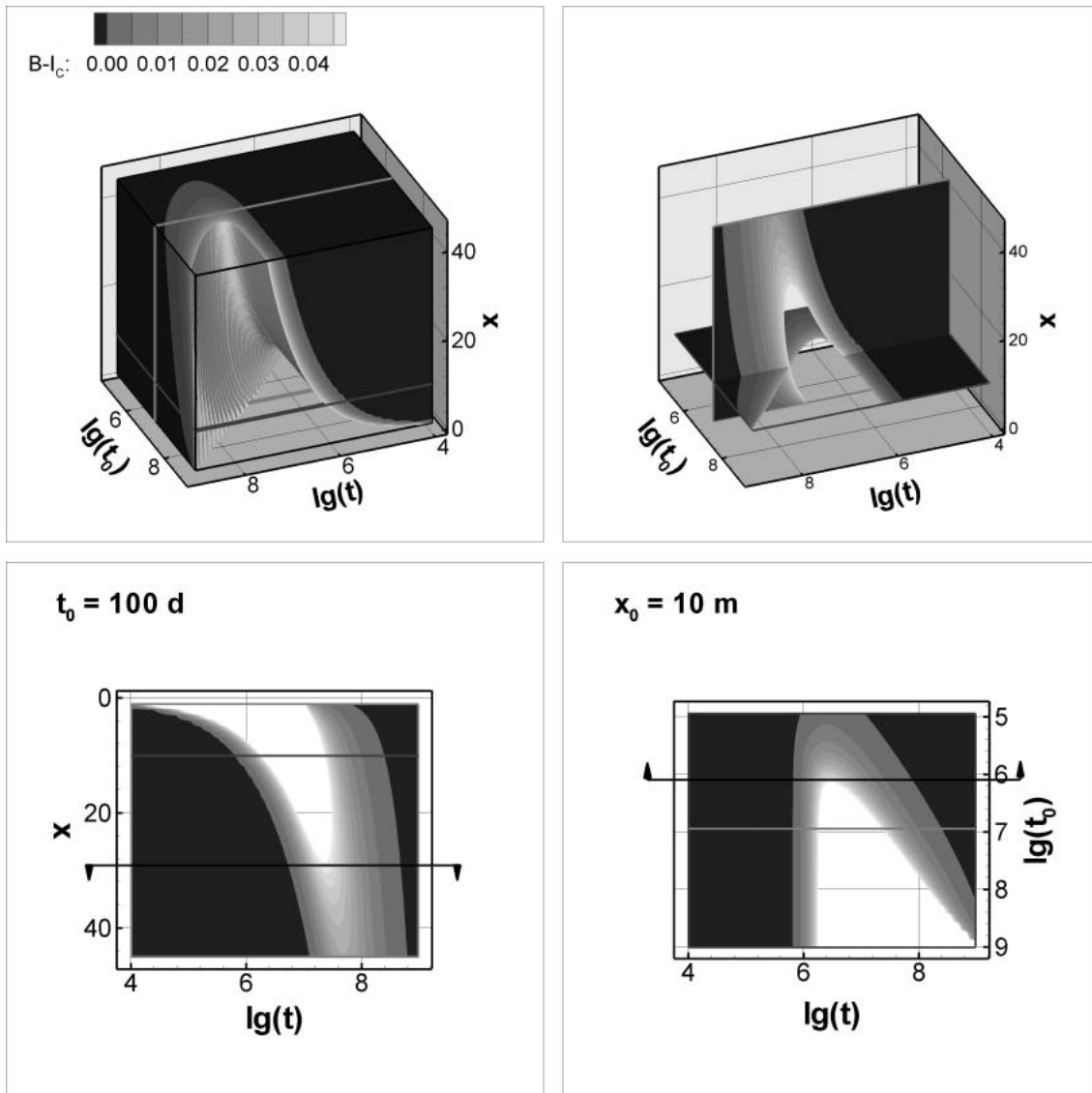


Abbildung 4.6: Differenzendarstellung (dreidimensional);
 Variante 1: t_0 -Schnitt: $t_0 = 100$ d; x_0 -Schnitt: $x_0 = 10.0$ m

Wie bereits bei Variante 1 zeigt sich auch für die Gegenüberstellung der Gültigkeitsbereiche der Variante 3 (vgl. Abbildungen 4.7 und 4.8) eine sehr gute Übereinstimmung der ausgeblendeten Bereiche. Die Auswertung für Variante 3 erfolgt analog zu Variante 1 an einem Schnitt zu $t_0 = 100d$ und einem Schnitt zu einer Transportentfernung $x_0 = 10.0m$. Die Schnittfläche zu $t_0 = 100d$ weist einen durchgängigen ausgeblendeten Bereich auf. Dies bedeutet, dass für eine Impulsdauer von $100d$ für Variante 3 bis zu einer Transportentfernung von $45.0m$ keine Konfiguration gefunden werden kann, bei der die geforderten Grenzwerte eingehalten werden. Aus diesem Grund ist hier auch keine Kennzeichnung enthalten. Der ausgeblendete Bereich ist jedoch für Transportentfernungen, die größer als $10m$ sind, vergleichsweise schmal. Die gleiche Beobachtung kann für die Variante 6 bereits anhand der Darstellung der Durchbruchskurven in Abbildung 4.3 bei kürzerer Transportentfernung bzw. aus Abbildung 4.4 bei längerer Impulsdauer bei Variante 3 gemacht werden. Dies zeigt, dass ein schmaler ausgeblendeter Bereich auf eine Parallelverschiebung (bei logarithmischer Skalierung der Zeitachse) der approximierten Kurve hindeutet und die Form der approximierten Kurve qualitativ durchaus mit der Form der „Wunschkurve“ übereinstimmt. Aus der Schnittdarstellung zu $x_0 = 10.0m$ lässt sich ablesen, dass für $t_0 \leq 35d$ die Anforderung an die Genauigkeit der Approximation erfüllt wird.

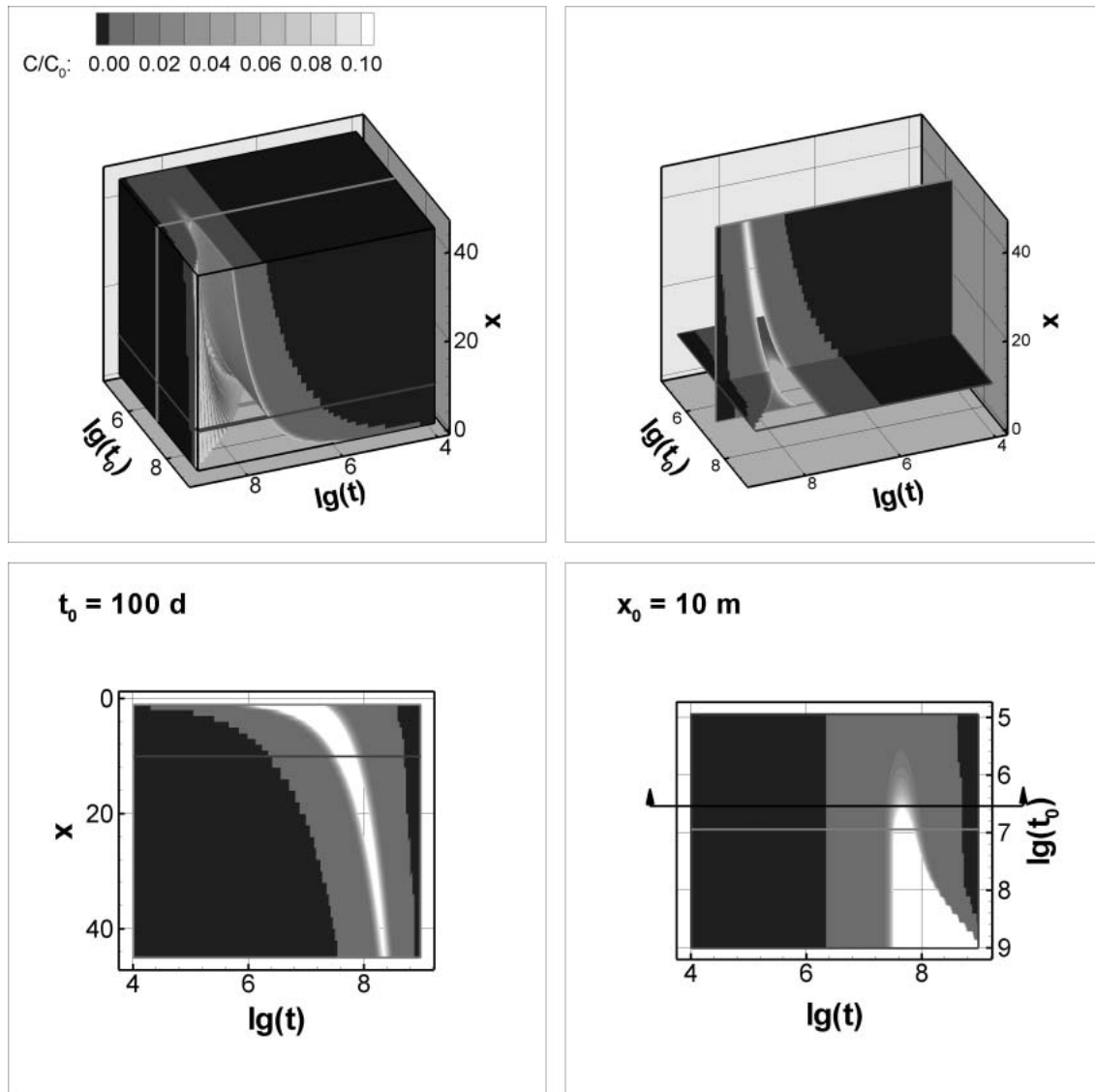


Abbildung 4.7: C/C_0 -Gültigkeitsbereiche (dreidimensional);
 Variante 3: t_0 -Schnitt: $t_0 = 100$ d; x_0 -Schnitt: $x_0 = 10.0$ m

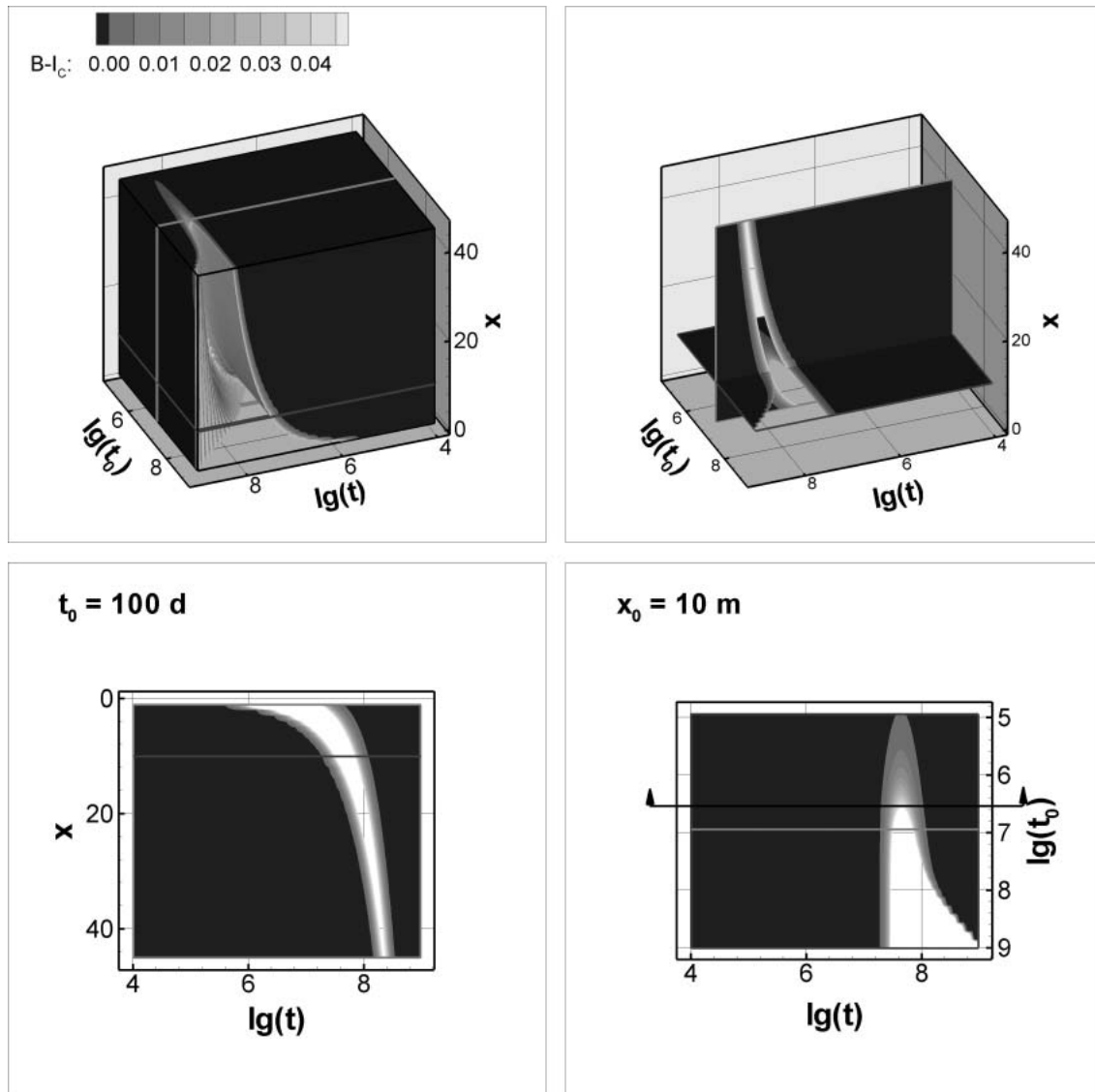


Abbildung 4.8: Differenzendarstellung (dreidimensional);
 Variante 3: t_0 -Schnitt: $t_0 = 100 \text{ d}$; x_0 -Schnitt: $x_0 = 10.0 \text{ m}$

4.5 Zusammenfassung

Die Untersuchungen mit Hilfe der analytischen Lösung für einen homogenen isotropen Aquifer zeigen anschaulich, dass das Antwortsignal auf eine kontinuierliche Tracereinleitung hinreichend genau durch die Integration und Normierung der Durchbruchskurve einer Impulseinleitung angenähert werden kann. Für die Untersuchungen werden insgesamt neun Varianten betrachtet. Die Varianten beschreiben einen Aquifer mit unterschiedlichen Durchlässigkeiten und Dispersivitäten. Durch die gewählte Bandbreite der Aquiferparameter werden in den Untersuchungen eine Vielzahl an Formen von Durchbruchskurven, die hier nur auszugsweise vorgestellt werden, abgebildet. Es zeigt sich, dass unabhängig von der Form der Durchbruchskurve eine gute Näherung durch die normierte Summenkurve erreicht werden kann, wenn z. B. die relative Konzentration 10% nicht übersteigt. Für Durchbruchskurven mit einem sehr ausgeprägten Maximum und einer geringen Aufweitung zeigt sich eine Parallelverschiebung der Approximationskurve. Der qualitative Verlauf stimmt jedoch für solche Konfigurationen sehr gut mit der tatsächlichen Lösung für eine unendlich lange Tracerzugabe überein.

Neben der Möglichkeit der Transformation des Antwortsignals einer Impulseinleitung in ein Antwortsignal einer kontinuierlichen Tracereinleitung zeigt das vorliegende Kapitel einen weiteren sehr nützlichen Sachverhalt auf. So ist es möglich, aus der Kenntnis der Durchbruchskurve der kontinuierlichen Tracerzugabe mit Hilfe von Gleichung (4.7) zu jeder Impulsdauer t_0 die dazugehörige Durchbruchskurve zu ermitteln. Diese Eigenschaft kann einerseits dazu verwendet werden, die als Durchbruchskurve einer kontinuierlichen Tracerzugabe identifizierte normierte Summenkurve zu überprüfen. Ande-

rerseits kann diese Eigenschaft dazu verwendet werden, bei numerischen Untersuchungen mit nur einer Berechnung zu einer kontinuierlichen Tracerzugabe und anschließendem Postprocessing eine Vielzahl an Durchbruchskurven zu verschiedenen Impulsdauern zu erzeugen.

In Kapitel 5 wird für einen bereits detailliert untersuchten synthetischen Festgesteinsaquifer die Anwendbarkeit der Methode zur Approximation der Tracerdurchbruchskurve einer zeitlich unbegrenzten Tracerzugabe auf tatsächliche DPSP-, DPDP- bzw. SPSP-Systeme überprüft.

Kapitel 5

Numerische Untersuchungen zur erweiterten Typisierungsmethode

5.1 Übersicht

Nach der Vorstellung der Methodik zur Transformation der Tracerdurchbruchskurve einer Impulseinleitung, werden im Folgenden numerische Untersuchungen mit dem Finite-Elemente-Programm STRAFE6 zur erweiterten Typisierungsmethode vorgestellt. Das diskrete Modell entspricht dem in Abbildung 5.1 dargestellten System. Die sich orthogonal schneidenden Klüfte werden als Stabelemente, die Matrix als Dreieckselemente diskretisiert. Aus Symmetriegründen wird nur ein Streifen der Höhe $h_0 = 0.5\text{ m}$ mit einer Gesamtlänge von $l = 45.0\text{ m}$ bzw. 90Sektoren modelliert. Die Längenangabe in Sektoren wird parallel zu der Angabe in m verwendet und ist vergleichbar mit der bereits in Kapitel 4.4 verwendeten Nomenklatur zur Längenangabe. Bezugnehmend auf das in Kapitel 3 vorgestellte Projekt „Festgesteins-Aquiferanalog: Experimente und Modellierung“ werden die numerischen Experimente einerseits für Parameterkonfigurationen mit dem Trägerfluid Wasser und andererseits mit dem Trägerfluid Luft durchgeführt.

5.2 Untersuchungsgebiet

Das Untersuchungsgebiet besteht, entsprechend der bereits in BERKOWITZ ET AL. (1988) vorgestellten Anordnung, aus einem regelmäßigen Kluftnetzwerk für die übergeordnete Komponente und einheitlichen Blöcken der untergeordneten Komponente. Das Untersuchungsgebiet und die Randbedingungen sind in Abbildung 5.1 dargestellt.

Die übergeordnete Komponente setzt sich aus zwei Kluftscharen zusammen, deren Klüfte unendlich ausgedehnt sind. Die Klüfte besitzen einen konstanten Kluftabstand d_1 und eine konstante äquivalente Öffnungsweite $2b$. Die Kluftscharen schließen mit der x -Achse den Winkel $+\theta_1$ bzw. $-\theta_1$ ein. Aus der Anordnung der Kluftscharen resultieren für die untergeordnete Komponente bei zweidimensionaler Betrachtung und einem Winkel $\theta_1 = 45^\circ$ quadratische Blöcke der Kantenlänge d_1 . Für das Kluft-Matrix-System sind die Strömungseigenschaften der untergeordneten Komponente (Matrix) isotrop und homogen (BIRKHÖLZER, 1994b).

Für das Untersuchungsgebiet werden gespannte und stationäre Strömungsverhältnisse gewählt. Für die Stofftransportberechnung werden Impulszugaben unterschiedlicher Dauer und eine kontinuierliche Tracereinleitung am linken Modellrand betrachtet. Für das gewählte Untersuchungsgebiet und die beschriebenen Randbedingungen resultiert eine regionale Strömung in Richtung der x -Achse. Für diese Strömungssituation tritt eine dispersive Tracerausbreitung an den Kluftverschneidungen nicht auf. Deshalb kann das Untersuchungsgebiet unter Ausnutzung der Symmetrie bezüglich der Geometrie und der Strömungs- und Transportprozesse reduziert werden.

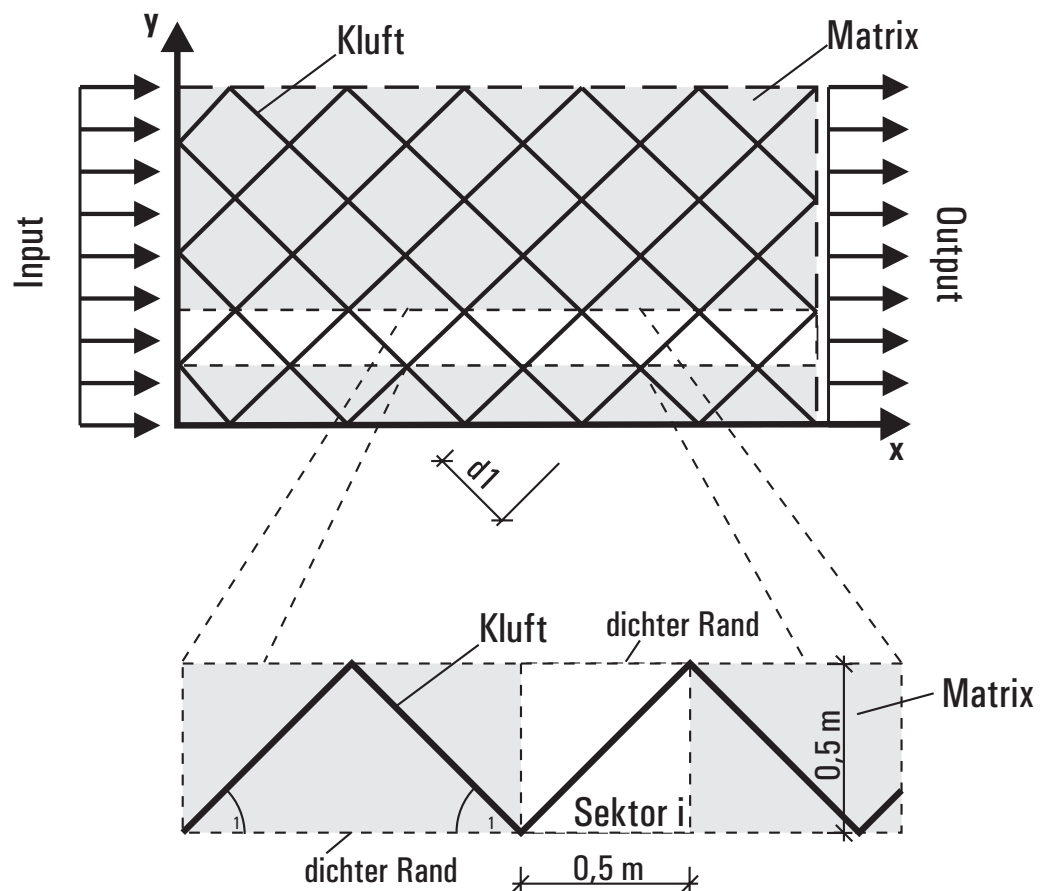


Abbildung 5.1: Untersuchungsgebiet und Berechnungsausschnitt nach BIRKHÖLZER (1994b)

Es resultiert ein Streifen der Höhe $d_1 \cos \theta_1$ und der Länge l .

BIRKHÖLZER (1994b) stellt insgesamt vier Grundvarianten (VAR1 bis VAR4, vgl. Tabellen 5.2 und 5.3) vor, die sich hinsichtlich der Durchlässigkeit der Gesteinsmatrix unterscheiden. Für eine ausführliche Erläuterung der vier Grundvarianten sei auf BIRKHÖLZER (1994b) verwiesen.

5.3 Numerische Experimente mit dem Trägerfluid Wasser

5.3.1 Parameter der Untersuchungen mit Wasser

In Tabelle 5.1 sind die Basisparameter für die durchgeführten Simulationen mit dem Trägerfluid Wasser aufgeführt. Das Kluftnetzwerk, die Transportparameter der Klüfte und Gesteinsmatrix, die Fluideigenschaften sowie die Randbedingungen für Strömung und Transport sind für die vier untersuchten Varianten identisch.

Die Grundvariante 1 beschreibt eine Gebirgsformation, für die die Durchlässigkeit der Gesteinsmatrix so gering ist (z. B. Granit), dass advektiver Transport in der Matrix praktisch nicht auftritt. Die Matrix dient fast ausschließlich als Speichermedium. Innerhalb der Varianten 1 bis 4 nimmt die Durchlässigkeit der Gesteinsmatrix sukzessive zu, bis für Variante 4 im Porenraum der Gesteinsmatrix die gleiche Fluidmenge wie in den Klüften transportiert wird (z. B. Sandstein). Die sich aus der Variation der Gesteinsdurchlässigkeit ergebenden charakteristischen Größen (vgl. Kapitel 2.4) finden sich in Tabelle 5.2. Die diffusive Abbaulänge L_D beträgt für alle Varianten einheitlich 484 *Sektoren*, und die diffusive Aufladezeit für das Trägerfluid Wasser beträgt $T_D^* = 2.72\text{E}+08\text{s}$. Die Ermittlung der diffusiven Abbaulänge erfolgt gemäß dem Vorschlag von BIRKHÖLZER (1994b) mit der analytischen Lösung nach TANG ET AL. (1981) für die Transportentfernung, an der ein Konzentrationswert $C/C_0 = 0.001$ nach einer Zeit von $0.2 T_D^*$ vorliegt. Die analytische Lösung dient der Lösung advektiv-dispersiver Transportvorgänge in einer einzelnen Kluft bei transversaler Diffusion in das poröse Gestein (TANG ET AL., 1981).

Die Abbaulänge spielt beim späteren Vergleich mit den Ergebnissen der Studie mit dem Trägerfluid Luft eine wesentliche Rolle und wird daher in Tabelle 5.3 als *bezogene Abbaulänge* angegeben. Die Bezugsgröße ist dabei die Messstrecke bzw. die betrachtete Transportentfernung (S02, S10, S30 und S90). D. h. für bezogene Abbaulängen kleiner eins erfolgt die Interaktion zwischen den Komponenten vollständig innerhalb der betrachteten Messstrecke.

Tabelle 5.1: Basisparameter für die Finite-Elemente-Untersuchung mit Wasser

Klüfte (2 Kluftscharen mit identischen Eigenschaften, vgl. Abbildung 5.1)			
Öffnungsweite	(2b)	[m]	1.00e-04
Kluftabstand	(B)	[m]	7.07e-01
Winkel der Kluftscharen zur x-Achse	(θ)	[°]	45.00
longitudinale Dispersivität	(α_l^F)	[m]	1.00e-01
effektiver Diffusionskoeffizient	(D_{mol}^F)	[m ² /s]	1.00e-09
Gesteinsmatrix (homogen und isotrop)			
Porosität	(n^M)	[m ³ /m ³]	5.00e-02
longitudinale Dispersivität	(α_l^M)	[m]	1.00e-01
transversale Dispersivität	(α_t^M)	[m]	1.00e-02
effektiver Diffusionskoeffizient	(D_{mol}^M)	[m ² /s]	2.30e-10
Fluideigenschaften			
Dichte	(ρ)	[kg/m ³]	1.00e+03
dynamische Viskosität	(η)	[kg/ms]	1.00e-03
stationäre Strömungsrandbedingungen (vgl. Abbildung 5.1)			
Gradient Druck	$\frac{dp}{dx}$	[Pa/m]	1.00e+02
Gradient Standrohrspiegelhöhe	$\frac{dh}{dx}$	[m/m]	1.02e-02
Transportberechnung			
Anfangsbedingung	$C(x, 0) = 0$		
Randbedingung Impuls	$C(0, t) = \begin{cases} C_0 & : 0 < t \leq t_0 \\ 0 & : t > t_0 \end{cases}$		
Randbedingung unendliche Tracerzugabe	$C(0, t) = C_0$		

Tabelle 5.2: Variation der Parameter für die Finite-Elemente-Untersuchung mit Wasser

Variante			VAR1	VAR2	VAR3	VAR4
Gesteinsdurchlässigkeit	(K^M)	$[m/s]$	9.61e-11	2.32e-08	9.61e-08	1.15e-06
Filtergeschwindigkeit Matrix	(q^M)	$[m/s]$	9.80e-13	2.37e-10	9.80e-10	1.17e-08
advektive Aufladezeit	(T_A^*)	$[s]$	2.55e+10	1.06e+08	2.55e+07	2.13e+06
Aufladezeit	(T^*)	$[s]$	2.69e+08	7.61e+07	2.33e+07	2.11e+06
advektive Abbaulänge	(L_A)	Sektoren	8.27e+04	3.42e+02	8.27e+01	6.91e+00
Mobilitätszahl	(N_M)	$[-]$	8.36e-05	2.02e-02	8.36e-02	1.00e-00
Diffusion-Advektionszahl	(N_{DA})	$[-]$	1.89e+02	1.47e+00	6.41e-01	1.78e-01
Abbaulänge	(L)	Sektoren	4.81e+02	2.00e+02	7.06e+01	6.81e+00

Tabelle 5.3: Bezogene Abbaulänge für die Finite-Elemente-Untersuchung mit Wasser

Sektor			S02	S10	S30	S90
VAR1						
advektive Abbaulänge	(L_A^*)	$[-]$	41336.23	8267.25	2755.75	918.58
diffusive Abbaulänge	(L_D^*)	$[-]$	241.80	48.36	16.12	5.37
Abbaulänge	(L^*)	$[-]$	240.39	48.08	16.03	5.34
VAR2						
advektive Abbaulänge	(L_A^*)	$[-]$	171.22	34.24	11.41	3.80
diffusive Abbaulänge	(L_D^*)	$[-]$	241.80	48.36	16.12	5.37
Abbaulänge	(L^*)	$[-]$	100.24	20.05	6.68	2.23
VAR3						
advektive Abbaulänge	(L_A^*)	$[-]$	41.34	8.27	2.76	0.92
diffusive Abbaulänge	(L_D^*)	$[-]$	241.80	48.36	16.12	5.37
Abbaulänge	(L^*)	$[-]$	35.30	7.06	2.35	0.78
VAR4						
advektive Abbaulänge	(L_A^*)	$[-]$	3.45	0.69	0.23	0.08
diffusive Abbaulänge	(L_D^*)	$[-]$	241.80	48.36	16.12	5.37
Abbaulänge	(L^*)	$[-]$	3.41	0.68	0.23	0.08

5.3.2 Erläuterung der Darstellungen

Für die Darstellung der diskreten Berechnungsergebnisse mit STRAFE6 in den Abbildungen 5.2 bis 5.4 werden die gleichen Konfigurationen (Messstrecke und Impulsdauer) wie bereits bei der Präsentation der mittels der analytischen Lösung bestimmten Ergebnisse (vgl. Kapitel 4.4) gewählt. Die Kurvenlegenden entsprechen ebenfalls der Nomenklatur aus der analytischen Lösung mit

- der Durchbruchskurve der zeitlich unbegrenzten Tracerzugabe ($B_{Variante}$)
- der normierten Summenkurve der Impulseinleitung ($I_{CVariante}$)
- der Differenzenkurve der zeitlich unbegrenzten Tracerzugabe und der normierten Summenkurve ($B_{Variante} - I_{CVariante}$)
- und der Durchbruchskurve der Impulseinleitung (C_{Impuls}).

5.3.3 Kennzahlen zur Beurteilung der Approximation aus Impulsmessungen

Für eine Bewertung der Qualität der Approximation durch die normierte Summenkurve sind in den Abbildungen 5.2 bis 5.4 weitere Kennzahlen angegeben. In Analogie zur Bodenklassifizierung nach DIN 18196 (1998) sind dies die Ungleichförmigkeitszahl U und die Krümmungszahl C_c .

U wird definiert als

$$U = \frac{t_{60}}{t_{10}} \quad (5.1)$$

und C_c als

$$C_c = \frac{t_{30}^2}{(t_{10} t_{60})} \quad (5.2)$$

Dabei entspricht bei der Impulseinleitung t_{xx} der Zeit, nach welcher $xx\%$ des Tracers am Messquerschnitt (MQS) wiedergefunden werden, bzw. bei zeitlich unbegrenzter Tracereinleitung der Zeit, nach der eine Konzentration C/C_0 von $xx\%$ gemessen wird. Neben diesen Kennzahlen zur Beschreibung des Kurvenverlaufs werden noch zwei charakteristische Zeitgrößen gewählt. Zum einen wird eine Zeit T_a aus dem Durchfluss am Messquerschnitt wie folgt ermittelt

$$T_a = \frac{l_{MQS}}{Q_{MQS}/h_0}. \quad (5.3)$$

Dabei ist l_{MQS} die Entfernung von der Tracereinleitung bis zum Messquerschnitt, $Q_{MQS} [m^3/m s]$ ist der gesamte Durchfluss aus Kluft und Matrix am Messquerschnitt und h_0 ist die Höhe des Messquerschnittes mit $h_0 = 0.5 m$. Die Zeit T_a entspricht der Aufenthaltszeit aus der DARCY-Geschwindigkeit zwischen Einlass und Messquerschnitt. Die zweite gewählte Zeitgröße ist der Zeitpunkt der maximalen Konzentration T_p (Peakzeit). T_a und T_p werden in den Abbildungen jeweils im Verhältnis zu der Dauer der Impulseinleitung T_i angegeben.

5.3.4 Randbedingungen

Insgesamt werden die Berechnungen für Impulsdauern von $1d$, $5d$, $10d$, $50d$, $100d$ und $500d$ für alle vier Varianten durchgeführt. Zusätzlich liegt zu jeder Variante die Berechnung für eine unendlich

lange Tracereinleitung vor. Der Ansatz der Randbedingungen zu den Strömungs- und Transportberechnungen kann Abbildung 5.1 und Tabelle 5.1 entnommen werden. Die Auswertung erfolgt jeweils für die Messquerschnitte 02, 10, 30 und 90. Dies entspricht Transportentfernungen von 1.0 m , 5.0 m , 15.0 m und 45.0 m . Aus der Gesamtheit aller durchgeführten Berechnungen für das Trägerfluid Wasser werden nur sechs Konfigurationen ausführlich abgebildet. Eine qualitative Darstellung in einer Matrix für jede Variante erfolgt zu allen Ergebnissen im Anschluss.

5.3.5 Ergebnisse

Es zeigt sich deutlich, dass der „Fehler“ für größere Verhältnisse $T_p : T_i$ innerhalb der einzelnen Varianten (vgl. Abbildung 5.2 und 5.3 für Variante 1) abnimmt. Für gleiche Impulsdauer und verschiedene Messquerschnitte und Varianten kann das gleiche Verhalten beobachtet werden (vgl. Abbildung 5.4).

Das Verhältnis $T_a : T_i$ lässt nicht unbedingt Rückschlüsse auf die Übereinstimmung der normierten Summenkurve und der Durchbruchkurve für zeitlich unbegrenzte Tracerzugabe zu. So ergibt sich z. B. für $T_i = 1\text{ d}$ und Messquerschnitt 02 ein Verhältnis von 1416.17. Das gleiche Verhältnis liegt für $T_i = 5\text{ d}$ und Messquerschnitt 10 vor (siehe Abbildung 5.5). Jedoch ist der „Fehler“ für Messquerschnitt 10 deutlich kleiner als für Messquerschnitt 02.

Ein direkter Zusammenhang zwischen den Kennzahlen C_c und U und der Übereinstimmung der Vergleichs- und Summenkurven kann nicht erkannt werden. Die die Kurvenform beschreibenden Größen sind jedoch für die Beurteilung der ablaufenden Prozesse hilfreich.

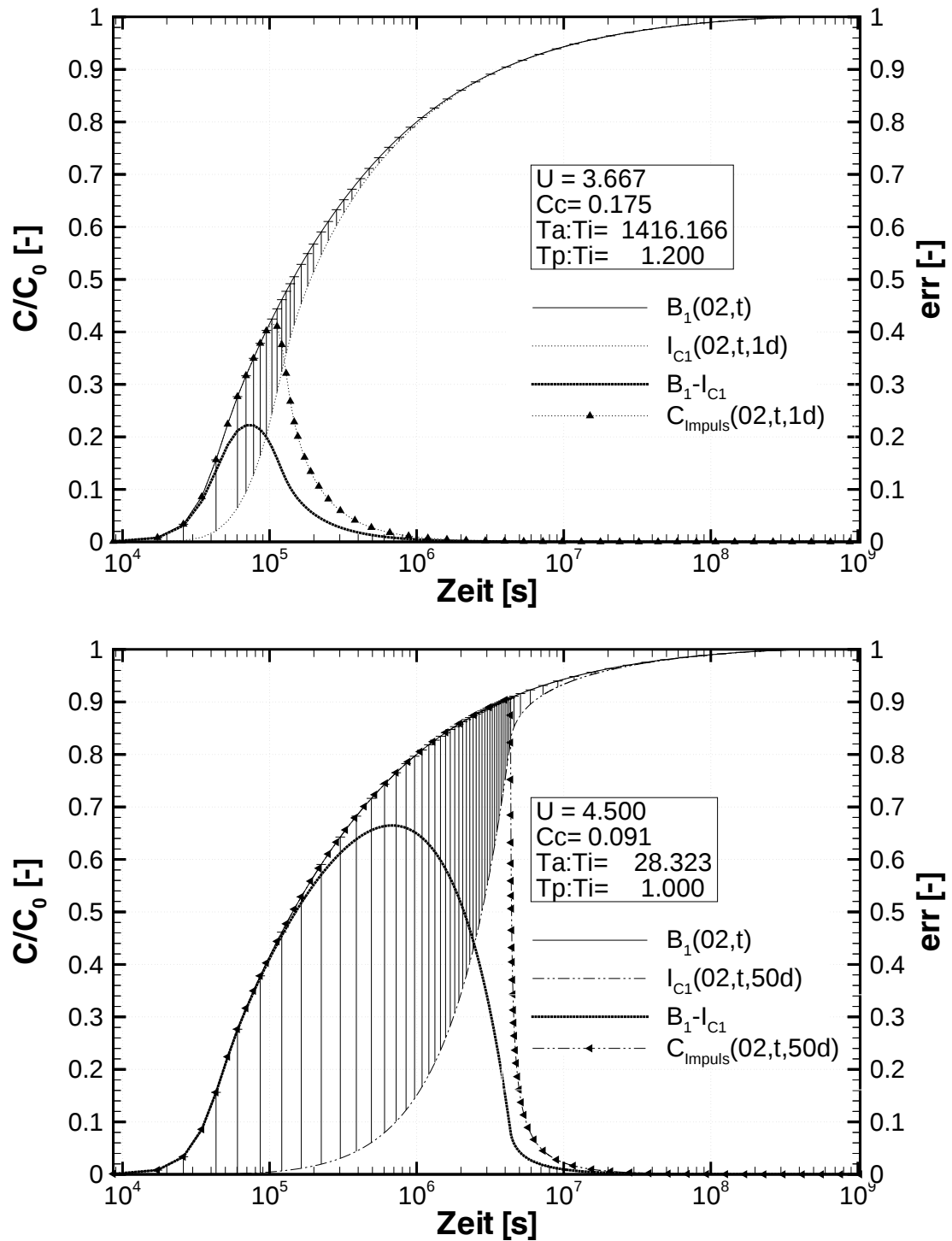


Abbildung 5.2: Tracerdurchbruchskurven und Differenzen für Variante 1
oben: MQS02 ($x_0 = 1.0 m$) und $t_0 = 1 d$; unten: MQS02 ($x_0 = 1.0 m$)
und $t_0 = 50 d$

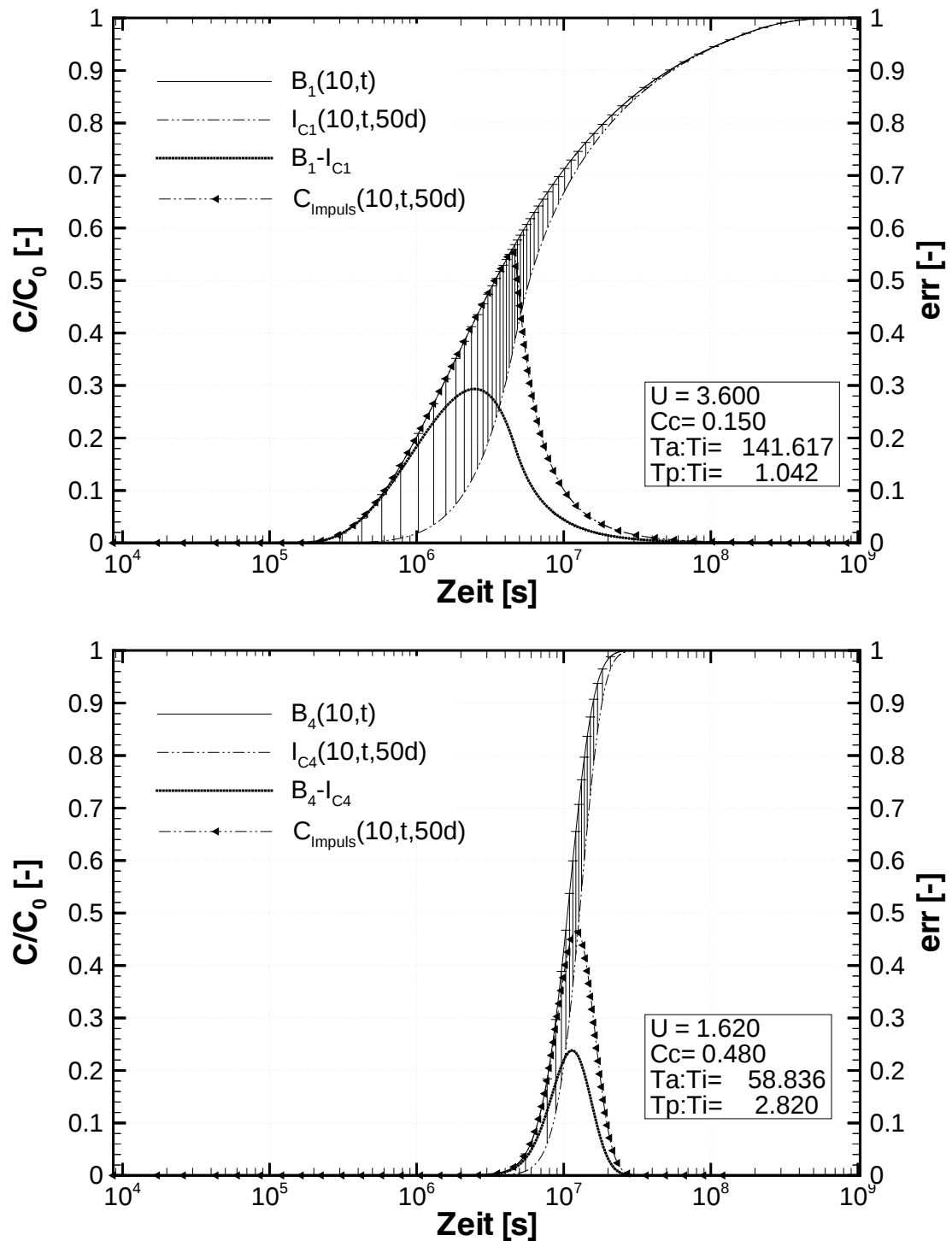


Abbildung 5.3: Tracerdurchbruchkurven und Differenzen
für MQS10 ($x_0 = 5.0$ m) und $t_0 = 50$ d
oben: Variante 1; unten: Variante 4

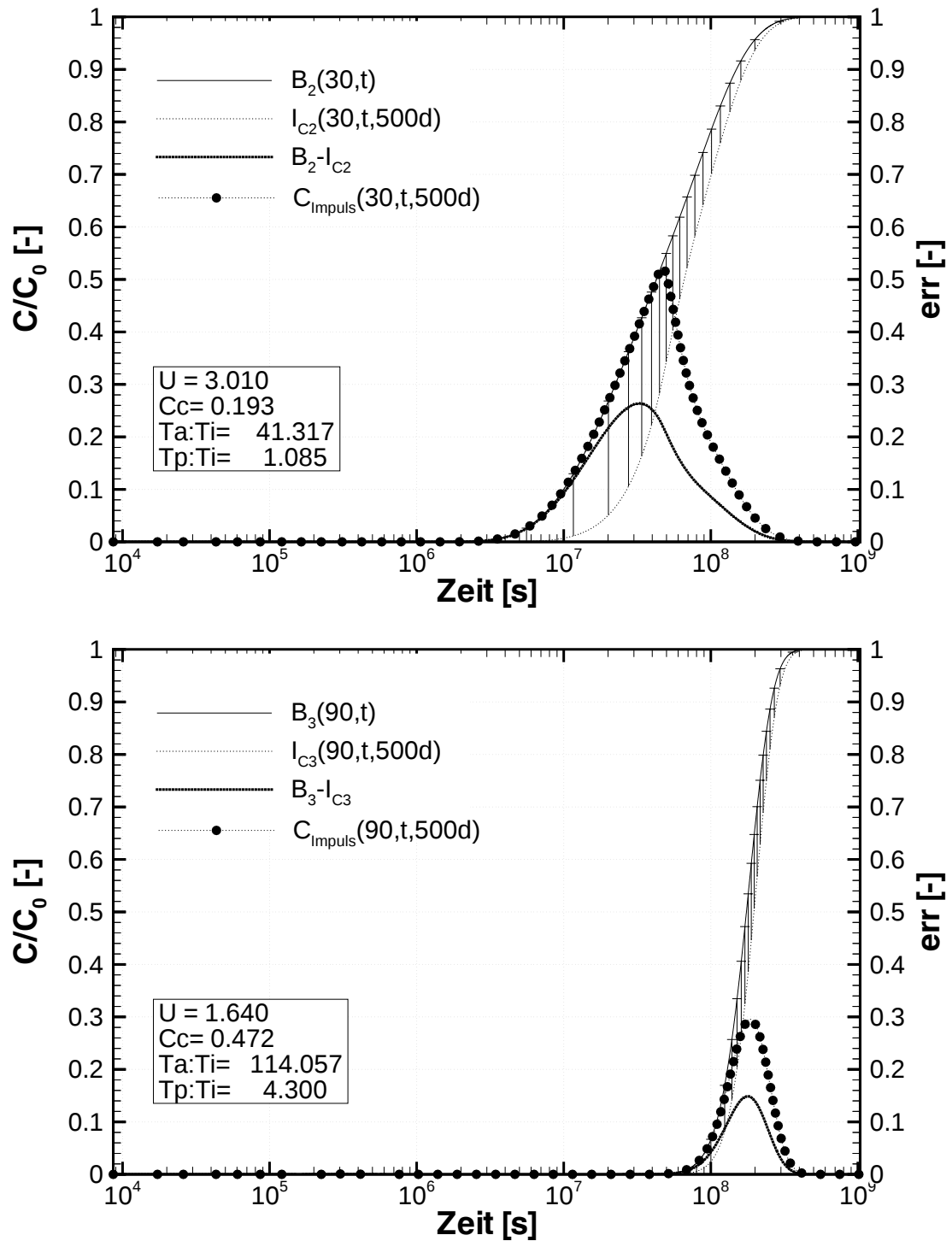


Abbildung 5.4: Tracerdurchbruchkurven und Differenzen für
oben: Variante 2, MQS30 ($x_0 = 15.0\text{ m}$) und $t_0 = 500\text{ d}$;
unten: Variante 3, MQS90 ($x_0 = 45.0\text{ m}$) und $t_0 = 500\text{ d}$

So beschreiben z.B. Konfigurationen mit einer großen Ungleichförmigkeitszahl U Systeme mit starker Interaktion zwischen den Komponenten. Diese Interaktion ist zudem in unterschiedlichen Zeitabschnitten verschieden stark ausgeprägt (vgl. Kapitel 2.2 und 2.3). Die Krümmungszahl C_c gibt für die gewählte Definition nach Gleichung (5.2) ein Maß für die Krümmung im Bereich zwischen t_{10} und t_{60} an. Es bleibt festzuhalten, dass die Kennzahlen für die Beurteilung der Qualität der approximierten Durchbruchskurve der unendlichen Tracerzugabe nicht geeignet sind. Für eine Beschreibung des Kurvenverlaufs analog zur Bodenklassifizierung nach DIN 18196 (1998) ist jedoch mit Hilfe von U und C_c eine Einteilung in die Ansprachen *gleichförmig*, *ungleichförmig* oder *sehr ungleichförmig* kombiniert mit *enggestuft*, *weitgestuft* oder *intermittierend gestuft* möglich. Diese Einteilung ist hilfreich bei der Auswertung von Messergebnissen, wie sie in Kapitel 6.4 vorgenommen wird, und wird daher nicht verworfen.

Nachfolgend werden alle Ergebnisse für die diskreten Berechnungen mit dem Trägerfluid Wasser in den Abbildungen 5.5 bis 5.8 präsentiert. Aus Gründen der Übersichtlichkeit sind nur noch die Durchbruchskurve der unendlich langen Tracerzugabe und die normierte Summenkurve der Impulseinleitung dargestellt. Der dazwischen liegende schraffierte Bereich erlaubt eine subjektive Beurteilung der Qualität der Annäherung. Je näher die Kurven beieinander liegen, umso geringer ist die Abweichung. Die Zeitachse ist logarithmisch skaliert, wodurch eine optische Abschätzung über die Flächengröße (schraffierter Bereich) nicht aussagekräftig ist. Der abgebildete Bereich der Durchbruchskurven erstreckt sich für t von $1.0e+04s$ bis $1.0e+09s$ und für C/C_0 von 0.0 bis 1.0. Spaltenweise werden die Messquerschnitte und zeilenweise die Impulsdauern aufgetragen. Es zeigt sich durchgängig wie auch bereits in Kapitel 4.4 beobachtet, dass

die Übereinstimmung für alle Varianten mit zunehmender Transportentfernung und abnehmender Impulsdauer besser wird. Würde eine subjektive Beurteilung (ohne Bestimmung des Flächeninhalts) anhand der schraffierten Fläche für alle vier Varianten (Abbildungen 5.5 bis 5.8) durchgeführt werden, so ergäbe sich nahezu die gleiche Einteilung für alle Varianten. Lediglich die Variante 4 könnte mehr positive Beurteilungen erfahren, jedoch nur unter der Voraussetzung, dass eine parallel verschobene Kurve (wie z.B. 100d-MQS10 in Abbildung 5.8) als gut beurteilt würde.

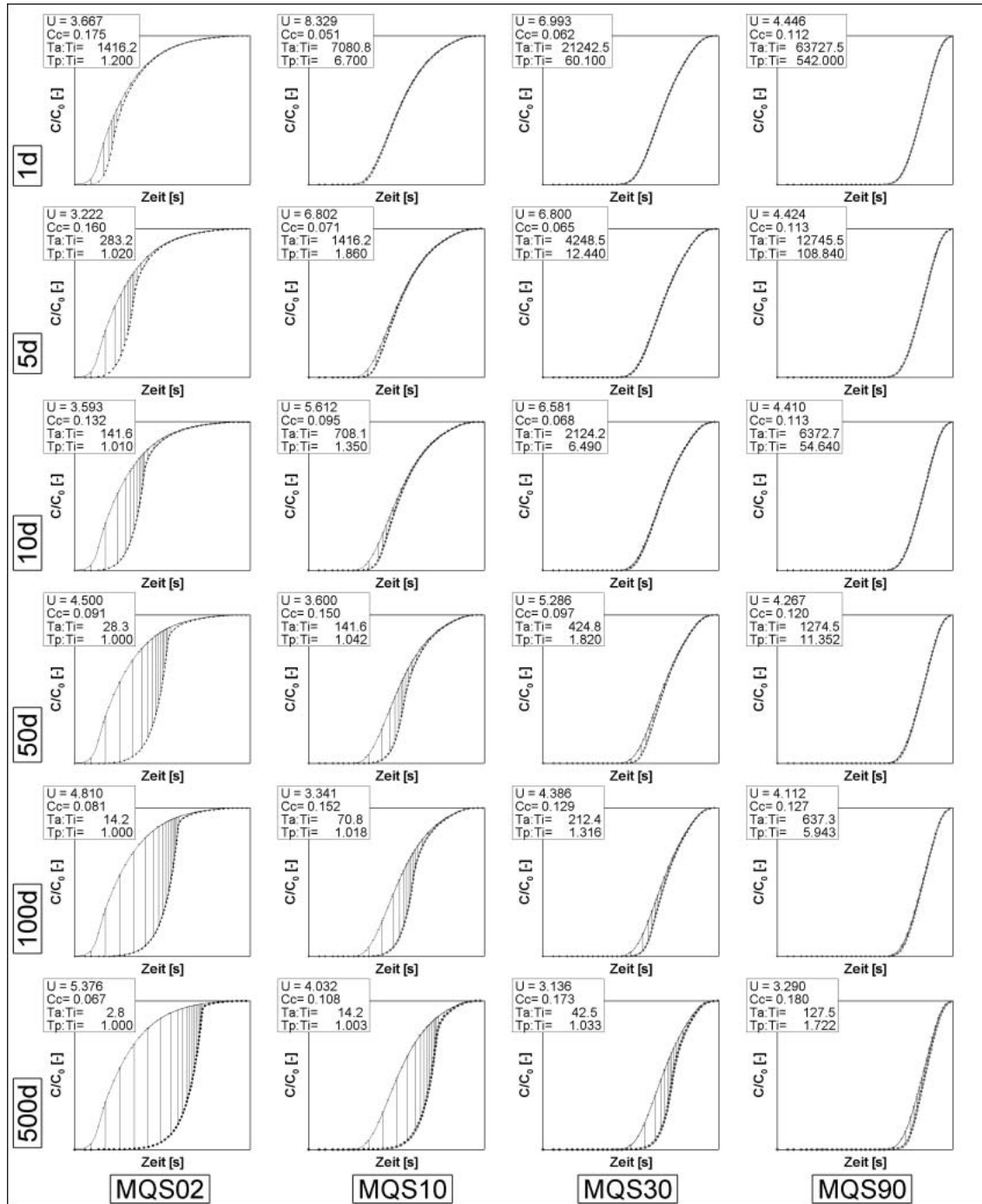


Abbildung 5.5: Variante 1 für Wasser, Kennzahlen: $U, C_c, T_a : T_i, T_p : T_j$

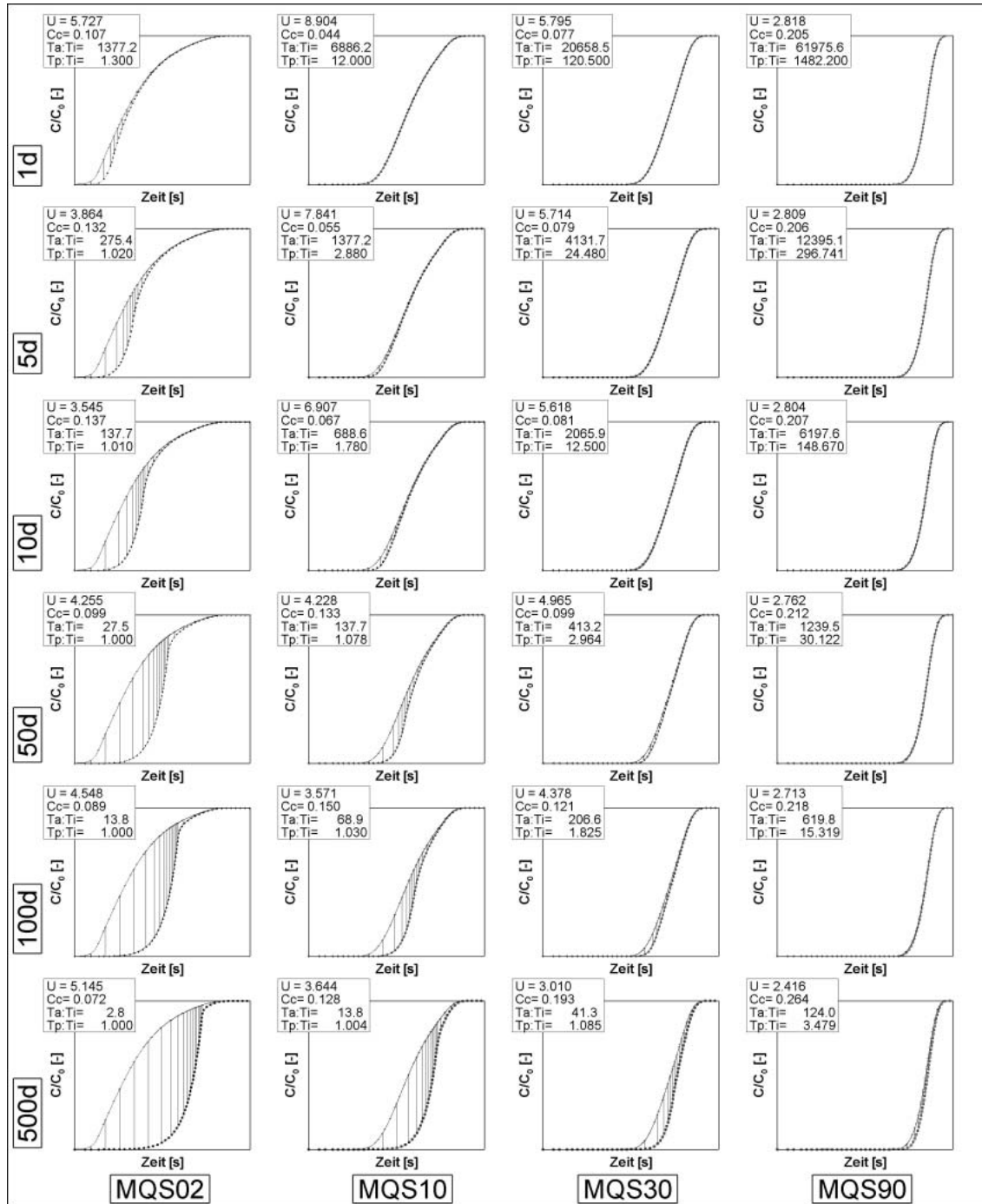
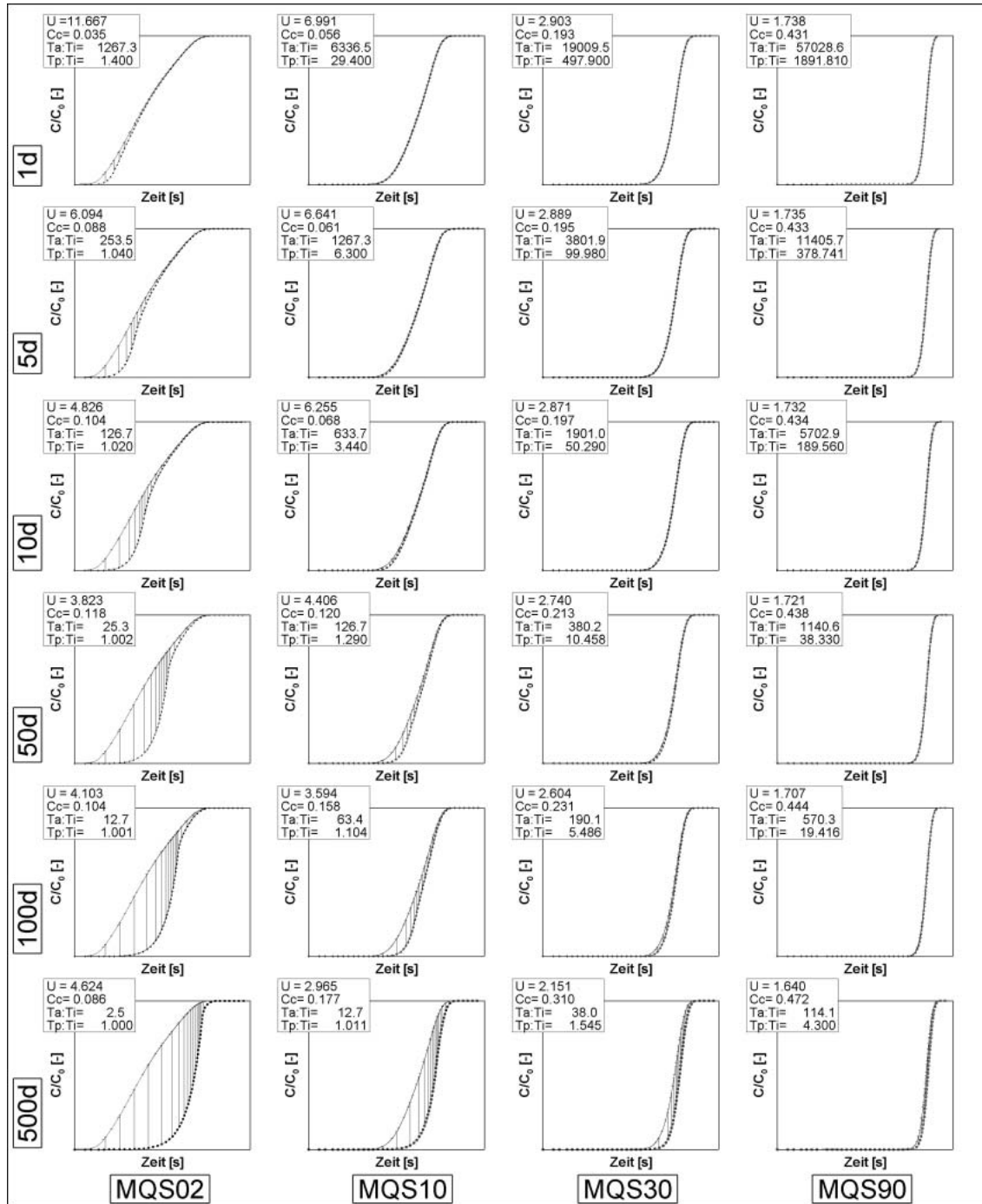


Abbildung 5.6: Variante 2 für Wasser, Kennzahlen: $U, C_c, T_a : T_i, T_p : T_i$

Abbildung 5.7: Variante 3 für Wasser, Kennzahlen: $U, C_c, T_a : T_i, T_p : T_i$

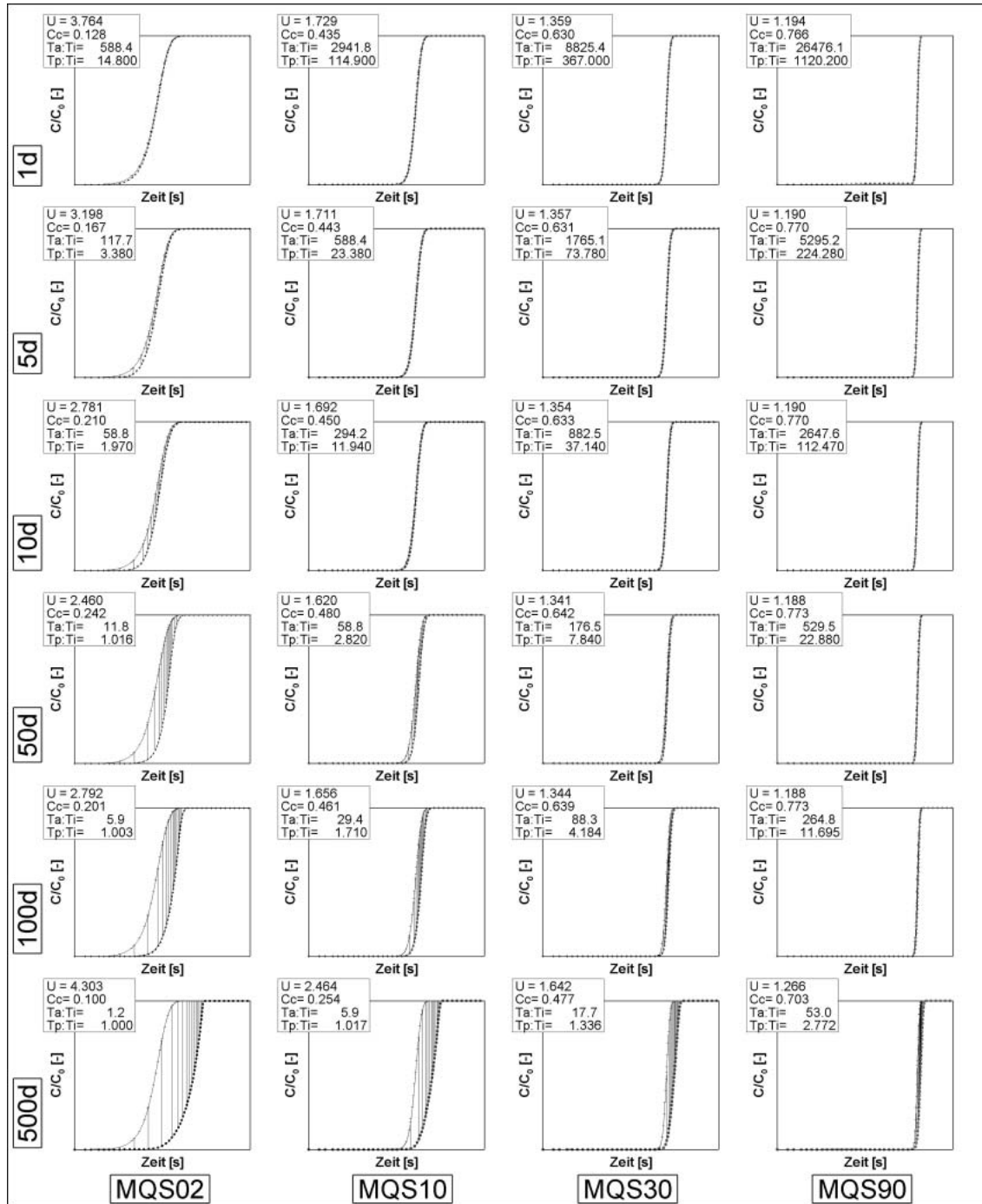


Abbildung 5.8: Variante 4 für Wasser, Kennzahlen: $U, C_c, T_a : T_i, T_p : T_j$

Neben der subjektiven Einschätzung durch die Beurteilung der schraffierten Flächen liefert das Verhältnis aus der Peakzeit und der Injektionsdauer $T_p : T_i$ eine hilfreiche Möglichkeit zur Beurteilung der Qualität der Approximation durch die normierte Summenkurve der Impulseinleitung. In den Abbildungen 5.5 bis 5.8 kann abgelesen werden, dass

- eine *gute Übereinstimmung* für $4 \leq (T_p : T_i)$,
- eine *brauchbare Übereinstimmung* für $1.3 \leq (T_p : T_i) < 4$,
- eine *geringe Übereinstimmung* für $1 < (T_p : T_i) < 1.3$
- und *keine Übereinstimmung* für $(T_p : T_i) = 1$

vorliegt. Wird die Impulsdauer so groß, dass die dazugehörige Durchbruchskurve (vgl. Abbildung 5.2, unten) für eine lange Versuchsdauer bereits mit der Durchbruchskurve der unendlichen Tracerzugabe übereinstimmt, so wird das Verhältnis $T_p : T_i$ das Minimum von 1 erreichen und eine Transformation unzulässig. Dieser Tatsache wird bereits durch die in Kapitel 4.4 geforderte Beschränkung der maximalen relativen Konzentration auf $C/C_0 = 0.1$ Rechnung getragen.

Abschließend zu den Untersuchungen mit dem Trägerfluid Wasser sind in Abbildung 5.9 die Ergebnisse nochmals mit linearer Skalierung der Zeitachse aufgetragen. Dargestellt sind zu den Varianten 1 bis 4 die Durchbruchskurven an den Messquerschnitten 02 und 10. Durch den Vergleich mit den typischen Durchbruchskurven für DPSP-, DPDP-, und SPSP-Systeme, wie diese in Kapitel 2.2 vorgestellt werden, kann

- Variante 1 als DPSP-System
- Variante 2 und 3 als DPDP-System
- und Variante 4 als SPSP-System

identifiziert werden. Die in Abbildung 5.9 dargestellten Durchbruchkurven werden in Kapitel 6.5.2 zur Identifikation des Mehrkontinuum-Modells wieder aufgegriffen.

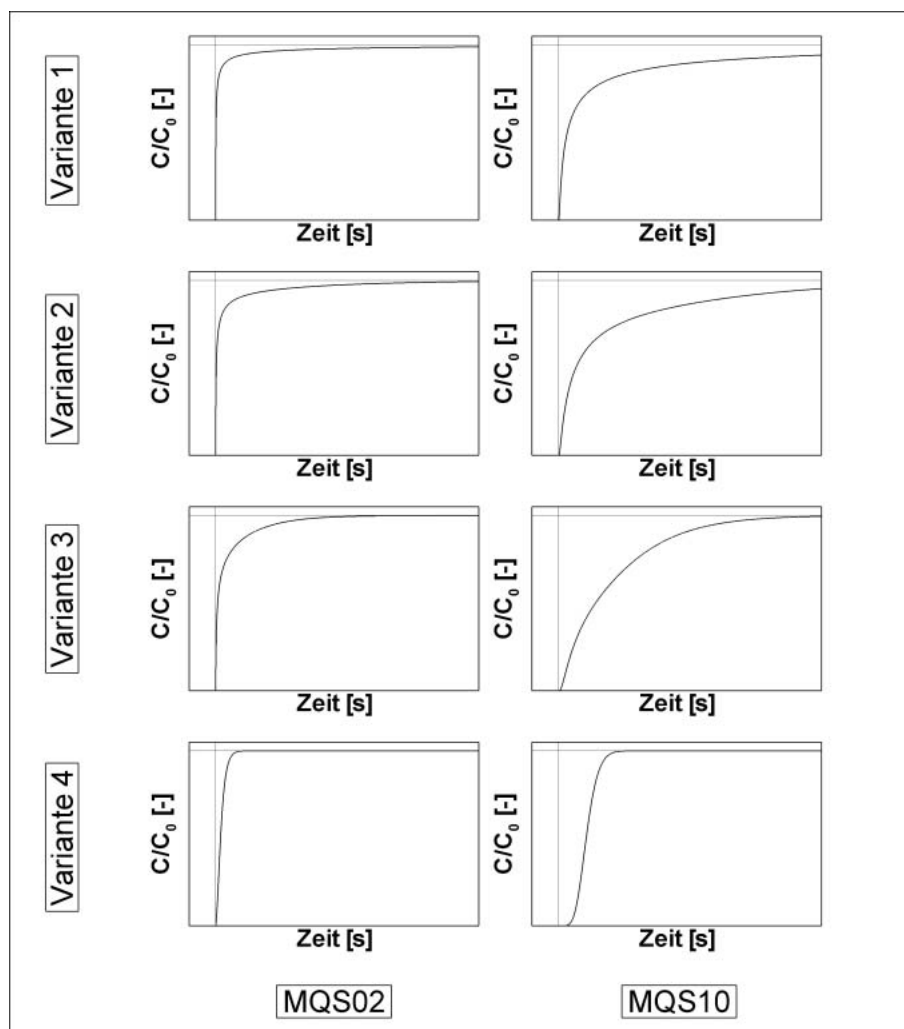


Abbildung 5.9: Varianten 1 bis 4 für Wasser;
typische Durchbruchkurven (lineare Darstellung)

5.4 Numerische Experimente mit dem Trägerfluid Luft

5.4.1 Parameter der Untersuchungen mit Luft

Im Anschluss an die Untersuchung mit dem diskreten Modell für das Trägerfluid Wasser werden nachfolgend die Untersuchungen mit dem Trägerfluid Luft und dem Tracer Helium vorgestellt. Die zugrunde liegende Geometrie ist unverändert gegenüber den vorherigen Untersuchungen (vgl. Abbildung 5.1). Die Variation der Parameter ist bedingt durch die veränderte Dichte und dynamische Viskosität gegenüber Wasser und den für Luft und Helium wesentlich veränderten Diffusionseigenschaften. Die Basisparameter, die für alle vier Varianten unveränderlich sind, können Tabelle 5.4 entnommen werden. Die Koeffizienten α_l und α_t der longitudinalen und transversalen Dispersivität sind gegenüber der Untersuchung mit Wasser unverändert. Der der Strömung zugrunde liegende Gradient entspricht für die Druckformulierung $\frac{dp}{dx}$ ebenfalls der Konfiguration für das Trägerfluid Wasser. Für die Formulierung des Gradienten als Standrohrspiegelhöhe ergibt sich demzufolge ein erhöhter Gradient.

Die Varianten der Parameter für die Untersuchungen der Varianten 1 bis 4 mit dem Trägerfluid Luft ergeben sich wiederum durch die Veränderung der Gesteinsdurchlässigkeit. Es werden die Werte der hydraulischen Leitfähigkeit aus den Untersuchungen mit Wasser übernommen und entsprechend dem Zusammenhang zwischen Permeabilität (k) und hydraulischer Leitfähigkeit (K) für das Trägerfluid Luft umgesetzt.

$$k = \frac{\eta}{\rho g} K \quad (5.4)$$

Tabelle 5.4: Basisparameter für die Finite-Elemente-Untersuchung mit Luft

Klüfte (2 Kluftscharen mit identischen Eigenschaften, vgl. Abbildung 5.1)			
Öffnungsweite	(2b)	[m]	1.00e-04
Kluftabstand	(B)	[m]	7.07e-01
Winkel der Kluftscharen zur x-Achse	(θ)	[°]	45.00
longitudinale Dispersivität	(α_l^F)	[m]	1.00e-01
effektiver Diffusionskoeffizient	(D_{mol}^F)	[m ² /s]	3.30e-05
Gesteinsmatrix (homogen und isotrop)			
Porosität	(n^M)	[m ³ /m ³]	5.00e-02
longitudinale Dispersivität	(α_l^M)	[m]	1.00e-01
transversale Dispersivität	(α_t^M)	[m]	1.00e-02
effektiver Diffusionskoeffizient	(D_{mol}^M)	[m ² /s]	7.50e-06
Fluideigenschaften			
Dichte	(ρ)	[kg/m ³]	1.00e+00
dynamische Viskosität	(η)	[kg/ms]	1.81e-05
stationäre Strömungsrandbedingungen (vgl. Abbildung 5.1)			
Gradient Druck	$\frac{dp}{dx}$	[Pa/m]	1.00e+02
Gradient Standrohrspiegelhöhe	$\frac{dh}{dx}$	[m/m]	1.02e+01
Transportberechnung			
Anfangsbedingung	$C(x, 0) = 0$		
Randbedingung Impuls	$C(0, t) = \begin{cases} C_0 & : 0 < t \leq t_0 \\ 0 & : t > t_0 \end{cases}$		
Randbedingung unendliche Tracerzugabe	$C(0, t) = C_0$		

Die entsprechenden Parameter sind in Tabelle 5.5 zusammengefasst. Die Diffusions-Advektionszahlen zeigen deutlich höhere Werte als bei vergleichbaren Konfigurationen für das Trägerfluid Wasser. Zu Variante 4, die bei der Untersuchung mit Wasser ein Verhältnis der Prozesse diffusiver zu advektivem Transport von ca. 1 : 10 aufweist, ergibt sich bei den Untersuchungen mit Luft und Heliumtracer sogar ein umgekehrtes Verhältnis.

Tabelle 5.5: Variation der Parameter für die Finite-Elemente-Untersuchung mit Luft

Variante			VAR1	VAR2	VAR3	VAR4
Gesteinsdurchlässigkeit	(K^M)	$[m/s]$	5.30e-12	1.28e-09	5.30e-09	6.34e-08
Filtergeschwindigkeit Matrix	(q^M)	$[m/s]$	5.40e-11	1.30e-08	5.40e-08	6.46e-07
advective Aufladezeit	(T_A^*)	$[s]$	4.63e+08	1.92e+06	4.63e+05	3.87e+04
Aufladezeit	(T^*)	$[s]$	8.33e+03	8.29e+03	8.18e+03	6.85e+03
advective Abbaulänge	(L_A)	<i>Sektoren</i>	9.96e+04	4.13e+02	9.96e+01	8.32e+00
relative Gesteinsdurchlässigkeit	(N_M)	$[-]$	6.93e-05	1.67e-02	6.93e-02	8.30e-01
Diffusion-Advektionszahl	(N_{DA})	$[-]$	1.11e+05	4.61e+02	1.12e+02	1.02e+01
Abbaulänge	(L)	<i>Sektoren</i>	4.03e-01	4.03e-01	4.01e-01	3.84e-01

Dass die diffusiven Prozesse zu der vorliegende Konfiguration mit dem Trägerfluid Luft für die Interaktion zwischen Kluft und Matrix überwiegen, zeigt sich auch deutlich in Tabelle 5.6 anhand der *bezogenen Abbaulänge*. Es gibt für die untersuchten Transportstrecken von 45.0 m bis 1.0 m keine Entfernung, die klein genug ist, um die Abbaulänge größer als die Transportstrecke werden zu lassen. Die Berechnung der gesamten Abbaulänge aus der diffusiven Abbaulänge und

Tabelle 5.6: Bezogene Abbaulänge für die Finite-Elemente-Untersuchung mit Luft

Sektor			S02	S10	S30	S90
VAR1						
advektive Abbaulänge	(L_A^*)	$[-]$	49807.56	9961.51	3320.50	1106.83
diffusive Abbaulänge	(L_D^*)	$[-]$	0.20	0.04	0.01	0.00
Abbaulänge	(L^*)	$[-]$	0.20	0.04	0.01	0.00
VAR2						
advektive Abbaulänge	(L_A^*)	$[-]$	206.31	41.26	13.75	4.58
diffusive Abbaulänge	(L_D^*)	$[-]$	0.20	0.04	0.01	0.00
Abbaulänge	(L^*)	$[-]$	0.20	0.04	0.01	0.00
VAR3						
advektive Abbaulänge	(L_A^*)	$[-]$	49.81	9.96	3.32	1.11
diffusive Abbaulänge	(L_D^*)	$[-]$	0.20	0.04	0.01	0.00
Abbaulänge	(L^*)	$[-]$	0.20	0.04	0.01	0.00
VAR4						
advektive Abbaulänge	(L_A^*)	$[-]$	4.16	0.83	0.28	0.09
diffusive Abbaulänge	(L_D^*)	$[-]$	0.20	0.04	0.01	0.00
Abbaulänge	(L^*)	$[-]$	0.19	0.04	0.01	0.00

der advektiven Abbaulänge erfolgt nach Gleichung (2.4). Durch die Summation der Reziprokwerte und der anschließenden Kehrwertbildung überwiegt der Einfluss der kleinen Werte deutlich. Dadurch ergibt sich die gesamte Abbaulänge hauptsächlich aus dem Anteil der diffusiven Abbaulänge. Es zeigt sich bei Betrachtung der charakteristischen Größen für die Untersuchungen mit dem Trägerfluid Luft, dass deutlich veränderte Verhältnisse gegenüber der Untersuchung mit Wasser vorliegen. Für Feldversuche mit dem Trägerfluid Luft und einem Tracer wie z. B. Helium bedeutet dies, dass die Übertragbarkeit der gefundenen Aquifereigenschaften auf eine Konfiguration mit Wasser nicht unmittelbar gegeben ist. Bedingt durch die intensiven diffusiven Austauschvorgänge zwischen den beteiligten Komponenten kommt es auch für kleine relative Gesteinsdurchlässigkeiten zu einer Homogenisierung und somit zu dem typischen S-förmigen Ver-

lauf, wie er für ein SPSP-System gefunden wird.

5.4.2 Randbedingungen

Die untersuchten Impulsdauern unterscheiden sich bedingt durch die erhöhten Filtergeschwindigkeiten im Vergleich zu der Untersuchung mit dem Trägerfluid Wasser um einen Faktor 0.01. Es werden Impulsdauern von $0.01d$, $0.05d$, $0.1d$, $0.5d$, $1d$ und $5d$ untersucht. Der Ansatz der Randbedingungen für die Strömungs- und Transportberechnungen kann Abbildung 5.1 und Tabelle 5.4 entnommen werden.

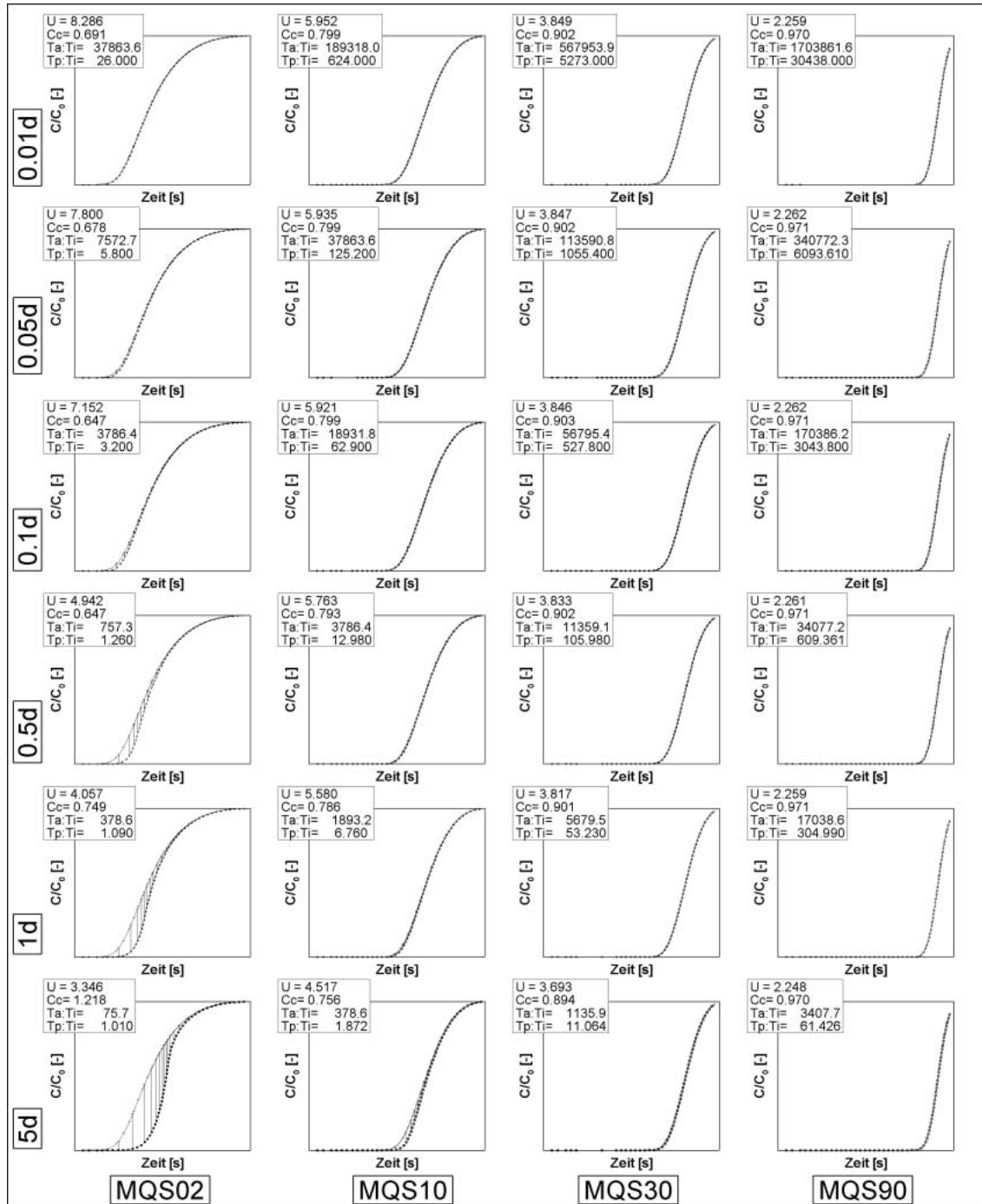
5.4.3 Ergebnisse

Wie bereits für die Studie mit dem Trägerfluid Wasser werden die Ergebnisse der Studie mit dem Trägerfluid Luft in den Abbildungen 5.10 bis 5.13 in einer Matrix für jede Variante angeordnet und die normierte Summenkurve der Durchbruchkurve der unendlichen Tracerzugabe gegenübergestellt. Der Abbildungsbereich erfolgt aufgrund der unterschiedlichen Zeitskalen abweichend von der Studie mit Wasser von $t = 1.0e+03s$ bis $1.0e+08s$. Die relative Konzentration wird auf ihrem gesamten Wertebereich C/C_0 von 0 bis 1 dargestellt. Die Zeitskala ist logarithmisch skaliert. Die verschiedenen Impulsdauern sind jeweils zeilenweise aufgetragen. Die betrachteten Messquerschnitte bzw. Transportentfernungen sind $1m$, $5m$, $15m$ und $45m$. Wie bereits bei der Variante Wasser kann auch für die Variante Luft aus den Abbildungen 5.10 bis 5.13 abgelesen werden, dass

- eine *gute Übereinstimmung* für $4 \leq T_p : T_i$,
- eine *brauchbare Übereinstimmung* für $1.3 \leq T_p : T_i < 4$,
- eine *geringe Übereinstimmung* für $1 < T_p : T_i < 1.3$
- und *keine Übereinstimmung* für $T_p : T_i = 1$

vorliegt. Für die untersuchten Impulsdauern mit dem Trägerfluid Luft ergeben sich insgesamt mehr Konfigurationen, die mit „*gute Übereinstimmung*“ eingestuft werden können. Die kürzeste Impulsdauer liefert für die größte Messstrecke den kleinsten Wert der maximalen relativen Konzentration mit $C/C_0 = 2.1 \cdot 10^{-5}$. Für die Versuchsdurchführung im Feld bedeutet dies, dass für eine akkurate Messung des Ausgangssignals der Wertebereich möglichst im Vorfeld abgeschätzt werden muss und die Eingangskonzentration entsprechend abzustimmen ist.

Abschließend zur Untersuchung mit dem Trägerfluid Luft wird in Abbildung 5.14 eine Gegenüberstellung der Varianten 1 und 4 in der zuvor beschriebenen Matrixform vorgenommen. Es zeigt sich deutlich, dass trotz des großen Unterschiedes der Matrixdurchlässigkeiten die charakteristischen Kurvenverläufe sehr ähnlich sind. Daraus lässt sich im Vergleich zu den Untersuchungen mit dem Trägerfluid Wasser der deutlich größere Einfluss des Diffusionskoeffizienten erkennen.

Abbildung 5.10: Variante 1 für Luft, Kennzahlen: $U, C_c, T_a : T_i, T_p : T_i$

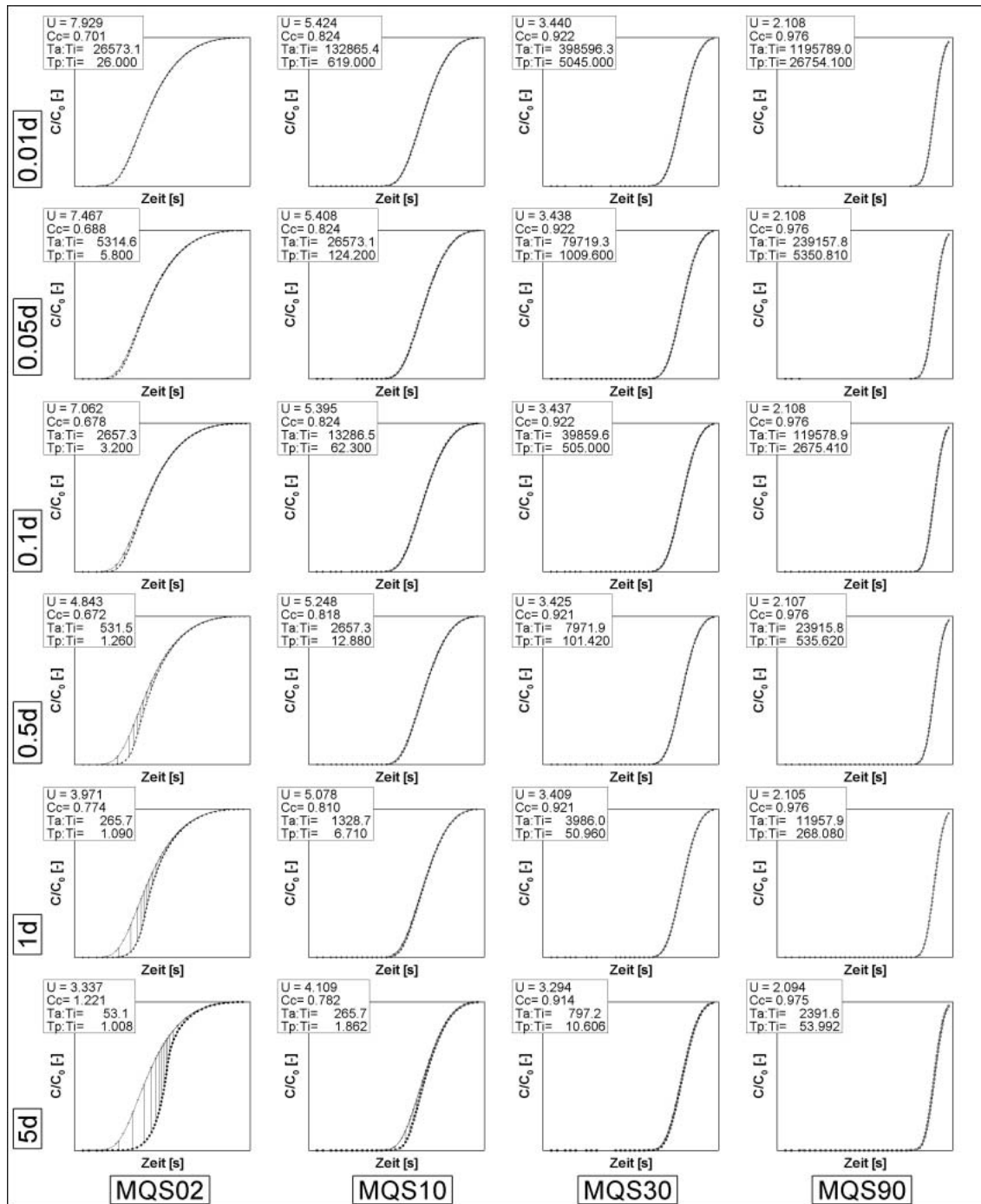
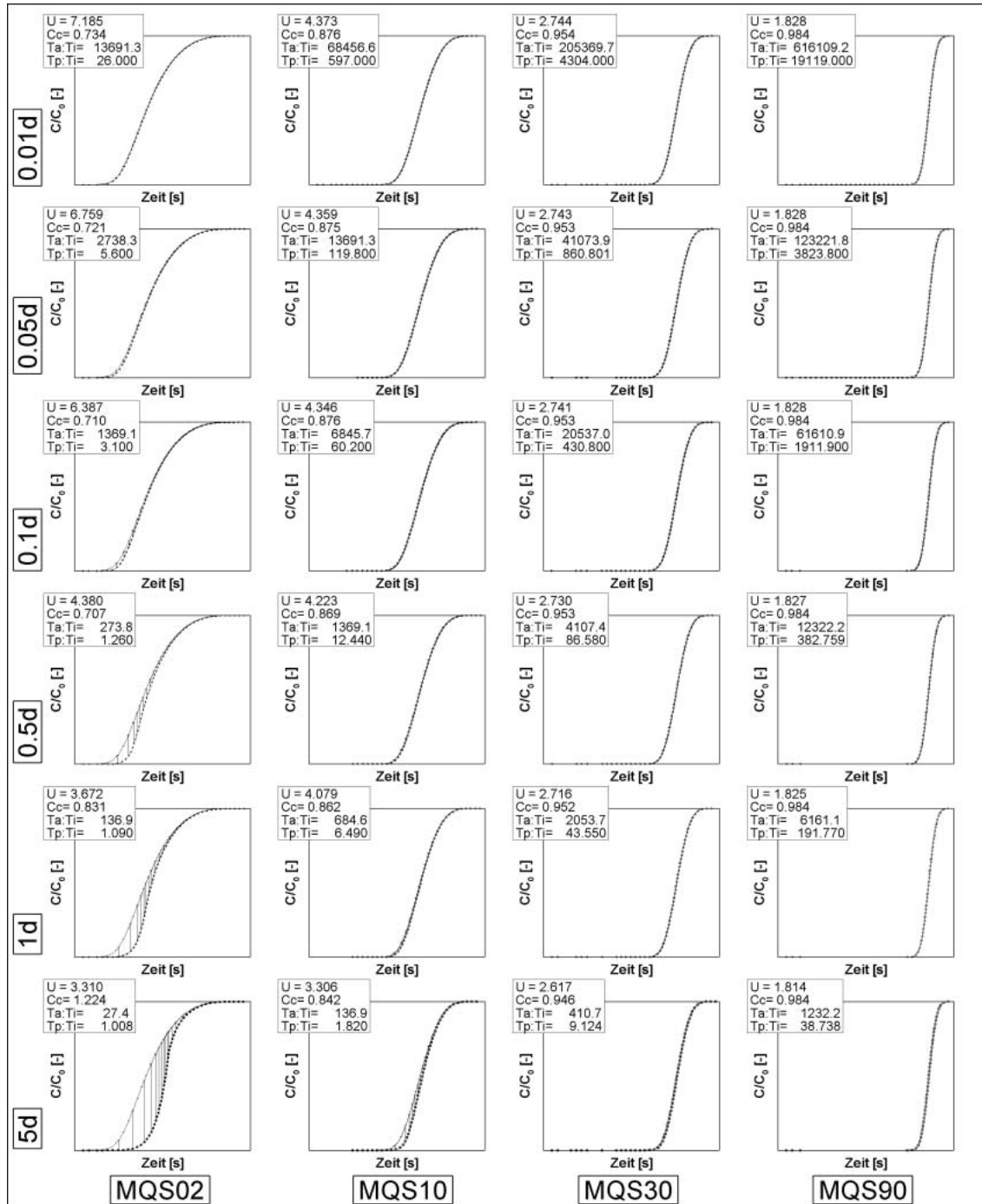


Abbildung 5.11: Variante 2 für Luft, Kennzahlen: $U, C_c, T_a : T_i, T_p : T_i$

Abbildung 5.12: Variante 3 für Luft, Kennzahlen: $U, C_c, T_a : T_i, T_p : T_i$

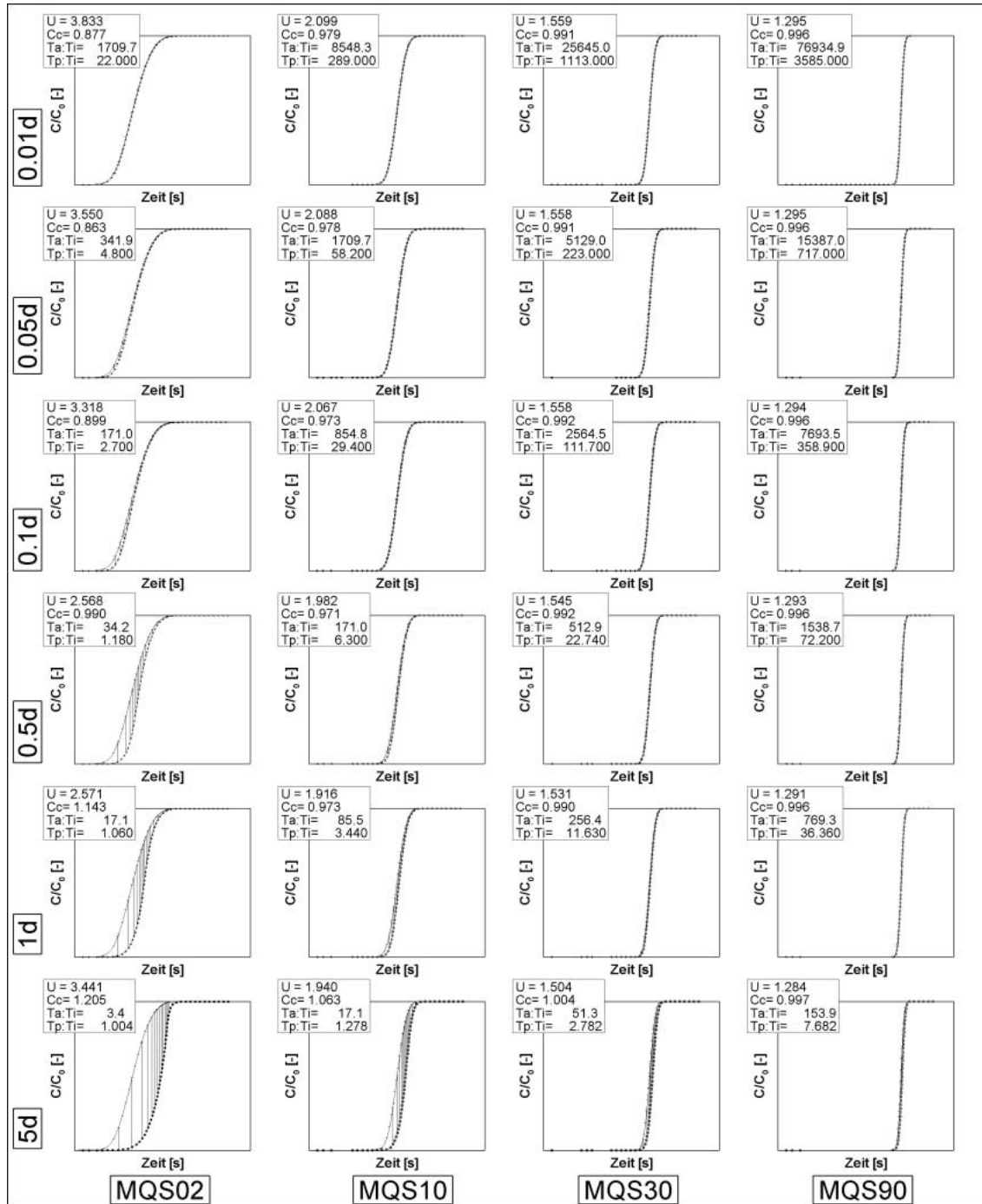


Abbildung 5.13: Variante 4 für Luft, Kennzahlen: $U, C_c, T_a : T_i, T_p : T_i$

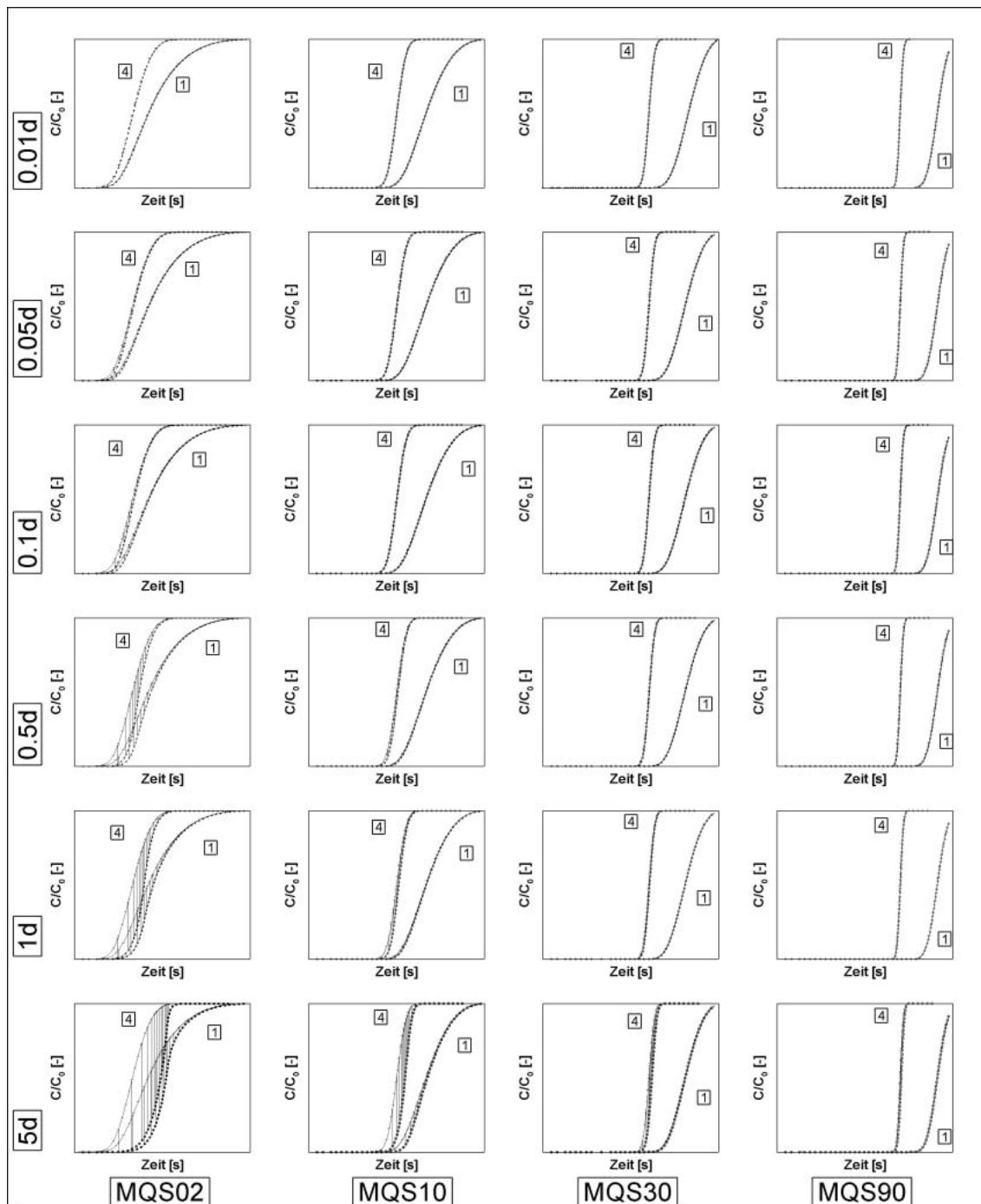


Abbildung 5.14: Variante 1 und 4 für Luft;
qualitative Gegenüberstellung der Durchbruchkurven

5.5 Zusammenfassung

Insgesamt zeigt sich für die Berechnungen der Varianten 1 bis 4 mit dem Trägerfluid Wasser und dem Trägerfluid Luft, dass die vorgeschlagene Methode zur Transformation der Durchbruchskurve einer Impulseinleitung in die Durchbruchskurve einer unendlichen Tracerzugabe unter Berücksichtigung einiger Randbedingungen sehr gut anwendbar ist. Die gefundenen Randbedingungen für eine gute Approximation lauten:

- Das Verhältnis der Peakzeit zur Impulsdauer $T_p : T_i$ sollte größer als vier sein.
- Die maximale relative Konzentration der Durchbruchskurve der Impulseinleitung C/C_0 liegt bei 0.1.

Unabhängig von der Kenntnis der tatsächlichen Tracerdurchbruchskurve für eine unendliche Einleitung kann so für bestimmte Verhältnisse der Peakzeit zur Impulsdauer eine Schätzung über die Qualität der Approximation vorgenommen werden und somit die normierte Summenkurve zur Typisierung verwendet werden. Das Verhältnis $T_d : T_i$ ist nicht so gut geeignet zur Beurteilung wie $T_p : T_i$, jedoch kann diese Kennzahl z.B. vor der Durchführung des eigentlichen Tracerversuchs im Feld bestimmt werden. Damit besteht die Möglichkeit, zumindest eine sinnvolle Startkonfiguration festzulegen. In der Praxis jedoch sollte die Versuchsdurchführung so festgelegt werden, dass die kürzestmögliche Impulsdauer, welche i. d. R. durch die Messgenauigkeit der Geräte zur Aufzeichnung der Durchbruchskurve bestimmt wird, gewählt wird. Um zu große Fehler durch Messungenauigkeiten zu vermeiden, sollte weiterhin ein zusätzlicher Versuch mit möglichst langer Impulsdauer durchgeführt werden. So

kann bereits bei der Durchführung von nur zwei Versuchen durch Beurteilung der Lage der aus den Versuchen gewonnenen normierten Summenkurve die Qualität der Approximation abgeschätzt werden.

Der hier nicht dargestellte Vergleich von den Durchbruchskurven der expliziten STRAFE6 Berechnung der zeitlich begrenzten Tracerzugabe mit den Impuls-Durchbruchskurven, erzeugt aus der STRAFE6 Berechnung für kontinuierliche Tracereinleitung, zeigt wie gefordert (vgl. Gleichung 4.8) eine hervorragende Übereinstimmung. Dies unterstreicht die Anwendbarkeit dieser Transformationseigenschaft für numerische Untersuchungen und bietet den Vorteil, bei Einhaltung der Courant- und Pecletzahl einen möglichst großen konstanten Zeitschritt ansetzen zu können, obwohl die Impulsdauer t_0 deutlich kleiner sein kann. Für die explizite Vorgabe wäre eine Reduzierung des Zeitschrittes auf zumindest t_0 erforderlich, um die entsprechende Randbedingung der Impulseinleitung umsetzen zu können.

Desweiteren zeigen die Untersuchungen zu dem Trägerfluid Wasser einerseits und dem Trägerfluid Luft andererseits bei identischen Systemeigenschaften des betrachteten Aquifers (Porosität, Permeabilität der Klüfte und Gesteinsmatrix sowie Kluftverteilung) deutlich verschiedene Systemreaktionen. Während für die Untersuchungen mit Wasser deutlich verschiedene Charakteristika der Durchbruchskurven zu den Varianten 1 bis 4 erkennbar sind, ergibt sich für Luft ein sehr homogenes Bild der Durchbruchskurven. Für Labor- und Feldexperimente mit dem Trägerfluid Gas, welche für den Aufbau eines numerischen Modells herangezogen werden, bedeutet dies, dass eine direkte Übertragbarkeit der Systemidentifikation auf das gleiche System mit dem Trägerfluid Wasser nicht gegeben ist. Die Wertigkeit

der relevanten diffusiven bzw. advektiven Austauschprozesse ist für die beiden Trägerfluide sehr unterschiedlich. Weiterführende Untersuchungen zu einer Übertragbarkeit ermittelter Kennzahlen mit dem Trägerfluid Luft auf das Trägerfluid Wasser sind für die Zukunft sinnvoll. Es wäre z. B. denkbar durch systematische numerische Untersuchungen einen empirischen Zusammenhang zwischen den Kurvenkennzahlen für das Trägerfluid Wasser und denjenigen des Trägerfluids Luft zu finden. Eine Überprüfung durch Laborversuche wäre möglich und sinnvoll.

Kapitel 6

Strömungs- und Transportexperimente mit diskreten Modellansätzen

6.1 Übersicht

Nach der Vorstellung einer geeigneten Methode zur Transformation der Durchbruchskurve einer Impulseinleitung in die Durchbruchskurve einer kontinuierlichen Tracerzugabe wird im nachfolgenden Kapitel ein synthetischer Kluftaquifer betrachtet, an dem die erweiterte Methode zur Typisierung eines multiporösen Festgesteinsaquifers angewendet wird. An dem zu untersuchenden Gebiet werden verschiedene Parameterkonfigurationen bezüglich der Matrixdurchlässigkeit untersucht, um so die Bandbreite der möglichen Austauschmodelle für die anschließende Simulation mit Mehrkontinuum-Ansätzen abbilden zu können. Die bereits definierten Kenngrößen U und C_c (vgl. Gleichung 5.1 und 5.2) und ihre Wertebereiche für eine Typisierung werden hinsichtlich ihrer Eignung diskutiert. Eine weitere Kennzahl, der zeitliche Tracerdurchgangskoeffizient γ_{el} , zur Beschreibung des Verhältnisses aus frühem zu spätem Tracerdurchgang wird eingeführt. Eine wichtige Grundeigenschaft für die betrachteten Kenngrößen zur Typisierung ist, dass sie

unabhängig von der Kenntnis der vorhandenen Komponenten sind. Es werden lediglich die Größen verwendet, die eindeutig in Labor- und Feldversuchen zu ermitteln sind.

Die Ergebnisse der diskreten Berechnungen führen zu einer Identifikation des untersuchten Festgesteinsaquifers als

- DPSP-System (doppelt porös, single permeabel),
- DPDP-System (doppelt porös, doppelt permeabel)
- oder SPSP-System (single porös, single permeabel).

Die identifizierten Systeme werden in Kapitel 7 als Mehrkontinuum-Modelle umgesetzt.

6.2 Beschreibung des Untersuchungsgebietes

6.2.1 Allgemeines

Das im vorliegenden Anwendungsbeispiel betrachtete Untersuchungsgebiet wird in Anlehnung an die Untersuchungen zum Einfluss der Austauschprozesse auf das Transportverhalten von zwei gekoppelten Komponenten nach JANSEN (1999) erstellt. Die geometrische Konfiguration für das Untersuchungsgebiet wird durch die Parameter der übergeordneten Kluftkomponente festgelegt. In einem vereinfachten Modell werden hier die Orientierung θ der Kluftachse zur Horizontalen, die Kluftlänge A_{0i} , die Kluftdicke D und die äquivalente hydraulische Öffnungsweite $2b_i$ als maßgebende Parameter für

die Generierung des Kluftnetzwerkes identifiziert (vgl. JANSEN, 1999; LONG ET AL., 1982).

6.2.2 Geometrische Parameter des Untersuchungsgebietes

JANSEN (1999) stellt in seiner Studie zum Einfluss der Austauschprozesse auf das Transportverhalten von zwei gekoppelten Aquifer-Komponenten zwei Kluftnetzwerke vor, die sich hinsichtlich des Mittelwertes und der Standardabweichung für eine gewählte Dichtefunktion unterscheiden. Das hier vorgestellte Kluftnetzwerk entspricht *Netz01* mit einer reduzierten Kantenlänge von je 5.0 m. Die Parameter der diskret abgebildeten übergeordneten Kluftkomponente sind in Tabelle 6.1 aufgeführt. Für die vorliegende Untersuchung werden nur solche Klüfte betrachtet, die auch ohne Berücksichtigung der Matrix einen Beitrag zur Durchströmung des Gebietes leisten. Dead-End-Klüfte treten nicht auf.

Die Generierung des Kluftnetzwerkes mit den in Tabelle 6.1 vorgegebenen geometrischen Parametern erfolgt mit den am Lawrence Berkeley National Laboratory, Berkeley, Kalifornien, USA, entwickelten Programmen FMGN und RENUMN (BIRKHÖLZER & KARASAKI, 1996). Eine weiterführende Darstellung zur Generierung von Kluft-Strukturmodellen findet sich z.B. in SILBERHORN-HEMMINGER (2002).

6.2.3 Einrichtung des Messfeldes

Das Kluftnetzwerk, die Lage der Randbedingungs- bzw. Beobachtungs-Ports und die Finite-Elemente-Diskretisierung für die dis-

Tabelle 6.1: Geometrische Parameter der diskret abgebildeten Kluftkomponente

Anzahl Kluftscharen			2
Kluftorientierung	θ	$[\circ]$	
- Verteilung			konstant
- Mittelwert			45 / 135
- Standardabweichung			0 / 0
Kluftlänge (Vorgabe)	A_{0i}	$[m]$	
- Verteilung			konstant
- Mittelwert			1
- Standardabweichung			0
Kluftlänge (generiert)	A_{0i}	$[m]$	
- Verteilung			lognormal
- Mittelwert		$[m]$	8.16e-02
- Standardabweichung		$[m]$	3.12e+00
Kluftdichte	D	$[1/m^2]$	6.00 / 6.00
Öffnungsweite (Vorgabe)	$2b_i$	$[m]$	
- Verteilung			konstant
- Mittelwert			1.00e-04
- Standardabweichung			0

kreten Modellrechnungen, welche für das Anwendungsbeispiel als Feldexperimente betrachtet werden, können Abbildung 6.1 entnommen werden. Das diskrete Modell umfasst insgesamt 30368 Netzknoten, 60057 Dreieckselemente und 12030 Stabelemente. In dem Untersuchungsgebiet mit einer Kantenlänge von 5.0m und einer angenommenen Mächtigkeit von 1.0m sind insgesamt dreizehn Randbedingungs-Ports angeordnet. Die Lage der Ports wird so gewählt, dass sich ein nahezu gleichmäßiges Raster ergibt. Geringfügige Abweichungen kommen dadurch zustande, dass mindestens ein zu einer Kluft zugehöriger Netzknoten innerhalb des Ports liegen muss. Diese Forderung ist notwendig, um Vergleichsrechnungen durchführen zu können, bei denen ausschließlich das diskrete Kluftnetzwerk betrachtet wird. Die Kantenlänge der gewählten Ports be-

trägt 0.1 m . Die Koordinaten der Port-Mittelpunkte können Tabelle 6.2 entnommen werden.

Tabelle 6.2: Port-Mittelpunkte

Port	$X_m[m]$	$Y_m[m]$
1	-2.00	-2.00
2	-2.00	1.90
3	2.00	2.00
4	2.00	-2.00
5	0.00	0.00
6	-2.00	0.00
7	0.00	2.00
8	2.00	0.00
9	0.00	-1.90
A	-0.90	-1.00
B	-0.90	1.00
C	1.00	0.90
D	1.00	-0.90

Das für das numerische Modell eingerichtete Messstellennetz aus dreizehn Ports orientiert sich an den Labor- und Feldversuchen des Forschungsverbundprojektes „Festgesteins-Aquiferanalog“ der DFG (vgl. HEMMINGER ET AL., 1997; HÖTZL ET AL., 2000, 1998; KÖNGETER ET AL., 1997, 2000; NEUNHÄUSER ET AL., 2000; SAUTER ET AL., 2000; TEUTSCH ET AL., 1997). Das Messstellennetz wird so gewählt, dass nahezu das gesamte Untersuchungsgebiet erfasst wird, ein Einfluss der Ränder durch einen Randabstand von 0.5 m möglichst klein gehalten wird und unterschiedliche Richtungen in den Versuchen betrachtet werden können. Wie bereits in Kapitel 3 erläutert, sind sowohl Port-Messungen als auch Profil-Messungen möglich. Bei Profil-Messungen werden mehrere sich auf einer Linie befindende Ports gleichzeitig in die Versuchsdurchführung einbezogen, z.B. zu einer Versuchsanordnung unter 45° die Ports 6, A und 9 (6A9) sowie die Ports 7, C und 8 (7C8).

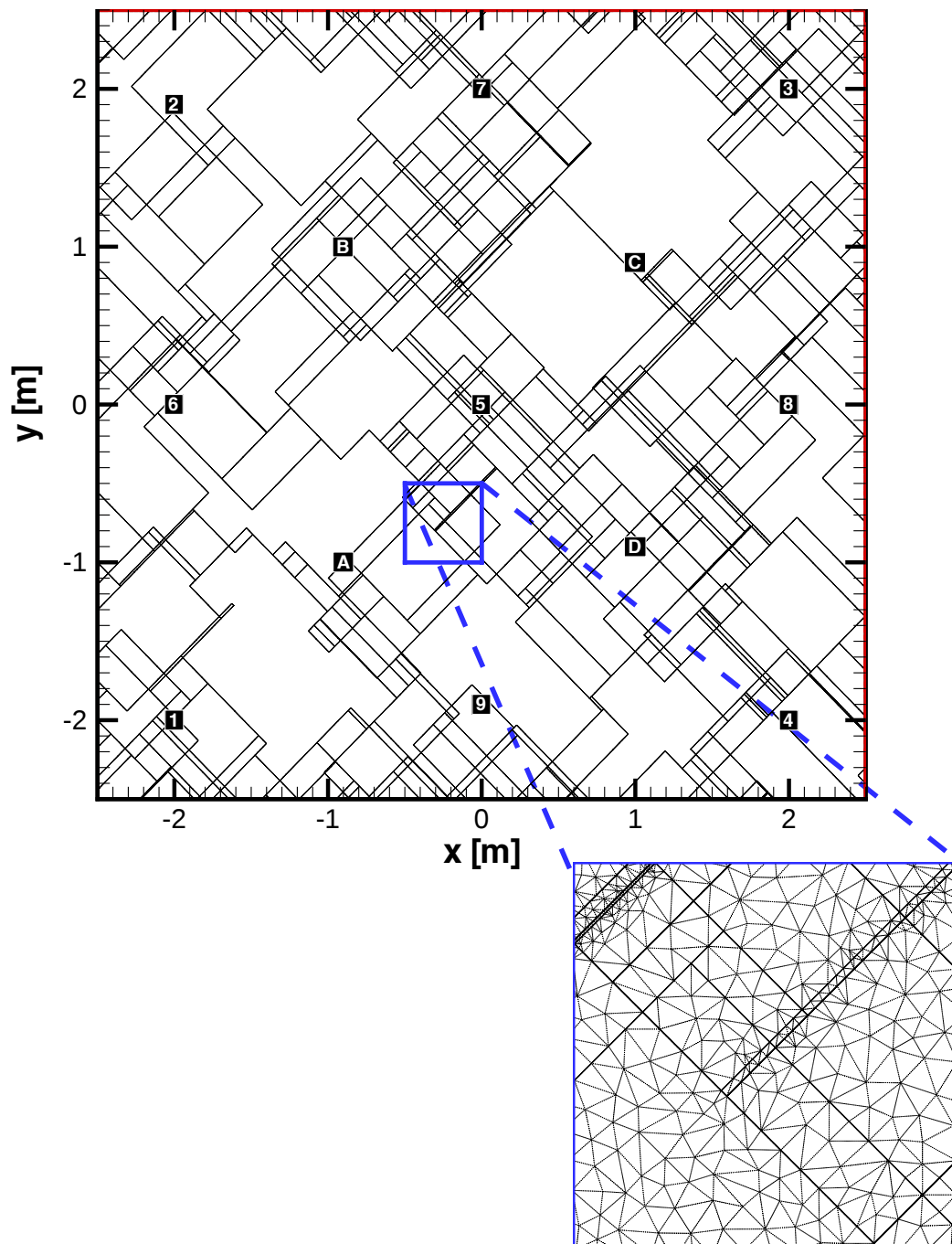


Abbildung 6.1: Kluftnetzwerk und Lage der Randbedingungs-Ports; Finite-Elemente-Diskretisierung eines Bereichs

6.2.4 Geostatistische Beschreibung des Untersuchungsgebietes

Die Parameter der ebenfalls diskret abgebildeten untergeordneten Matrixkomponente sind in Tabelle 6.3 zusammengestellt.

Tabelle 6.3: Geometrische Parameter der diskret abgebildeten Matrixkomponente

Blockanzahl			705
Volumen	V_0	$[m^3/m]$	25.00
Interfacefläche	A_0	$[m^2/m]$	446.38
Spezifische Oberfläche	Ω_0	$[1/m]$	17.86
Penetrationstiefe	s_{max}		
- Verteilung			lognormal
- Mittelwert	$\bar{s}_{max}$	$[m]$	4.58e-02
- Standardabweichung	$\sigma_{s_{max}}$	$[m]$	5.28e-02
- Minimum	$\min(s_{max})$	$[m]$	7.34e-05
- Maximum	$\max(s_{max})$	$[m]$	4.39e-01

Die Häufigkeitsverteilungen der Interfacefläche A_{0j} und der maximalen Penetrationstiefen s_{maxj} sind in Abbildung 6.2 dargestellt. Der Index j weist darauf hin, dass es sich um Parameter der Matrixblöcke handelt. Der Index i (vgl. Tabelle 6.1) bezieht sich auf die Klüfte des Kluftnetzwerkes. Die Gesamtinterfacefläche A_0 ergibt sich aus:

$$A_0 = 2 \sum_i A_{0i} \quad (6.1)$$

Die spezifische Oberfläche Ω_0 beschreibt das Verhältnis der Interfacefläche zum Volumen des Untersuchungsgebietes.

$$\Omega_0 = A_0/V_0 \quad (6.2)$$

Die hier beschriebenen Parameter der untergeordneten Komponente sind entscheidend zur Beschreibung der Austauschprozesse bei einer Mehrkontinuum-Modellierung (vgl. Anhang A.4). Ihre Ermittlung ist jedoch nur dann möglich, wenn die exakte Geometrie der Kluftstrukturen bzw. die statistischen Parameter bekannt sind. Die exakte Bestimmung der Geometrie ist für Feldexperimente nicht immer möglich. Dieser Sachverhalt wird bei der an die diskreten numerischen Untersuchungen anschließenden Mehrkontinuum-Modellierung berücksichtigt und diskutiert.

Zur Auswertung der räumlichen Verteilung der Matrixblöcke wird neben der reinen Betrachtung des Kluftnetzwerkes eine Fenster-technik „Moving Window Statistic“ aus der Geostatistik (vgl. z.B. ISAACS & SRIVASTAVA, 1989) eingesetzt. Die Fenstertechnik wird für eine Fenstergröße von $0.125\text{ m} \times 0.125\text{ m}$ angewendet. In dem Untersuchungsgebiet werden 10000 Zufallspunkte verteilt, um für die statistische Auswertung eine ausreichende Datenmenge zu gewährleisten. Für jeden Zufallspunkt wird der Block identifiziert, in dem der Zufallspunkt angeordnet ist. Jeder Block wird durch die maximale Penetrationstiefe, das Blockvolumen und die Blockoberfläche beschrieben. Die Ergebnisse der Fenstertechnik sind für die Penetrationstiefe s_{max} als Rasterabbildung in Abbildung 6.3 dargestellt.

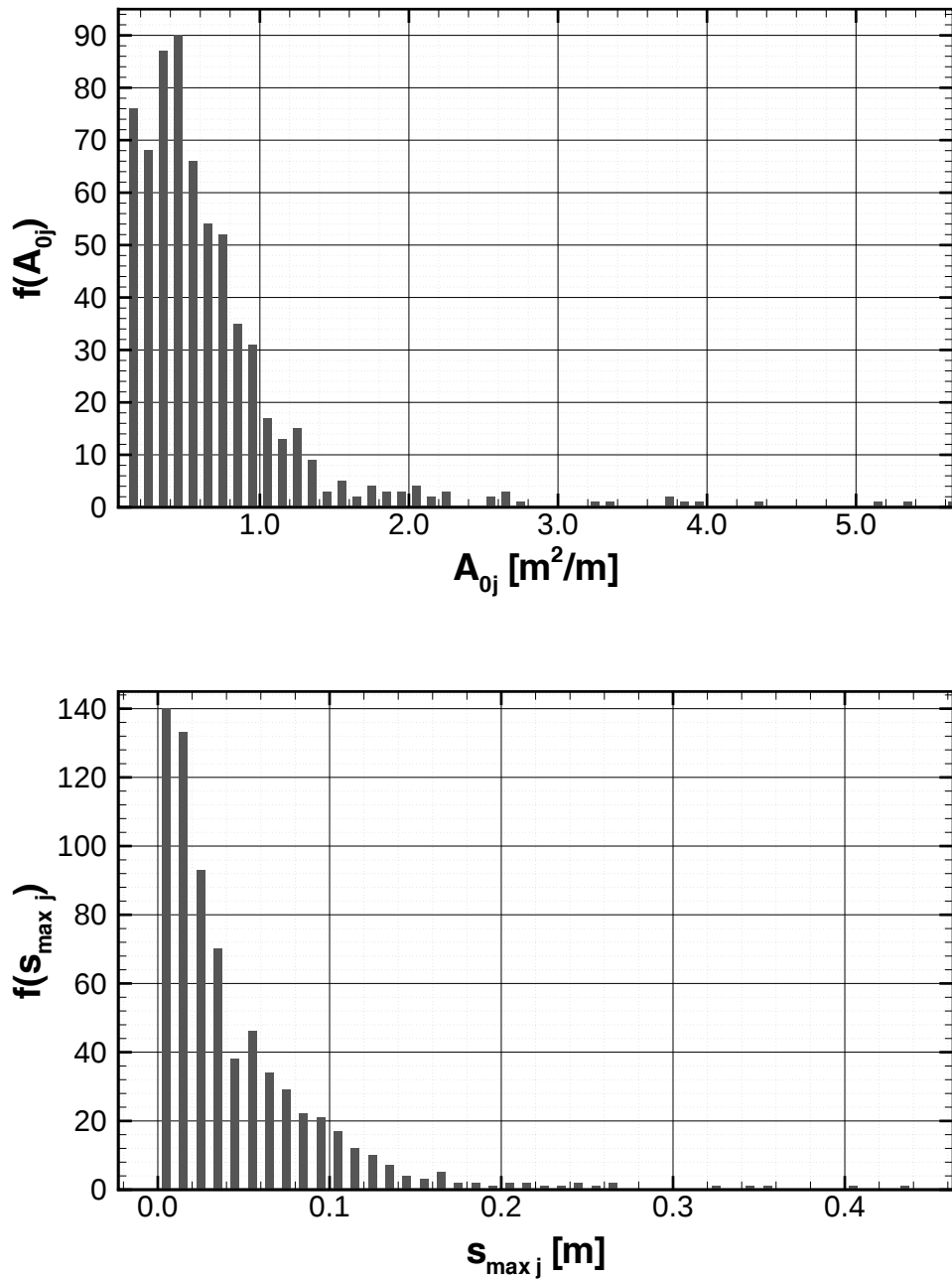


Abbildung 6.2: Häufigkeitsverteilungen für die Interfacefläche A_{0j} (oben) und die maximale Penetrationstiefe $s_{\max j}$ (unten)

Die Darstellung erfolgt je Fenster für die Identifikation

- des arithmetisch mittleren Blocks,
- des minimalen Blocks
- und des maximalen Blocks.

Es kann den drei Rasterdarstellungen jeweils die Information über Bereiche mit großen Matrixblöcken (helle Bereiche) sowie über Bereiche mit kleinen Penetrationstiefen und entsprechend dichten Klüften (dunkle Bereiche) entnommen werden.

In Abbildung 6.4 sind der Best-Fit-Tensor der spezifischen Kluftfläche und die aus der Geometrie des Kluftnetzwerkes ermittelten diskreten Werte dargestellt. Die spezifische Kluftfläche Ω_w ist definiert als Quotient aus der Summe der orthogonalen Projektionen aller Kluftflächen auf die Strömungsrichtung in der untergeordneten Komponente und dem Bezugsvolumen der untergeordneten Komponente. Die spezifische Kluftfläche ist ebenso wie die spezifische Oberfläche Ω_0 ein Maß für den Zerklüftungsgrad des Festgesteins.

Die Kenntnis der spezifischen Kluftfläche ist bei der Mehrkontinuum-Modellierung zur Beschreibung regionaler Austauschprozesse erforderlich (doppelt poröse, doppelt permeable Systeme). Sie sind die Folge von Vermischungsprozessen bei unterschiedlich gerichteten advektiven Massenströmen zweier gekoppelter Komponenten und nicht die Folge von lokalen Druck- bzw. Konzentrationsgradienten.

Eine detaillierte Beschreibung zur Bestimmung des Best-Fit-Tensors findet sich z. B. in JANSEN (1999).

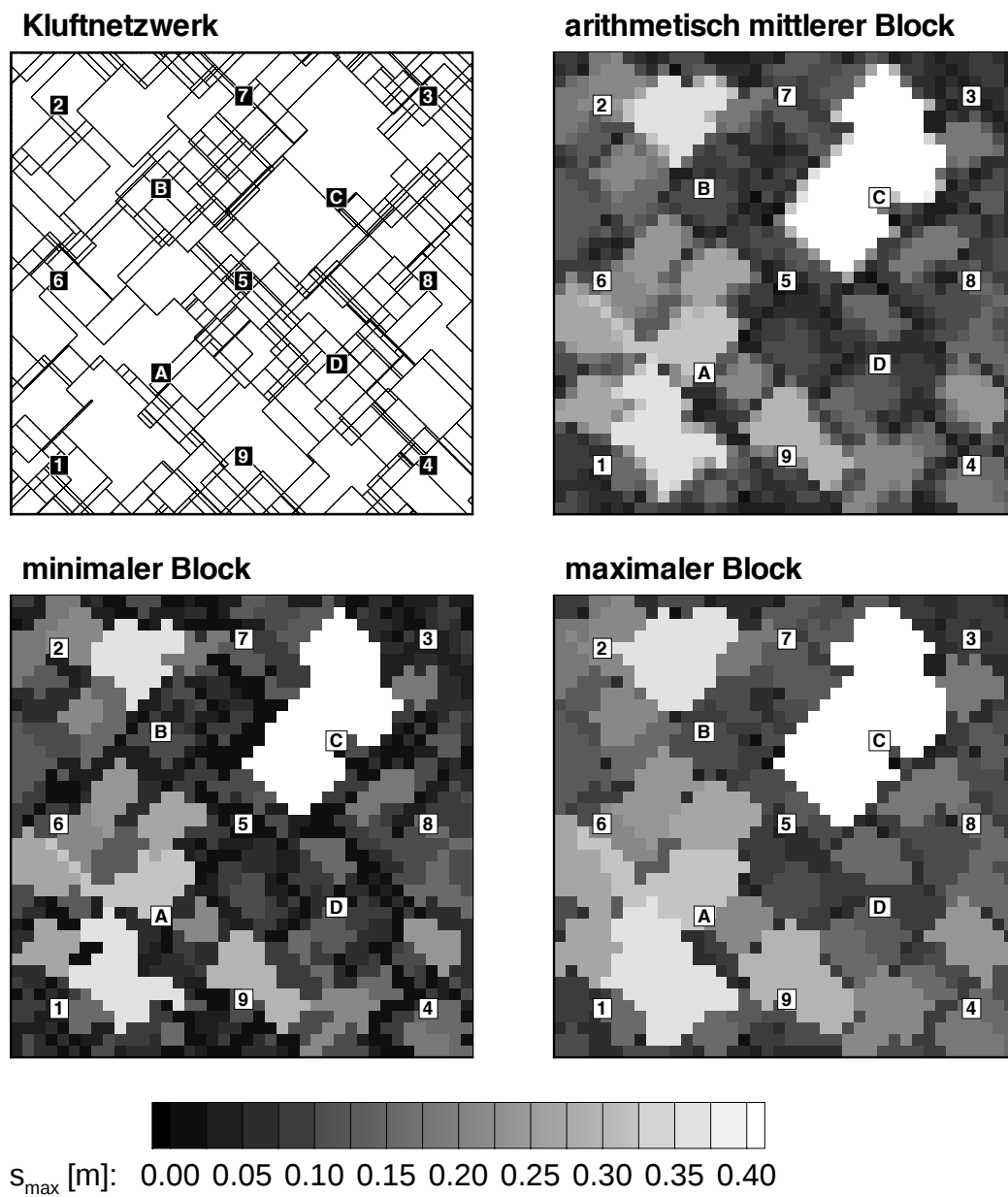


Abbildung 6.3: Räumliche Verteilung der Blockgrößen

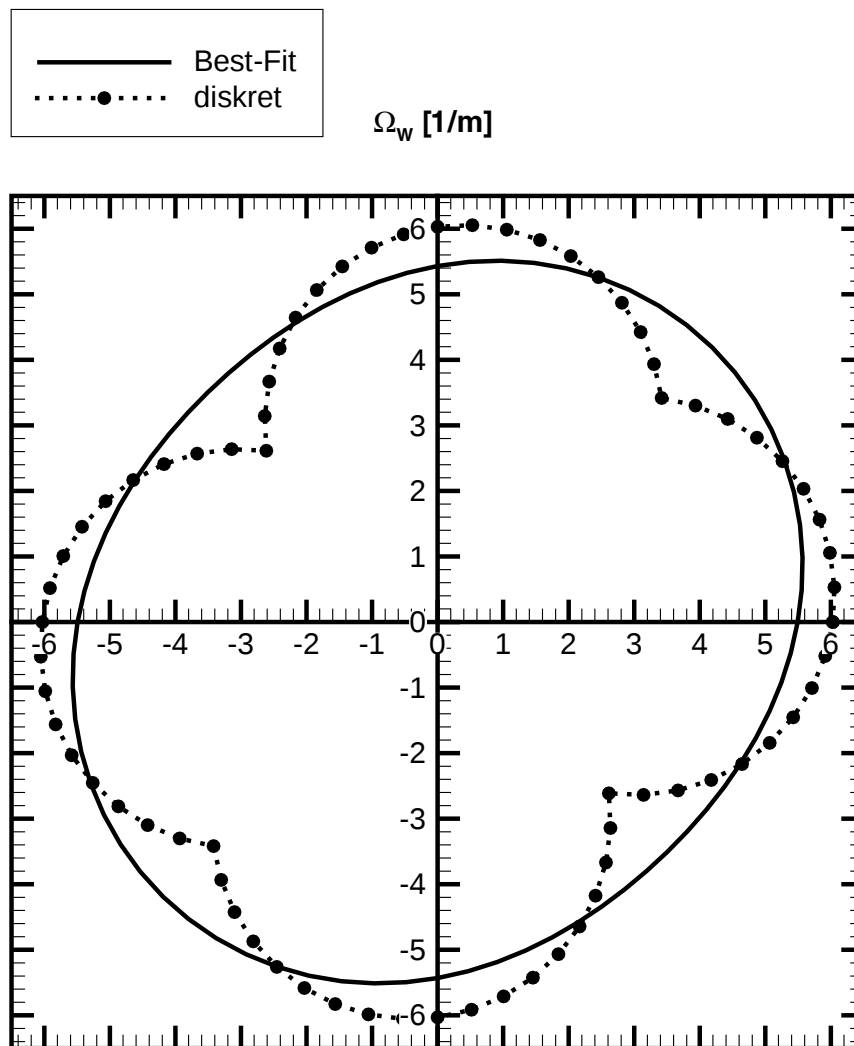


Abbildung 6.4: Tensor der spezifischen Kluftfläche $\Omega_{w,ij}$

6.3 Versuchsdurchführung am diskreten Modell

6.3.1 Materialparameter der diskreten Berechnung

Für das beschriebene Untersuchungsgebiet werden insgesamt fünf verschiedene Varianten betrachtet. Die Materialparameter sind in Tabelle 6.4 aufgeführt. Die Eigenschaften der Klüfte (Stabelemente) werden für alle Varianten gleich angesetzt. Die hydraulische Durchlässigkeit der Matrixblöcke (Dreieckselemente) wird von Variante 1 mit einer sehr geringen Durchlässigkeit bis hin zu Variante 5 mit einer großen Durchlässigkeit gesteigert.

Tabelle 6.4: Materialparameter der diskreten Berechnung

Klüfte (Stabelemente)			
Porosität einer Einzelkluft	n	$[m^3/m^3]$	1.00
Durchlässigkeit einer Einzelkluft	K	$[m/s]$	8.17e-03
longitudinale Dispersivität	α_l	$[m]$	1.00e-01
effektiver Diffusionskoeffizient	D_{mol}	$[m^2/s]$	1.00e-09
Gesteinsmatrix (homogen und isotrop; Dreieckselemente)			
Porosität	n	$[m^3/m^3]$	0.05
hydraulische Durchlässigkeit	K	$[m/s]$	
- Variante 1			9.61e-11
- Variante 2			2.32e-08
- Variante 3			9.61e-08
- Variante 4			1.15e-06
- Variante 5			5.75e-06
longitudinale Dispersivität	α_l	$[m]$	1.00e-01
transversale Dispersivität	α_t	$[m]$	1.00e-02
effektiver Diffusionskoeffizient	D_{mol}	$[m^2/s]$	2.30e-10

6.3.2 Strömungsrandbedingungen

Bei sämtlichen Versuchsdurchführungen wird für das gesamte Gebiet zunächst eine einheitliche Standrohrspiegelhöhe von 1.0 m vorgegeben. Am jeweiligen Einlass wird über die gesamte Simulationsdauer eine Standrohrspiegelhöhe von 1.05 m , am Auslass eine Standrohrspiegelhöhe von 1.0 m vorgegeben. Die Strömungsberechnung wird so lange durchgeführt, bis sich ein stationäres Strömungsfeld eingestellt hat. Die Stationarität wird anhand des gemessenen Durchflusses am Auslass (analog zu Feld- bzw. Laborversuchen) überprüft.

6.3.3 Transportrandbedingungen

Für die Tracerversuche wird jeweils das vorab berechnete Strömungsfeld verwendet. Es wird für sämtliche Versuchsdurchführungen angenommen, dass zu Simulationsbeginn kein Tracer im Gebiet enthalten ist. Ab Simulationsbeginn wird je nach Art des Versuchs über die gesamte Simulationsdauer bzw. für eine Dauer t_0 eine DIRICHLET-Randbedingung $C/C_0 = 1.0$ am Einlass angesetzt. Am Auslass wird jeweils die Durchbruchskurve aufgezeichnet.

6.4 Versuchsauswertung

6.4.1 Bestimmung der äquivalenten Kluftdurchlässigkeit

Für natürliche Kluftaquifere ist es nahezu unmöglich, die hydraulischen Eigenschaften der beteiligten Komponenten getrennt zu ermit-

tehn. Zur Bestimmung der Porosität und Durchlässigkeit der beteiligten Gesteinsmatrix besteht die Möglichkeit der Versuchsdurchführung an kleineren Gesteinsproben. Die Bestimmung der äquivalenten Parameter der übergeordneten Kluftkomponente ist nicht getrennt möglich. Dies betrifft vor allem die Bestimmung einer äquivalenten hydraulischen Durchlässigkeit. Sind die Geometrie des Kluftnetzwerkes und die Öffnungsweitenverteilung bekannt, so kann für sehr einfach strukturierte Kluftnetzwerke eine äquivalente hydraulische Durchlässigkeit direkt aus der Geometrie bestimmt werden. Für komplexere Kluftnetzwerke bei detaillierter Kenntnis der Geometrie und Kluftöffnungsweitenverteilung bzw. der statistischen Größen ist der Einsatz von diskreten numerischen Modellen, die nur das Kluftnetzwerk abbilden, möglich. Mit einem solchen Modell lässt sich dann z. B. unter Anwendung der Methode nach LONG ET AL. (1982) ein Best-Fit-Tensor für die äquivalente hydraulische Durchlässigkeit der Kluftkomponente finden. Eine detaillierte Darstellung zu der Erstellung eines geeigneten Strukturmodells als Basis für die Erstellung des diskreten Kluftnetzwerkes aus Naturmessdaten findet sich z. B. in SILBERHORN-HEMMINGER (2002).

Für das Anwendungsbeispiel ist aufgrund der synthetischen Natur des betrachteten Festgesteinsaquifers die Bestimmung einer äquivalenten Durchlässigkeit mit Hilfe eines numerischen Modells möglich. Zur Erstellung eines geeigneten Mehrkontinuum-Modells wird jedoch zunächst auf Messungen zurückgegriffen, die ohne weiteres auch im Feld durchgeführt werden können. Zur Bestimmung eines Best-Fit-Tensors zur Beschreibung der äquivalenten Durchlässigkeit der übergeordneten Komponente werden insgesamt acht Profil-Profil-Messungen je Variante durchgeführt.

In Tabelle 6.5 sind zu jeder Profil-Profil-Messung, welche zur Bestim-

Tabelle 6.5: Konfiguration der Profil-Profil-Messungen für Strömung

Konfiguration		$l[m]$	$I_{direkt}[m/m]$	$\alpha[^\circ]$	$A[m^2]$
Einlass	Auslass				
162	384	4.00	1.25e-02	0.0	5.00
6A9	7C8	2.83	1.77e-02	45.0	3.54
194	273	4.00	1.25e-02	90.0	5.00
9D8	6B7	2.83	1.77e-02	135.0	3.54
384	162	4.00	1.25e-02	180.0	5.00
7C8	6A9	2.83	1.77e-02	225.0	3.54
273	194	4.00	1.25e-02	270.0	5.00
6B7	9D8	2.83	1.77e-02	315.0	3.54

mung des Best-Fit-Tensors verwendet wird, die drei Ports des Einlasses, die drei Ports des Auslasses, die Länge der kürzesten Verbindungsstrecke l , der direkte hydraulische Gradient zwischen den Profilen I_{direkt} , der Winkel α gegenüber der x -Achse und die angenommene mittlere Breite des zur Verfügung stehenden Fließquerschnitts A aufgeführt.

Die Bestimmung der richtungsbezogenen äquivalenten Durchlässigkeiten der Kluftkomponente erfolgt unter der vereinfachten Annahme einer konstanten homogenen isotropen Matrixdurchlässigkeit k^M nach:

$$k^F(\alpha) = k_g(\alpha) - k^M \quad (6.3)$$

Die richtungsbezogene äquivalente Gesamtdurchlässigkeit $k_g(\alpha)$ in Gleichung (6.3) wird aus dem am Auslass beobachteten Gesamtdurchfluss Q_g errechnet zu:

$$k_g(\alpha) = \frac{Q_g(\alpha)}{I A} \quad (6.4)$$

Der mittlere hydraulische Gradient $I = I_{\text{direkt}}$ zu Gleichung (6.4) kann Tabelle 6.5 entnommen werden.

Zu den so gefundenen richtungsbezogenen äquivalenten Durchlässigkeiten der Kluftkomponente wird in einem weiteren Schritt ein Best-Fit-Tensor zur Beschreibung des Durchlässigkeitstensors der Kluftkomponente bestimmt.

Es sei an dieser Stelle angemerkt, dass sich aufgrund der Anordnung der Einlass- bzw. Auslass-Profil im Untersuchungsgebiet die durchflossene Querschnittsfläche im Gegensatz zu der Methode nach LONG ET AL. (1982) ändert und dass der Gradient des richtungsbezogenen Ersatzsystems ($k_g(\alpha)$) nicht mehr konstant ist. Dies wird in der Auswertung der Strömungsuntersuchungen für die Varianten 1 bis 5 einheitlich berücksichtigt durch die Annahme einer um den Faktor 1.25 vergrößerten Ersatzfläche gegenüber der Profillänge in der Mitte zwischen dem Einlass- und Auslass-Profil (vgl. Tabelle 6.5). Der Faktor ist an einer vereinfachten numerischen Voruntersuchung als sinnvoll ermittelt worden. Als mittlerer hydraulischer Gradient wird der sich rechnerisch auf der kürzesten Verbindung zwischen Einlass und Auslass ergebende Gradient angesetzt.

Die Ergebnisse der Strömungsberechnungen zur Bestimmung des äquivalenten Durchlässigkeitstensors der übergeordneten Komponente sind für die Varianten 1 bis 5 in Abbildung 6.5 dargestellt. Neben den Ellipsen, die die bestimmten Tensoren der Varianten beschreiben, sind zur Verdeutlichung der Problematik bei der Bestimmung einer äquivalenten Durchlässigkeit der Kluftkomponente aus Durchflussmessungen weitere Tensoren und diskrete Messwerte aufgetragen. So stellt die in der Legende mit *LONG* gekennzeichnete Ellipse den äquivalenten Durchlässigkeitstensor nach der Metho-

de von LONG ET AL. (1982) dar, den JANSEN (1999) für das isoliert betrachtete Kluftnetzwerk bestimmt hat. Für das vorliegende Kluftnetzwerk ergeben sich bei isolierter Betrachtung des Kluftnetzwerkes aufgrund des reduzierten Gebietes geringfügige Abweichungen gegenüber dem durch JANSEN (1999) bestimmten Tensor. Exemplarisch sind in Abbildung 6.5 für vier Richtungen die diskreten Messergebnisse aufgetragen (*nur Kluft integral*). Die Bezeichnung *integral* weist darauf hin, dass für diese Strömungssimulationen DIRICHLET-Randbedingungen integral über die entsprechenden Gebietsränder vorgegeben werden. Die mit *nur Kluft* gekennzeichneten Ergebnisse werden ebenfalls anhand von Profil-Profil-Messungen erzeugt, jedoch bei ausschließlicher Betrachtung des Kluftnetzwerkes ohne Berücksichtigung der Gesteinsmatrix. Es zeigt sich in Abbildung 6.5, dass mit zunehmender Durchlässigkeit der Matrixkomponente die ermittelten äquivalenten Durchlässigkeiten der Kluftkomponente überschätzt werden (Varianten 4 und 5). Die Varianten 1 bis 3 wie auch die Vergleichsrechnung *nur Kluft* liefern gut vergleichbare Ergebnisse. Die Tendenz der Zunahme der Durchlässigkeit der Kluftkomponente ist für diese Varianten ebenfalls zu beobachten (vgl. Bereichsdarstellung in Abbildung 6.5). Die Differenzen bei der Bestimmung der äquivalenten Durchlässigkeitstensoren für die übergeordnete Komponente ergeben sich aus den bereits beschriebenen vereinfachten Annahmen zur durchflossenen Querschnittsfläche und dem hydraulischen Gradienten. Es zeigt sich für die vorliegende Bandbreite innerhalb der Matrixdurchlässigkeit, dass die gewählte Methode die vorhandene Anisotropie zu jeder Variante in gleicher Weise liefert und die Abweichung der quantitativen Bestimmung der Durchlässigkeitswerte der übergeordneten Komponente zu einer maximalen Überschätzung von 30% führt. Die so ermittelten äquivalenten Durchlässigkeitstensoren der Kluftkomponente werden bei der Er-

stellung der Mehrkontinuum-Modelle zu den Varianten 1 bis 5 entsprechend berücksichtigt.

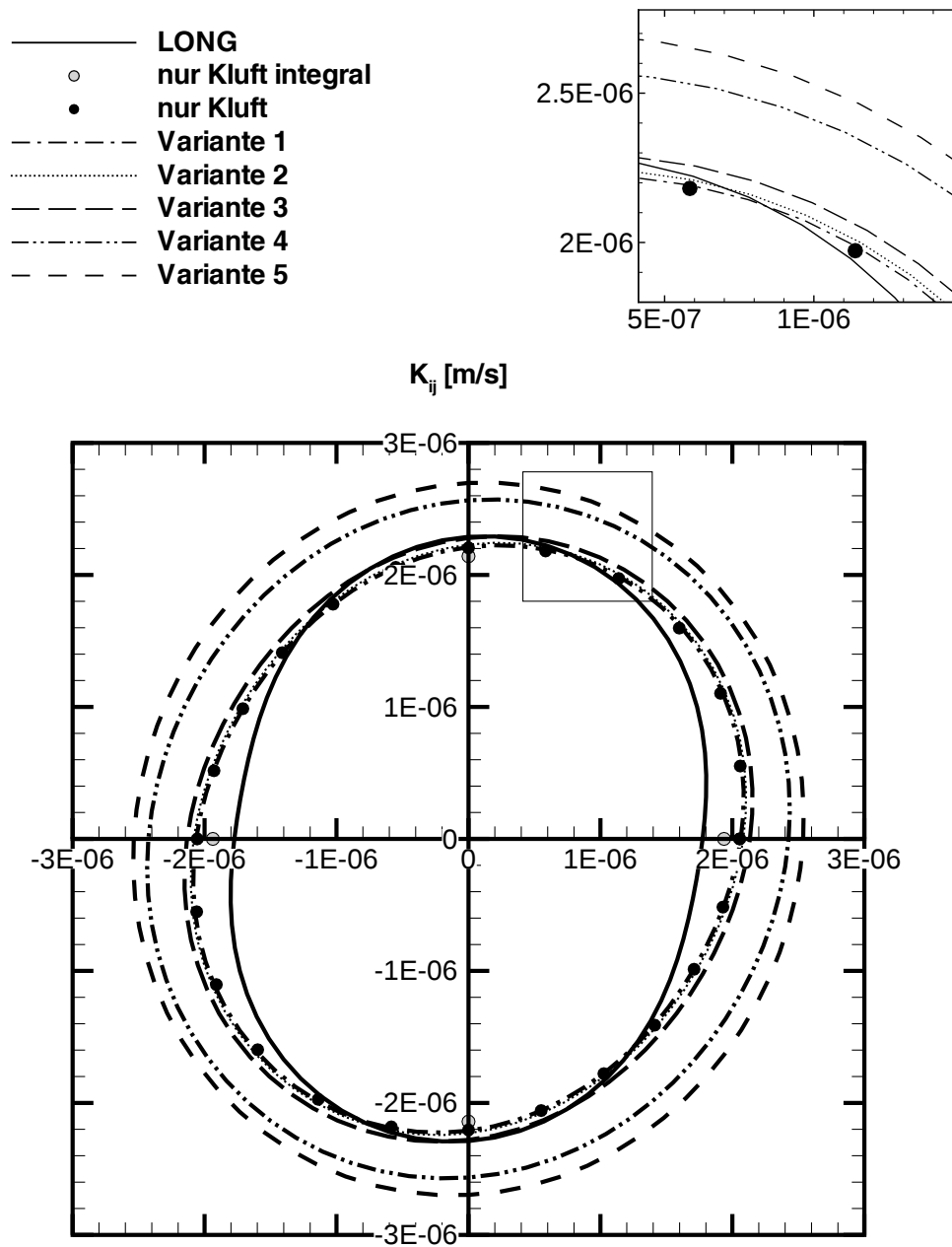


Abbildung 6.5: Tensoren der äquivalenten Durchlässigkeit K_{ij}

6.4.2 Analyse der Tracerdurchbruchskurven

Allgemeines

Im folgenden Unterkapitel werden die Ergebnisse der Simulationsrechnungen am diskreten Modell für die Transportuntersuchungen vorgestellt. Zunächst werden für alle möglichen Port-Port-Verbindungen Konfigurationen mit unterschiedlich langen impulsartigen Tracereinleitungen betrachtet. Die Auswertung erfolgt dahingehend, dass unter Berücksichtigung der Ergebnisse aus Kapitel 4 und 5 zu jeder Konfiguration die Tracerdurchbruchskurve einer zeitlich unbegrenzten Tracerzugabe approximiert und ihre Qualität beurteilt wird. Die Beurteilung erfolgt auf der Basis der Größen, die ohne Kenntnis der tatsächlichen Durchbruchskurve einer unbegrenzten Tracerzugabe vorhanden sind. Eine Kontrolle der Beurteilung erfolgt durch den Vergleich mit den Ergebnissen der Tracerexperimente mit einer zeitlich unbegrenzten Tracerzugabe.

Profil-Profil-Messungen werden zu diesem Zeitpunkt noch nicht betrachtet, obwohl diese bereits in der Versuchsdurchführung den integralen Charakter eines Mehrkontinuum-Modells beinhalten. Diese Art der Versuchsdurchführung wird im Anschluss an den Aufbau der Mehrkontinuum-Modelle verwendet, um die Eignung dieser Modelle für integrale Prognoserechnungen beurteilen zu können.

Methode zur Beurteilung der Qualität der approximierten Tracerdurchbruchskurve einer unendlichen Tracerzugabe

Für eine uneingeschränkte Anwendbarkeit der erweiterten Methode zur Typisierung eines multiporösen Festgesteinsaquifers ist es notwendig, eine Methode zur Beurteilung der Qualität der Approximation der Typkurve aus einer Impulseinleitung (normierte Summenkurve) bereit zu stellen. Die hier vorgestellte Methode beruht auf den Gleichungen der in Kapitel 4.2.2 vorgestellten analytischen Lösung. Die Berechnung der Durchbruchskurve einer Impulseinleitung der Dauer t_0 erfolgt durch die Abbildung der Differenz aus der Durchbruchskurve einer zeitlich unbegrenzten Tracerzugabe ab dem Zeitpunkt $t = 0$ und der um die Dauer des Impulses t_0 verschobenen Durchbruchskurve einer zeitlich unbegrenzten Tracerzugabe. Entsprechend wird zu jeder aus den Impulseinleitungen bestimmten normierten Summenkurve die verschobene Summenkurve zu den untersuchten Impulsdauern $t_0 = 1d, 10d, 100d$ erstellt und ihre Differenzenkurve gebildet. Die Beurteilung der Qualität der approximierten Typkurve erfolgt dann durch den Vergleich der rekonstruierten Durchbruchskurve und der gemessenen Durchbruchskurve der Impulseinleitung. Es zeigt sich deutlich, dass die Messung einer Transportkonfiguration mit einer möglichst langen Impulsdauer (hier $100d$) für die Beurteilung der Qualität der approximierten Typkurve sehr hilfreich ist. Zu frühen Zeitpunkten entspricht der ansteigende Ast der Durchbruchskurve einer solchen Impulseinleitung per Definition derjenigen Durchbruchskurve, die bei zeitlich unbegrenzter Tracerzugabe aufgezeichnet würde.

In den nachfolgenden Abbildungen 6.6 bis 6.17 sind zu den Varianten 1 bis 5 ausgewählte Ergebnisse dargestellt. Zu jeder präsentierten

Port-Port-Konfiguration werden zwei Abbildungen betrachtet. Die jeweils erste Darstellung (z. B. Abbildung 6.6) beinhaltet die Vergleiche mit den gemessenen Kurven aus einer Impulsdauer von einem Tag (oben) und zehn Tagen (unten). Die durchgezogene Linie repräsentiert die gemessenen Ergebnisse, die mit $C^*(Nd - > Md)$ bezeichneten Kurven zeigen jeweils die aus der Nd -Impulsdauer rekonstruierten Tracerdurchbruchskurven zu der Md -Impulsdauer. Die jeweils zweite Darstellung (z. B. Abbildung 6.7) beinhaltet den Vergleich mit der Tracerdurchbruchskurve aus dem Experiment mit einer Impulsdauer von 100 Tagen (oben). Im unteren Teil dieser Abbildungen ist der direkte Vergleich der aus den 1, 10 und 100 Tagesimpulsen approximierten Tracerdurchbruchskurven mit der im numerischen Experiment gemessenen Tracerdurchbruchskurve für eine unendliche Tracerzugabe gezeigt.

Die dargestellten Ergebnisse zu Variante 1 (Abbildungen 6.6 bis 6.9) erfolgen exemplarisch für alle Varianten für verschiedene Transportentfernungen (vgl. Abbildung 6.1). Zu den Varianten 2 bis 5 wird jeweils nur eine Port-Port-Konfiguration dargestellt. Die Port-Port-Konfiguration 1-2 in den Abbildungen 6.6 und 6.7 gehört zur Gruppe der mittleren betrachteten Transportentfernungen. Die in den Abbildungen 6.8 und 6.9 dargestellte Konfiguration 3-5 ist eine Messung entlang der Diagonalen, jedoch zu der Gruppe der kürzesten Transportentfernungen gehörend. Beide Konfigurationen zeigen deutlich, dass die Methode zur Approximation der Tracerdurchbruchskurve einer unendlichen Tracerzugabe zu sehr guten Ergebnissen führt. Für die betrachteten Impulsdauern liefert der $1d$ -Impuls hervorragende Ergebnisse. Der $10d$ -Impuls zeigt annähernd die gleichen Charakteristika wie die tatsächliche Tracerdurchbruchskurve der unendlichen Einleitung, weicht jedoch zu frühen Zeitpunkten ab (Abbildungen 6.7 und 6.9 jeweils unten). Hier wird der Tracerdurchgang unterschätzt.

Die approximierte Summenkurve des $100d$ -Impulses weicht sowohl im Vergleich der einzelnen Impuls-Durchbruchskurven als auch im Vergleich der Summenkurven deutlich ab. Wie bereits erwähnt lässt sich jedoch durch eine Tracerdurchbruchskurve eines sehr langen Impulses die tatsächliche Summenkurve möglichst weit bestimmen. Sie liefert somit neben dem Vergleich der rekonstruierten Impulskurven mit den gemessenen Impulskurven die Möglichkeit eines teilweisen Vergleichs mit der tatsächlichen Summenkurve.

Die zu Variante 2 in den Abbildungen 6.10 und 6.11 dargestellte Port-Port-Konfiguration 2-4 ist eine Konfiguration mit einer der größten untersuchten Transportentfernungen. Die Messung erfolgt diagonal unter einem Winkel von -45° . Der Vergleich der rekonstruierten Tracerdurchbruchskurven (C^*) mit den gemessenen Kurven zeigt, dass der $1d$ -Impuls sehr gut für die Näherung der tatsächlichen Durchbruchskurve einer unendlichen Tracerzugabe eingesetzt werden kann.

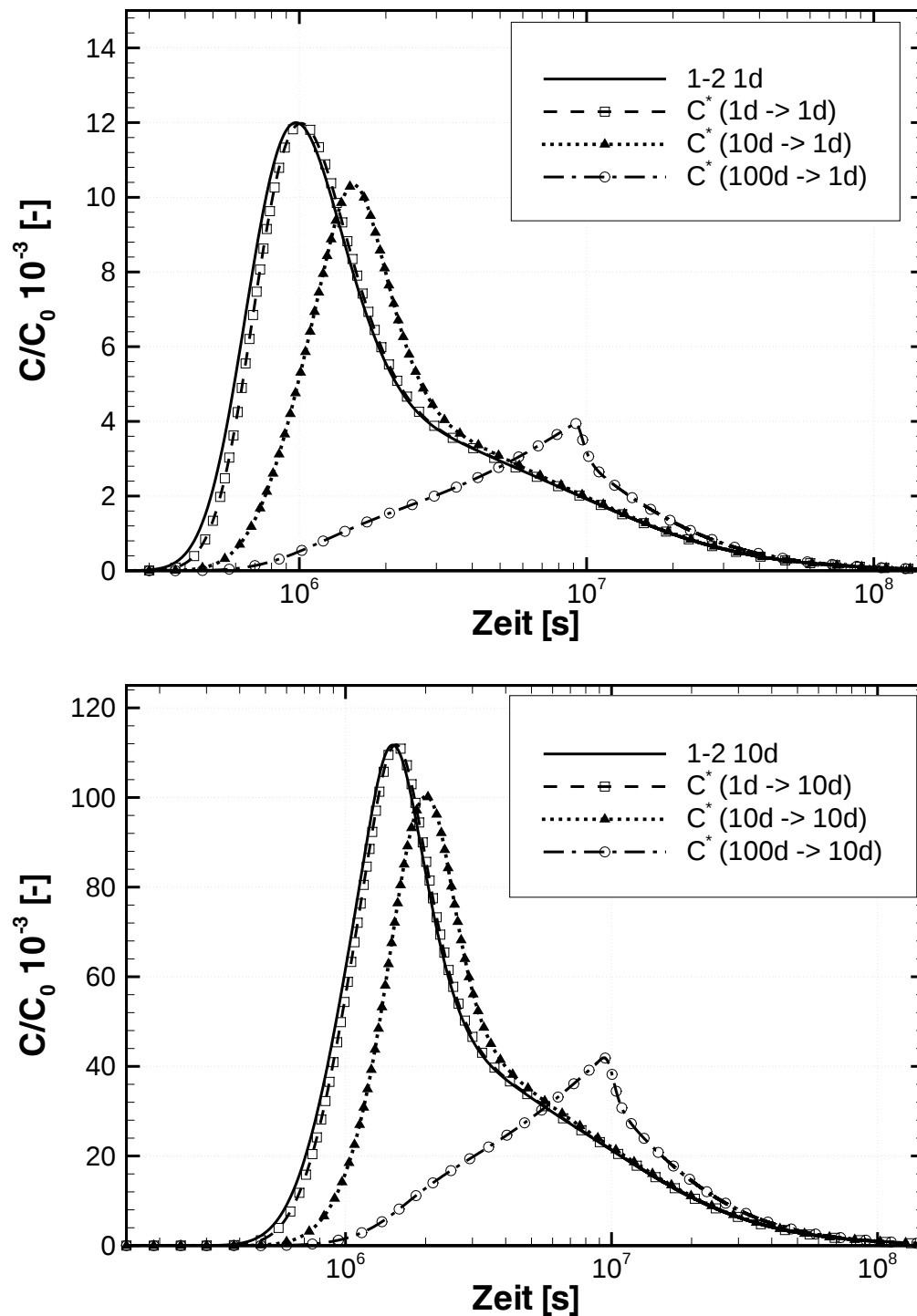


Abbildung 6.6: Variante 1: Konfiguration 1-2,
Rekonstruktion der 1d- und 10d-Impulskurve

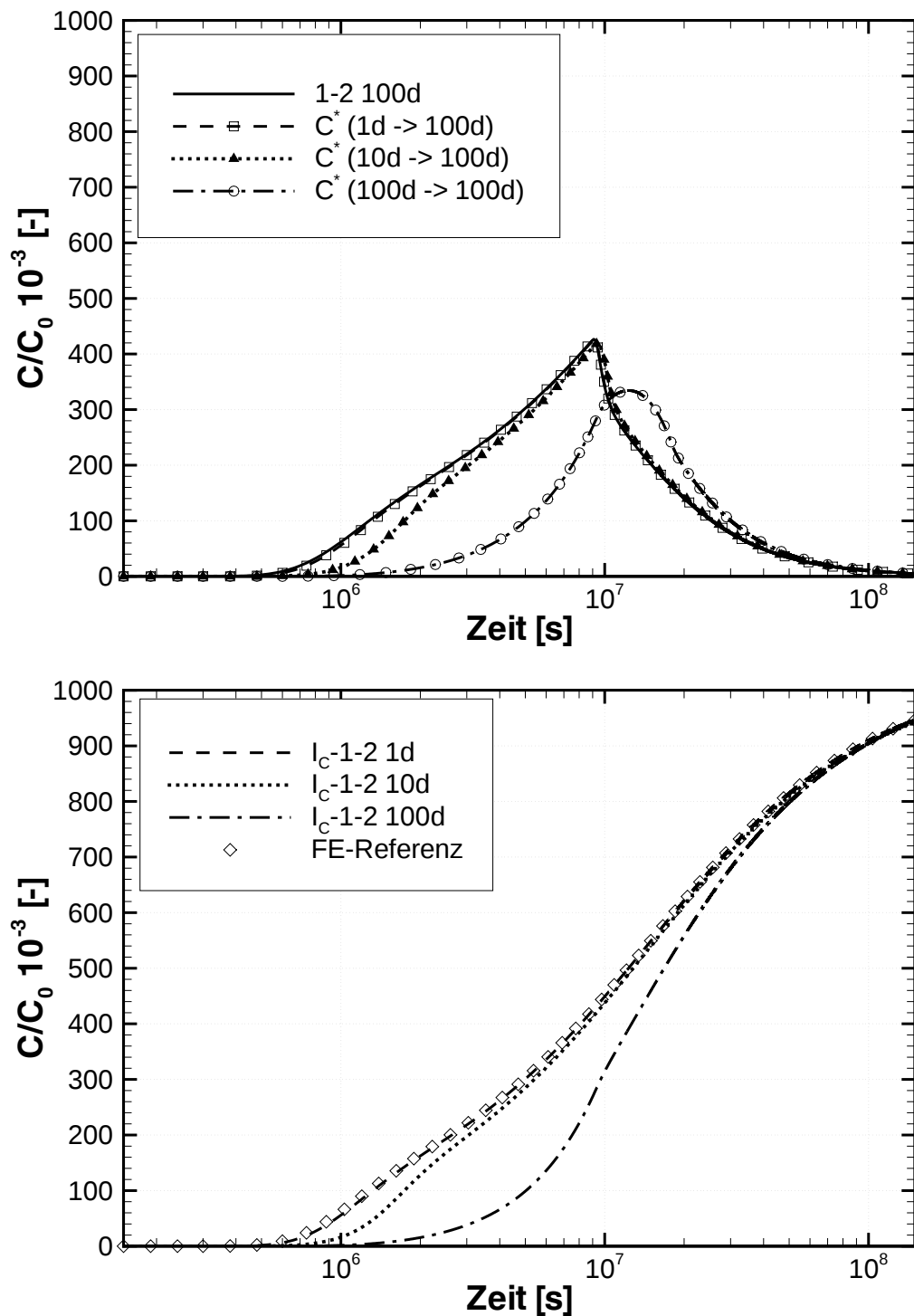


Abbildung 6.7: Variante 1: Konfiguration 1-2,
Rekonstruktion der 100 d-Impulskurve und normierte Summenkurven

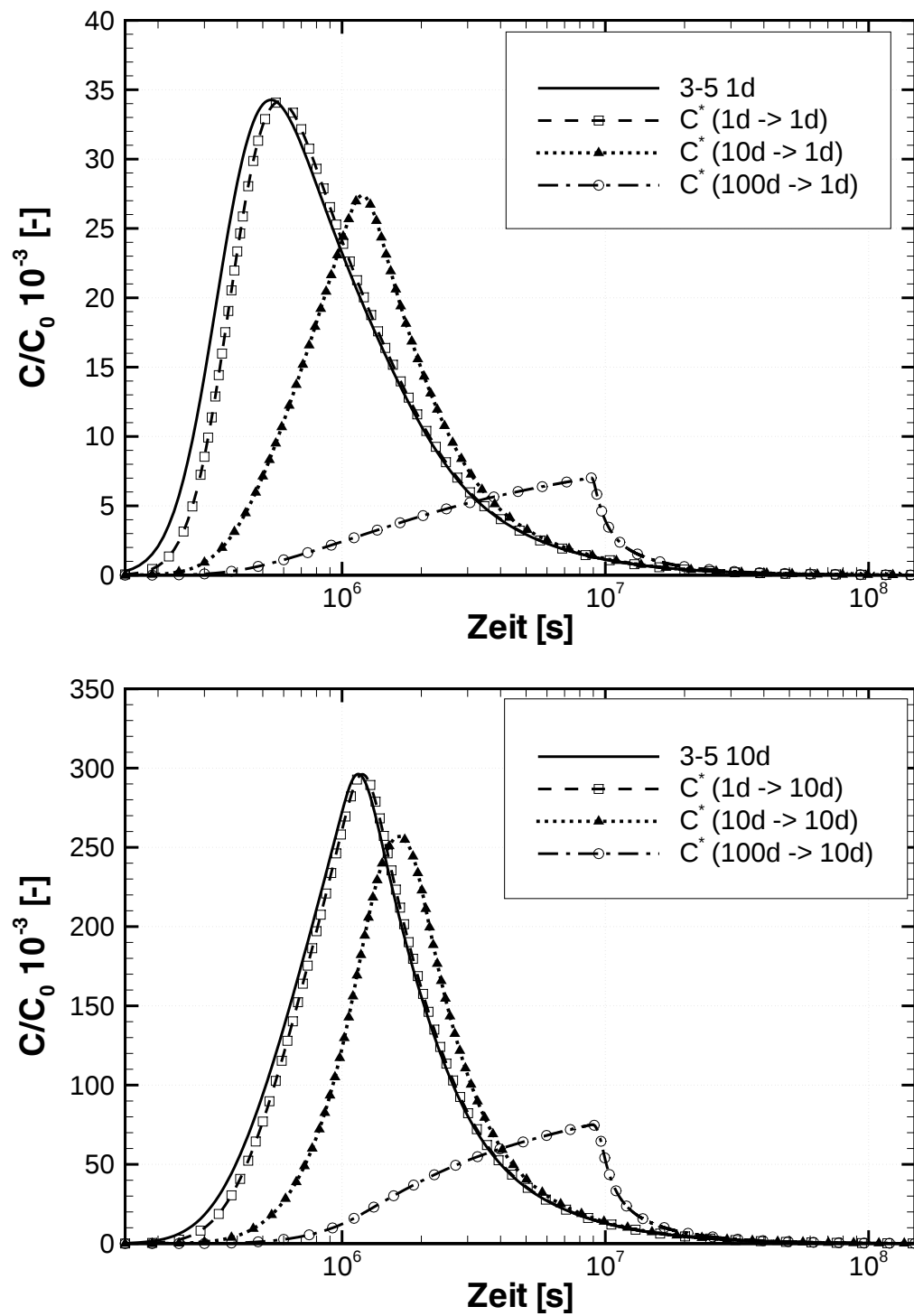


Abbildung 6.8: Variante 1: Konfiguration 3-5,
Rekonstruktion der 1d- und 10d-Impulskurve

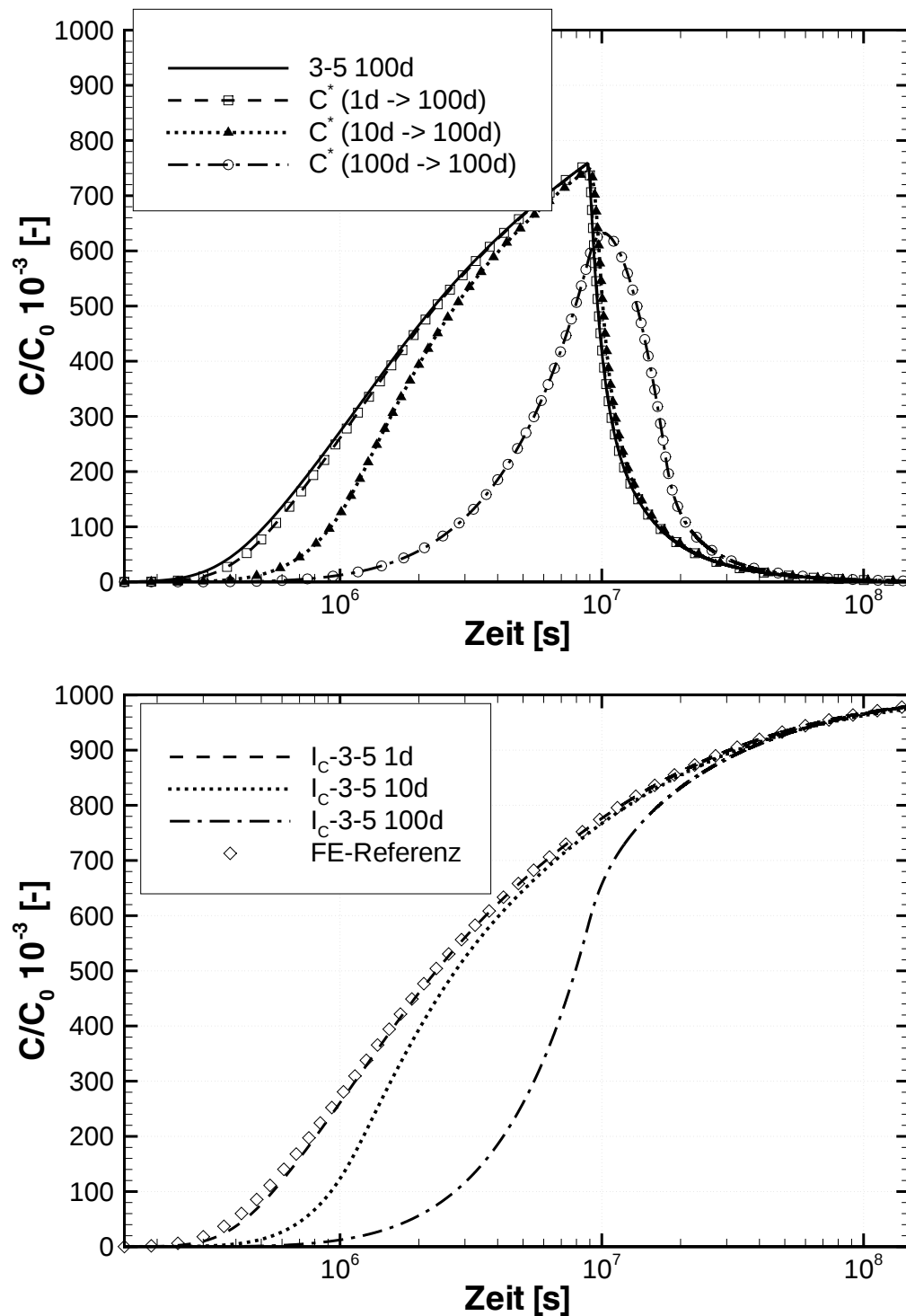


Abbildung 6.9: Variante 1: Konfiguration 3-5,
Rekonstruktion der 100 d-Impulskurve und normierte Summenkurven

Die zu Variante 3 dargestellte Konfiguration 1-5 (Abbildungen 6.12 und 6.13) weist für den $1d$ -Impuls einen von der zu Variante 1 dargestellten Konfiguration 3-5 (Abbildungen 6.8 und 6.9) abweichenden Tracerdurchgang auf. An diesem Vergleich zeigt sich deutlich der diskrete Einfluss bei Port-Port-Messungen. Bei gleicher Transportentfernung sind diese Differenzen nicht nur auf die verschiedenen Eigenschaften der Gesteinsdurchlässigkeit zwischen Variante 1 ($K = 9.61e-11 \text{ m/s}$) und 3 ($K = 9.61e-08 \text{ m/s}$) zurückzuführen. Ein hier nicht dargestellter Vergleich der Konfigurationen mit Beteiligung des mittleren Ports (5) zeigt eine ähnliche Abweichung auch innerhalb der einzelnen Varianten auf. Die Abweichungen sind bedingt durch ausgeprägte Kluftverbindungen für die Konfigurationen 3-5 und 4-5 (vgl. Abbildung 6.3). Bei Konfiguration 1-5 ergeben sich auf der Transportstrecke die größten Umwege durch die Klüfte.

Konfiguration 1-3, welche in den Abbildungen 6.14 und 6.15 zu Variante 4 dargestellt ist, gehört zu der Gruppe der größten gemessenen Transportentfernungen entlang der Diagonalen. Der erste Teil der Transportstrecke beinhaltet die Konfiguration 1-5 mit den größten Umwegen. Die Auswirkung auf den Kurvenverlauf ist jedoch geringer als bei den entsprechenden Konfigurationen entlang der kurzen Diagonalen. Die Ergebnisse innerhalb der Varianten für die langen Diagonalen weisen einen ähnlichen Charakter auf.

Zu Variante 5, Konfiguration 4-5, zeigt sich eine deutlich frühere Erstankunft als zu den vergleichbaren Konfigurationen 1-5, 2-5 und 3-5 (Abbildungen 6.16 und 6.17). Dieser rasche Anstieg der Konzentration ergibt sich durch die sehr guten Kluftverbindungen zwischen diesen Ports. Die Approximation durch die normierte Summenkurve stimmt auch hier sehr gut mit der tatsächlichen Lösung überein.

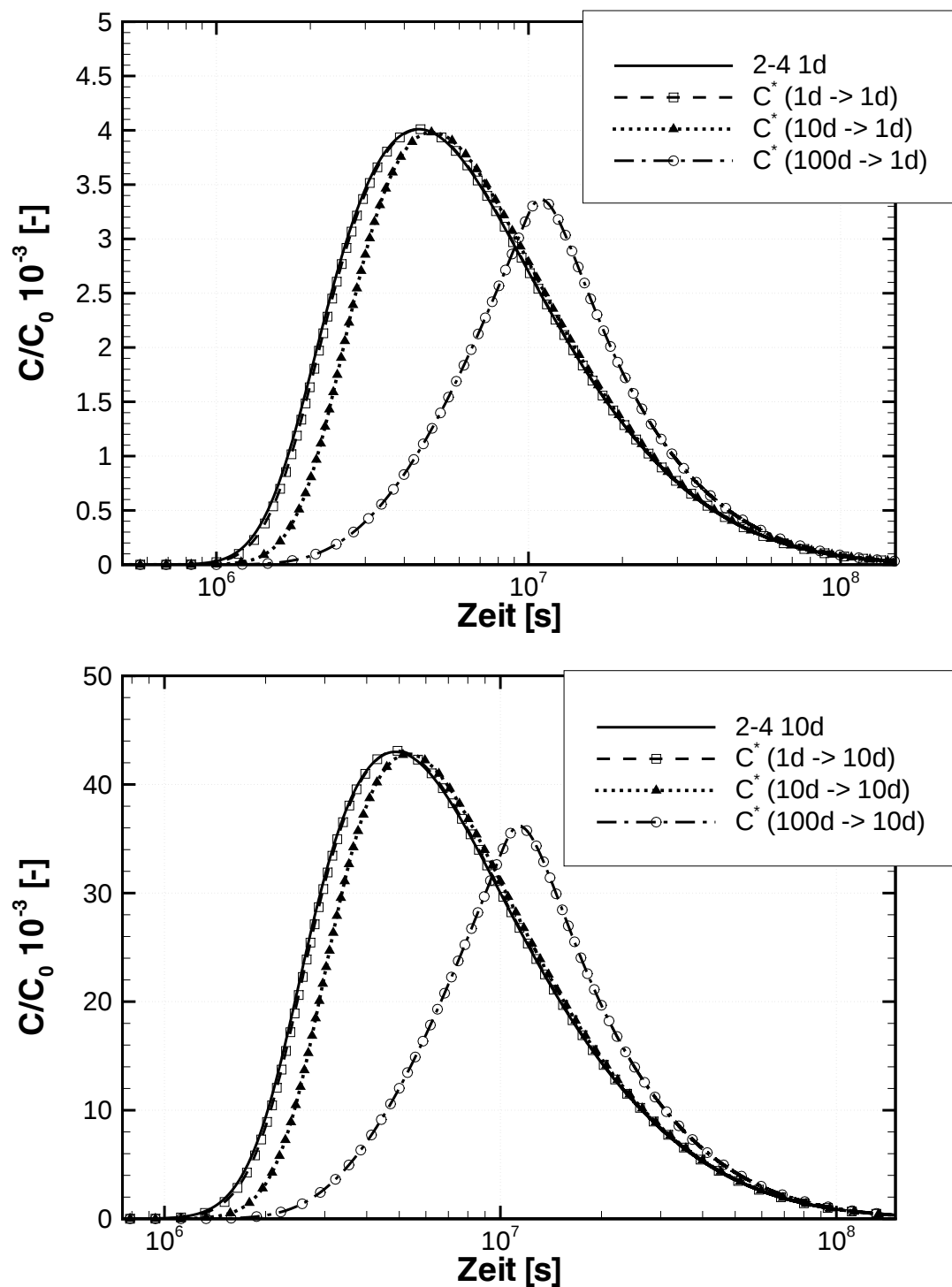


Abbildung 6.10: Variante 2: Konfiguration 2-4,
Rekonstruktion der 1d- und 10d-Impulskurve

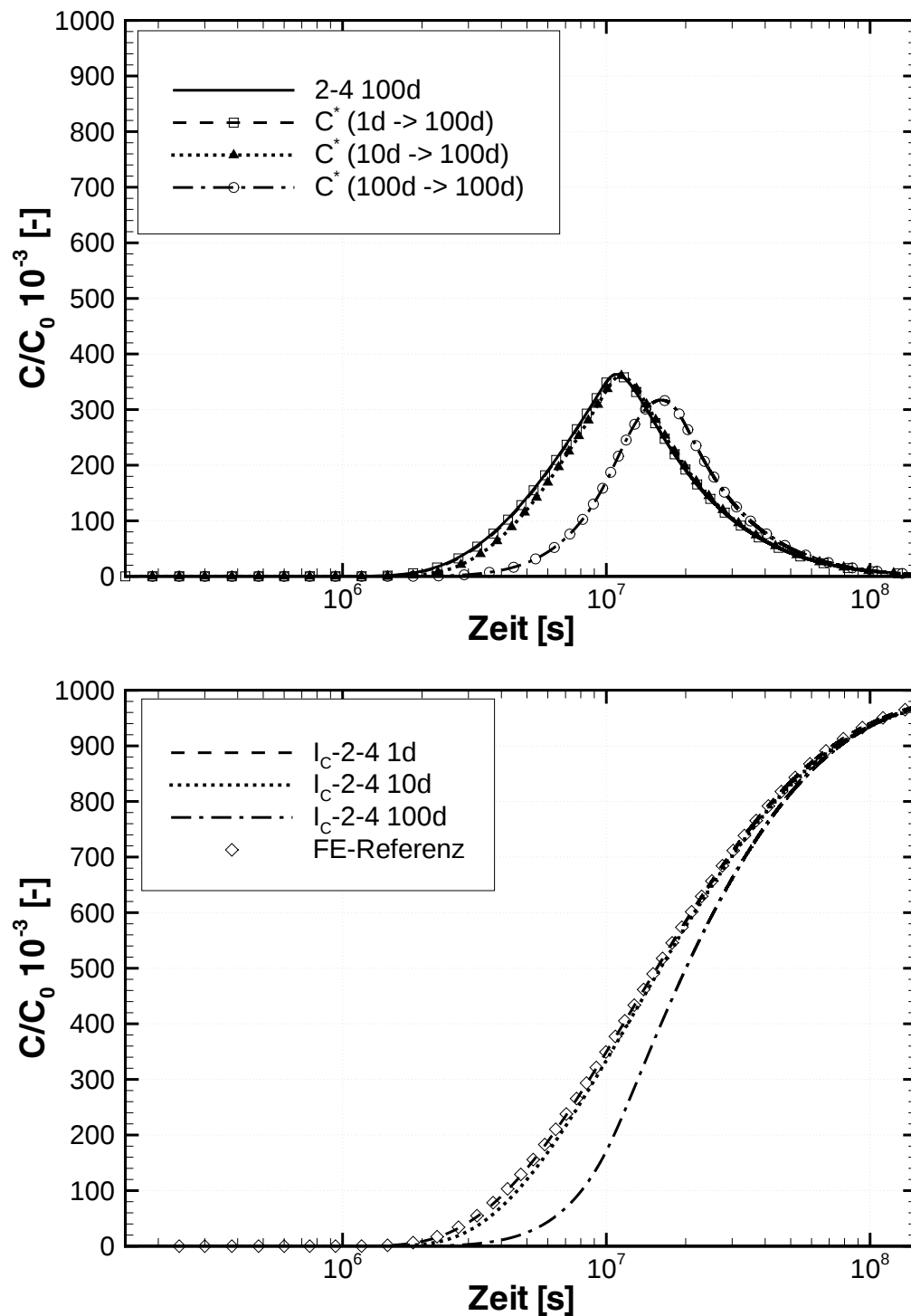


Abbildung 6.11: Variante 2: Konfiguration 2-4,
Rekonstruktion der 100d-Impulskurve und normierte Summenkurven

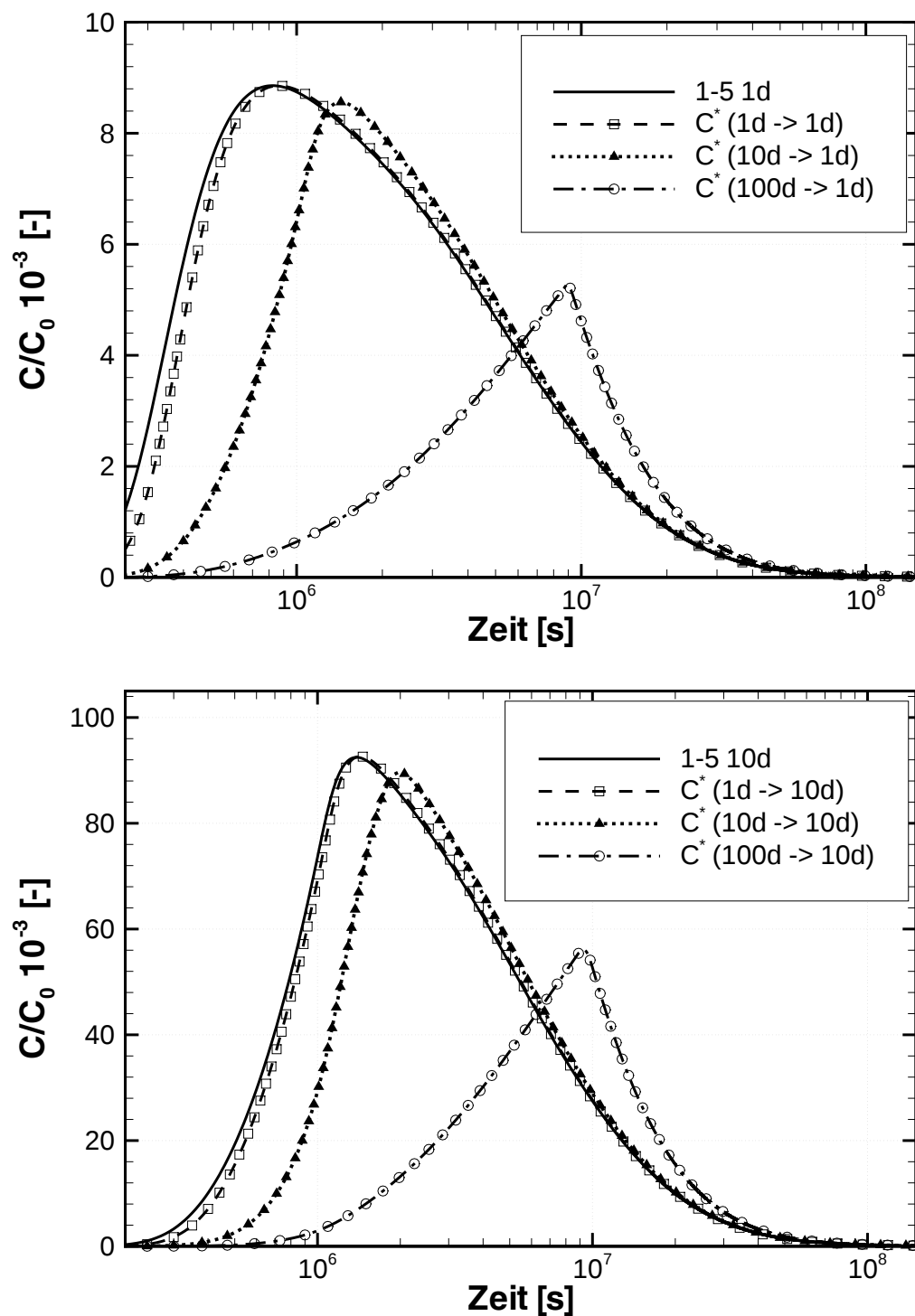


Abbildung 6.12: Variante 3: Konfiguration 1-5,
Rekonstruktion der 1d- und 10d-Impulskurve

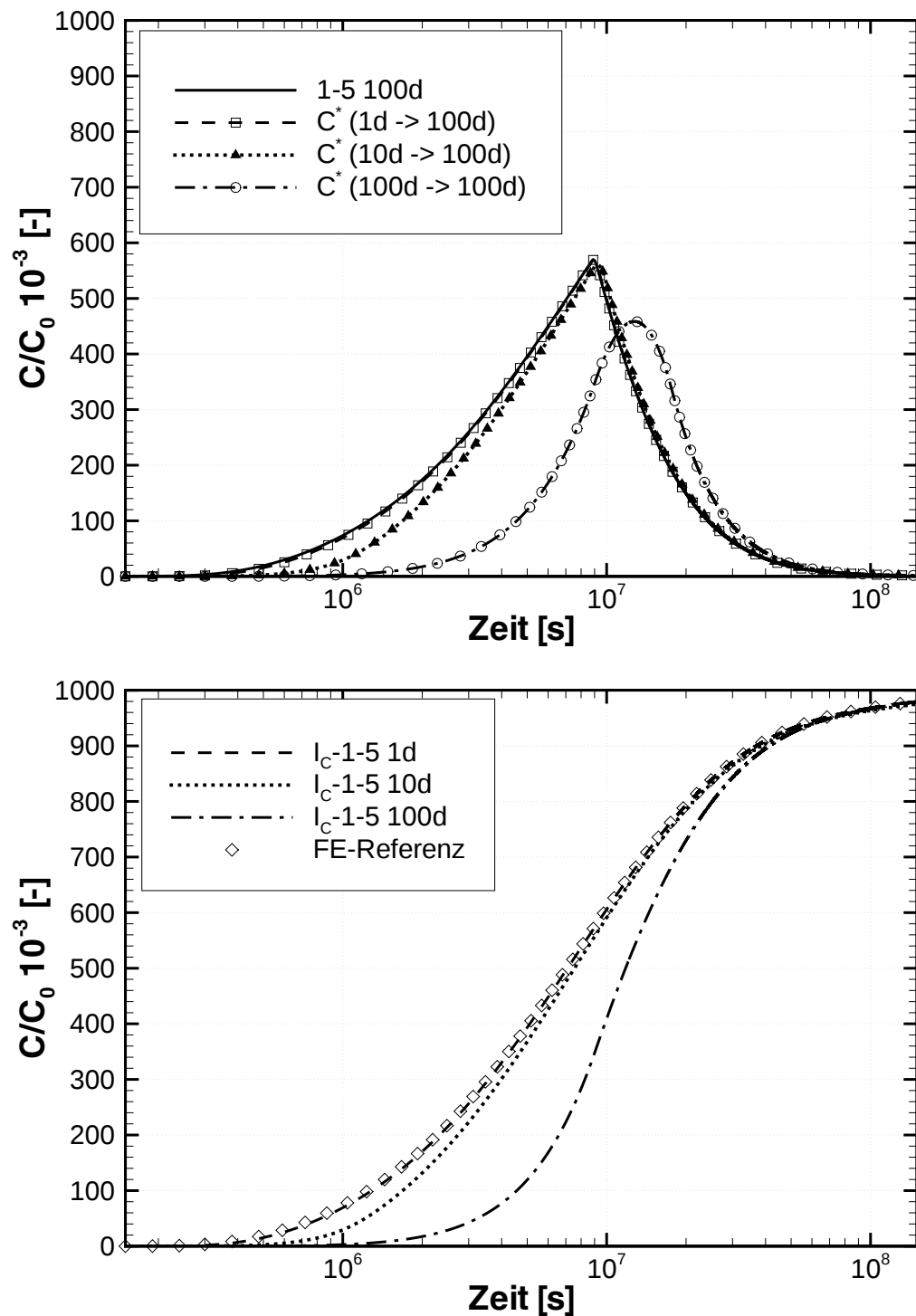


Abbildung 6.13: Variante 3: Konfiguration 1-5,
Rekonstruktion der 100d-Impulskurve und normierte Summenkurven

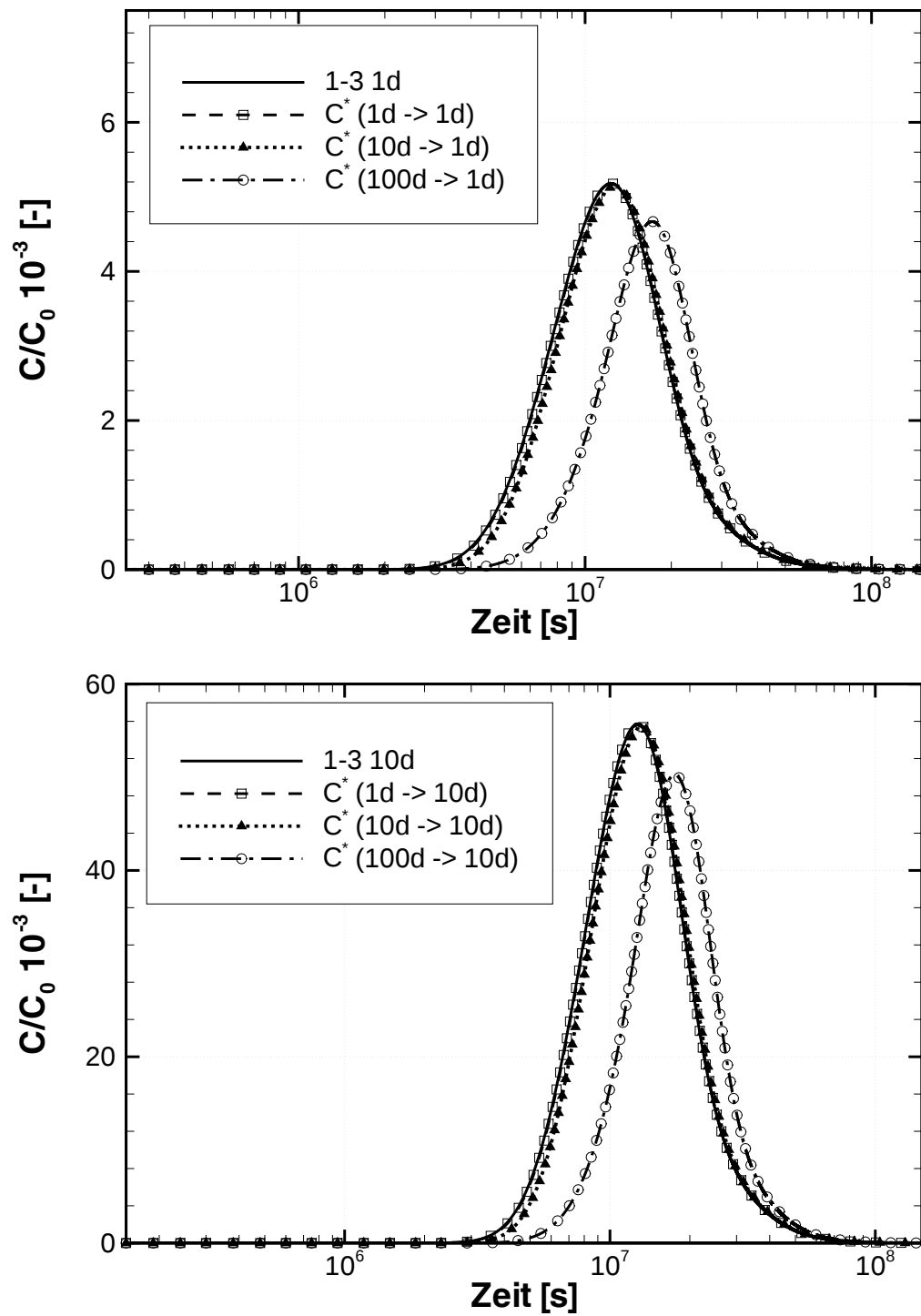


Abbildung 6.14: Variante 4: Konfiguration 1-3,
Rekonstruktion der 1d- und 10d-Impulskurve

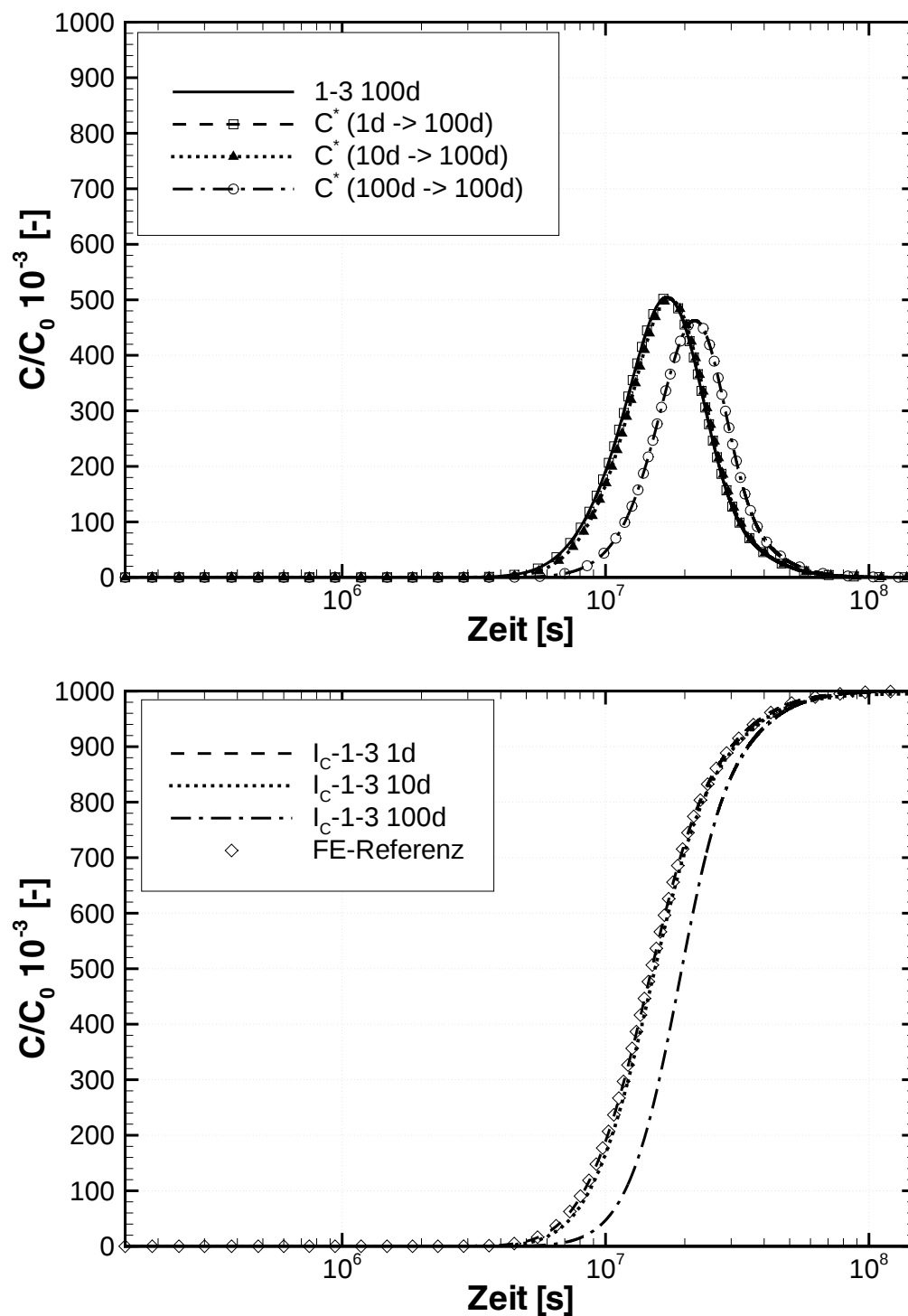


Abbildung 6.15: Variante 4: Konfiguration 1-3,
Rekonstruktion der 100d-Impulskurve und normierte Summenkurven

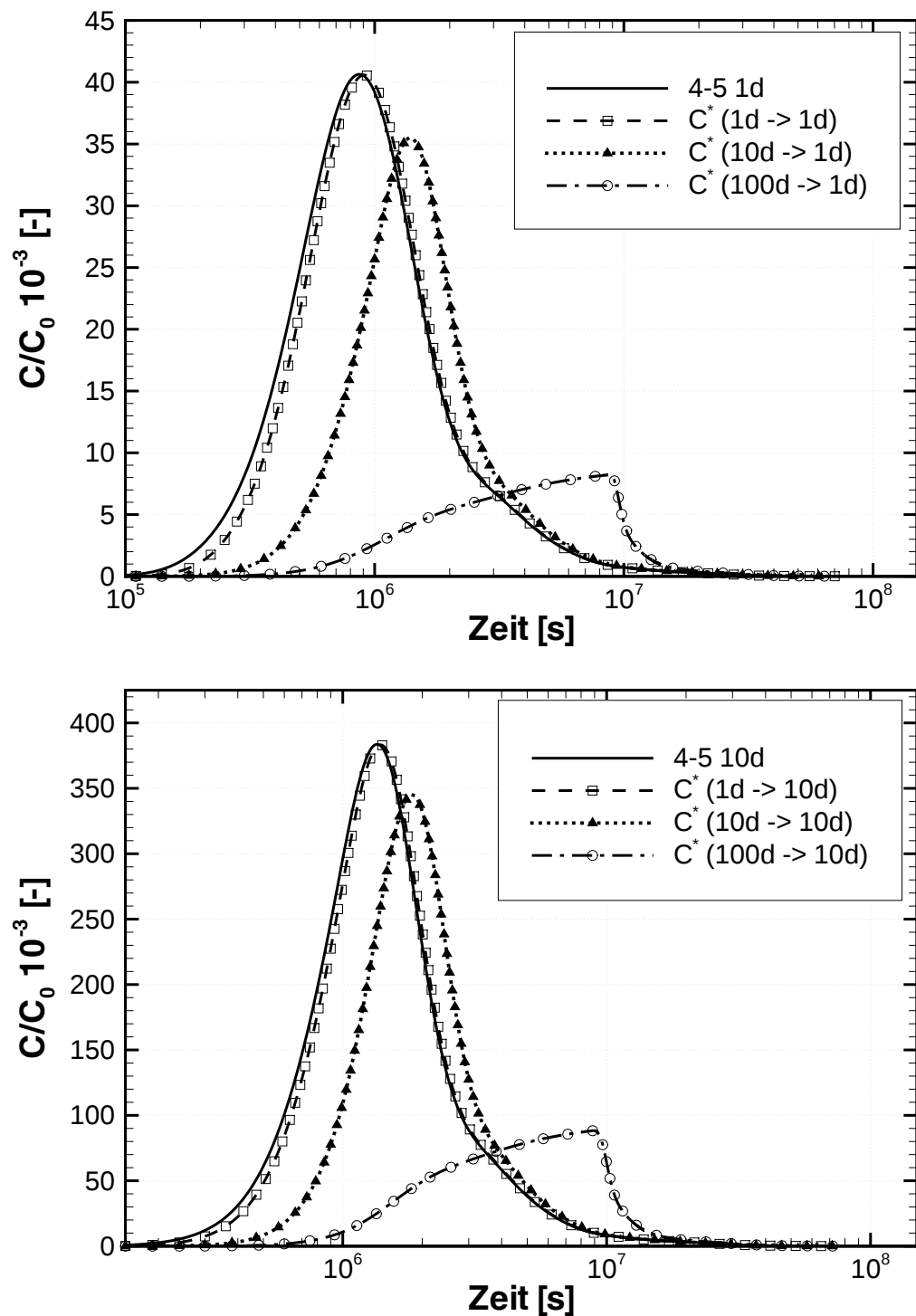


Abbildung 6.16: Variante 5: Konfiguration 4-5,
Rekonstruktion der 1d- und 10d-Impulskurve

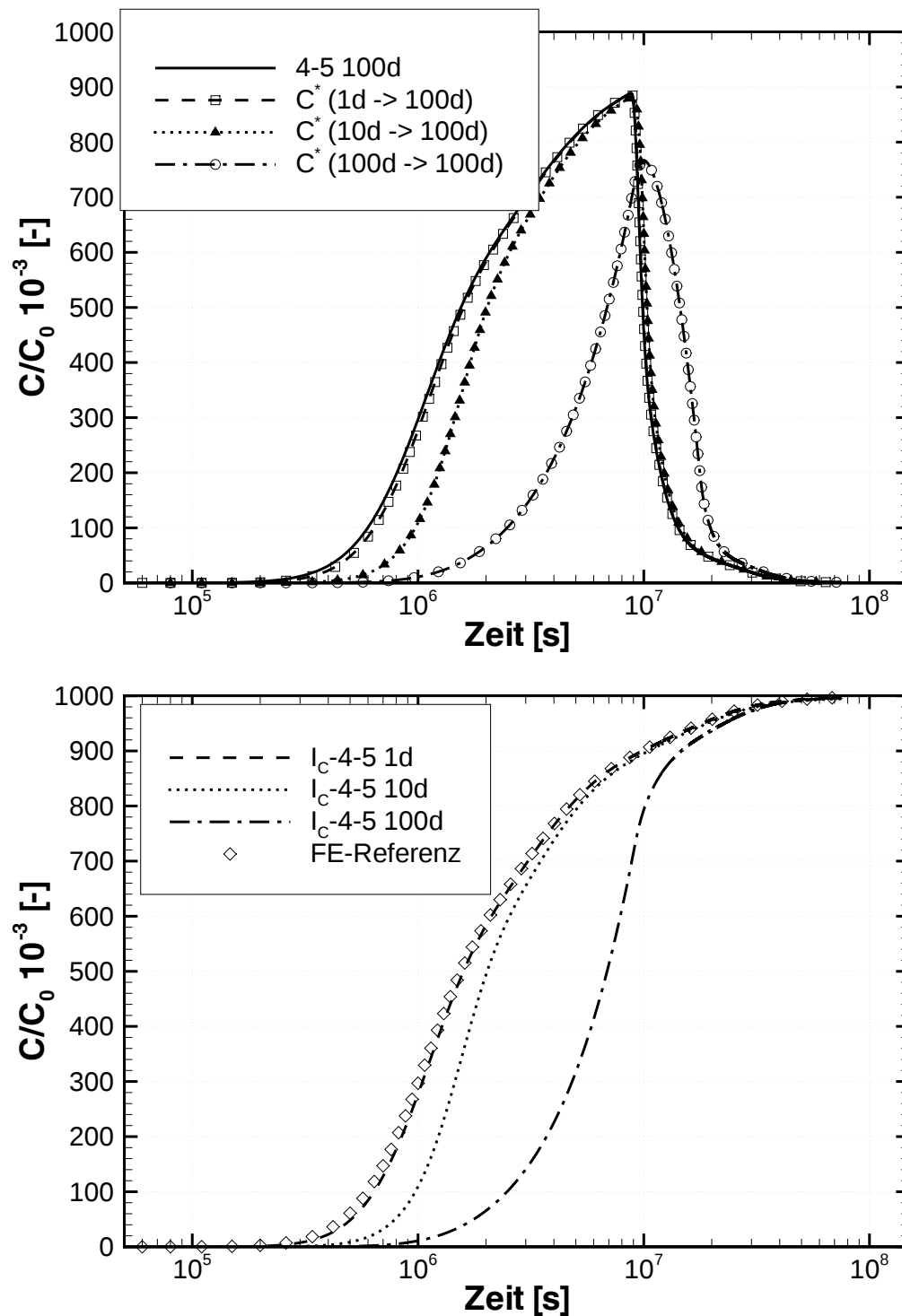


Abbildung 6.17: Variante 5: Konfiguration 4-5,
Rekonstruktion der 100d-Impulskurve und normierte Summenkurven

Zusammenfassende Beurteilung der Analyse

Insgesamt zeigt sich für alle betrachteten Varianten und alle durchgeführten Port-Port-Konfigurationen eine uneingeschränkte Anwendbarkeit der Approximationsmethode. Die aus den $1d$ -Impulsen normierten Summenkurven liefern in hervorragender Qualität das Antwortsignal eines unendlichen Impulses. Die Beurteilung kann ohne die Kenntnis der tatsächlichen Kurve durch den Vergleich verschiedener Impulsdauern vorgenommen werden. Damit stehen zu den untersuchten Varianten die Kurven einer unbegrenzten Tracerzugabe zur Verfügung und können für die Identifikation eines geeigneten Mehrkontinuum-Ansatzes verwendet werden.

6.5 Auswahl geeigneter Mehrkontinuum-Konzepte

6.5.1 Vorgehensweise

Die in Kapitel 6.4.2 beschriebene Datengrundlage bezüglich der approximierten Tracerdurchbruchskurven einer zeitlich unbegrenzten Einleitung wird nachfolgend dazu verwendet, für die Varianten 1 bis 5 ein geeignetes Konzept zur Mehrkontinuum-Modellierung auszuwählen. Für das vorliegende Anwendungsbeispiel wird vereinfachend angenommen, dass maximal zwei Komponenten beteiligt sind. Diese Annahme ist einerseits durch die synthetische Natur des Fallbeispiels bekannt, andererseits wird sie durch die untersuchten Durchbruchskurven bestätigt. Somit stehen

- ein DPSP-Ansatz (doppelt porös, single permeabel),
- ein DPDP-Ansatz (doppelt porös, doppelt permeabel)
- und ein SPSP-Ansatz (single porös, single permeabel)

zur Auswahl. Die Auswahl eines geeigneten Ansatzes erfolgt neben der rein qualitativen optischen Beurteilung der approximierten Summenkurven durch den Vergleich der die Summenkurven beschreibenden Kennzahlen mit den Kennzahlen zu den Tracerdurchbruchskurven aus bereits mit Mehrkontinuum-Ansätzen sehr detailliert untersuchten Fallbeispielen (vgl. Kapitel 5.3). Zu den in Kapitel 5.3 vorgestellten Grundkonfigurationen 1 bis 4 eines Festgesteinsaquifers bestehend aus einer regelmäßigen, gleichförmigen Anordnung der Kluftscharen stellt BIRKHÖLZER (1994b) verschiedene Mehrkontinuum-Ansätze zur Simulation vor. Die Ergebnisse führen

zu einer Entscheidungshilfe, welcher Ansatz in Abhängigkeit der Mobilitätszahl N_M und der Diffusions-Advektionszahl N_{DA} sinnvoll für eine Mehrkontinuum-Modellierung eingesetzt werden kann. Nachfolgend werden für die Auswahl eines geeigneten Konzeptes nicht die charakteristischen Größen verwendet, die die Wertigkeit der Prozesse der beteiligten Komponenten beschreiben, sondern lediglich Kennzahlen, die die Kurvencharakteristik beschreiben. Diese lassen sich direkt aus Labor- und Feldversuchen ermitteln. Die zur Auswahl verwendeten Kennzahlen sind die bereits in Kapitel 5.3.3 vorgestellte

- Ungleichförmigkeitszahl U (5.1),
- die Krümmungszahl C_C (5.2),

und der neu eingeführte

- zeitliche Tracerdurchgangskoeffizient γ_{el} .

γ_{el} beschreibt das Verhältnis des Tracerdurchgangs zu frühen und zu späten Zeitpunkten und wird wie folgt definiert:

$$\gamma_{el} = \frac{t_{50} - t_{10}}{t_{90} - t_{10}} \quad (6.5)$$

Für diese drei Kennzahlen werden zu den aus BIRKHÖLZER (1994b) bekannten Systemeigenschaften Gültigkeitsbereiche für den Einsatz von DPSP-, DPDP- und SPSP-Modellen abgeleitet. In die Auswertung gehen dabei nur die Tracerdurchbruchskurven ein, für die die Zuordnung auch optisch eindeutig erfolgen kann. Entsprechend werden für die Aufstellung der U - C_C - γ_{el} -Bereiche die Ergebnisse der

Grundvarianten 1 (DPSP), 3 (DPDP) und 4 (SPSP) an den Messquerschnitten 02 und 10 verwendet (vgl. Abbildung 5.9).

6.5.2 Identifikation des Mehrkontinuum-Ansatzes zu den Varianten 1-5

In den Abbildungen 6.18 bis 6.22 sind jeweils die Bereiche zu den verschiedenen Modellansätzen aus bekannten Untersuchungen (BIRKHÖLZER, 1994b) als schattierte Blöcke bzw. Rechtecke dargestellt. Zusätzlich sind die Schwerpunkte der Bereiche als Kreise markiert. Für die zur Festlegung der Bereiche verwendeten Untersuchungen werden jeweils zwei Kurven verwendet, die an den Messquerschnitten S02 und S10 aufgezeichnet worden sind. Entsprechend liegt ihr Schwerpunkt immer auf dem Schnittpunkt der Diagonalen. Die Ergebnisse der Port-Port-Untersuchungen der Varianten 1 bis 5 sind jeweils durch ihren arithmetischen Mittelwert als Kästchen in den Abbildungen aufgetragen. Der Gesamtbereich wird durch einen Block bzw. ein Rechteck gekennzeichnet. Die Bereiche der Varianten ergeben sich aus den Minima und Maxima der Kennwerte aller durchgeführten Port-Port-Messungen. Die Schwerpunkte der Punktwolken stimmen also nicht mit den Schwerpunkten der markierten Block- bzw. Rechteckbereiche überein, sondern können exzentrisch zu diesen angeordnet sein. Die Zuordnung eines geeigneten Ansatzes erfolgt durch die Beurteilung der Lage des Schwerpunktes der Punktwolke.

Der Bereich der Kennzahlen zu Variante 1 in Abbildung 6.18 umschließt nahezu den gesamten als DPSP gekennzeichneten Bereich.

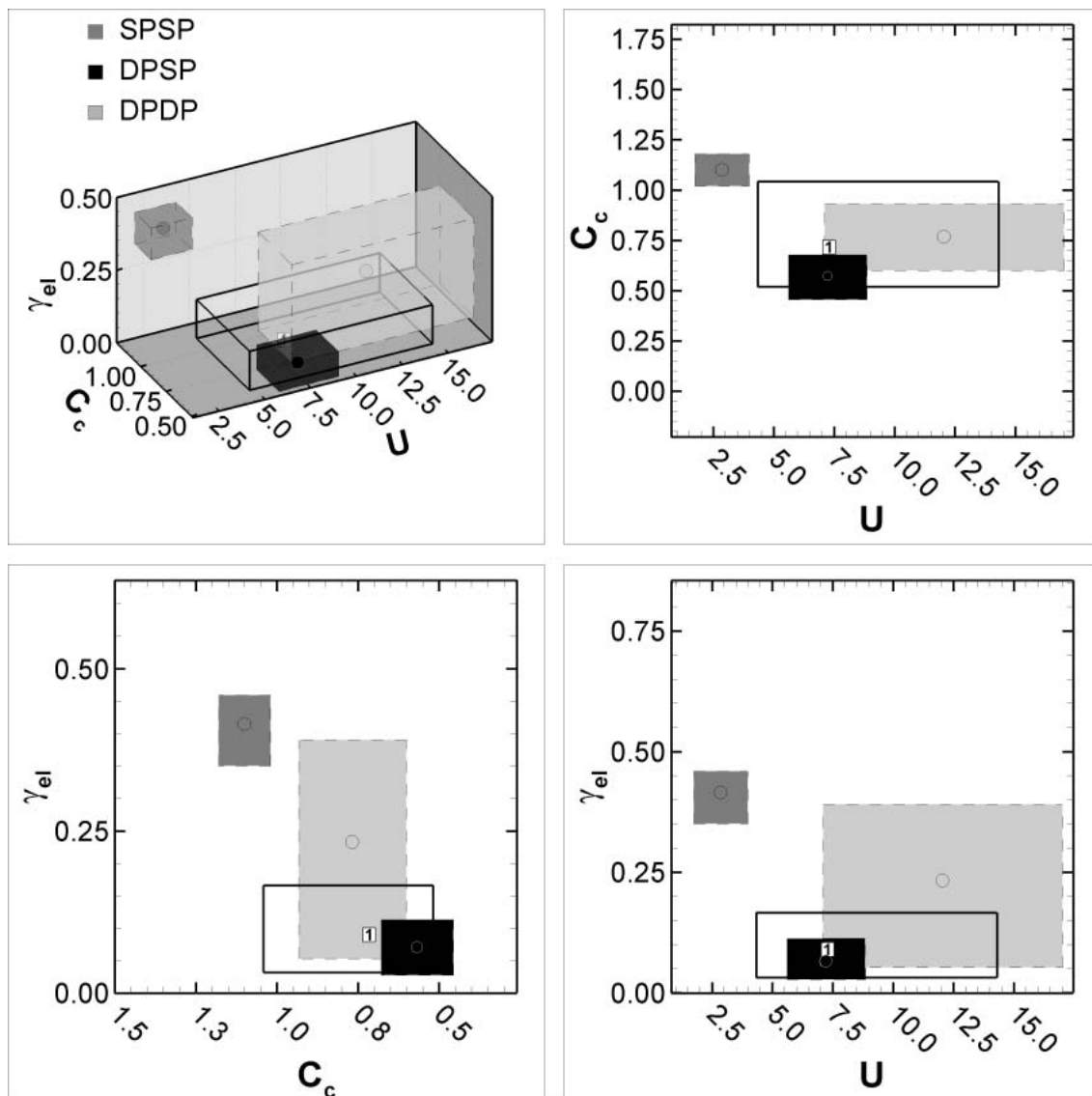


Abbildung 6.18: Variante 1: Kennzahlen U , C_c und γ_{el}

Variante 2 weist einen ähnlichen Kennzahlenbereich wie Variante 1 auf, jedoch ist der ermittelte Bereich der Ungleichförmigkeitszahl U auf kleinere Werte beschränkt. Der Bereich der Krümmungszahl C_C ist zu größeren Werten hin verschoben. Insgesamt liegt auch Variante 2 am nächsten an dem mit DPSP markierten Bereich (Abbildung 6.19).

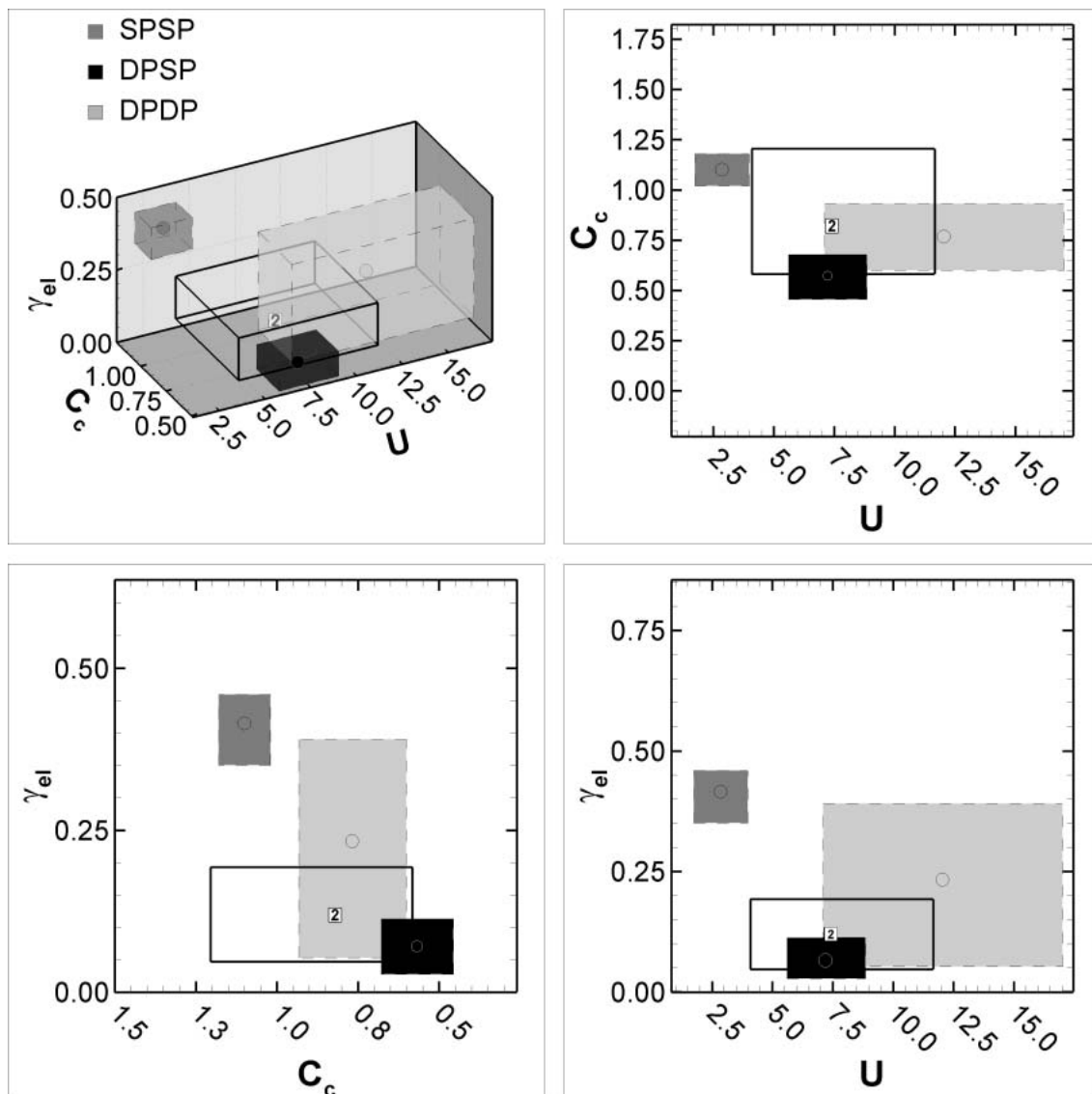


Abbildung 6.19: Variante 2: Kennzahlen U , C_C und γ_{el}

Der zu Variante 3 ermittelte Bereich der Kennzahlen U, C_C und γ_{el} (Abbildung 6.20) kann nicht eindeutig einem bekannten Gültigkeitsbereich zugeordnet werden. Es sind sowohl eine Zuordnung zu dem DPSP-Bereich als auch zu dem DPDP-Bereich möglich.

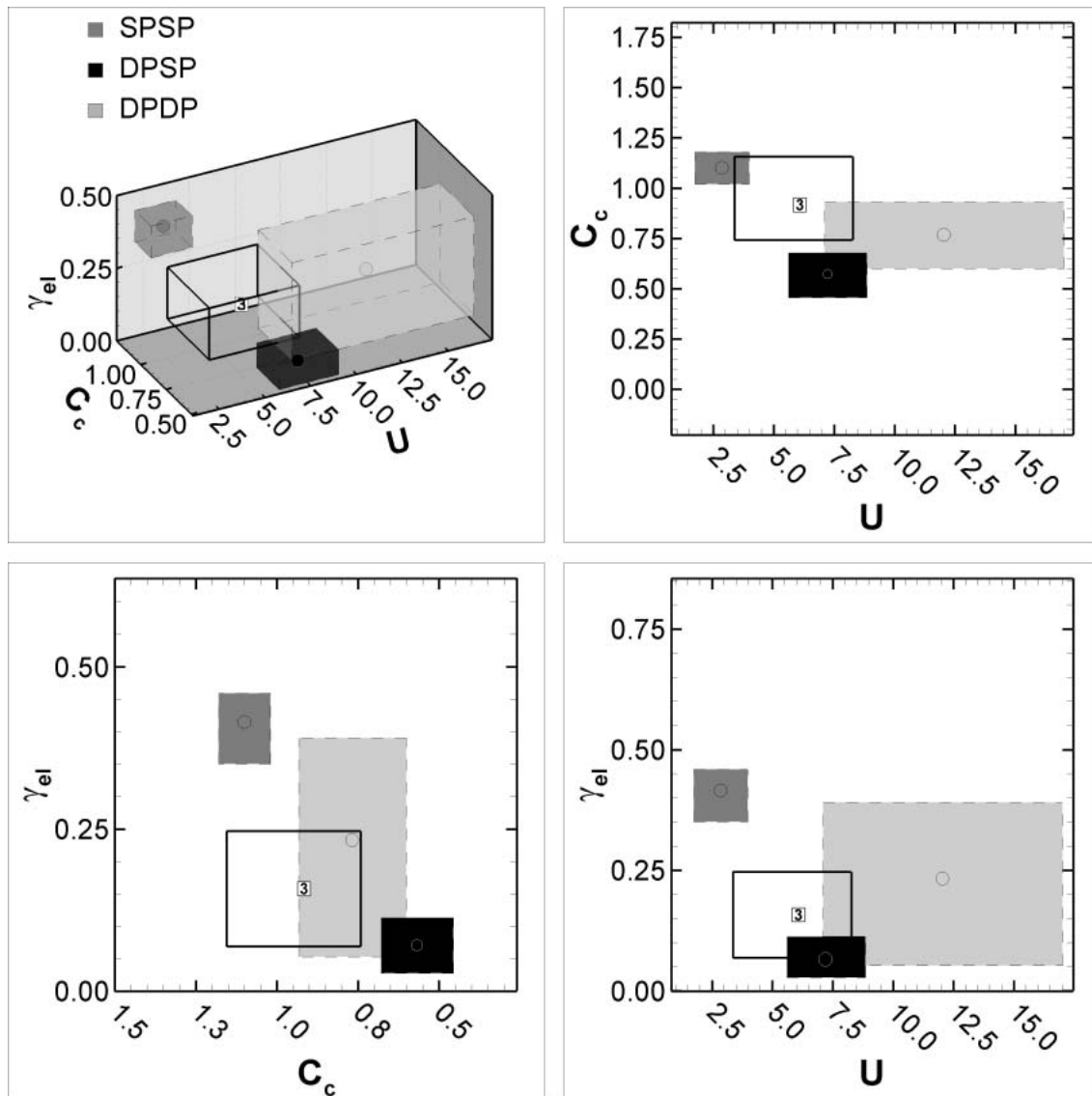


Abbildung 6.20: Variante 3: Kennzahlen U, C_C und γ_{el}

Die zu den Varianten 4 und 5 dargestellten Bereiche (Abbildungen 6.21 und 6.22) weisen trotz der um den für Variante 5 um Faktor 5.0 höheren Durchlässigkeit der Gesteinsmatrix sehr ähnliche $U-C_C-\gamma_{el}$ -Bereiche auf. Beide Varianten haben einen Schwerpunkt bezüglich $U-C_C$, der sehr nahe dem SPSP-Bereich liegt. Die $C_C-\gamma_{el}$ Darstellung erlaubt eine Zuordnung zum DPDP-Bereich. Dies ist kein Widerspruch. Die Modellwahl für einen solchen Fall sollte von der Art der Fragestellung abhängen, denn im Falle eines SPSP-Modells wäre es nicht mehr möglich, die getrennte Betrachtung der beteiligten Komponenten vorzunehmen. Es wäre lediglich das gemeinsame Antwortsignal bekannt.

In der nachfolgenden Tabelle 6.6 sind die Ergebnisse der Identifikation eines geeigneten Mehrkontinuum-Ansatzes zu den Varianten 1 bis 5 nochmals zusammenfassend aufgeführt.

Tabelle 6.6: Wahl eines Mehrkontinuum-Ansatzes zu den Varianten 1 bis 5

	DPSP	DPDP	SPSP
Variante 1	x		
Variante 2	x		
Variante 3	x	x	
Variante 4		x	x
Variante 5		x	x

Die zu den einzelnen Varianten mit einem x markierten Ansätze werden im nachfolgenden Kapitel 7 umgesetzt.

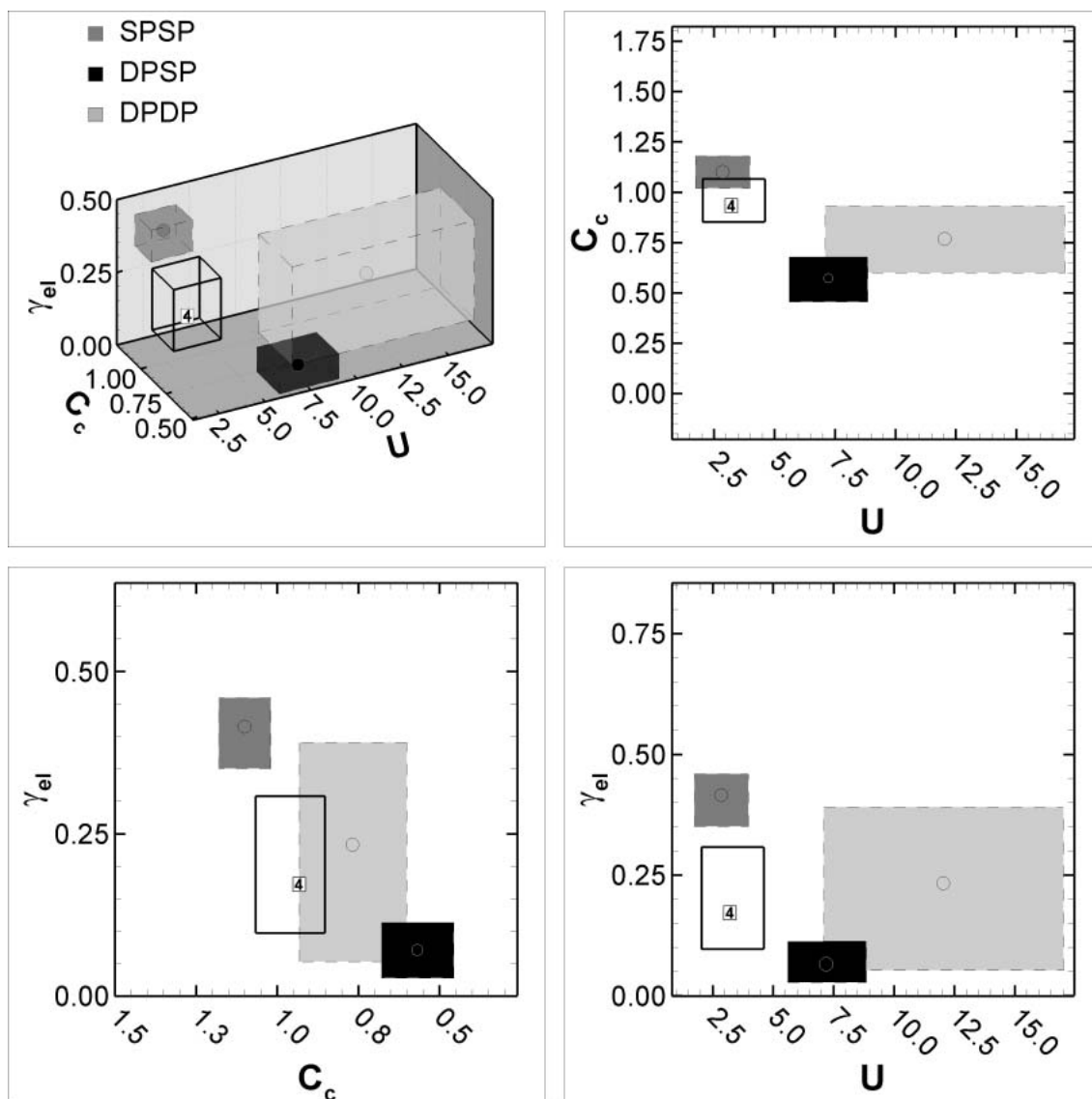


Abbildung 6.21: Variante 4: Kennzahlen U , C_c und γ_{el}

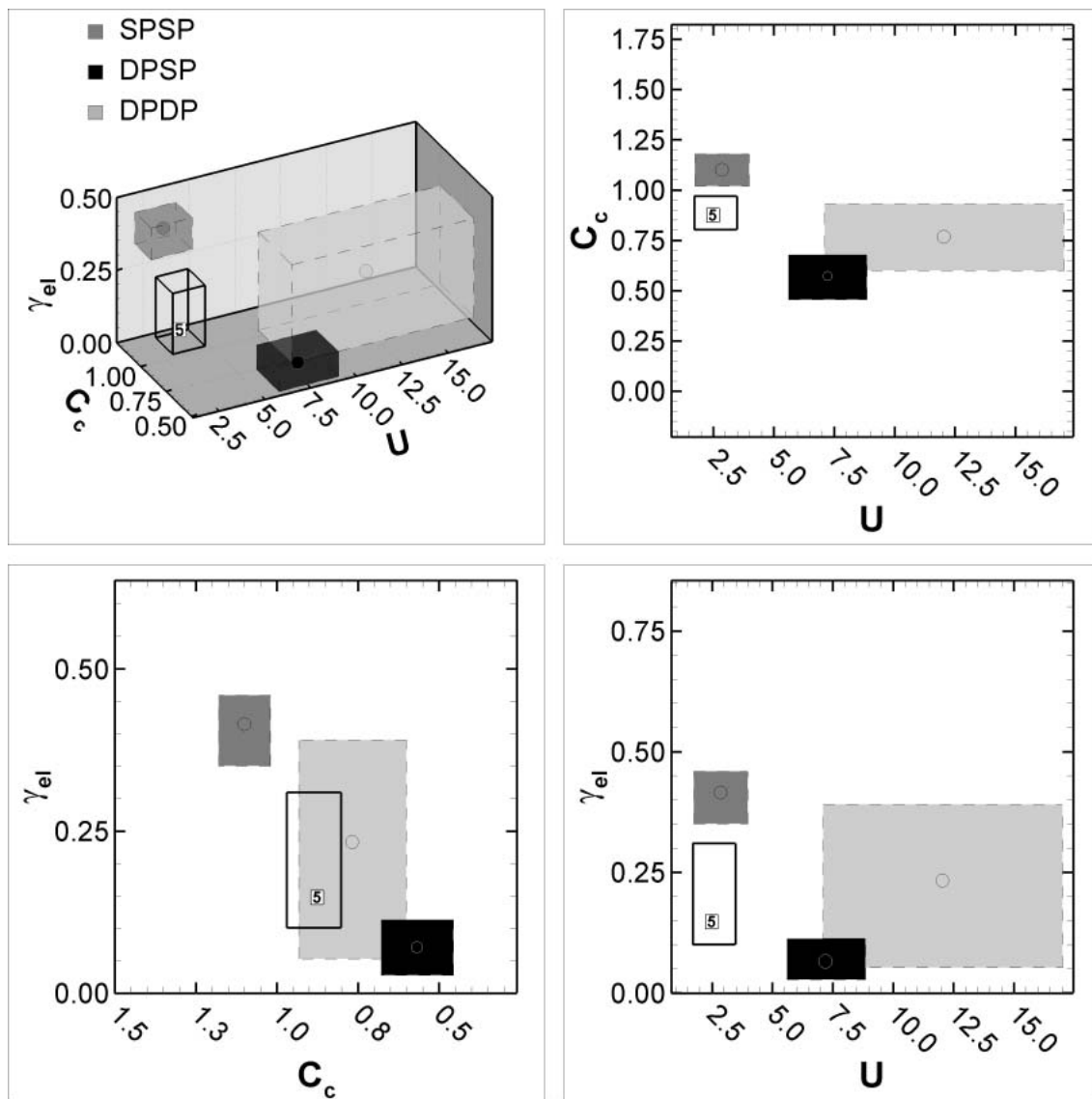


Abbildung 6.22: Variante 5: Kennzahlen U , C_c und γ_{el}

6.6 Zusammenfassung der Untersuchungen mit diskreten Modellansätzen

In den Kapiteln 6.2 bis 6.5 werden an einem synthetisch erzeugten Untersuchungsgebiet, das eine Kluftverteilung zu einer vorgegebenen Dichtefunktion beinhaltet, numerische Experimente mit diskreten Modellansätzen vorgestellt. Es werden Strömungs- und Stofftransportprozesse zur Charakterisierung der Eigenschaften des Aquifers durchgeführt. Insgesamt werden fünf Varianten betrachtet. Die Durchlässigkeit der Gesteinsmatrix wird dabei von Variante 1 (z.B. Granit) bis hin zu Variante 5 (z.B. Sandstein) zunehmend gesteigert. Somit wird eine genügend große Bandbreite an Transportcharakteristika hinsichtlich der Wertigkeit der diffusiven und advektiven Austauschprozesse und der Beteiligung der untergeordneten Matrixkomponente am regionalen Stofftransport abgebildet. Die Auswertung der Stofftransportexperimente zeigt, dass die Untersuchungen mit begrenzter Tracerzugabe sehr gut eingesetzt werden können, um die Durchbruchkurve einer zeitlich unbegrenzten Tracerzugabe vorherzusagen. Die prognostizierten Durchbruchkurven einer zeitlich unbegrenzten Tracerzugabe werden abschließend zur Identifikation eines geeigneten Mehrkontinuum-Ansatzes verwendet. Die Identifikation erfolgt durch die Ermittlung von Kennzahlen, die die Kurvencharakteristik hinsichtlich Ungleichförmigkeit, Krümmung sowie frühem und spätem Tracerdurchgang beschreiben. Die Auswahl eines geeigneten Ansatzes erfolgt durch den Vergleich der Kennzahlen mit Ergebnissen aus detailliert bekannten Untersuchungsgebieten, für die entsprechende Mehrkontinuum-Ansätze bereits erfolgreich eingesetzt werden konnten.

Kapitel 7

Strömungs- und Transportexperimente mit Mehrkontinuum-Ansätzen

7.1 Allgemeines

7.1.1 Vorgehensweise

Im vorliegenden Kapitel werden zu dem in Kapitel 6 vorgestellten synthetischen Festgesteinsaquifer die in Kapitel 6.5.2 identifizierten Mehrkontinuum-Ansätze zu den Varianten 1 bis 5 umgesetzt. Die Beurteilung der mit den Mehrkontinuum-Ansätzen erzielten Ergebnisse erfolgt durch den Vergleich der Durchbruchkurven mit den diskreten Ergebnissen. Die zum Vergleich herangezogenen Ergebnisse der diskreten Untersuchungen werden als Messung verwendet, d. h. es werden jeweils die approximierten Tracerdurchbruchkurven einer unbegrenzten Tracerzugabe aus den 1*d*-Impulsberechnungen mit den Durchbruchkurven einer unendlichen Tracerzugabe aus den Mehrkontinuum-Berechnungen verglichen. Abschließend wird zu jedem vorgestellten Modellansatz eine Prognoserechnung für integralen Stofftransport vorgestellt.

7.1.2 Erläuterung der Ergebnisdarstellung

Die Darstellung der Ergebnisse für den Modellaufbau und die Prognoserechnung der einzelnen Varianten und Modellansätze erfolgt für jede untersuchte Variante in identischer Form. Die Durchbruchkurven werden in Matrizen abgebildet. Es wird jeweils eine Matrix mit logarithmischer Skalierung der Zeitachse präsentiert. Die Zeilenbeschriftung enthält die Information über den „Input-Port“, die Spaltenbeschriftung über den „Output-Port“ bzw. „BTC-Port“ (Port, an dem die Durchbruchkurve aufgezeichnet wird). Für einzelne Konfigurationen werden die lineare und die logarithmische Darstellung vor der Präsentation der Ergebnismatrix vergrößert dargestellt. Mit Hilfe dieser vergrößerten Ergebnisdarstellung lassen sich die Unterschiede innerhalb der Parametervariation deutlicher erkennen.

7.1.3 Finite-Elemente-Diskretisierung

Die Finite-Elemente-Diskretisierung der übergeordneten Komponente erfolgt in einem regelmäßigen Knotenabstand von $0.125m$. Beim Aufbau der DPSP-Modelle erfolgt die Zuordnung der eindimensionalen Subsysteme der untergeordneten Komponente zu jedem Knoten. Bei der Wahl eines DPDP-Modells liegen zwei identische Finite-Elemente-Netze vor, die jeweils an ihren örtlich gleichen Knoten durch Stabelemente gekoppelt sind. Insgesamt umfasst ein Finite-Elemente-Netz einer Komponente 1681 Knoten und 3200 Dreieckselemente.

7.2 DPSP-Ansatz

7.2.1 Allgemeines

Die in Kapitel 6.5.2 angewendete Methode zur Identifikation eines geeigneten Mehrkontinuum-Ansatzes mit Hilfe der Kurvenkennzahlen liefert für die Varianten 1 bis 3 als möglichen Ansatz ein doppelt poröses, single permeables Mehrkontinuum-Modell (DPSP). Mit STRAFE6 sind sowohl ein Linearansatz als auch ein Gradientenansatz zur Formulierung des diffusiven Stofftransfers zwischen der über- und untergeordneten Komponente mit einem DPSP-Ansatz möglich (vgl. Anhang A.4). In der vorliegenden Arbeit werden in Verbindung mit Speichermodellen lediglich Gradientenansätze eingesetzt.

Die angesetzten Basisparameter der DPSP-Berechnungen sind für die Varianten 1 bis 3 in Tabelle 7.1 aufgeführt. Die Unterscheidung erfolgt im Modellaufbau lediglich durch die Berücksichtigung der ermittelten äquivalenten hydraulischen Durchlässigkeit der Kluftkomponente (vgl. Kapitel 6.4.1). Die äquivalente Porosität der übergeordneten Kluftkomponente ergibt sich direkt aus der Geometrie des Kluftnetzwerks und der bekannten Kluftöffnungsweite. Bei Feldversuchen ist dieser Parameter entsprechend mit Unsicherheiten behaftet. Eine Tortuosität wird für die Kluftkomponente analog zu der diskreten Berechnung nicht angesetzt. Die Tortuosität für die Gesteinsmatrix wird einheitlich zu ca. 20% angenommen, wodurch sich der effektive Diffusionskoeffizient der untergeordneten Matrixkomponente wie in Tabelle 7.1 ausgewiesen ergibt. Der Austausch für ein DPSP-Modell wird maßgeblich durch die spezifische Oberfläche, dem Produkt aus Porosität der Matrixkomponente mit dem effektiven Diffusionskoef-

fizienten und der verwendeten Interface-Funktion bestimmt (siehe Anhang A.4.3).

Tabelle 7.1: Basiswerte der Materialtypen der DPSP-Berechnung

übergeordnete Kluftkomponente			
äquivalente Porosität	n_1	$[m^3/m^3]$	8.10e-04
hydraulische Durchlässigkeit	$K_{1,11}[m/s]$	$K_{1,12}[m/s]$	$K_{1,22}[m/s]$
Variante 1	2.06e-06	1.42e-07	2.21e-06
Variante 2	2.08e-06	1.40e-07	2.23e-06
Variante 3	2.13e-06	1.34e-07	2.28e-06
longitudinale Dispersivität	$\alpha_{1,l}$	$[m]$	1.00e-01
transversale Dispersivität	$\alpha_{1,t}$	$[m]$	1.00e-02
effektiver Diffusionskoeffizient	$D_{1,mol}$	$[m^2/s]$	1.00e-09
untergeordnete Matrixkomponente			
äquivalente Porosität	n_2	$[m^3/m^3]$	0.05
effektiver Diffusionskoeffizient	$D_{2,mol}$	$[m^2/s]$	2.30e-10
spezifische Oberfläche	Ω_0	$[1/m]$	17.90

Der Modellaufbau erfolgt sowohl unter Einbeziehung der räumlichen Verteilung der Blockgrößen als auch ohne Berücksichtigung der Heterogenität der Blockgrößenverteilung für die untergeordnete Komponente. Das DPSP-Modell ohne Berücksichtigung der Heterogenität beinhaltet zur Formulierung des Stoffaustausches den durch JANSEN (1999) vorgestellten Kluftufer-Ansatz. Mit dieser Methode ist es möglich, sowohl auf die Generierung des Kluftnetzwerkes als auch auf die Annahme einfacher Blockformen zu verzichten. Die mittlere Interface-Funktion $\bar{A}(s)$ für einen Matrixbereich wird aus den originalen statistischen Parametern für das Kluftnetzwerk bestimmt. Für weiterführende Erläuterungen wird auf JANSEN (1999) verwiesen. Zur Abbildung der räumlichen Anordnung der Blöcke wird die in 6.2.4 beschriebene Fenstertechnik verwendet. Der Modellaufbau un-

ter Berücksichtigung der Blockgrößenverteilung erfolgt für den minimalen (*MIN*), den maximalen (*MAX*) und den arithmetisch mittleren Block (*MEAN*) je Fenster. Die Anzahl der für die DPSP-Modelle umgesetzten Interface-Funktionen der untergeordneten Komponente sind

- 1 homogener Materialbereich für den Kluftufer-Ansatz,
- 56 Materialbereiche für den minimalen Block je Fenster,
- 54 Materialbereiche für den maximalen Block je Fenster
- und 82 Materialbereiche für den arithmetisch mittleren Block je Fenster.

Die unterschiedliche Anzahl der Materialbereiche entsteht durch eine entsprechende Klasseneinteilung bei der Vergabe der Materialtypen. Für den arithmetisch mittleren Block ergibt sich die größte Anzahl an Klassen (siehe Abbildung 6.3). Für die Ansätze mit Berücksichtigung der räumlichen Verteilung der Blockgröße gilt nicht die in Tabelle 7.1 aufgeführte spezifische Oberfläche Ω_0 . Für die Ansätze *MIN*, *MAX* und *MEAN* gilt der entsprechende Wert des untersuchten Fensters und variiert somit über die Materialbereiche.

7.2.2 Modellaufbau

Variante 1

Ausgehend von der Startkonfiguration mit einer Matrixporosität von $n_2 = 0.05$ sind in den Abbildungen 7.1 bis 7.2 die Ergebnisse mit dem Kluftufer-Ansatz für variierende Porosität der Matrix dargestellt. In der Matrixabbildung 7.2 wird deutlich, dass für die Startkonfiguration der diffusive Austausch zu groß angenommen wird. Für die Variationen der Matrixporosität ($n_2 = 0.035$ und $n_2 = 0.025$) verschieben sich die Durchbruchkurven insgesamt zu früheren Zeitpunkten hin. Der für die meisten Konfigurationen in den Messungen beobachtete schnelle Anstieg mit einem anschließenden ausgeprägten Tailing kann mit dem DPSP-Modell nur begrenzt wiedergegeben werden. Insgesamt werden die Messungen am besten durch den Kluftufer-Ansatz bei einer Porosität von 0.035 abgebildet.

In den folgenden Abbildungen 7.3 und 7.4 sind die Ergebnisse bei einer Matrixporosität von $n_2 = 0.035$ für die Ansätze *Kluftufer*, *MIN* und *MAX* einander gegenübergestellt. Der Ansatz *Kluftufer* wird in den Legenden ohne weitere Kennzeichnung dargestellt. Der Kluftufer-Ansatz liefert ohne Berücksichtigung der Heterogenität gut mit den Messungen vergleichbare Ergebnisse. Mit dem Ansatz der Eigenschaften der minimalen Blöcke in einem Fenster kann das steile Ansteigen nach der Erstankunft der Tracerdurchbruchskurve zum Teil besser wiedergegeben werden, jedoch wird die Erstankunft hier geringfügig unterschätzt. Für kleine Blöcke ist die spezifische Oberfläche Ω_0 größer. Zu frühen Zeitpunkten, wenn die Blöcke noch nicht aufgeladen sind, nimmt somit die Intensität des Stoffaustausches zu. Bei Ansatz der maximalen Blöcke je Fenster ist das Verhalten umge-

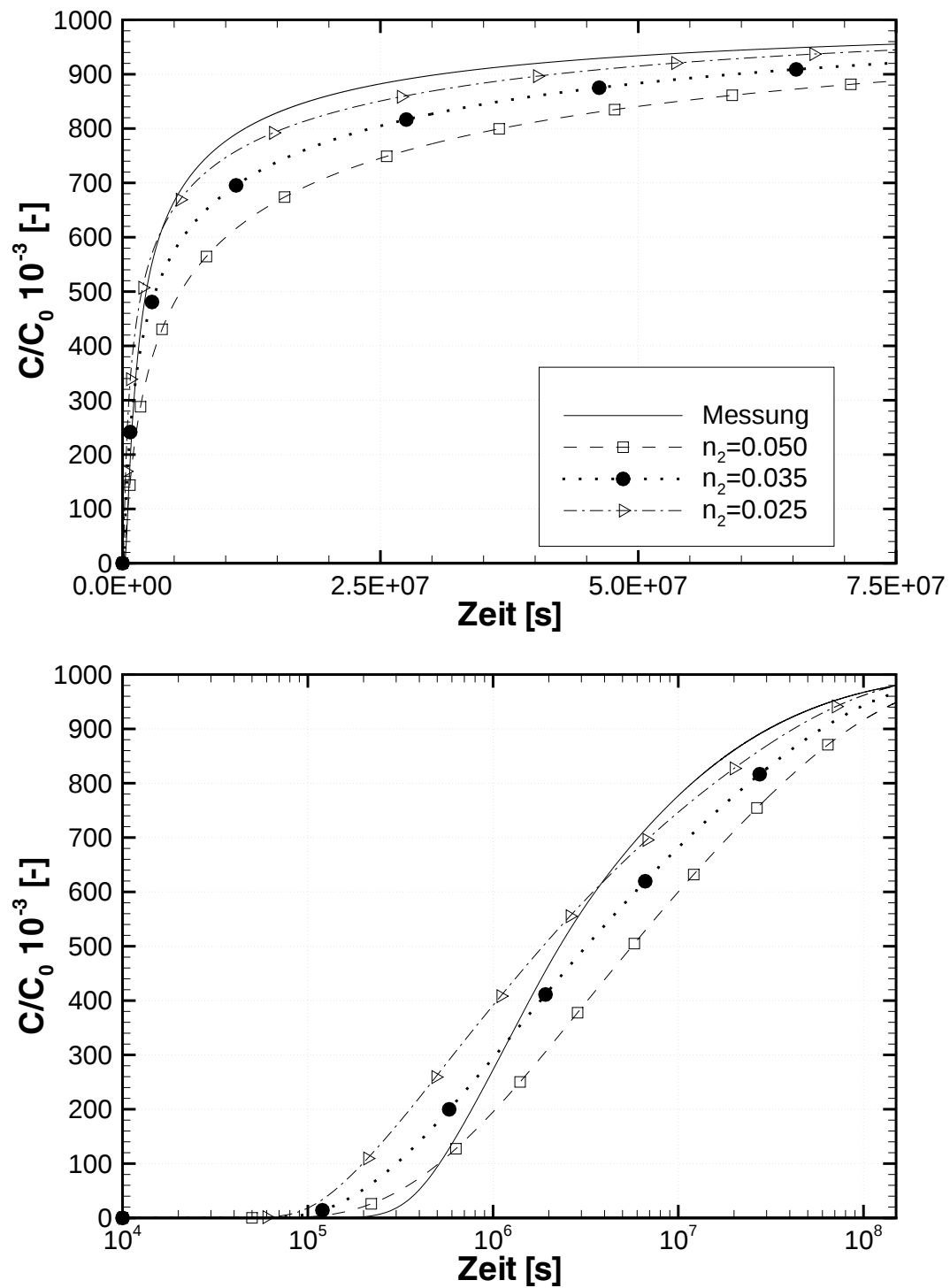


Abbildung 7.1: Durchbruchkurven zu Variante 1: DPSP-Port-Port, Konfiguration 3-5, *Kluftufer*
oben: t linear; unten: t logarithmisch

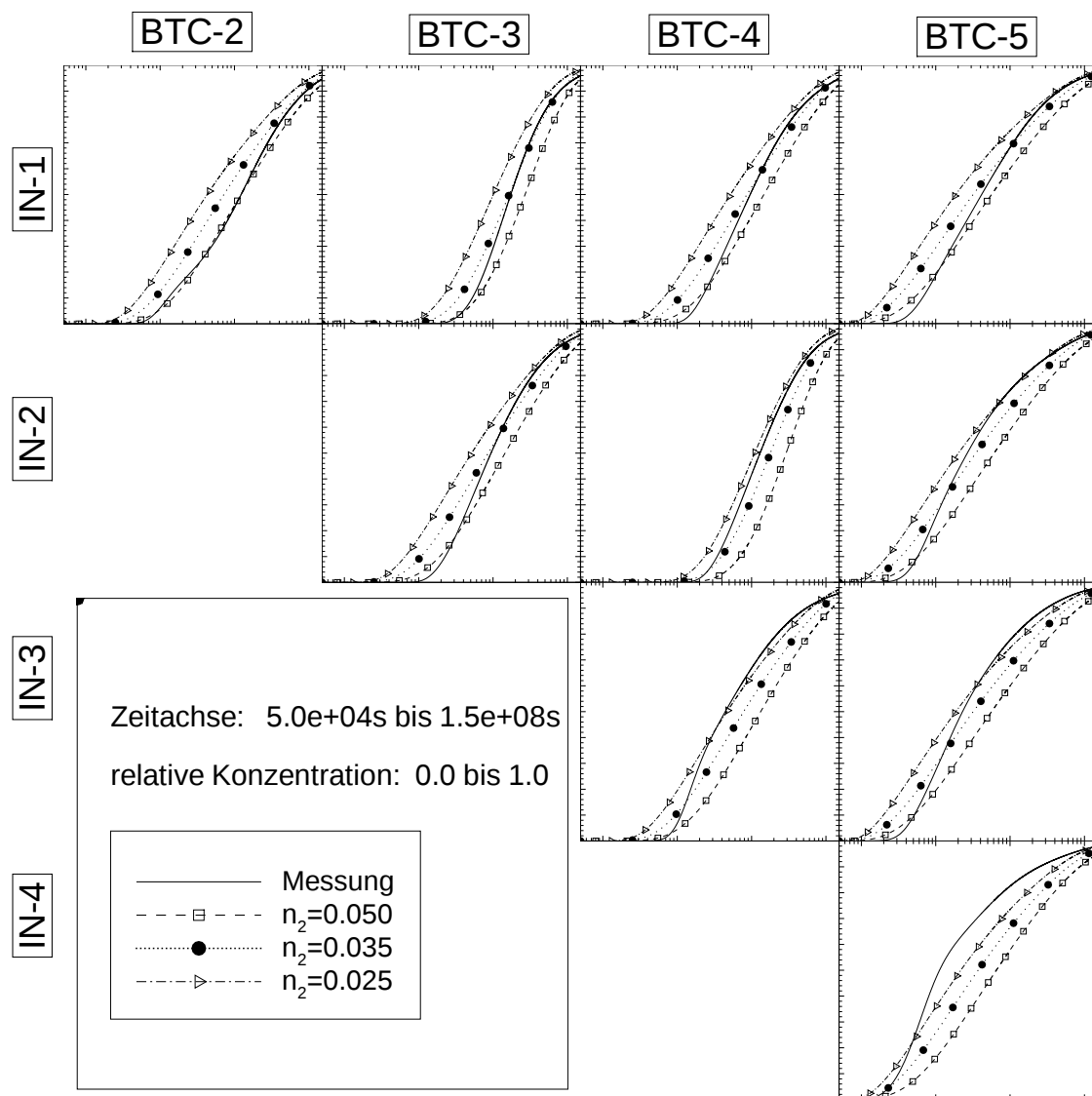


Abbildung 7.2: Durchbruchkurven zu Variante 1: DPSP-Port-Port, Matrix, t logarithmisch, Kluftufer

kehrt. Zu frühen Zeitpunkten ist der Austausch weniger intensiv, jedoch ergibt sich zu späten Zeitpunkten durch die weiter vorhandene Speicherkapazität der großen Blöcke ein flacherer Anstieg der Tracerdurchbruchskurven. Die Ergebnisse der Ansätze *MIN* und *MAX* gleichen sich zum Ende des Beobachtungszeitraums wieder an und stimmen besser mit den Messergebnissen überein als die Ergebnisse des Kluftufer-Ansatzes.

Abschließend werden für den DPSP-Ansatz zu Variante 1 in den Abbildungen 7.5 und 7.6 die Ergebnisse der Startkonfiguration ($n_2 = 0.05$) für die drei Ansätze (*MIN*, *MEAN*, *MAX*) mit Berücksichtigung der Blockgrößenverteilung dargestellt. In der linearen, vergrößerten Darstellung (Abbildung 7.5, oben) zu der Port-Port-Konfiguration 2-4 zeigen sich dabei die Unterschiede in den Ansätzen besonders deutlich. Der Ansatz der minimalen Blöcke führt wie bereits erläutert zu Anfang der Simulationsphase zu einem deutlich intensiveren Austausch als dies bei den Varianten mit dem arithmetisch mittleren bzw. maximalen Block beobachtet werden kann. Zu späteren Zeitpunkten, nachdem ca. 60% des Tracers am Ausgang detektiert werden, gleichen sich die Kurven für alle Ansätze an, liegen jedoch im Vergleich zu den Simulationen mit einer Porosität $n_2 = 0.035$ (Abbildungen 7.2 und 7.4) weiter unterhalb der Messkurven.

Insgesamt zeigt sich für die verschiedenen DPSP-Ansätze zu Variante 1, dass bereits durch die alleinige Variation der Matrixporosität die Bandbreite der gemessenen Ergebnisse aus den Port-Port-Konfigurationen mit dem DPSP-Ansatz sehr gut wiedergegeben werden kann. Der spezifische Kurvenverlauf einzelner Port-Port-Konfigurationen kann nicht immer mit dem gleichen Ansatz in bester Weise erfolgen. Die Prognoserechnungen werden in Kapitel 7.2.3 für ausgewählte Konfigurationen präsentiert.

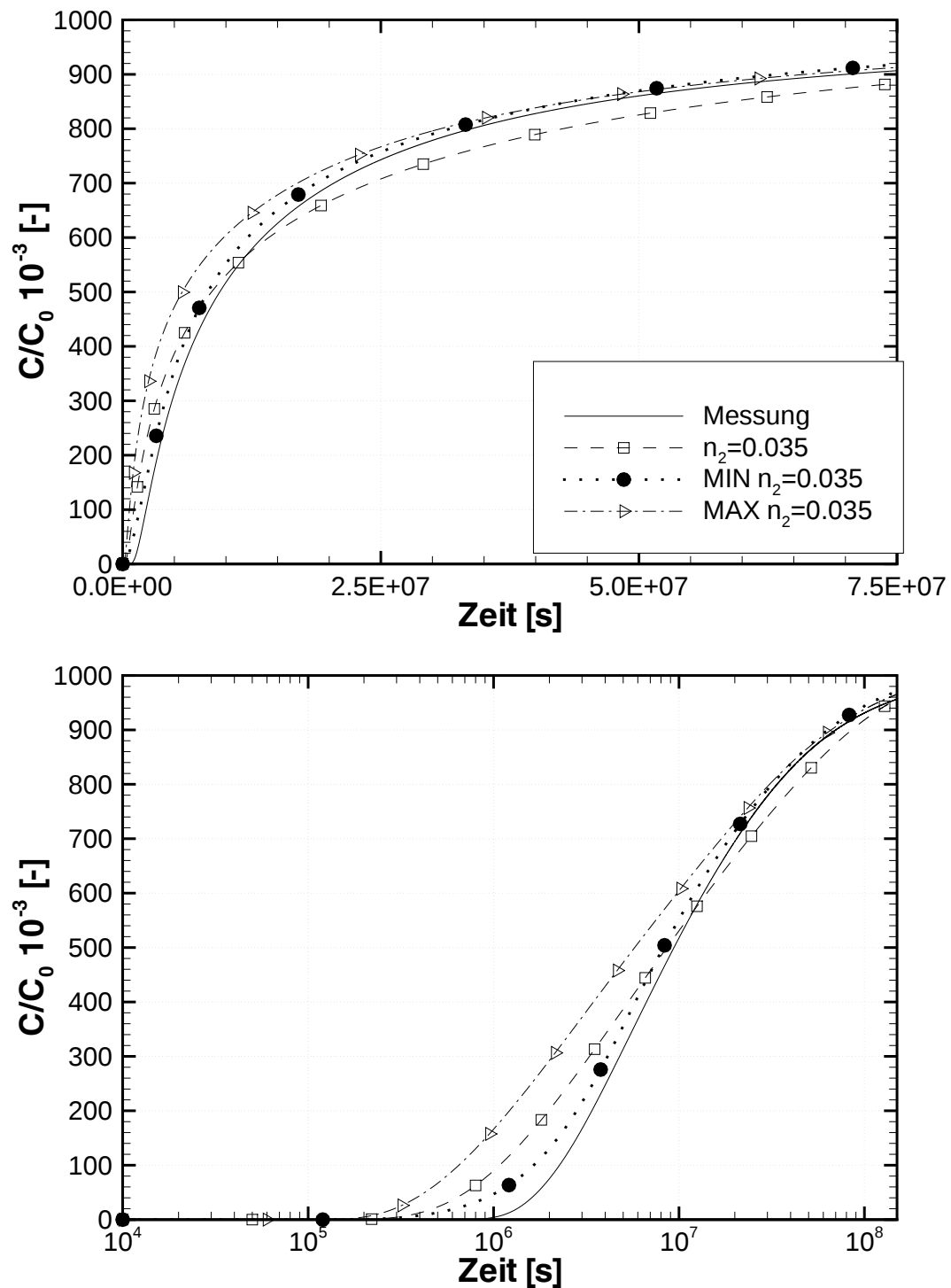


Abbildung 7.3: Durchbruchkurven zu Variante 1: DPSP-Port-Port, Konfiguration 2-3, Kluftufer, MIN, MAX
oben: t linear; unten: t logarithmisch

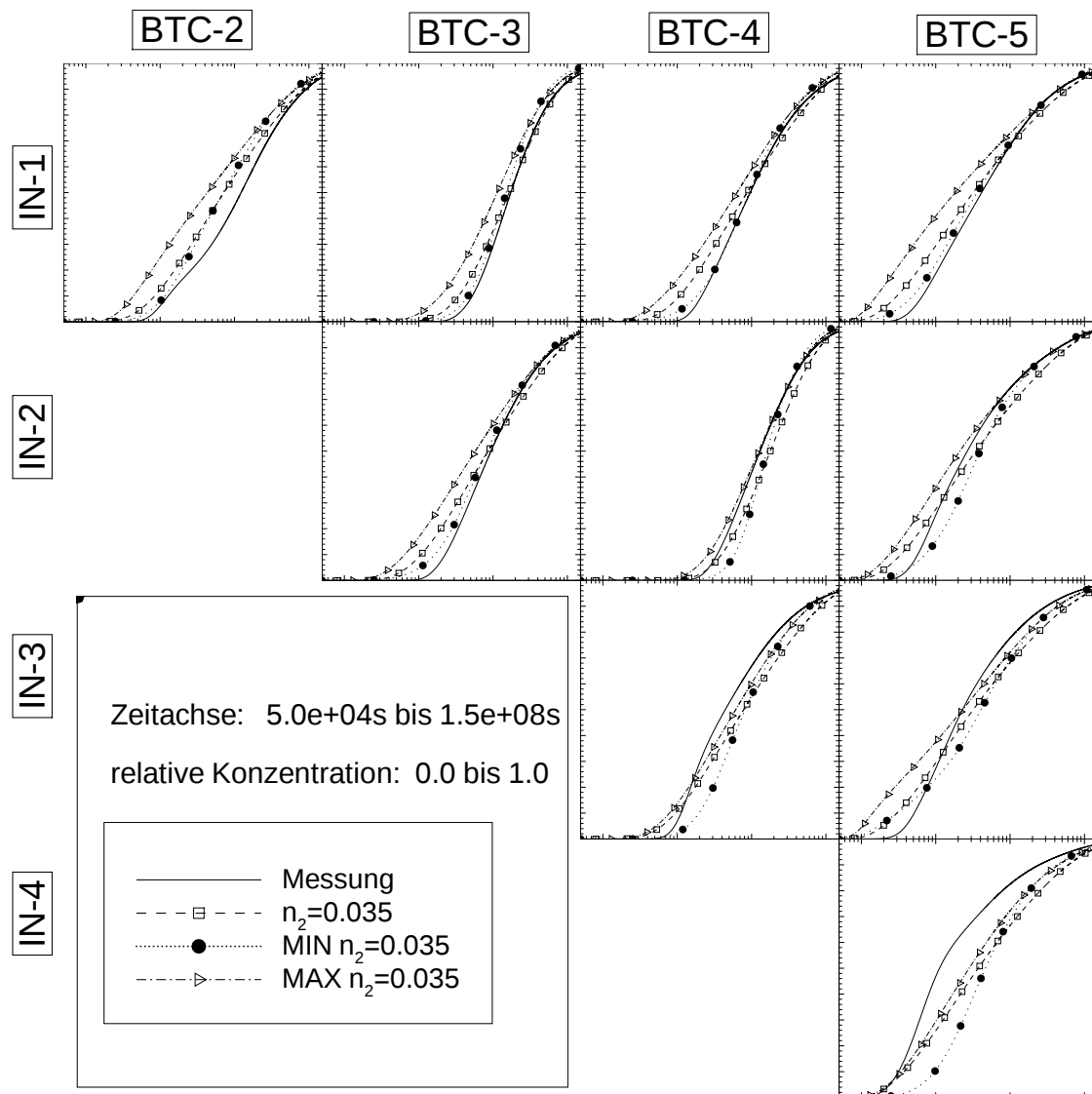


Abbildung 7.4: Durchbruchkurven zu Variante 1: DPSP-Port-Port, Matrix, t logarithmisch, Kluftufer, MIN, MAX

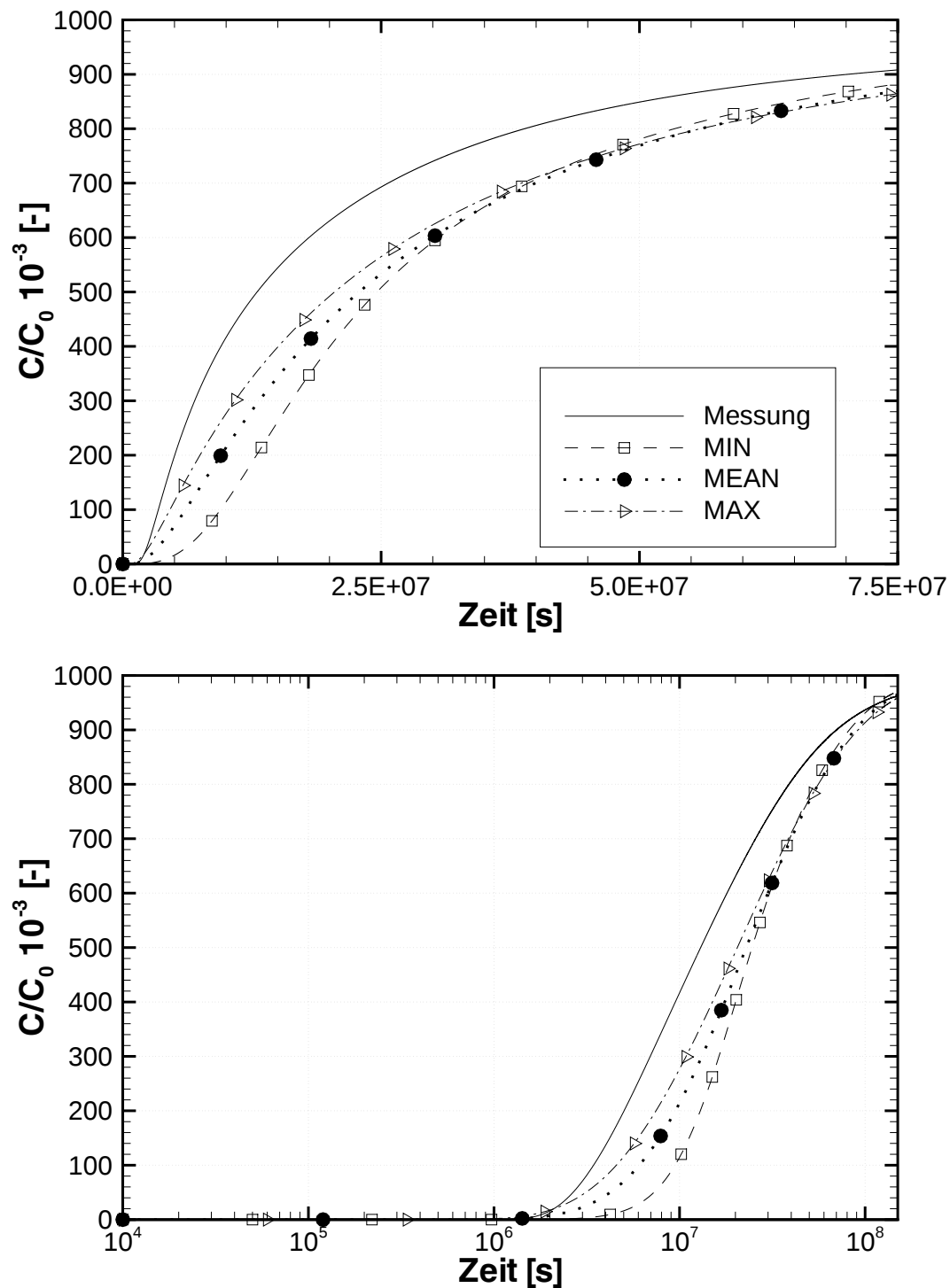


Abbildung 7.5: Durchbruchkurven zu Variante 1: DPSP-Port-Port, Konfiguration 2-4, *MIN*, *MEAN*, *MAX*
oben: t linear; unten: t logarithmisch

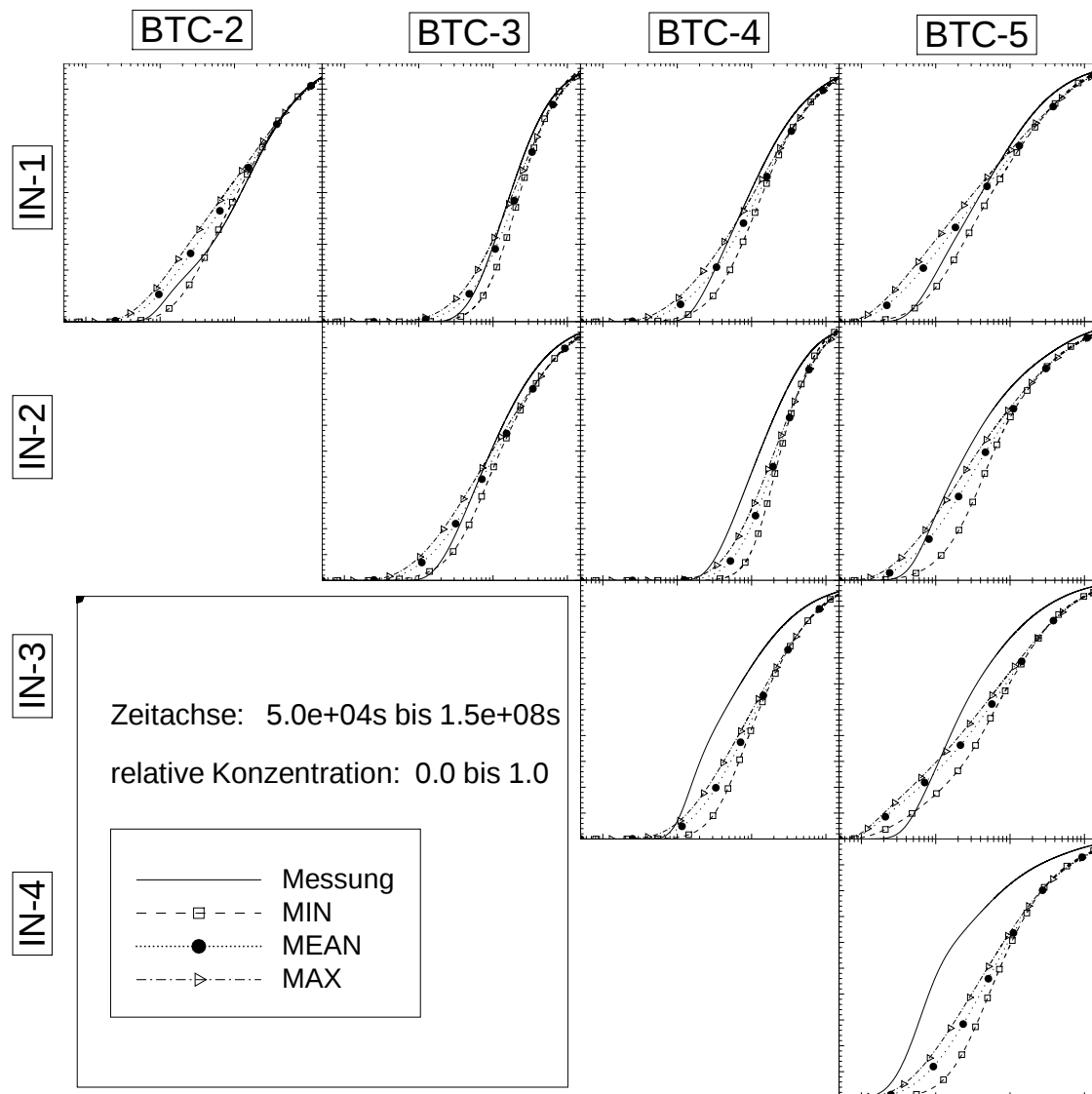


Abbildung 7.6: Durchbruchkurven zu Variante 1: DPSP-Port-Port, Matrix, t logarithmisch, MIN, MEAN, MAX

Variante 2

Wie bereits zu Variante 1 werden zu Variante 2 die Ergebnisse bei Variation der Matrixporosität n_2 unter Anwendung des Kluftufer-Ansatzes vorgestellt (Abbildung 7.7). Auf eine vergrößerte Darstellung wird hier verzichtet. Die Variation der Matrixporosität führt zu einem ähnlichen Ergebnisraum wie dieser bereits für Variante 1 beobachtet werden konnte. Die gemessene Durchbruchskurve liegt zwischen den Ergebnissen des Kluftufer-Ansatzes bei einer Matrixporosität von $n_2 = 0.05$ und $n_2 = 0.025$. Die größten Diskrepanzen ergeben sich wie bereits bei Variante 1 für die Port-Port-Konfiguration 4-5. Die Ursache liegt in diskreten Einflüssen, die nicht mit dem DPSP-Ansatz abgebildet werden können. Für die Konfiguration 4-5 liegen sehr gute Kluftverbindungen vor (vgl. Abbildung 6.3). Die Bestimmung des äquivalenten Durchlässigkeitstensors erfolgt in Kapitel 6.4.1 für Profil-Profil-Messungen, d. h. die schnellen diskreten Verbindungen werden durch die integrale Messung verschmiert. Die Stärke eines Mehrkontinuum-Modells ist in Untersuchungen mit integrelem Charakter zu sehen. Einzelne Diskontinuitäten werden nicht aufgelöst. Für die integrale Prognoserechnung, welche sich auf die Profil-Profil-Messungen stützen, werden dementsprechend bessere Ergebnisse erwartet.

Durch die Berücksichtigung der Blockgrößenverteilung für die Ansätze *MIN* und *MAX* bei einer Matrixporosität $n_2 = 0.035$ (vgl. Abbildung 7.8) kann die Kurvencharakteristik einzelner Port-Port-Konfigurationen besser wiedergegeben werden. So stimmen für die Konfigurationen 2-4 (*MAX*) und 2-5 (*MIN*) die mit dem DPSP-Ansatz ermittelten Durchbruchskurven sehr gut mit den Messergebnissen überein.

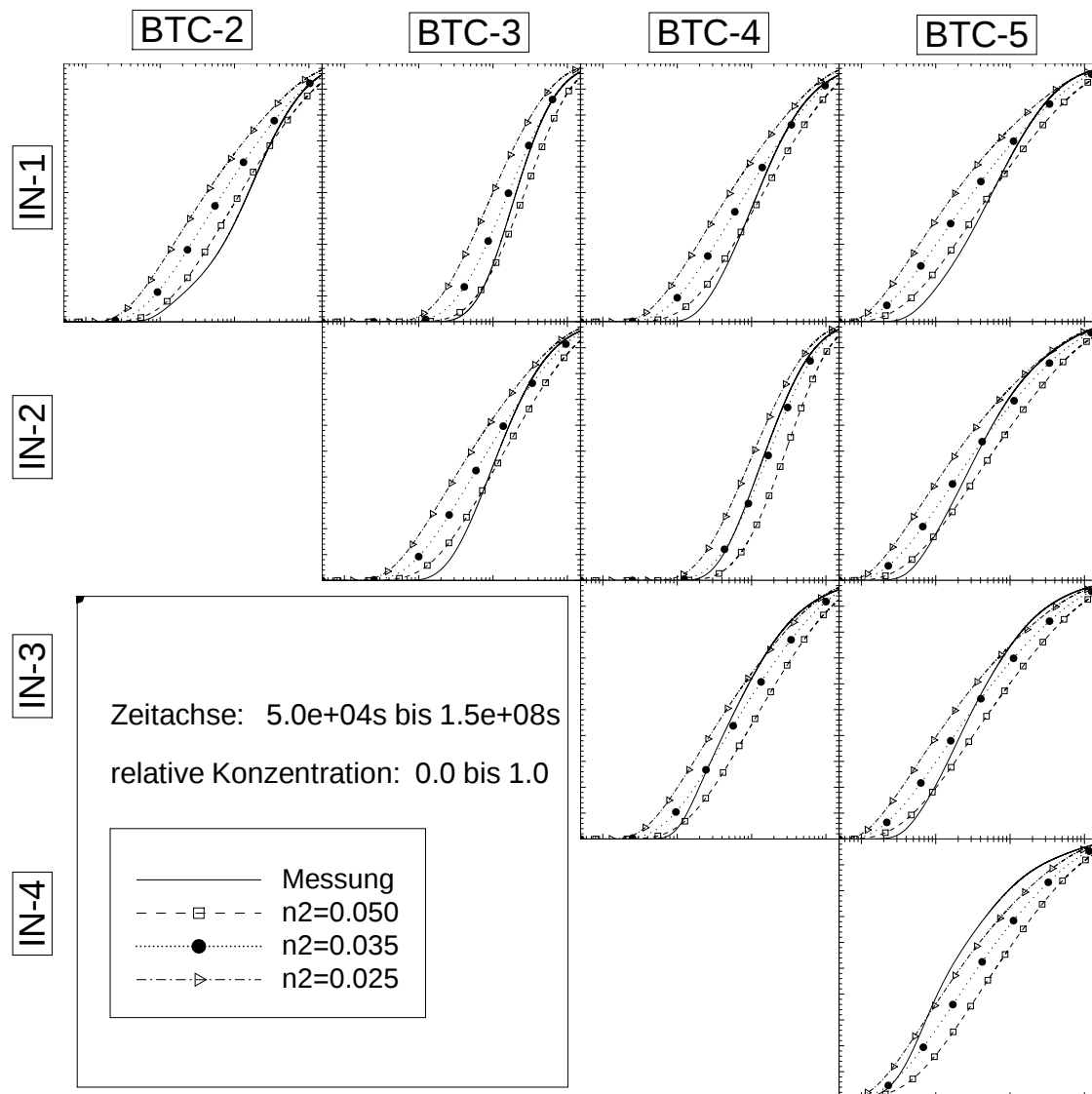


Abbildung 7.7: Durchbruchkurven zu Variante 2: DPSP-Port-Port, Matrix, t logarithmisch, Kluftufer

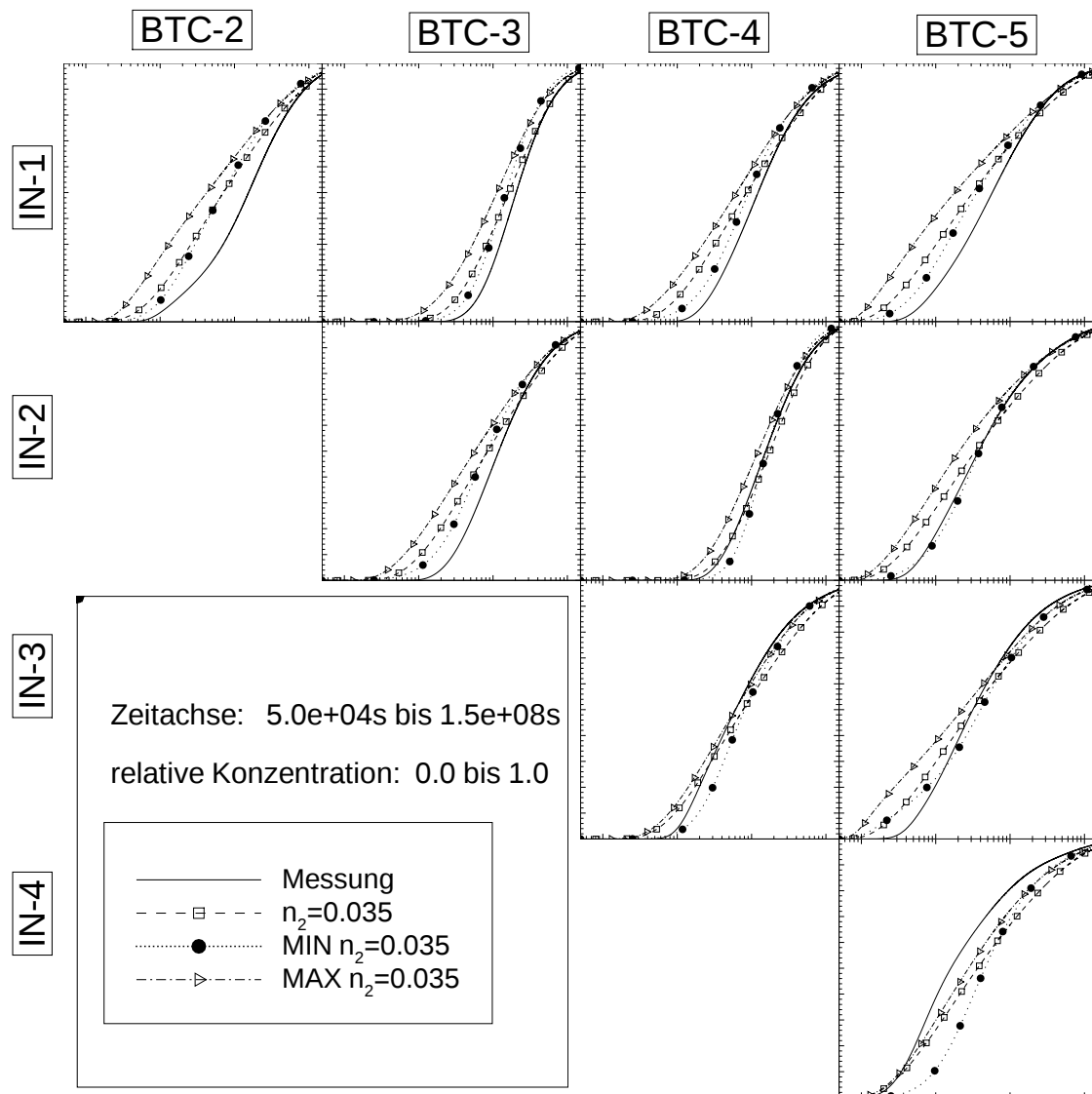


Abbildung 7.8: Durchbruchkurven zu Variante 2: DPSP-Port-Port, Matrix, t logarithmisch, Kluftufer, MIN, MAX

Variante 3

Die Identifikation eines geeigneten Mehrkontinuum-Ansatzes in Kapitel 6.5.2 weist für Variante 3 als möglichen Ansatz sowohl den DPSP- als auch den DPDP-Ansatz aus. Nachfolgend werden die mit dem DPSP-Modell erzielten Ergebnisse vorgestellt. Zu den Ansätzen mit Berücksichtigung der Blockgrößenverteilung werden für Variante 3 die Durchbruchskurven für den minimalen Block je Fenster bei einer Matrixporosität von $n_2 = 0.05$ und $n_2 = 0.035$ im Vergleich zum Kluftufer-Ansatz mit $n_2 = 0.035$ vorgestellt (Abbildungen 7.9 und 7.10). Mit dem Ansatz der minimalen Blöcke je Fenster bei $n_2 = 0.035$ werden zu frühen Zeitpunkten sehr gute Ergebnisse erzielt (Port-Port-Konfigurationen 2-4, 2-5 und 3-4). Zu späten Zeitpunkten werden die Konzentrationen am Auslass wie beim Kluftufer-Ansatz ($n_2 = 0.035$) und dem Ansatz der minimalen Blöcke bei $n_2 = 0.05$ unterschätzt. Für eine Matrixporosität $n_2 = 0.05$ können die Durchbruchskurven der Port-Port-Konfigurationen 1-3 und 1-4 mit dem Ansatz der minimalen Blöcke am besten wiedergegeben werden. Es zeigt sich wie bereits bei Variante 1 und 2, dass nicht ein Ansatz alleine zu allen Port-Port-Konfigurationen die besten Ergebnisse liefert. Bedingt durch die verschiedenen diskreten Einflüsse führen verschiedene DPSP-Ansätze bei ausgewählten Konfigurationen zu guten und bei anderen zu weniger guten Ergebnissen. Es ist zu erwarten, dass die Übereinstimmung für einen Ansatz bei unterschiedlichen Profil-Profil-Konfigurationen für die integrale Prognoserechnung homogener ist.

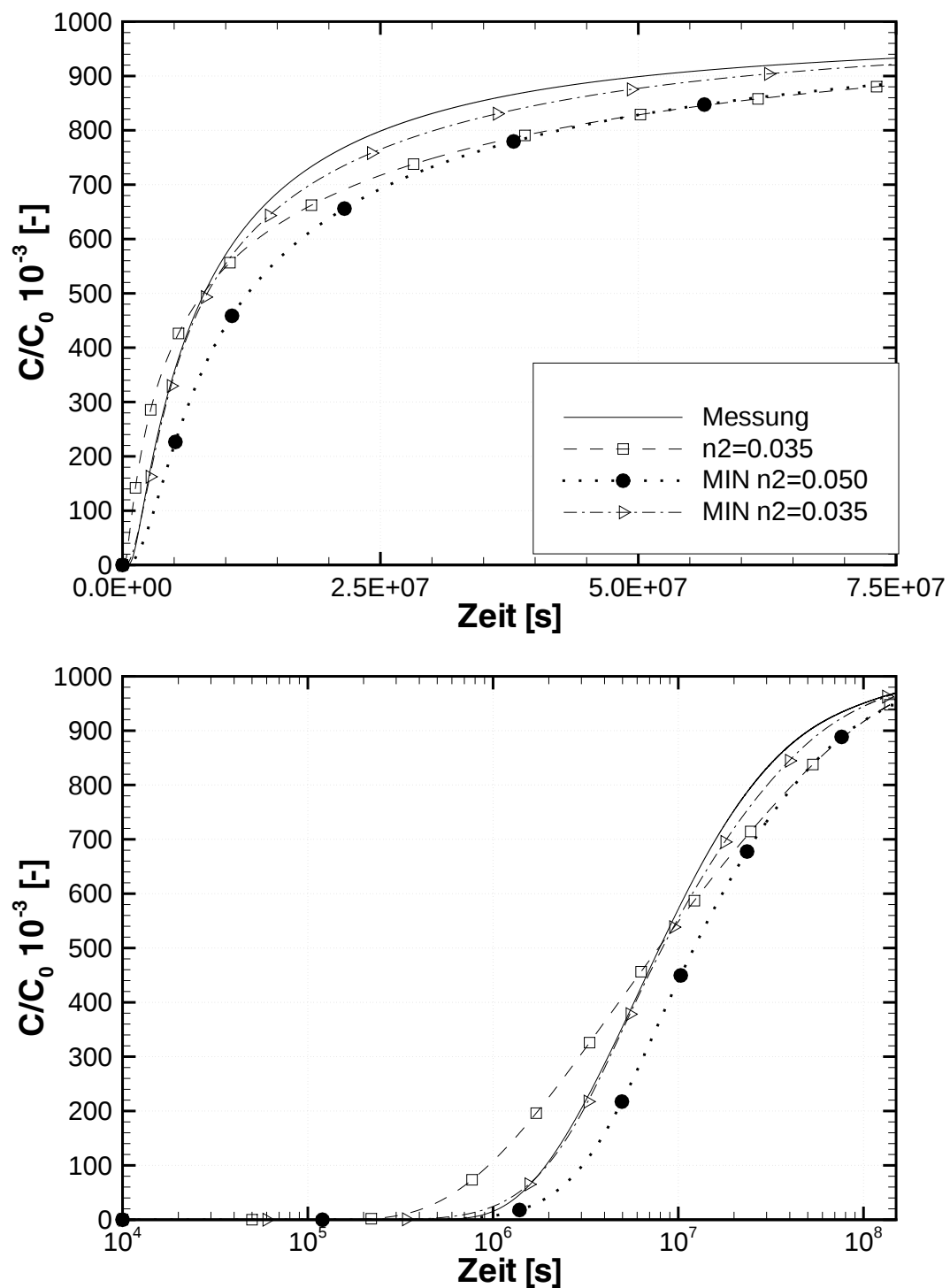


Abbildung 7.9: Durchbruchkurven zu Variante 3: DPSP-Port-Port, Konfiguration 3-4, MIN
oben: t linear; unten: t logarithmisch

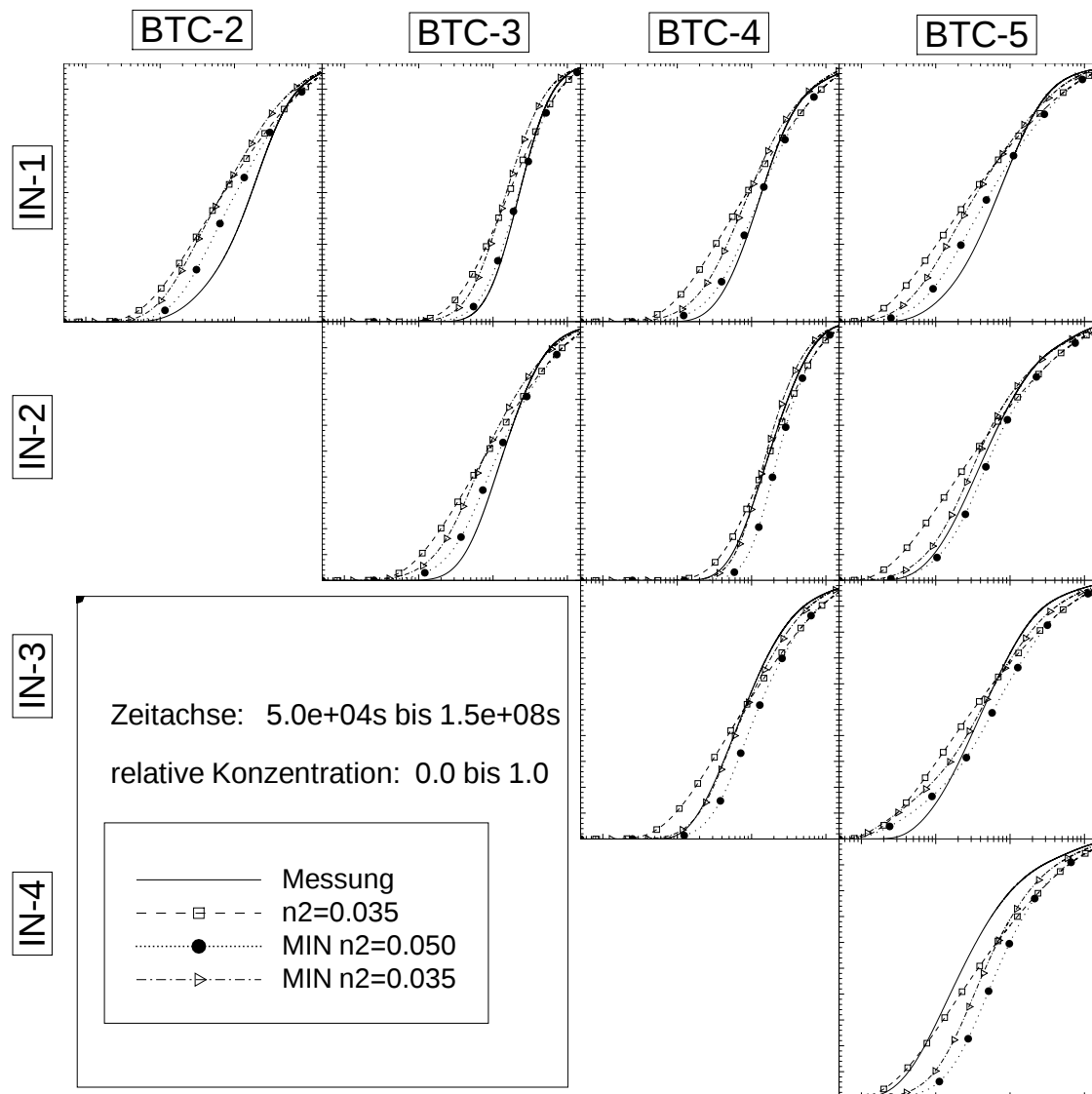


Abbildung 7.10: Durchbruchkurven zu Variante 3: DPSP-Port-Port,
Matrix, t logarithmisch, MIN

7.2.3 Modellprognose

Variante 1

Die Modellprognose erfolgt für die bereits zur Bestimmung der äquivalenten hydraulischen Durchlässigkeit beschriebenen Profil-Profil-Messungen (Kapitel 6.4.1). Es werden jeweils die Ergebnisse zu vier untersuchten Richtungen vorgestellt. Die Information der angeschlossenen Input-Ports und BTC-Ports ist wie bei dem Modell-aufbau den Matrizen zu entnehmen. In-162 / BTC-384 weist entsprechend die Ports 1, 6 und 2 als Einlass und die Ports 3, 8 und 4 als Auslass aus. In Abbildung 7.11 sind die Prognoserechnungen der Variante 1 bei Verwendung des Kluftufer-Ansatz für variierende Porosität dargestellt. Der mittlere Verlauf wird am besten bei einer Porosität von $n_2 = 0.035$ wiedergegeben. Zu frühen Zeitpunkten wird die Tracerankunft hier jedoch überschätzt, zu späten Zeitpunkten unterschätzt. Der Ergebnisraum wird insgesamt durch die Prognoserechnungen mit $n_2 = 0.025$ und der Ausgangskonfiguration mit $n_2 = 0.05$ begrenzt.

Bei einer Matrixporosität $n_2 = 0.035$ ergibt sich für die Ansätze *Kluftufer*, *MIN* und *MAX* ein Ergebnisraum, der zu späten Zeitpunkten enger gefasst ist und die Vergleichsergebnisse der Messungen sehr gut wiedergibt (Abbildung 7.12). Der ausgeprägte, steile Anstieg der Tracerdurchbruchskurve zu Konfiguration 6A9-7C8 kann nicht wiedergegeben werden. Die Kurvencharakteristik dieser speziellen Konfiguration unterscheidet sich deutlich von denen der übrigen Konfigurationen. Zu dieser Konfiguration liegen im Vergleich zu 9D8-6B7, 162-384 und 194-273 bessere Kluftverbindungen vor.

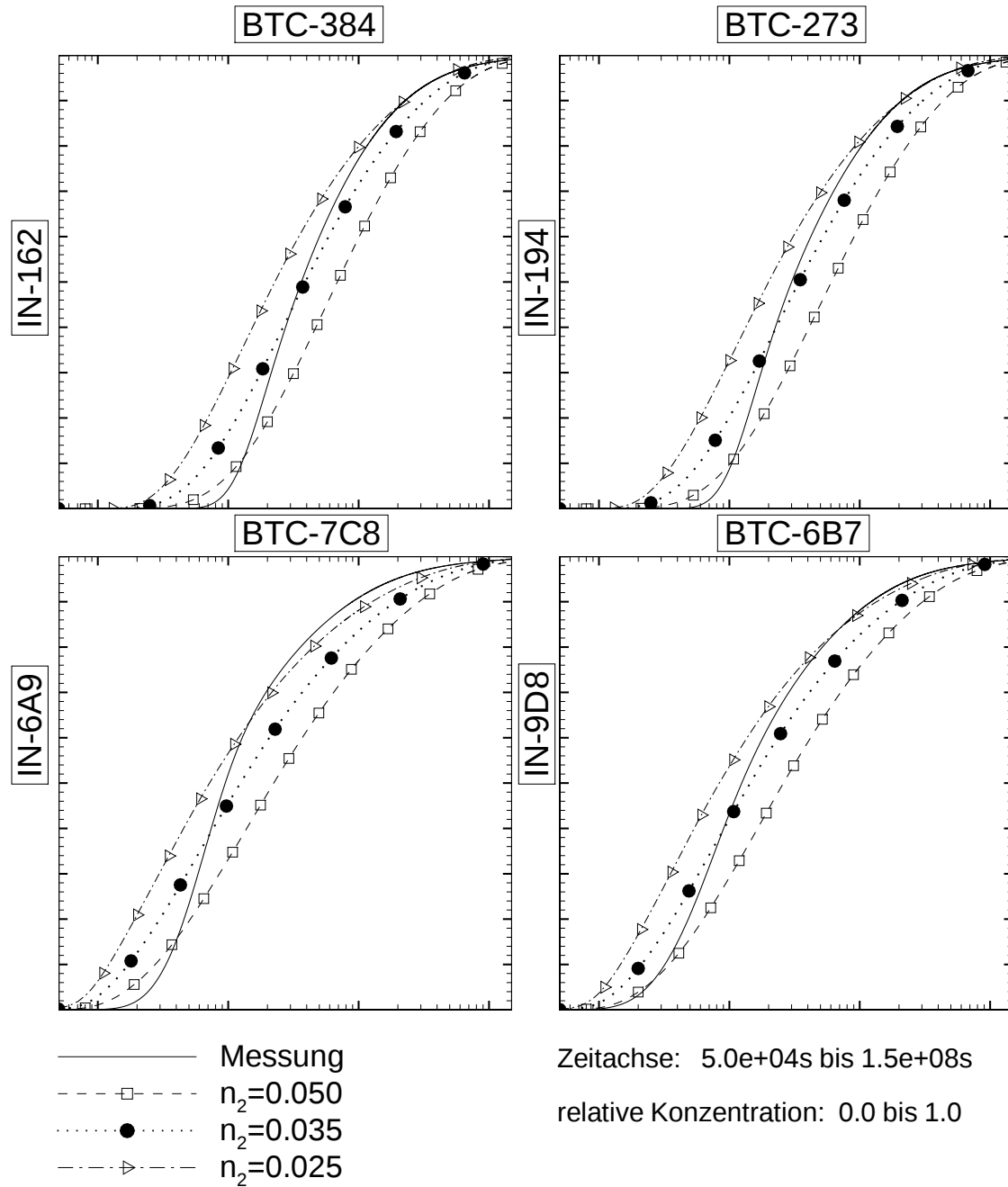


Abbildung 7.11: Durchbruchkurven zu Variante 1: DPSP-Profil-Profil,
 t logarithmisch, *Kluftufer*

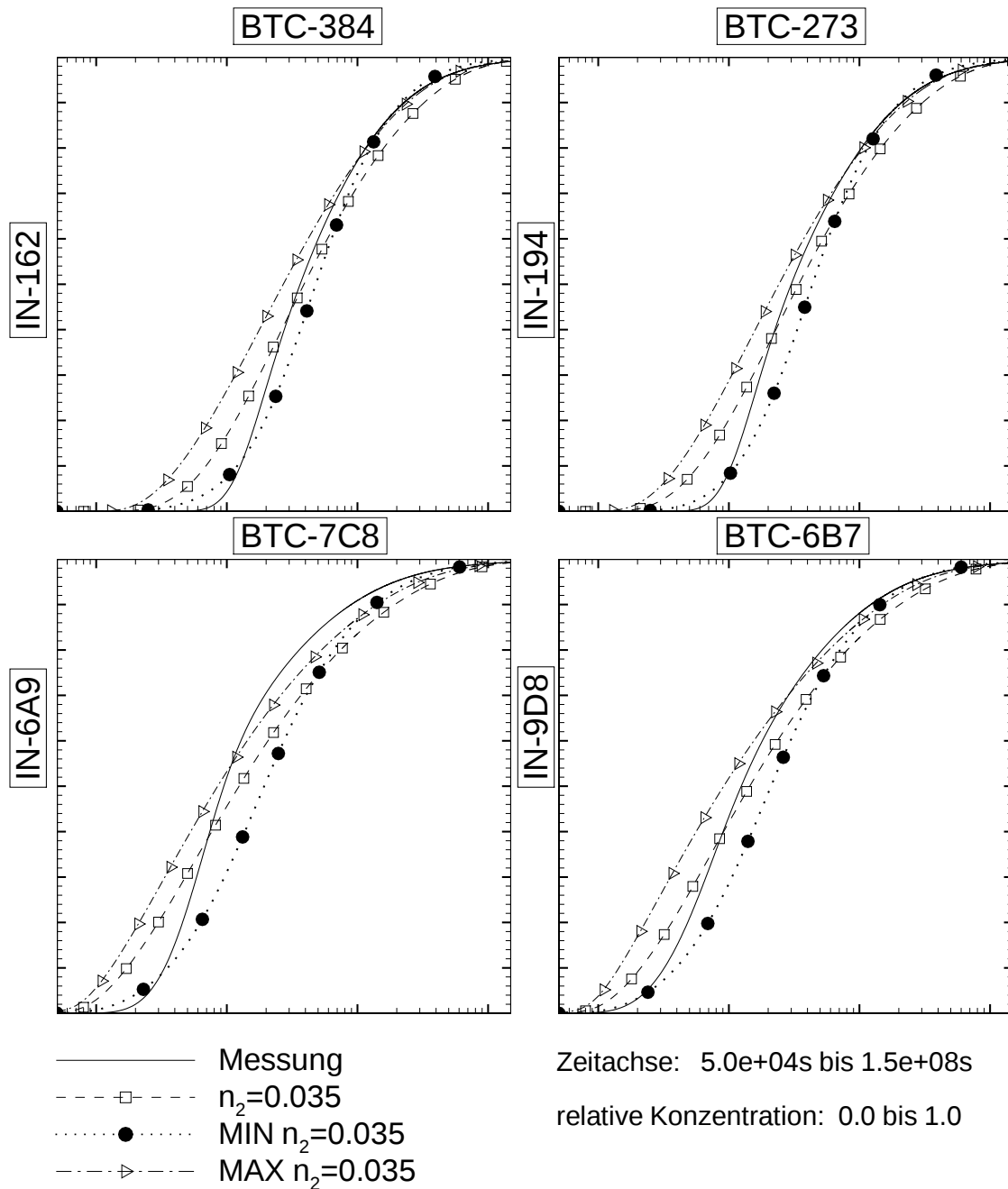


Abbildung 7.12: Durchbruchkurven zu Variante 1: DPSP-Profil-Profil, t logarithmisch, Kluftufer, MIN, MAX

Variante 2

Aus der Modellprognose zu Variante 2 resultieren mit Variante 1 vergleichbare Ergebnisse. Es sind wieder die Modellansätze *Kluftufer* bei variierender Matrixporosität (Abbildung 7.13) sowie die Ergebnisse zu einer konstanten Porosität $n_2 = 0.035$ für *Kluftufer*, *MIN* und *MAX* dargestellt (Abbildung 7.14). Der Ansatz der minimalen Blöcke je Fenster führt zu einer sehr guten Übereinstimmung mit den Messungen. Der gesamte Zeitraum wird gut abgebildet. Lediglich für die Profil-Profil-Konfiguration 6A9-7C8 wird der Tracerdurchgang zu späten Zeitpunkten unterschätzt. Im Vergleich zu Variante 1 ist der steile Anstieg der Tracerdurchbruchskurve zu frühen Zeitpunkten weniger stark ausgeprägt. Die Ursache liegt in dem bereits für Variante 2 intensiveren regionalen Austausch bei der diskreten Berechnung bedingt durch die Zunahme der Gesteinsdurchlässigkeit. Mit dem DPSP-Modell werden bei stationären Strömungsverhältnissen keine advektiven Austauschprozesse berücksichtigt, dennoch ist bei einem homogenen gemessenen Kurvenverlauf die Abbildung durch das DPSP-Modell zutreffender. Die Austauschprozesse verändern sich weniger ausgeprägt über die Zeit. Die Ergebnisse, die mit dem *Kluftufer*-Ansatz erzielt werden, liegen deshalb näher an den Messungen als dies für Variante 1 beobachtet werden kann.

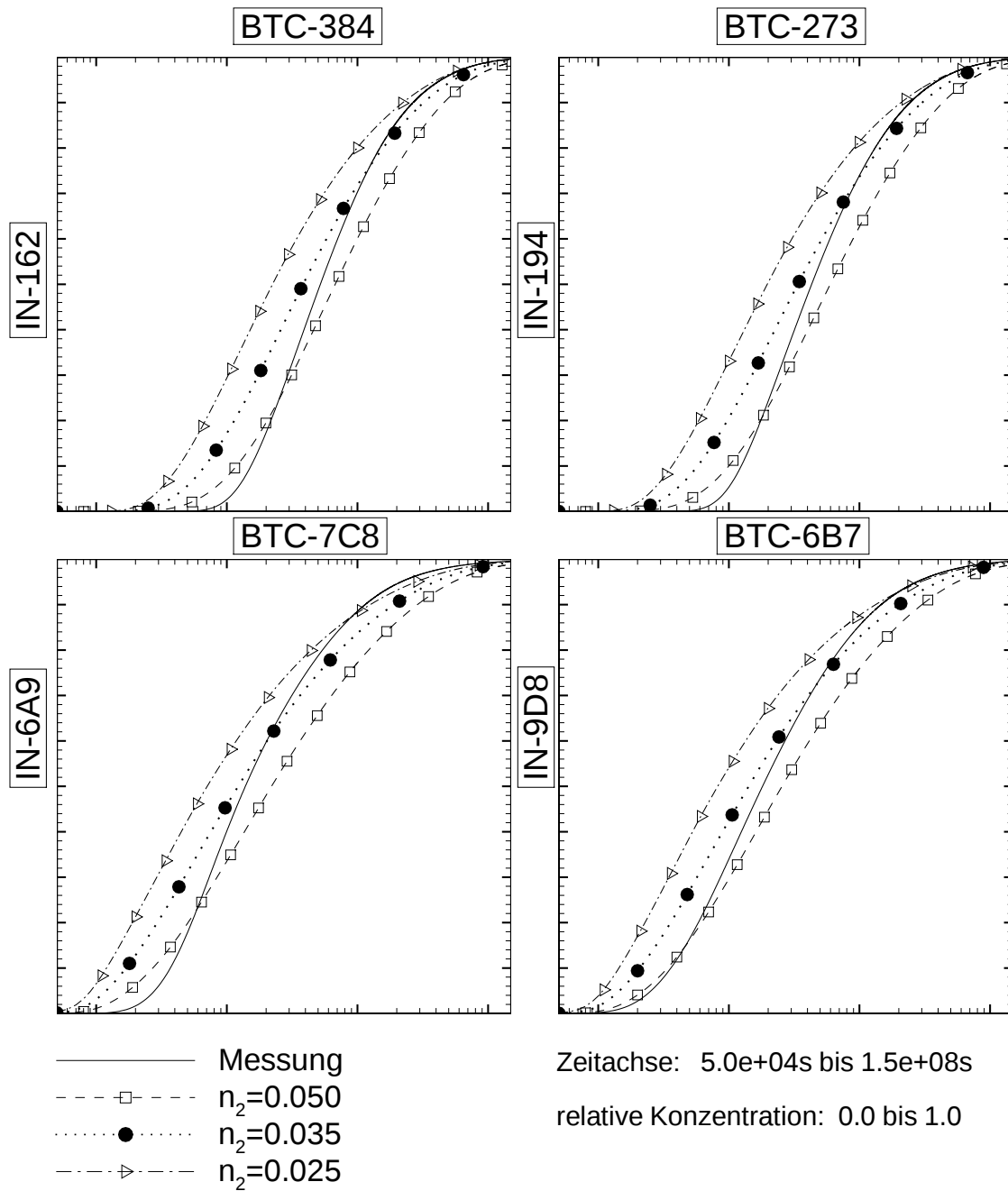


Abbildung 7.13: Durchbruchkurven zu Variante 2: DPSP-Profil-Profil,
 t logarithmisch, Kluftufer

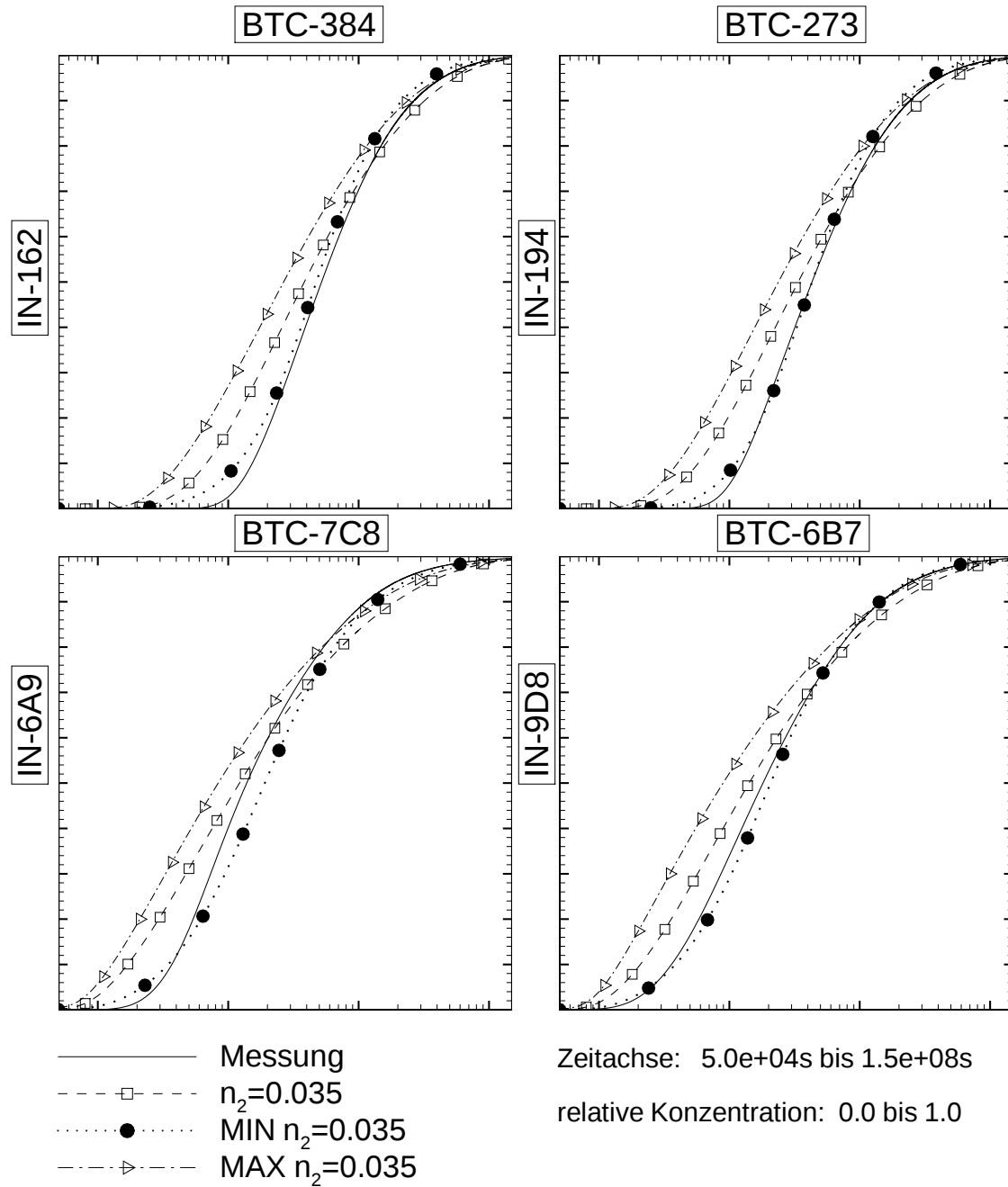


Abbildung 7.14: Durchbruchkurven zu Variante 2: DPSP-Profil-Profil,
 t logarithmisch, Kluftufer, MIN, MAX

Variante 3

Variante 3, die eine Charakteristik des Stofftransports zwischen einem DPSP-Modell und einem DPDP-Modell aufweist (vgl. Kapitel 6.5.2), kann sehr gut mit einem Ansatz der minimalen Blöcke je Fenster beschrieben werden. Die Modellprognose für den Ansatz *MIN* bei $n_2 = 0.05$ führt für die Profil-Profil-Konfigurationen 162-384 und 194-273 zu einer sehr guten Übereinstimmung mit den Messergebnissen. Der Ergebnisraum wird für die kürzeren Transportentfernungen (6A9-7C8 und 9D8-6B7) beim Ansatz *MIN* durch die Porosität $n_2 = 0.035$ und $n_2 = 0.05$ begrenzt (Abbildung 7.15). Der Kluftufer-Ansatz führt bei einer reduzierten Porosität nicht zu zufriedenstellenden Ergebnissen. Im Vergleich zu den vorher präsentierten Varianten 1 und 2 mit geringerer Matrixdurchlässigkeit in der diskreten Modellberechnung nehmen der steile Anstieg der Tracerdurchbruchskurven und das ausgeprägte Tailing weiterhin ab. Die Kurvencharakteristika der verschiedenen Profil-Profil-Konfigurationen sind sehr ähnlich, wodurch für die vier präsentierten Konfigurationen ähnlich gute Ergebnisse für die Prognose des integralen Stofftransports erzielt werden können.

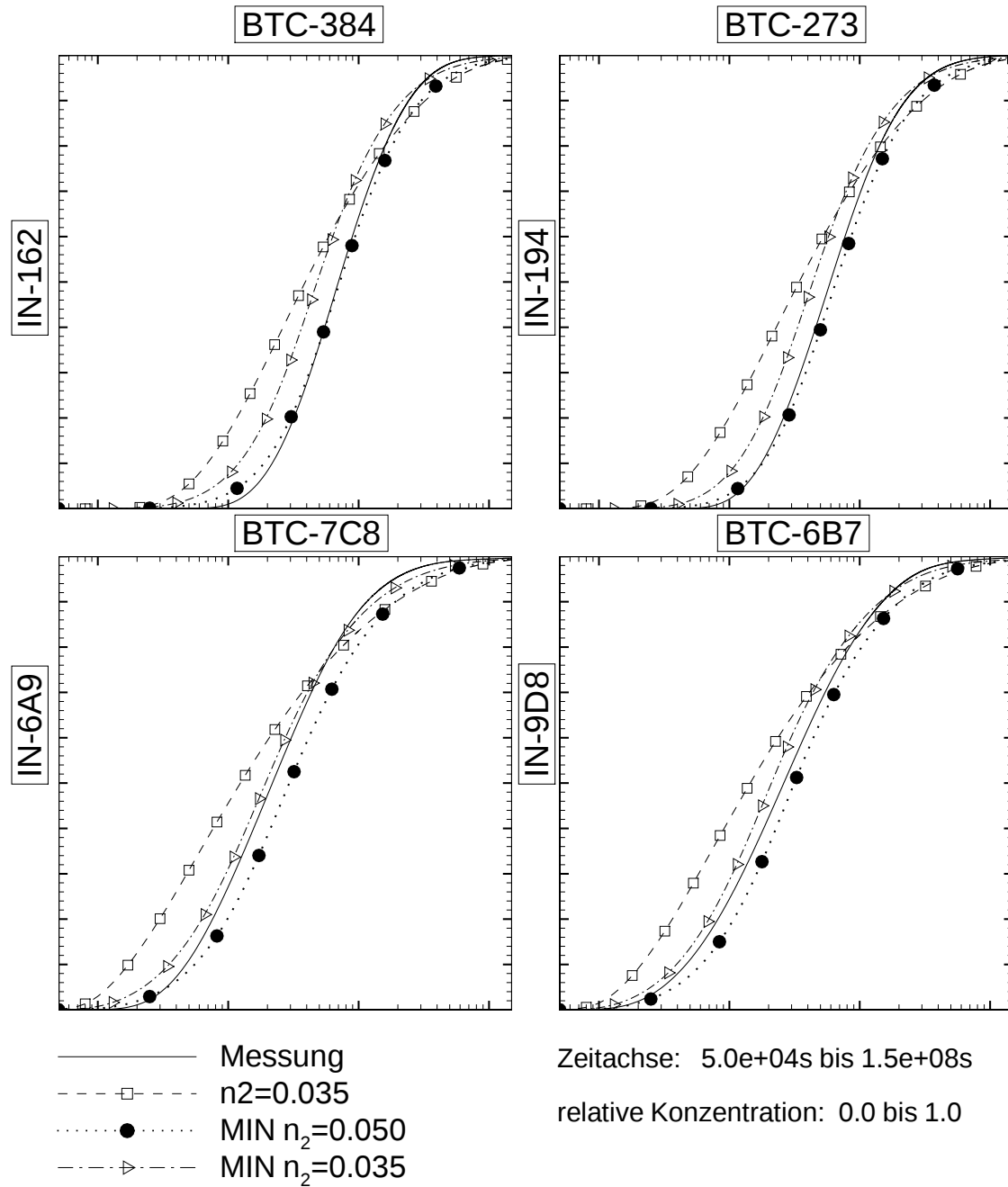


Abbildung 7.15: Durchbruchkurven zu Variante 3: DPSP-Profil-Profil,
 t logarithmisch, Kluftufer, MIN

7.3 DPDP-Ansatz

7.3.1 Allgemeines

Die Methode der Identifikation eines geeigneten Mehrkontinuum-Ansatzes durch Kurvenkennzahlen liefert für die Varianten 3 bis 5 als möglichen Ansatz ein doppelt poröses, doppelt permeables Mehrkontinuum-Modell (DPDP). In Tabelle 7.2 sind die angesetzten Materialparameter der Startkonfiguration für den DPDP-Ansatz aufgeführt.

Die Umsetzung eines DPDP-Modells erfolgt mit STRAFE6 ausschließlich durch Linearansätze. Im Unterschied zur vorangegangenen Untersuchung der Varianten 1 bis 3 mit einem DPSP-Ansatz wird hier die regionale Strömung in der untergeordneten Matrixkomponente berücksichtigt. Entscheidend für die Qualität eines DPDP-Modells sind bei Ansatz stationärer Strömungsrandbedingungen der Tensor der spezifischen Kluftfläche Ω_w , die spezifische Oberfläche Ω_0 , sowie der Ansatz eines geeigneten Geometriefaktors ϵ (siehe Anhang A.4).

Für den Geometriefaktor ϵ wird in Anlehnung an JANSEN (1999) zunächst der Wert 2 gewählt. Dieser Faktor entspricht nach folgender Gleichung zur Abschätzung von ϵ

$$\epsilon = \frac{2}{\Omega_0 s_0} \quad (7.1)$$

mit $s_0 = \frac{a}{2} = \frac{1}{2} s_{max}$ einer maximalen Eindringtiefe von 0.112 m. Der Parameter a entspricht der Kantenlänge bei der Annahme quadra-

Tabelle 7.2: Basiswerte der Materialtypen der DPDP-Berechnung

übergeordnete Kluftkomponente			
äquivalente Porosität	n_1	$[m^3/m^3]$	8.10e-04
hydraulische Durchlässigkeit	$K_{1,11}[m/s]$	$K_{1,12}[m/s]$	$K_{1,22}[m/s]$
Variante 3	2.13e-06	1.34e-07	2.28e-06
Variante 4	2.42e-06	9.82e-08	2.56e-06
Variante 5	2.54e-06	6.90e-08	2.70e-06
longitudinale Dispersivität	$\alpha_{1,l}$	$[m]$	1.00e-01
transversale Dispersivität	$\alpha_{1,t}$	$[m]$	1.00e-02
effektiver Diffusionskoeffizient	$D_{1,mol}$	$[m^2/s]$	2.30e-10
untergeordnete Matrixkomponente			
äquivalente Porosität	n_2	$[m^3/m^3]$	0.05
hydraulische Durchlässigkeit	$K_{2,11}[m/s]$	$K_{2,12}[m/s]$	$K_{2,22}[m/s]$
Variante 3	9.61e-08	0.00e+00	9.61e-08
Variante 4	1.15e-06	0.00e+00	1.15e-06
Variante 5	5.75e-06	0.00e+00	5.75e-06
longitudinale Dispersivität	$\alpha_{2,l}$	$[m]$	1.00e-01
transversale Dispersivität	$\alpha_{2,t}$	$[m]$	1.00e-02
effektiver Diffusionskoeffizient	$D_{2,mol}$	$[m^2/s]$	2.30e-10
Kopplung der Komponenten			
Geometrieparameter für Austausch	ϵ	$[-]$	2,5,10
Austauschkoeffizient für Strömung	α_Q	$[m/s]$	$\epsilon K_{2,11}$
Austauschkoeffizient für Transport	α_C	$[m^2/s]$	$\epsilon n_2 D_{m_2}$
spezifische Oberfläche	Ω_0	$[1/m]$	17.86
spezifische Kluftfläche	$\Omega_{W,11}[1/m]$	$\Omega_{W,12}[1/m]$	$\Omega_{W,22}[1/m]$
	5.53e+00	4.70e-01	5.36e+00

tischer Blöcke. Der Wert 2 für den Parameter ϵ ergibt sich dementsprechend bei der Annahme quadratischer Blöcke. Auch hier wäre wie beim DPSP-Ansatz eine Berücksichtigung der Verteilung der Blockgrößen möglich. Entsprechende Materialbereiche können mit verschiedenen Austauschparametern belegt werden. In den vorgestellten DPDP-Berechnungen wird jeweils ein homogener Materialbereich für die übergeordnete und ein homogener Materialbereich für die untergeordnete Komponente umgesetzt.

Die Austauschkoeffizienten α_Q und α_C für Strömung und Transport ergeben sich aus der hydraulischen Leitfähigkeit der untergeordneten Komponente bzw. dem effektiven Diffusionskoeffizienten und dem Parameter ϵ .

Der in Tabelle 7.2 aufgeführte Tensor der spezifischen Kluftfläche beruht wie in Kapitel 6.2.4 erläutert auf einer reinen Auswertung der Geometrie des Kluftnetzwerkes. Die hier angegebenen Werte beschreiben den Best-Fit-Tensor so, wie dieser in Abbildung 6.4 abgebildet ist.

7.3.2 Modellaufbau

Variante 3

Für Variante 3 werden bereits in Kapitel 7.2.2 und 7.2.3 die Ergebnisse unter Verwendung eines DPSP-Modells vorgestellt. Ausgehend von der Basiskonfiguration mit einem Geometriefaktor $\epsilon = 2$ sind in den Abbildungen 7.16 und 7.17 die Ergebnisse des DPDP-Modells zu $\epsilon = 5$ bzw. 10 im Vergleich dargestellt. Die Vergrößerung des Parameters ϵ ist gleichbedeutend mit einer geringeren Pe-

netrationstiefe und somit kleineren Blöcken. Der Austausch zwischen den beiden Komponenten nimmt mit größerem ϵ zu frühen Zeitpunkten entsprechend zu. Die Startkonfiguration zeigt für die Port-Port-Konfiguration 1-5 (Abbildung 7.16), dass der berechnete Austausch mit dem DPDP-Modell für $\epsilon = 2$ zu frühen Zeitpunkten deutlich unterschätzt wird. Es bildet sich der typische Verlauf eines DPDP-Modell mit einer raschen Anstiegsphase, einem anschließenden Plateau und einem weiteren Anstieg der Tracerdurchbruchskurve aus. Durch Vergrößerung des Parameters ϵ intensivieren sich die Austauschprozesse für das DPDP-Modell und der frühe Anstieg erfolgt weniger ausgeprägt. Insgesamt kann für alle dargestellten Variationen von ϵ eine Verschiebung der Tracerdurchbruchskurve zu späteren Zeitpunkten hin beobachtet werden. Zu den Port-Port-Konfiguration mit ausgeprägten Kluftverbindungen (z.B. 3-4) sind die Abweichungen am größten.

Eine Variation der Porosität der über- und untergeordneten Komponente bei $\epsilon = 2$ (Abbildungen 7.18 und 7.19) führt für spätere Zeitpunkte zu einer besseren Übereinstimmung mit den Messungen, allerdings ergibt sich ebenfalls ein deutliches Plateau nach dem Erstanstieg, wie es in den Messungen nicht beobachtet werden kann. Die zu beobachtende größere Sensitivität des DPDP-Modells als des DPSP-Modells gegenüber einer Variation der Porosität ist darin begründet, dass der Einfluss der Matrixporosität sich bei den DPDP-Modellen mehrfach auswirkt. Einerseits ist der diffusive Austausch zwischen den Komponenten betroffen und andererseits wirkt sich die Variation auf die regionale Transportgeschwindigkeit in der Matrix und somit auch auf den regional advektiven Austausch aus. Bei den DPSP-Modellen variiert lediglich der diffusive Austausch.

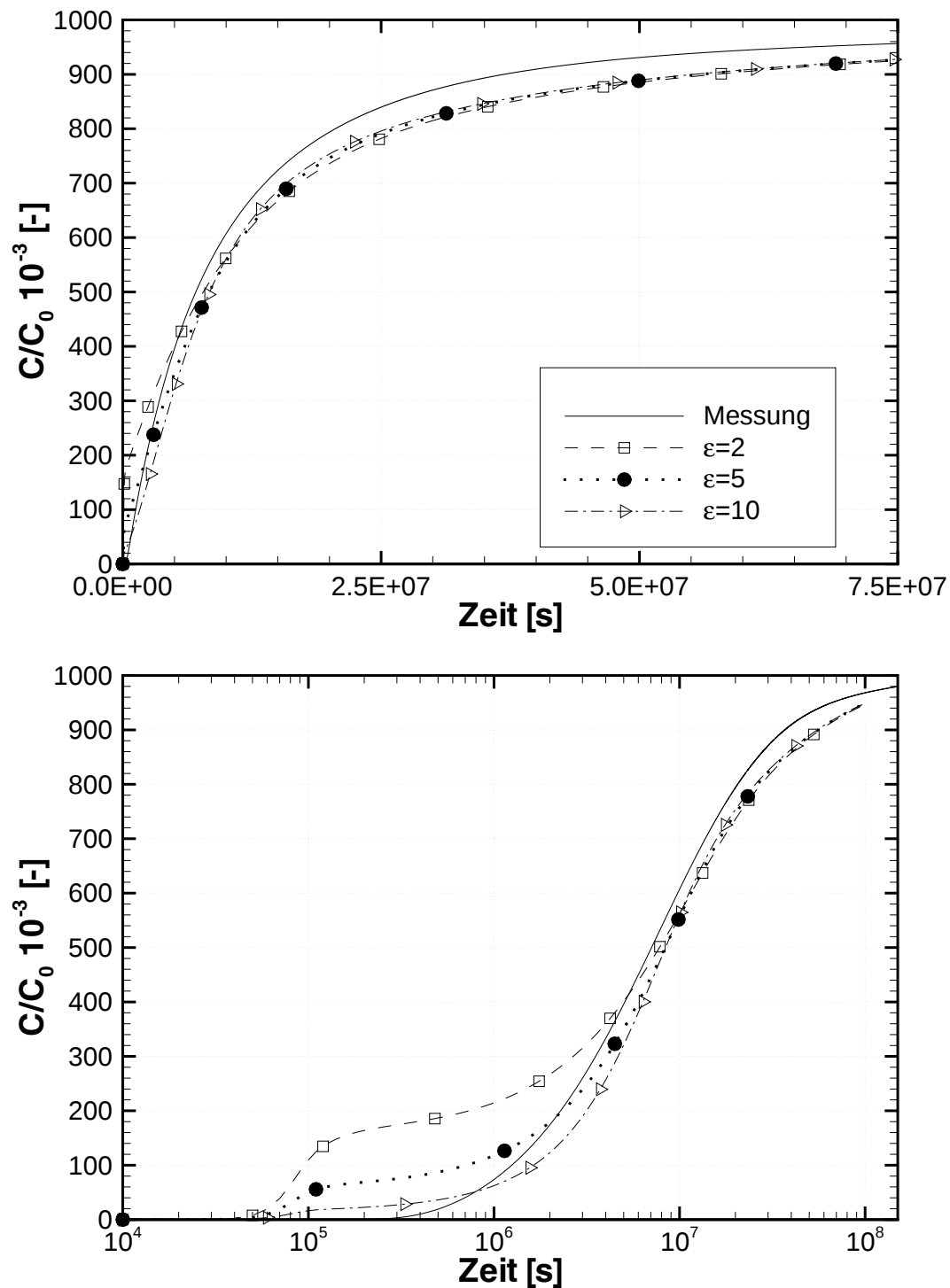


Abbildung 7.16: Durchbruchkurven zu Variante 3: DPDP-Port-Port, Konfiguration 1-5, ϵ
oben: t linear; unten: t logarithmisch

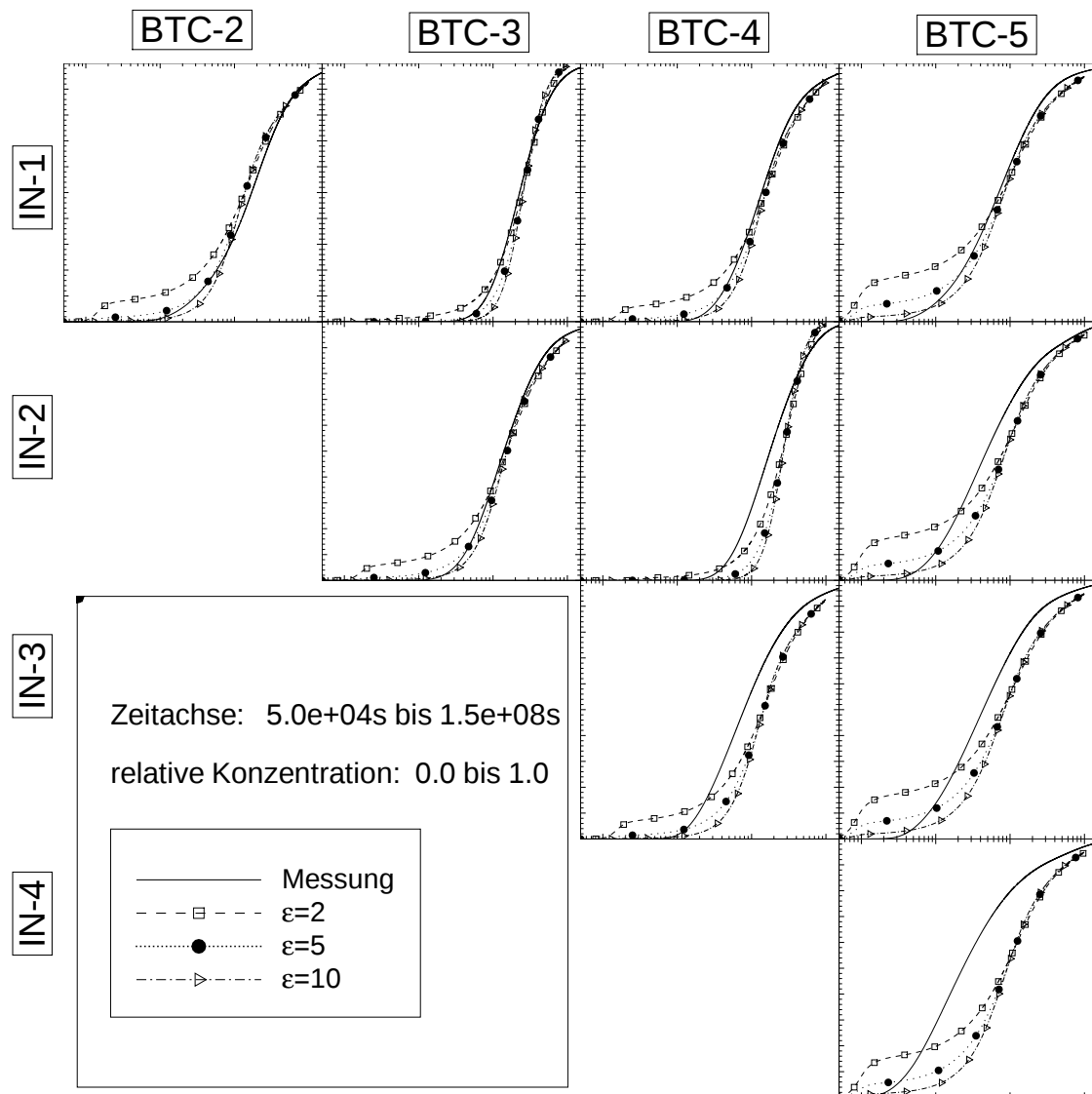


Abbildung 7.17: Durchbruchkurven zu Variante 3: DPDP-Port-Port,
Matrix, t logarithmisch, ϵ

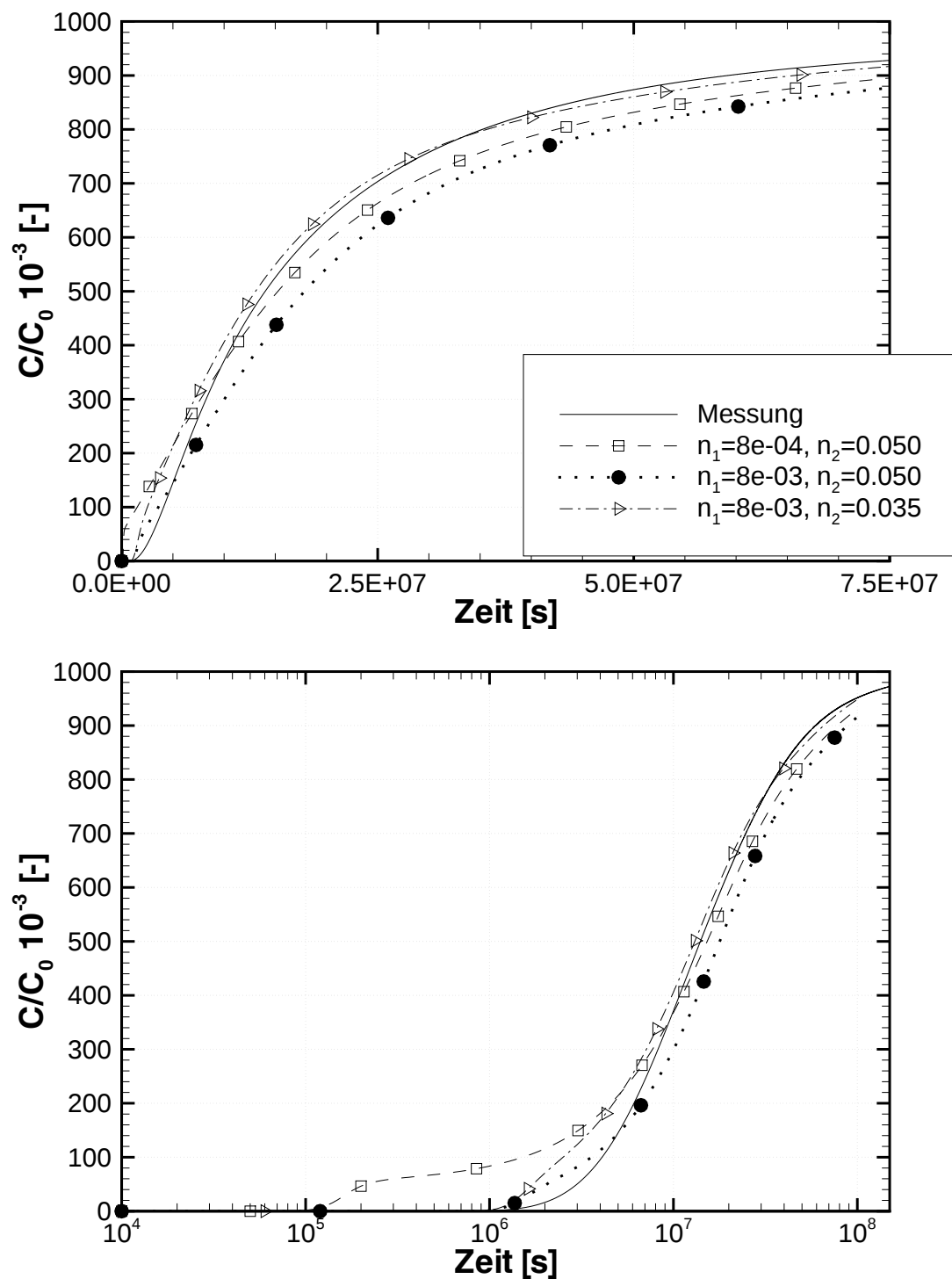


Abbildung 7.18: Durchbruchkurven zu Variante 3: DPDP-Port-Port,
Konfiguration 2-3, n_1, n_2
oben: t linear; unten: t logarithmisch

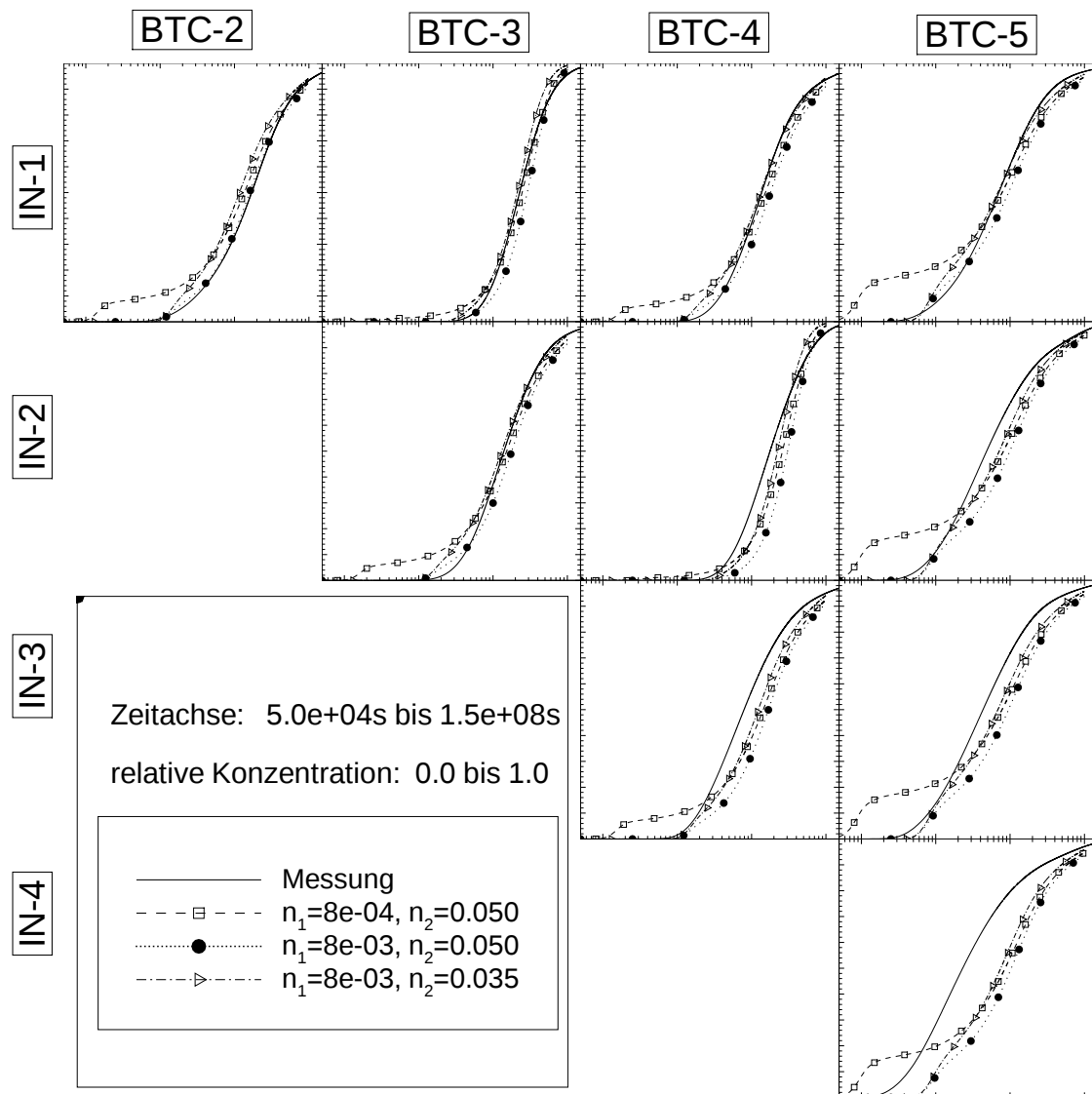


Abbildung 7.19: Durchbruchkurven zu Variante 3: DPDP-Port-Port,
Matrix, t logarithmisch, n_1, n_2

Variante 4

Variante 4 wird in Kapitel 6.5.2 als DPDP- oder SPSP-Modell identifiziert. In den Abbildungen 7.20 und 7.21 sind die Ergebnisse der DPDP-Modellierung zu Variante 4 für die Startkonfiguration ($\epsilon = 2$, $n_1 = 8.1\text{e-}04$ und $n_2 = 0.05$) dargestellt. Die Tracerdurchbruchskurven des Mehrkontinuum-Modells stimmen bereits für die Startkonfiguration hervorragend mit den Messergebnissen überein. Eine weitere Variation der Parameter wird deshalb zu Variante 4 nicht vorgenommen.

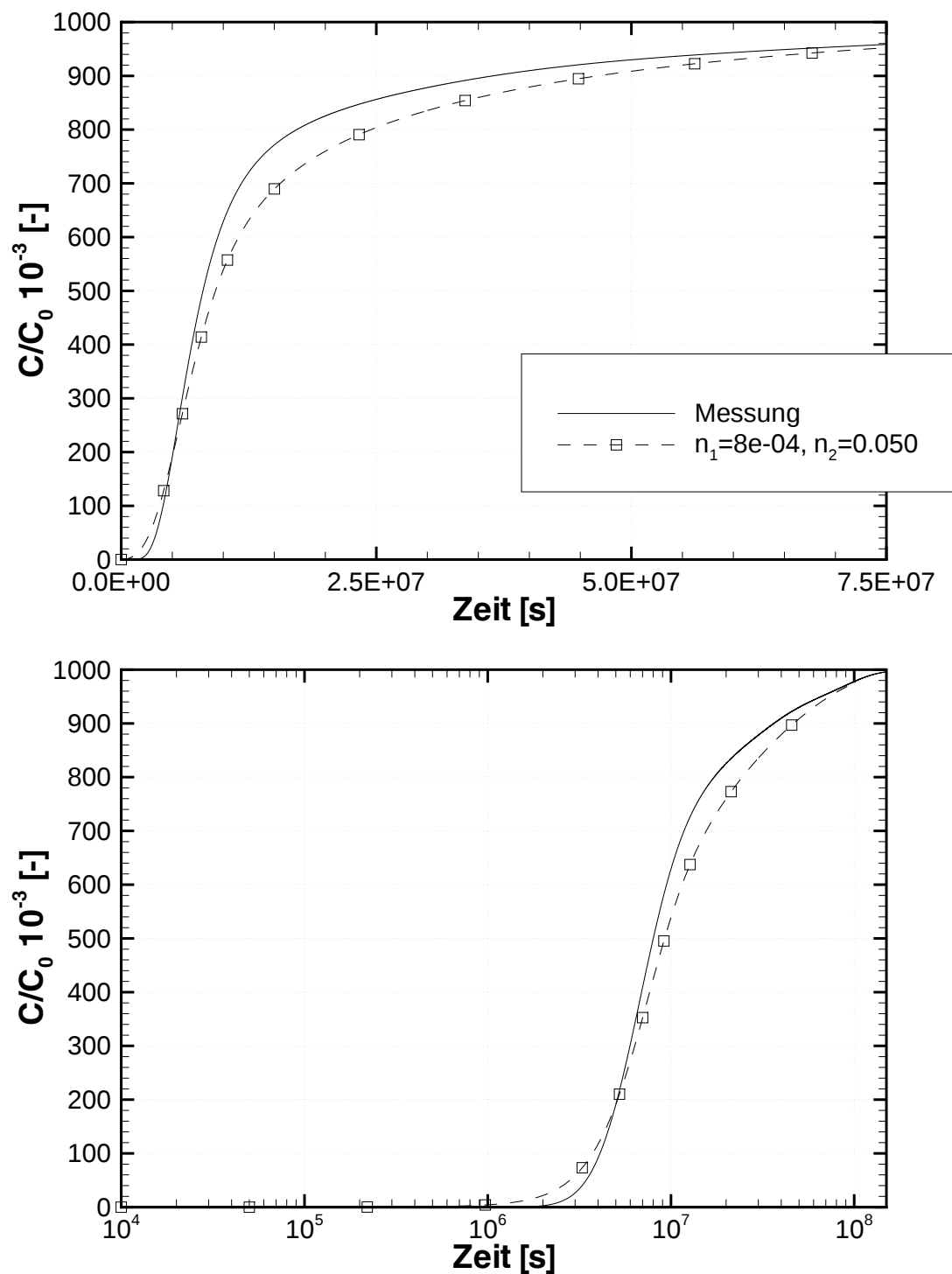


Abbildung 7.20: Durchbruchkurven zu Variante 4: DPDP-Port-Port, Konfiguration 1-4
oben: t linear; unten: t logarithmisch

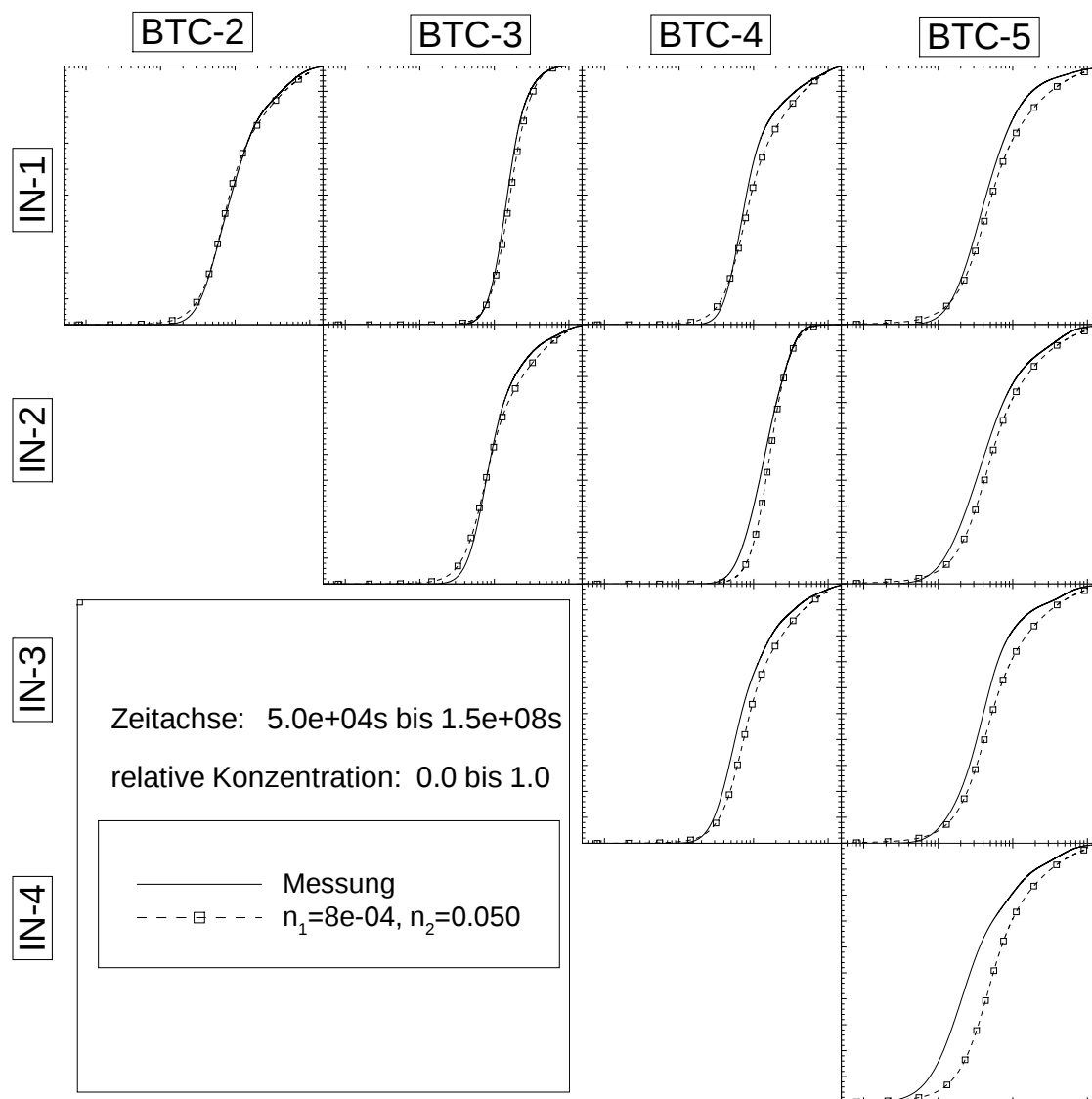


Abbildung 7.21: Durchbruchkurven zu Variante 4: DPDP-Port-Port, Matrix, t logarithmisch

Variante 5

Wie bereits zu Variante 4 wird für Variante 5 ebenfalls nur die Startkonfiguration in den Abbildungen 7.22 und 7.23 gezeigt. Eine weitere Variation der Parameter wird an dieser Stelle nicht vorgenommen. Bereits die Startkonfiguration der Materialparameter zeigt zu nahezu allen Port-Port-Konfiguration sehr gute Ergebnisse. Die größten Abweichung werden zu Konfiguration 4-5, einer kurzen Transportentfernung mit ausgeprägten Kluftverbindungen, beobachtet. Bereits für die hier dargestellte Startkonfiguration werden sehr gute Ergebnisse zu der Prognoserechnung mit integralem Stofftransport erwartet. Durch eine weitere Kalibrierung der Parameter n_1 , n_2 und ϵ können die Ergebnisse weiter verbessert werden.

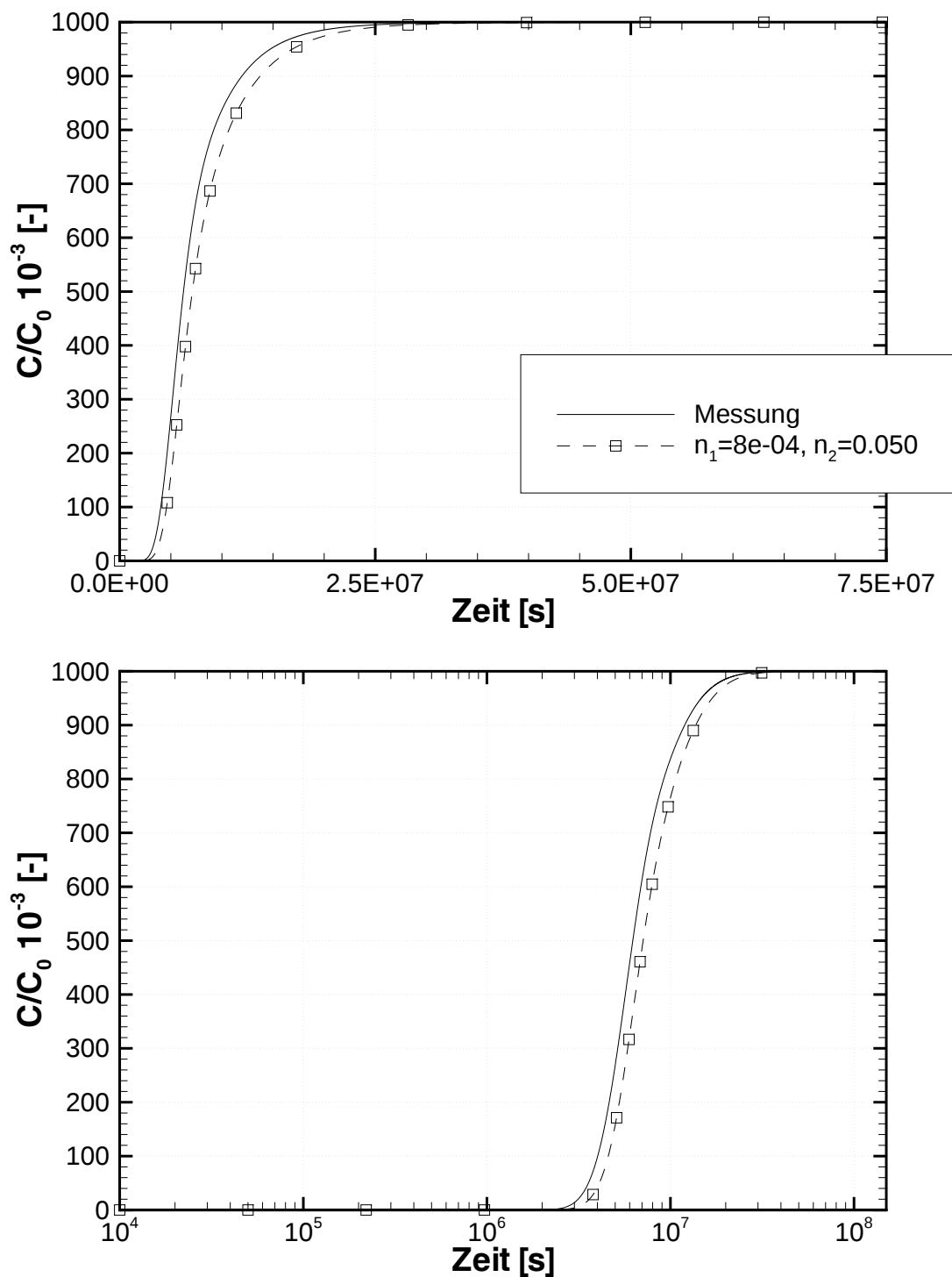


Abbildung 7.22: Durchbruchkurven zu Variante 5: DPDP-Port-Port, Konfiguration 1-3
oben: t linear; unten: t logarithmisch

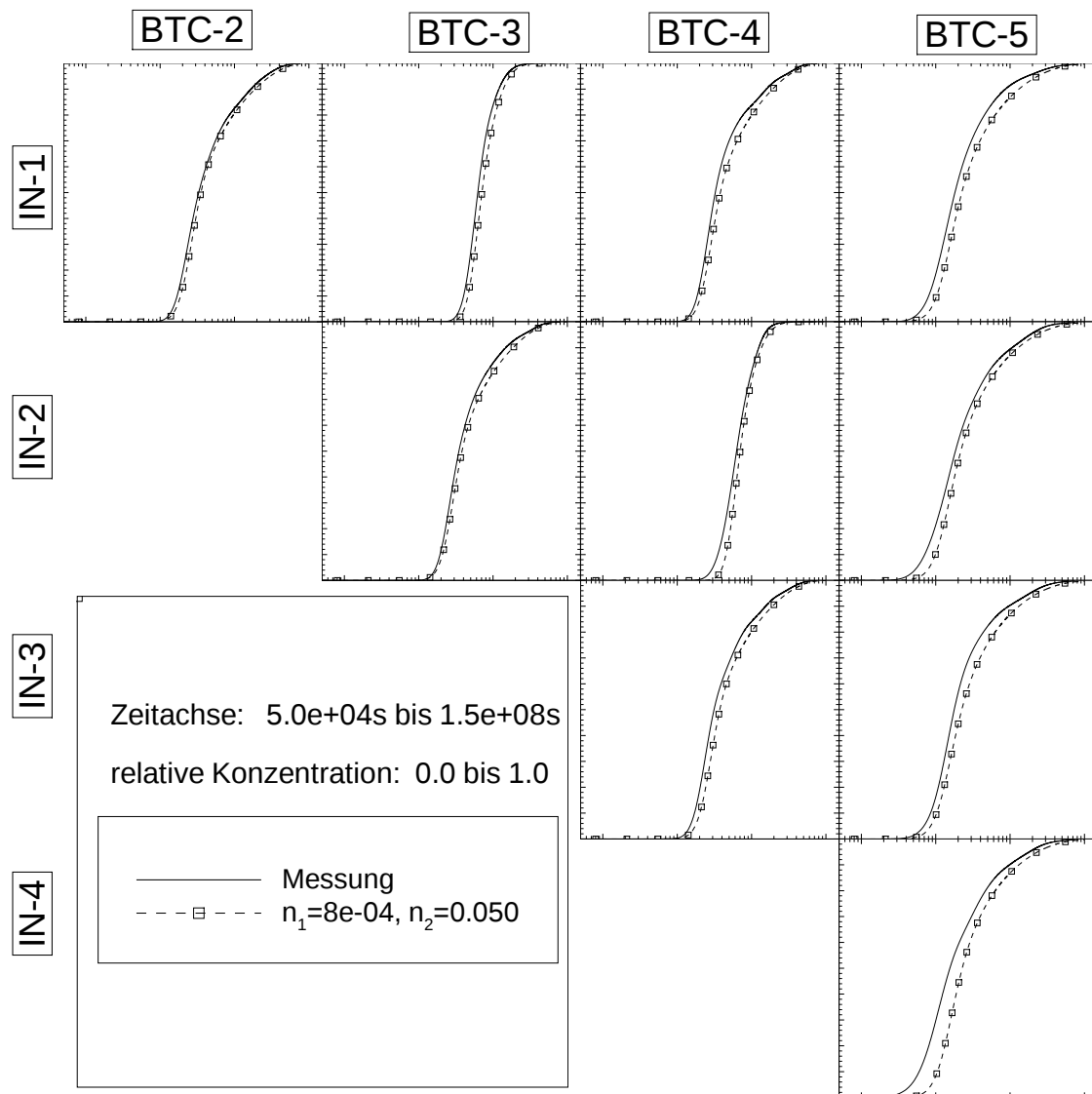


Abbildung 7.23: Durchbruchkurven zu Variante 5: DPDP-Port-Port,
Matrix, t logarithmisch

7.3.3 Modellprognose

Variante 3

In Abbildung 7.24 sind die Ergebnisse der integralen Prognoserechnung für die Ausgangskonfiguration zu Variante 3 ($n_1 = 8.1 \cdot 10^{-4}$, $n_2 = 0.05$ und $\epsilon = 2$), einer Variation von $n_1 = 8.1 \cdot 10^{-3}$ und einer gleichzeitigen Variation der Porosität der über- und untergeordneten Komponenten $n_1 = 8.1 \cdot 10^{-3}$ und $n_2 = 0.035$ dargestellt. Wie bereits bei den Port-Port-Messungen (Kapitel 7.3.2) zeigen die Ergebnisse der Variante 3 ein ausgeprägtes Plateau nach einem raschen Erstanstieg der Tracerdurchbruchskurve für die Startkonfiguration. Bei den beiden DPDP-Ansätzen mit modifizierter Porosität ist das Plateau weniger stark ausgeprägt und die Prognoserechnungen stimmen besser mit den Messungen überein. Im Vergleich zu den Prognoserechnungen mit dem DPSP-Ansatz, der in Kapitel 7.2.3 vorgestellt wird, gleichen die Ergebnisse mit dem DPDP-Ansatz weniger gut den Messungen. Eine Kalibrierung des DPDP-Modells zu Variante 3 erscheint schwieriger als die Kalibrierung des entsprechenden DPSP-Modells. Insgesamt ist die Verwendung eines DPDP-Ansatzes zu Variante 3 weniger gut geeignet als der DPSP-Ansatz.

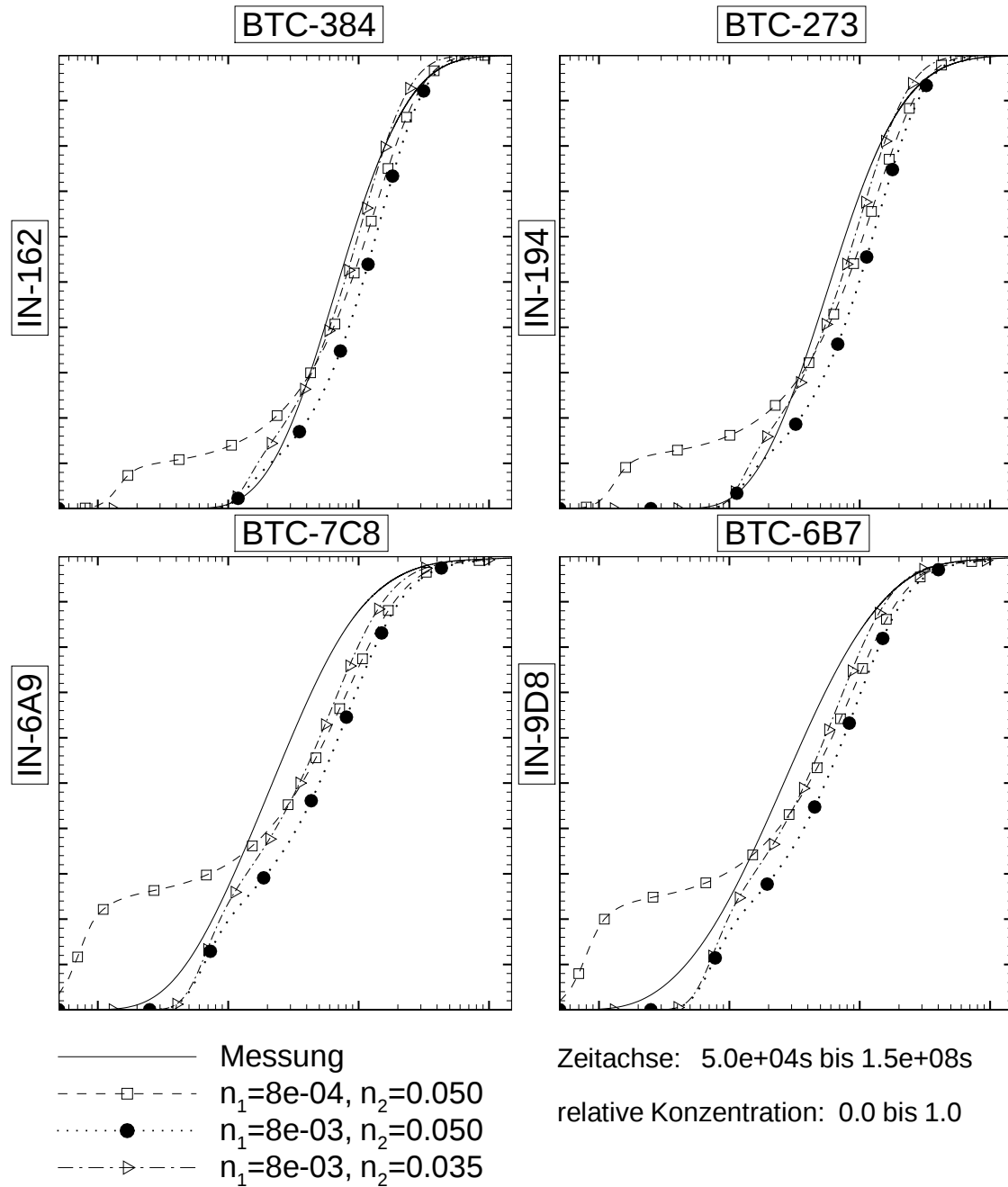


Abbildung 7.24: Durchbruchkurven zu Variante 3: DPDP-Profil-Profil,
 t logarithmisch, n_1, n_2

Variante 4

Die Ergebnisse des DPSP-Modells zu Variante 4 führen bereits bei Ansatz der Startparameter zu sehr guten Übereinstimmungen mit den gemessenen Tracerdurchbruchkurven der Profil-Profil-Konfigurationen. Insgesamt erfolgt der Tracerdurchgang geringfügig zu spät. Durch eine weitere Kalibrierung, die hier nicht vorgenommen wird, können die Ergebnisse weiter verbessert werden. Zu Variante 4 liegt mit dem DPDP-Modell ein ausgezeichnetes Werkzeug zur Untersuchung der integralen Stofftransportvorgänge im untersuchten Festgesteinsaquifer vor.

Variante 5

Die Prognoserechnung mit den Parametern der Startkonfiguration des DPDP-Modells zu Variante 5 zeigt ähnliche Ergebnisse wie bereits bei Variante 4. Der Verlauf der Tracerdurchbruchkurven ist für alle vier dargestellten Richtungen (Abbildung 7.26) zeitlich etwas verzögert. Durch eine geringfügige Variation der Porosität können die Modellergebnisse bereits für die Port-Port-Messungen (Kapitel 7.3.2) verbessert werden und stehen dann für die Prognoserechnung zur Verfügung. Wie bei Variante 4 bietet ein DPDP-Modell eine hervorragende Möglichkeit zu Stofftransportuntersuchungen im Untersuchungsgebiet für eine Kombination der hydraulischen Eigenschaften, wie sie zu Variante 5 vorliegen.

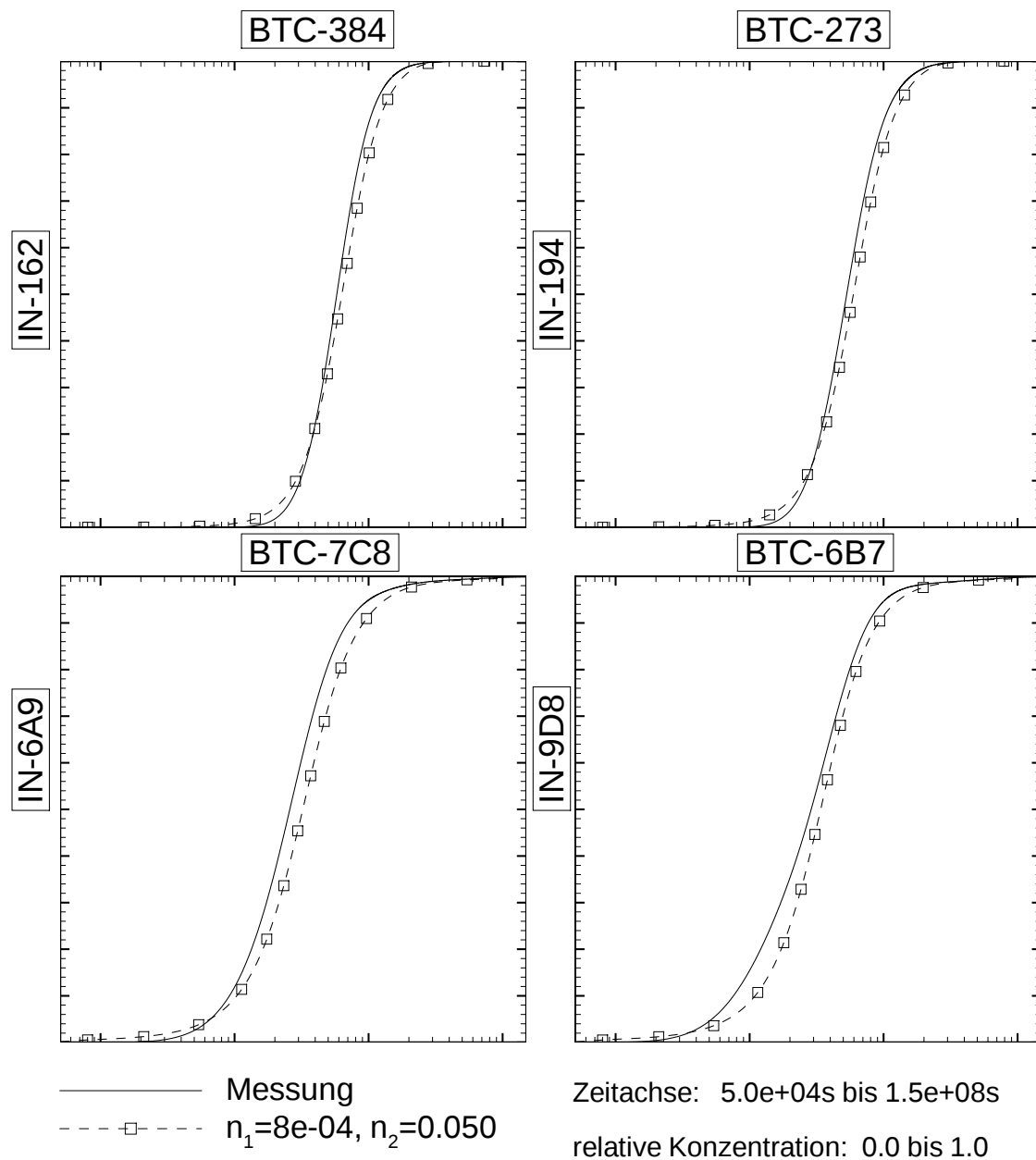


Abbildung 7.25: Durchbruchkurven zu Variante 4: DPDP-Profil-Profil, t logarithmisch

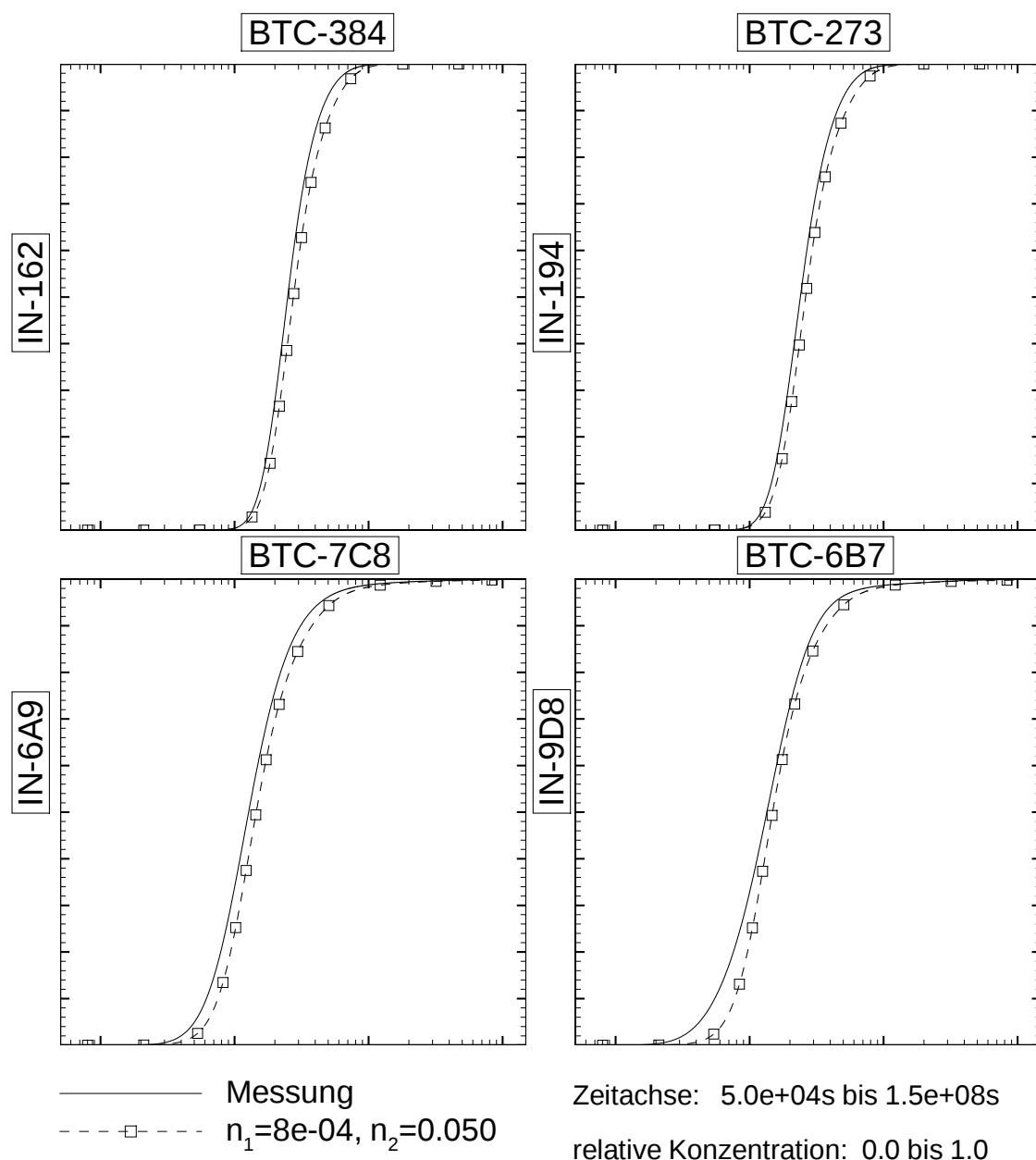


Abbildung 7.26: Durchbruchkurven zu Variante 5: DPDP-Profil-Profil, t logarithmisch

7.4 SPSP-Ansatz

7.4.1 Allgemeines

Nach den numerischen Tracerexperimenten zu den Varianten 4 und 5 mit einem doppelt porösen, doppelt permeablen Ansatz (DPDP) (Kapitel 7.3) werden nachfolgend die Ergebnisse für einen single porösen, single permeablen Ansatz (SPSP) vorgestellt. Beim SPSP-Ansatz werden die Eigenschaften der über- und untergeordneten Komponente zu *einem* homogenen Ersatzmedium zusammengefasst.

Tabelle 7.3: Basiswerte der Materialtypen der SPSP-Berechnung

Homogenes Ersatzsystem			
äquivalente Porosität	n	$[m^3/m^3]$	8.10e-04
hydraulische Durchlässigkeit	$K_{11}[m/s]$	$K_{12}[m/s]$	$K_{22}[m/s]$
Variante 4	3.07e-06	-4.55e-08	3.21e-06
Variante 5	5.77e-06	-6.50e-07	5.93e-06
longitudinale Dispersivität	α_l	$[m]$	1.00e-01
transversale Dispersivität	α_t	$[m]$	1.00e-02
effektiver Diffusionskoeffizient	D_{mol}	$[m^2/s]$	1.00e-09

Wie bereits bei den vorangegangenen Untersuchungen mit einem DPSP- bzw. DPDP-Ansatz werden die Durchbruchkurven mit den diskreten Messergebnissen verglichen. Die Startparameter der Berechnungen sind in Tabelle 7.3 angegeben. Die zunächst verwendete Porosität des Ersatzmediums entspricht der Summe der Porosität aus der DPDP-Untersuchung:

$$n = n_1 + n_2 \quad (7.2)$$

Die äquivalente Porosität n des homogenen Ersatzsystems muss nicht zwingend wie in Tabelle 7.3 der physikalischen Porosität entsprechen. Vielmehr gibt sie den Zusammenhang zwischen der Filtergeschwindigkeit des Kontinuums und der Ausbreitungsgeschwindigkeit des Tracers wieder. Im Allgemeinen ist für eine SPSP-Modellierung eine Kalibrierung der Porosität n und der Dispersivitäten α_l und α_t erforderlich. Je homogener der Verlauf der Durchbruchskurve ist, umso näher liegen die Parameter des Ersatzmediums an den Parametern der Einzelkomponenten. Der Tensor der hydraulischen Durchlässigkeit K ergibt sich aus den Strömungsexperimenten, die in Kapitel 6.4.1 beschrieben sind. Die Komponenten des in Tabelle 7.3 angegebenen Best-Fit-Tensors ergeben sich direkt aus den richtungsbezogenen Gesamtdurchlässigkeiten $k_g(\alpha)$ (Gleichung 6.4).

7.4.2 Modellaufbau und -prognose

Variante 4

Zu den numerischen Untersuchungen mit dem SPSP-Ansatz werden nachfolgend nur die Ergebnisse einer ausgewählten Parameterzusammenstellung für die Prognose präsentiert (Abbildung 7.27). Der Modellaufbau des SPSP-Modells erfolgt analog zu den vorher beschriebenen DPSP- und DPDP-Modellen anhand des Vergleichs mit den Tracerdurchbruchskurven der diskreten Port-Port-Berechnungen. Für die Bandbreite der Parameter n und α_l zeigt sich bereits eine sehr gute Übereinstimmung der Ergebnisse des SPSP-Modells mit den Messungen des integralen Stofftransportes. Für eine deutlich erhöhte Modelldispersivität ($\alpha_l = 1.0\text{ m}$) ergibt sich die beste Übereinstimmung.

Variante 5

Abschließend zu den numerischen Untersuchungen an dem synthetischen Festgesteinsaquifer werden die Ergebnisse der Profil-Profil-Rechnungen zu Variante 5 mit dem SPSP-Ansatz in Abbildung 7.28 präsentiert. Die Ergebnisse des SPSP-Ansatzes liegen bereits für die hier nicht dargestellten Port-Port-Konfigurationen näher an den Messungen als für Variante 4. Die longitudinale Dispersivität des homogenen Ersatzsystems $\alpha_l = 0.1\text{ m}$ liefert hervorragende Prognosen in Kombination mit einer Porosität $n = 0.035$. Die Erhöhung der Dispersivität auf 0.25 m verbessert die Prognoseergebnisse nochmals. Das SPSP-Modell ist folglich sehr gut geeignet, die Stofftransportprozesse der Profil-Profil-Konfigurationen vorherzusagen.

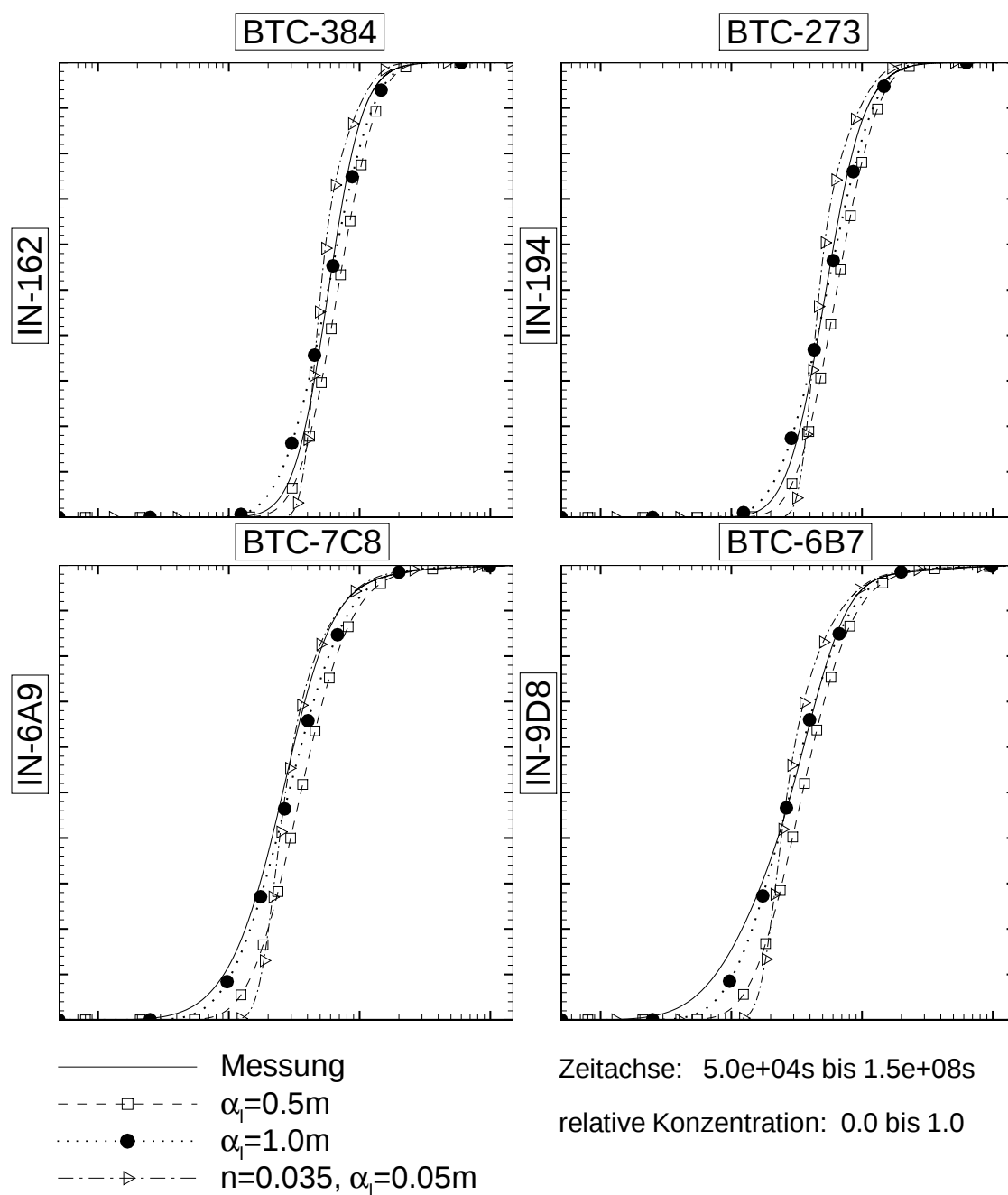


Abbildung 7.27: Durchbruchkurven zu Variante 4: SPSP-Profil-Profil, t logarithmisch

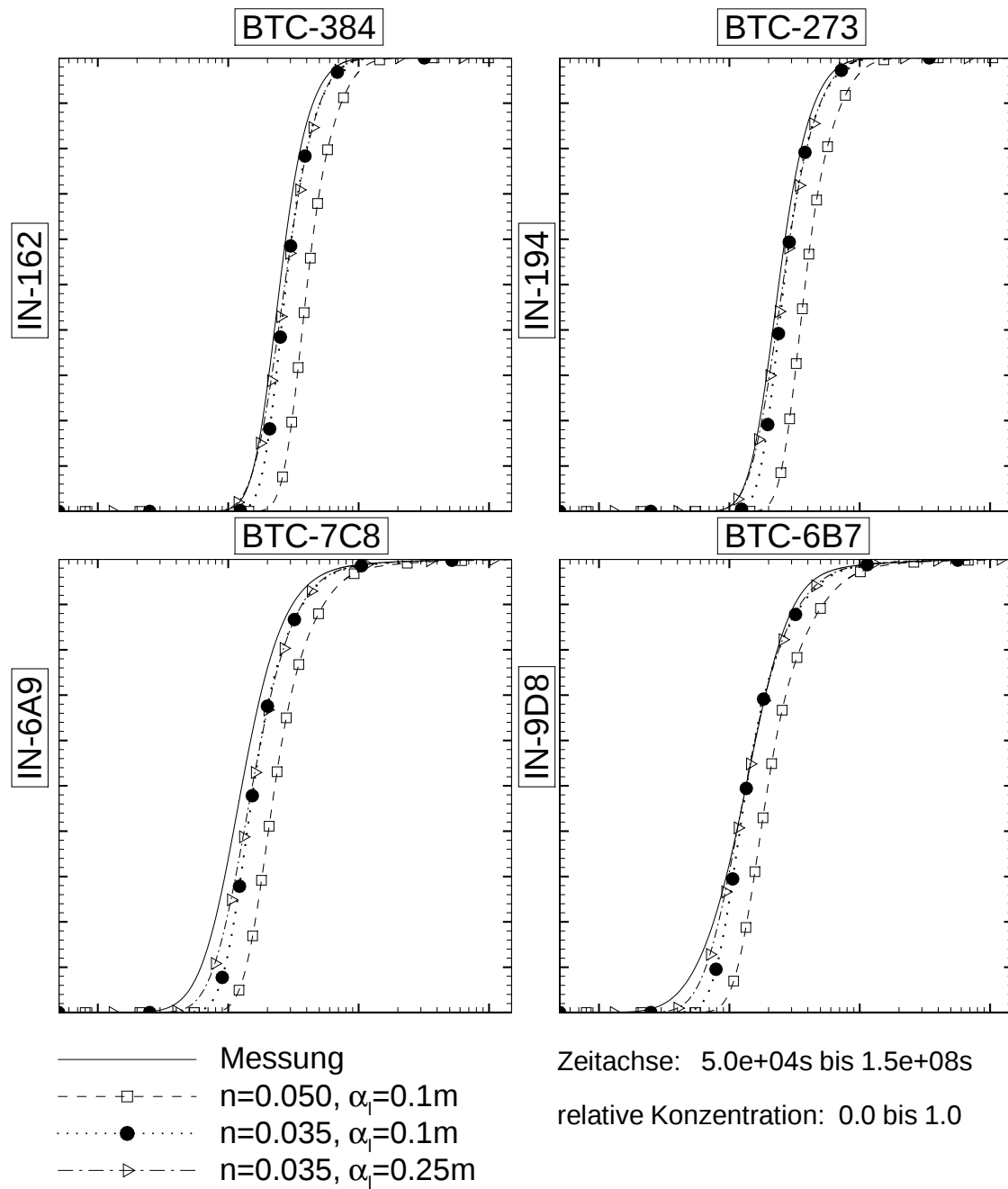


Abbildung 7.28: Durchbruchkurven zu Variante 5: SPSP-Profil-Profil, t logarithmisch

7.5 Zusammenfassung der Untersuchungen mit Mehrkontinuum-Ansätzen

In den Kapiteln 7.2 bis 7.4 werden numerische Tracerexperimente zu dem in Kapitel 6 vorgestellten synthetischen Untersuchungsgebiet mit verschiedenen Mehrkontinuum-Ansätzen präsentiert. Es werden fünf Varianten untersucht, die sich in ihrer Grundkonzeption durch die Veränderung der Gesteinsdurchlässigkeit unterscheiden. Die zum Einsatz kommenden Mehrkontinuum-Ansätze sind

- ein doppelt poröser, single permeabler Ansatz (DPSP),
- ein doppelt poröser, doppelt permeabler Ansatz (DPDP)
- und ein single poröser, single permeabler Ansatz (SPSP).

Die in Kapitel 6.5.2 identifizierten möglichen Mehrkontinuum-Ansätze zu den einzelnen Varianten werden erfolgreich umgesetzt. Der Modellaufbau erfolgt jeweils anhand des Vergleichs der diskreten Port-Port-Messungen mit den Tracerdurchbruchskurven des entsprechenden Mehrkontinuum-Ansatzes. Eine Prognose wird für Stofftransportuntersuchungen mit integralem Charakter zu Profil-Profil-Messungen vorgestellt. Die beim Modellaufbau mittels der Port-Port-Messungen gefundene Bandbreite der Modellparameter führt für alle Varianten zu zufriedenstellenden Prognoseergebnissen. Die Untersuchungen zeigen anschaulich die Anwendbarkeit der erweiterten Typisierungsmethode zur Identifikation des Stofftransportverhaltens eines multiporösen Festgesteinsaquifers und die daran anschließende erfolgreiche Modellumsetzung.

Kapitel 8

Zusammenfassung

Mehrkontinuum-Modelle sind effiziente numerische Hilfsmittel zur Simulation von Strömungs- und Stofftransportprozessen in Kluftaquiferen. Obwohl entsprechende Simulatoren verfügbar sind, ist die Anwendbarkeit der Mehrkontinuum-Modelle für Kluftaquifere erst dann gegeben, wenn eine Methode zur Identifikation des integralen Stofftransportverhaltens zur Verfügung steht. In der vorliegenden Arbeit wird eine Erweiterung der bestehenden Methode zur Identifikation eines multiporösen Systems präsentiert. Die vorhandene Methode beruht auf charakteristischen Größen, die die Wertigkeit der Austauschprozesse zwischen den beteiligten Komponenten beschreiben. Neben den charakteristischen Größen existieren typisierte Tracerdurchbruchskurven zu einer zeitlich unbegrenzten Tracereinleitung, die bei der Identifikation des Systems zur Verfügung stehen.

Bis heute ist es in Feld- und Laborversuchen sehr schwierig, mögliche beteiligte Komponenten getrennt zu untersuchen. Eine geeignete Zuordnung von Materialparametern für ein Mehrkontinuum-Modell wird dadurch erschwert. Die in der vorliegenden Arbeit vorgestellte erweiterte Methodik zur Typisierung eines Festgesteinsaquifers berücksichtigt die limitierten Erkundungsmöglichkeiten im Feld und

stellt ein Bindeglied zwischen den bereits mittels numerischer Experimente entwickelten Identifikationsverfahren und experimentell bestimmbar Größen dar. Die Methodik zur Identifikation beruht auf der systematischen Analyse von Tracerdurchbruchskurven bei zeitlich begrenzter Tracerzugabe. Die neu entwickelte Methode zur Auswertung der Durchbruchskurven transformiert die Ergebnisse in eine Form, die die Anwendung der bereits vorhandenen Methodik zur Identifikation eines geeigneten Mehrkontinuum-Modells zulässt. Damit steht eine Methodik zur Verfügung, die für die Auswertung von Tracerversuchen im Labor und Feld herangezogen werden kann.

Für die untersuchte Problemstellung der Transformation der Lösung für eine Impulseinleitung in die Lösung der zeitlich unbegrenzten Tracerzugabe besteht der Grundgedanke darin, den Faltungssatz anzuwenden. Daraus folgt dann, dass die Lösung für eine unendlich lange Tracerzugabe direkt aus der Integration der Lösung eines DIRAC-Impulses über t erhältlich ist.

Die Untersuchungen mit Hilfe der analytischen Lösung für einen homogenen isotropen Aquifer zeigen anschaulich, dass das Antwortsignal auf eine kontinuierliche Tracereinleitung hinreichend genau durch die Integration und Normierung der Durchbruchskurve einer Impulseinleitung angenähert werden kann.

Weiterführende Untersuchungen werden mit einem diskreten Finite-Elemente-Modell durchgeführt. Das Untersuchungsgebiet entspricht einer Anordnung aus einem regelmäßigen Kluftnetzwerk und entsprechend einheitlichen Blöcken der untergeordneten Komponente. Insgesamt zeigt sich für die Berechnungen der 4 Varianten der Porosität der Gesteinsmatrix mit dem Trägerfluid Wasser und dem Trägerfluid Luft, dass die vorgeschlagene Methode zur Transformation der

Durchbruchskurve einer Impulseinleitung in die Durchbruchskurve einer unendlichen Tracerzugabe sehr gut anwendbar ist. Unabhängig von der Kenntnis der tatsächlichen Tracerdurchbruchskurve für eine unendliche Einleitung kann so für bestimmte Verhältnisse der Peakzeit zur Impulsdauer ($T_p : T_i > 4$) eine Schätzung über die Qualität der Approximation vorgenommen werden und somit die normierte Summenkurve zur Typisierung verwendet werden.

Die Untersuchungen zu dem Trägerfluid Wasser einerseits und dem Trägerfluid Luft andererseits zeigen bei identischen Systemeigenschaften des betrachteten Aquifers (Porosität, Permeabilität der Klüfte und Gesteinsmatrix sowie Kluftverteilung) deutlich verschiedene Systemreaktionen. Während für die Untersuchungen mit Wasser verschiedene Charakteristika der Durchbruchskurven zu den Varianten erkennbar sind, ergibt sich für Luft ein sehr homogenes Bild der Durchbruchskurven. Für Labor- und Feldexperimente mit dem Trägerfluid Gas, welche für den Aufbau eines numerischen Modells herangezogen werden, bedeutet dies, dass eine direkte Übertragbarkeit der Systemidentifikation auf das gleiche System mit dem Trägerfluid Wasser nicht gegeben ist. Die Wertigkeit der relevanten diffusiven bzw. advektiven Austauschprozesse ist für die beiden Trägerfluide sehr unterschiedlich. Weiterführende Untersuchungen zu einer Übertragbarkeit ermittelter Kennzahlen mit dem Trägerfluid Luft auf das Trägerfluid Wasser sind für die Zukunft sinnvoll. Es wäre z. B. denkbar durch systematische numerische Untersuchungen einen empirischen Zusammenhang zwischen den Kurvenkennzahlen für das Trägerfluid Wasser und diejenigen des Trägerfluids Luft zu finden. Eine Überprüfung durch Laborversuche wäre möglich und sinnvoll.

Zu einem Anwendungsbeispiel werden an einem synthetisch erzeugten Untersuchungsgebiet, das eine Kluftverteilung zu einer vor-

gegebenen Dichtefunktion beinhaltet, numerische Experimente mit diskreten Modellansätzen vorgestellt. Es werden Strömungs- und Stofftransportprozesse zur Charakterisierung der Eigenschaften des Aquifers durchgeführt. Insgesamt werden für das Anwendungsbeispiel fünf Varianten betrachtet. Die Durchlässigkeit der Gesteinsmatrix wird dabei von Variante 1 (z.B. Granit) bis hin zu Variante 5 (z.B. Sandstein) zunehmend gesteigert. Somit wird eine genügend große Bandbreite an Transportcharakteristika hinsichtlich der Wertigkeit der diffusiven und advektiven Austauschprozesse und der Beteiligung der untergeordneten Matrixkomponente am regionalen Stofftransport abgebildet. Die Auswertung der Stofftransportexperimente zeigt, dass die Untersuchungen mit begrenzter Tracerzugabe sehr gut eingesetzt werden können, um die Durchbruchkurve einer zeitlich unbegrenzten Tracerzugabe vorherzusagen. Die prognostizierten Durchbruchkurven einer zeitlich unbegrenzten Tracerzugabe werden abschließend zur Identifikation eines geeigneten Mehrkontinuum-Ansatzes verwendet. Die Identifikation erfolgt durch die Ermittlung von Kennzahlen, die die Kurvencharakteristika hinsichtlich Ungleichförmigkeit U , Krümmung C_C sowie frühem und spätem Tracerdurchgang γ_{el} beschreiben. Die Auswahl eines geeigneten Ansatzes erfolgt durch den Vergleich der Kennzahlen mit Ergebnissen aus detailliert bekannten Untersuchungsgebieten, für die entsprechende Mehrkontinuum-Ansätze bereits erfolgreich eingesetzt werden konnten. Für zukünftige Untersuchungen bietet es sich an, die U - C_C - γ_{el} -Zuordnung durch weitere systematische Untersuchungen zu ergänzen und somit ein Diagramm zur Identifikation eines geeigneten Mehrkontinuum-Ansatzes anhand der Kurvenkennzahlen zur Verfügung zu stellen.

Die identifizierten möglichen Mehrkontinuum-Ansätze zu den einzelnen Varianten des Anwendungsbeispiels werden erfolg-

reich umgesetzt. Der Modellaufbau geschieht jeweils anhand des Vergleichs diskreter Port-Port-Messungen mit den Tracerdurchbruchskurven des entsprechenden Mehrkontinuum-Ansatzes. Eine Prognose wird für Stofftransportuntersuchungen mit integralem Charakter zu Profil-Profil-Messungen vorgestellt. Die Untersuchungen zeigen anschaulich die Anwendbarkeit der erweiterten Typisierungsmethode zur Identifikation des Stofftransportverhaltens eines multiporösen Festgesteinsaquifers und die daran gekoppelte erfolgreiche Modellumsetzung.

Literaturverzeichnis

- ABDASSAH D. & ERSHAGHI I. (1986): *Triple-Porosity Systems for Representing Naturally Fractured Reservoirs.*, in: SPE Formation Evaluation, Vol. 1, No. 2, pp. 113–127, ISSN 0885-923x.
- BARAKA-LOKMANE S. (1999): *Determination of Hydraulic Conductivities from Discrete Geometrical Characterisation of Fractured Sandstone Cores*, Tübingen: Inst. und Museum für Geologie und Paläontologie, (Tübinger Geowissenschaftliche Arbeiten = TGA C; 51) (Zugl.: Tübingen, Univ., Diss.).
- BARENBLATT G.; ZHELTOV I. & KOCHINA I. (1960): *Basic Concepts in the Theory of Seepage of Homogeneous Liquids in Fissured Rocks (STRATA)*, in: PMM: Journal of Applied Mathematics and Mechanics, Vol. 24, pp. 1286–1303, ISSN 0021-8928.
- BEAR J. (1972): *Dynamics of Fluids in Porous Media*, New York: American Elsevier Publ. Comp., (Environmental Science Series), ISBN 0-444-00114-X.
- BEAR J. & BACHMAT Y. (1990): *Introduction to Modeling of Transport Phenomena in Porous Media*, Dordrecht u.a.: Kluwer, (Theory and Applications of Transport in Porous Media; 4), ISBN 0-7923-0557-4.
- BECKER M. & SHAPIRO A. (2000): *Tracer Transport in Fractured Cry-*

- stalline Rock: Evidence of Nondiffusive Breakthrough Tailing*, in: Water Resources Research, Vol. 36, No. 7, pp. 1677–1686, ISSN 0043-1397.
- BERKOWITZ B.; BEAR J. & BRAESTER C. (1988): *Continuum Models for Contaminant Transport in Fractured Porous Formations*, in: Water Resources Research, Vol. 24, No. 8, pp. 1225–1236, ISSN 0043-1397.
- BERKOWITZ B.; SCHER H. & SILLIMAN S. (2000): *Anomalous Transport in Laboratory-Scale, Heterogeneous Porous Media*, in: Water Resources Research, Vol. 36, No. 1, pp. 149–158, ISSN 0043-1397.
- BIANCHI-MOSQUERA G. & MACKAY D. (1994): *An Evaluation of the Reproducibility of Forced-Gradient Solute Transport Tests*, in: Ground Water, Vol. 32, No. 6, pp. 937–948, ISSN 0017-467x.
- BIRKHÖLZER J. (1994a): 2. Arbeitsbericht: *Entwicklung eines mathematischen-numerischen Verfahrens zur großräumigen Modellierung von Strömungs- und Stofftransportvorgängen in Festgesteinsaquiferen*, Aachen: Lehrstuhl und Institut für Wasserbau und Wasserwirtschaft der RWTH, (Forschungsvorhaben bei der DFG: Strömung und Stofftransport in Festgesteinsaquiferen).
- BIRKHÖLZER J. (1994b): *Numerische Untersuchungen zur Mehrkontinuumsmodellierung von Stofftransportvorgängen in Kluftgrundwasserleitern*, Aachen: Eigenverlag, (Technische Hochschule Aachen / Lehrstuhl und Institut für Wasserbau und Wasserwirtschaft: Mitteilungen; 93) (Zugl.: Aachen, T.H., Diss.), ISBN 3-88345-465-6.
- BIRKHÖLZER J. (1994c): *Programmdokumentation STRAFE4: Ein 3D Finite-Elemente-Programm zur Simulation von Strömungs- und Transportvorgängen in doppelt-permeablen Medien*, Aachen: Lehr-

stuhl und Institut für Wasserbau und Wasserwirtschaft der RWTH, (unveröffentlicht).

BIRKHÖLZER J. & KARASAKI K. (1996): *FMGN, RENUMN, POLY, TRIPOLY: Suite of Programs for Calculating and Analyzing Flow and Transport in Fracture Networks Embedded in Porous Matrix Blocks (LBNL-39387)*, Berkeley: Lawrence Berkeley Laboratory.

BOULTON N. & STRELTSOVA T. (1977): *Unsteady Flow to a Pumped Well in a Fissured Water-Bearing Formation*, in: *Journal of Hydrology*, Vol. 35, pp. 257–269, ISSN 0022-1694.

CALLAHAN T.; REIMUS P.; BOWMANN R. & HAGA M. (2000): *Using Multiple Experimental Methods to Determine Fracture/Matrix Interactions and Dispersion of Nonreactive Solutes in Saturated Volcanic Tuff*, in: *Water Resources Research*, Vol. 36, No. 12, pp. 3547–3558, ISSN 0043-1397.

DELAY F.; POREL G. & DE MARSILY G. (1997): *Predicting Solute Transport in Heterogeneous Media from Results Obtained in Homogeneous Ones: an Experimental Approach*, in: *Journal of Contaminant Hydrology*, Vol. 25, No. 1-2, pp. 357–393, ISSN 0169-7722.

DIETRICH P.; LIEDL R.; TEUTSCH G. & SAUTER M. (2000): *Teilprojekt 2 - Folgeantrag (3. Phase): Laborexperimente und Entwicklung neuer Untersuchungsmethoden*, Tübingen: Lehrstuhl und Institut für Angewandte Geologie, (Forschungsvorhaben bei der DFG: Festgesteins-Aquiferanalog: Experimente und Modellierung).

DIN 18196 (1998): *Erkundung und Untersuchung des Baugrunds, Normen*, Berlin [u.a.]: Beuth, (DIN-Taschenbuch; 113), ISBN 3-410-14195-2.

- EINSELE G. & SAUTER M. (1992): *Arbeitsbericht Kurzfassung: Karbonatlösung (Gebirgsauslaugung) entlang von Klüften in Sandstein-Aquiferen*, Tübingen: Lehrstuhl und Institut für Angewandte Geologie, (Forschungsvorhaben bei der DFG: Strömung und Stofftransport in Festgesteinsaquiferen).
- FEEHLEY C.; ZHENG C. & MOLZ F. (2000): *A Dual-Domain Mass Transfer Approach for Modeling Solute Transport in Heterogeneous Aquifers: Application to the Macrodispersion Experiment (MADE) Site*, in: *Water Resources Research*, Vol. 36, No. 9, pp. 2501–2515, ISSN 0043-1397.
- FREEZE R. & CHERRY J. (1979): *Groundwater*, Englewood Cliffs, NJ: Prentice Hall, ISBN 0-13-365312-9.
- GONZALEZ-HERRERA R. (2001): *3D Analytical Solution for Transport in a Double Porosity Aquifer System with First-Type Rectangular Source*, in: *IAMG 2001 Conference: 2001 Annual Conference of the International Association for Mathematical Geology, Cancún, Mexico, September 6-12, 2001*, Kansas: Kansas Geological Survey.
[<http://www.kgs.ukans.edu/Conferences/IAMG/Sessions/A/a%.html>][21.10.2002]
- HEMMINGER A.; NEUNHÄUSERER L. & HELMIG R. (1997): *Teilprojekt 3 - Arbeitsbericht - 1. Projektphase: Einsatz von diskreten Modellsätzen*, Braunschweig u. Stuttgart: Fachgebiet für Numerische Methoden und Informationsverarbeitung der TU Braunschweig; Lehrstuhl und Institut für Hydraulik, Grundwasser und Wasserbau der Univ. Stuttgart, (Forschungsvorhaben bei der DFG: Festgesteins-Aquiferanalog: Experimente und Modellierung).

- HÖTZL H.; BÄUMLE R.; THÜRINGER C. & WITTHÜSER K. (2000): *Teilprojekt 1 - Arbeitsbericht - 2. Projektphase: Feldexperimente zur Wasser- und Stoffausbreitung in Abhängigkeit von Kluft- und Gesteinsdurchlässigkeit*, Karlsruhe: Lehrstuhl für Angewandte Geologie, (Forschungsvorhaben bei der DFG: Festgesteins-Aquiferanalog: Experimente und Modellierung).
- HÖTZL H.; THÜRINGER C. & WITTHÜSER K. (1998): *Teilprojekt 1- Arbeitsbericht - 1. Projektphase: Feldexperimente zur Wasser- und Stoffausbreitung in Abhängigkeit von Kluft- und Gesteinsdurchlässigkeit*, Karlsruhe: Lehrstuhl für Angewandte Geologie, (Forschungsvorhaben bei der DFG: Festgesteins-Aquiferanalog: Experimente und Modellierung).
- HUYAKORN P.; LESTER B. & MERCER J. (1983a): *An Efficient Finite Element Technique for Modeling Transport in Fractured Porous Media: 1. Single Species Transport*, in: Water Resources Research, Vol. 19, No. 3, pp. 841–854, ISSN 0043-1397.
- HUYAKORN P.; LESTER B. & MERCER J. (1983b): *An Efficient Finite Element Technique for Modeling Transport in Fractured Porous Media: 2. Nuclide Decay Chain Transport*, in: Water Resources Research, Vol. 19, No. 5, pp. 1286–1296, ISSN 0043-1397.
- ISAAKS E. & SRIVASTAVA R. (1989): *Applied Geostatistics. An Introduction*, New York: Oxford Univ. Press, ISBN 0-19-505012-6.
- JACQUES D.; KIM D.; DIELS J.; VANDERBORGHT J.; VERECKEN H. & FEYEN J. (1998): *Analysis of Steady State Chloride Transport Through Two Heterogeneous Field Soils*, in: Water Resources Research, Vol. 34, No. 10, pp. 2539–2550, ISSN 0043-1397.

- JANSEN D. (1999): *Identifikation des Mehrkontinuum-Modells zur Simulation des Stofftransportes in multiporösen Festgesteinsaquiferen*, Aachen: Eigenverlag, (Technische Hochschule Aachen / Lehrstuhl und Institut für Wasserbau und Wasserwirtschaft: Mitteilungen; 118) (Zugl.: Aachen, T.H., Diss.), ISBN 3-89653-618-4.
- KÖNGETER J.; JANSEN D. & LAGENDIJK V. (1997): *Teilprojekt 4 - Arbeitsbericht - 1. Projektphase: Einsatz von äquivalenten Modellansätzen (Ko 1573/2-1)*, Aachen: Lehrstuhl und Institut für Wasserbau und Wasserwirtschaft der RWTH, (Forschungsvorhaben bei der DFG: Festgesteins-Aquiferanalog: Experimente und Modellierung).
- KÖNGETER J.; LAGENDIJK V.; VOGEL T.; JANSEN D. & FORKEL C. (2000): *Teilprojekt 4 - Arbeitsbericht - 2. Projektphase: Einsatz von äquivalenten Modellansätzen (Ko 1573/2-2)*, Aachen: Lehrstuhl und Institut für Wasserbau und Wasserwirtschaft der RWTH, (Forschungsvorhaben bei der DFG: Festgesteins-Aquiferanalog: Experimente und Modellierung).
- LEIJ F.; SKAGGS T. & VAN GENUCHTEN M. (1991): *Analytical Solutions for Solute Transport in Three-Dimensional Semi-Infinite Porous Media*, in: Water Resources Research, Vol. 27, No. 10, pp. 2719–2733, ISSN 0043-1397.
- LEIJ F.; TORIDE N. & VAN GENUCHTEN M. (1993): *Analytical Solutions for Non-Equilibrium Solute Transport in Three-Dimensional Porous Media*, in: Journal of Hydrology, Vol. 151, No. 2-4, pp. 193–228, ISSN 0022-1694.
- LINDSTROM F.T. & BOERSMA L. (1989): *Analytical Solutions for*

- Convective-Dispersive Transport in Confined Aquifers With Different Initial and Boundary Conditions*, in: Water Resources Research, Vol. 25, No. 2, pp. 241–256, ISSN 0043-1397.
- LONG J.; REMER J. & WILSON C.E. (1982): *Porous Media Equivalents for Networks of Discontinuous Fractures*, in: Water Resources Research, Vol. 18, No. 3, pp. 645–658, ISSN 0043-1397.
- MCDERMOTT C. (1999): *New Experimental and Modelling Techniques to Investigate the Fractured Porous System*, Tübingen: Inst. und Museum für Geologie und Paläontologie, (Tübinger geowissenschaftliche Arbeiten = TGA C; 52) (Zugl.: Tübingen, Univ., Diss.).
- NEUNHÄUSER L.; HEMMINGER A. & HELMIG R. (2000): *Teilprojekt 3 - Arbeitsbericht - 2. Projektphase: Einsatz von diskreten Modellansätzen*, Braunschweig: Institut für Computer Anwendungen im Bauingenieurwesen, (Forschungsvorhaben bei der DFG: Festgesteins-Aquiferanalog: Experimente und Modellierung).
- NUMERICAL ALGORITHMS GROUP (1999): *NAG Fortran library manual, Mark 19*, Oxford [u.a.]: Numerical Algorithms Group.
[<http://www.nag.co.uk/numeric/fl/manual19/html/mark19.html>][22.07.2002]
- OGATA A. & BANKS R. (1961): *A Solution of the Differential Equation of Longitudinal Dispersion in Porous Media*, Washington: US Gov. Print. Office, (Geological Survey Professional Paper, 411-A).
- OSTENSEN R. (1998): *Tracer Tests and Contaminant Transport Rates in Dual-Porosity Formations with Application to the WIPP*, in: Journal of Hydrology, Vol. 204, No. 1-4, pp. 197–216, ISSN 0022-1694.

- PARK E. & ZHAN H. (2001): *Analytical Solutions of Contaminant Transport from Finite One-, Two-, and Three- Dimensional Sources in a Finite-Thickness Aquifer*, in: Journal of Contaminant Hydrology, Vol. 53, pp. 41–61, ISSN 0169-7722.
[<http://geoweb.tamu.edu/Faculty/Zhan/Research.html>][21.10.2002]
- PARKER J. & VAN GENUCHTEN M. (1984): *Flux-Averaged and Volume-Averaged Concentrations in Continuum Approaches to Solute Transport*, in: Water Resources Research, Vol. 20, No. 7, pp. 866–872, ISSN 0043-1397.
- REIS J. (1998): *Effect of Fracture Spacing Distribution on Pressure Transient Response in Naturally Fractured Reservoirs*, in: Journal of Petroleum Science & Engineering, Vol. 20, No. 1-2, pp. 31–47, ISSN 0920-4105.
- ROUVÉ G. & BIRKHÖLZER J. (1994): *Abschlußbericht (Ro 365/36)*, Aachen: Lehrstuhl und Institut für Wasserbau und Wasserwirtschaft der RWTH, (Forschungsvorhaben bei der DFG: Strömung und Stofftransport in Festgesteinsaquiferen).
- SAUTER M.; LIEDL R.; TEUTSCH G.; LEVEN C.; BARAKA-LOKMANE S. & MCDERMOTT C. (2000): *Teilprojekt 2 - Arbeitsbericht - 2. Projektphase: Laborexperimente und Entwicklung neuer Untersuchungsmethoden (LAG 00-01/2406)*, Tübingen: Lehrstuhl und Institut für Angewandte Geologie, (Forschungsvorhaben bei der DFG: Festgesteins-Aquiferanalog: Experimente und Modellierung).
- SAUVEPLANE C. (1984): *Pumping Test Analysis in Fractured Aquifer Formations: State of Art and Some Perspectives*, in: Groundwa-

- ter Hydraulics: based on Papers from the John Ferris Symposium on Groundwater Hydraulics held 1981 in Baltimore, Md. / Ed. by J.S. Rosenshein*, Washington, DC: American Geophysical Union, (Water Resources Monograph Series; 9), ISBN 0-87590-310-X, pp. 171–206.
- SCHEIDEGGER A. (1961): *General Theory of Dispersion in Porous Media*, in: *Journal of Geophysical Research*, Vol. 66, No. 10, pp. 3273–3278, ISSN 0022-1406.
- SILBERHORN-HEMMINGER A. (2002): *Modellierung von Kluftaquifersystemen: Geostatistische Analyse und deterministisch-stochastische Kluftgenerierung*, Stuttgart: Eigenverlag, (Institut für Wasserbau Stuttgart: Mitteilungen; NN) (Zugl.: Stuttgart, Univ., Diss., 2002), ISBN 3-921694-NN-x.
- STÖCKER H. (1995): *Taschenbuch mathematischer Formeln und moderner Verfahren*, Thun u.a.: Deutsch, 3. edition, ISBN 3-8171-1461-3.
- STRELTSOVA-ADAMS T. (1978): *Well Hydraulics in Heterogeneous Aquifer Formations*, in: *Advances in Hydrosience*, Vol. 11, pp. 357–423, ISSN 0065-2768.
- SUDICKY E. (1989): *The Laplace Transform Galerkin Technique: A Time-Continuous Finite Element Theory and Application to Mass Transport in Groundwater*, in: *Water Resources Research*, Vol. 25, No. 8, pp. 1833–1846, ISSN 0043-1397.
- SUDICKY E. & FRIND E. (1982): *Contaminant Transport in Fractured Porous Media: Analytical Solution for a System of Parallel Fractures*, in: *Water Resources Research*, Vol. 18, No. 6, pp. 1634–1642, ISSN 0043-1397.

- TANG D.; FRIND E. & SUDICKY E. (1981): *Contaminant Transport in Fractured Porous Media: Analytical Solution for a Single Fracture*, in: *Water Resources Research*, Vol. 17, No. 3, pp. 555–564, ISSN 0043-1397.
- TEUTSCH G. & SAUTER M. (1992): *Groundwater Modeling in Karst Terranes: Scale Effects, Data Aquisition and Field Validation*, in: *Proceedings of the Third International Conference on Hydrogeology, Ecology, Monitoring and Management of Groundwater in Karst Terranes, December 4-6, 1991 Nashville, USA*, Dublin, Ohio: Water Well Journal Publishing, (Ground Water Management; 10), pp. 17–35.
- TEUTSCH G.; SAUTER M.; LIEDL R.; BARAKA-LOKMANE S. & MC-
DERMOTT C. (1997): *Teilprojekt 2 - Arbeitsbericht - 1. Projektphase: Laborexperimente und Entwicklung neuer Untersuchungsmethoden (LAG 97-01/1909)*, Tübingen: Lehrstuhl und Institut für Angewandte Geologie, (Forschungsvorhaben bei der DFG: Festgesteins-Aquiferanalog: Experimente und Modellierung).
- VAN GENUCHTEN M. & ALVES W. (1982): *Analytical Solutions of the One-Dimensional Convective-Dispersive Solute Transport Equation*, Washington, D.C.: U.S. Government Print. Off., (Technical bulletin / Agricultural Research Service, United States Department of Agriculture; 1661).
- WEIR G. (1999): *Single-Phase Flow Regimes in a Discrete Fracture Model*, in: *Water Resources Research*, Vol. 35, No. 1, pp. 65–73, ISSN 0043-1397.
- ZOPPOU C. & KNIGHT J. (1997): *Analytical Solution of the Spatially Variable Coefficient Advective-Diffusion Equation in One-, Two- and*

Three-Dimensions, in: *Mathematics Research Report MRR 056-97*,
Canberra: Centre for Mathematics and Its Applications, School of
Mathematical Sciences, Australian National University.
[[www.maths.anu.edu.au/research.reports/mrr/97.056/MRR97%-056.ps.gz](http://www.maths.anu.edu.au/research.reports/mrr/97.056/MRR97%056.ps.gz)] [18.04.2002]

ZOPPOU C. & KNIGHT J. (1999): *Analytical Solution of a Spatially
Variable Coefficient Advection-Diffusion Equation in Up to Three Di-
mensions*, in: *Applied Mathematical Modelling*, Vol. 23, No. 9,
pp. 667–685, ISSN 0307-904X.

Anhang A

Finite-Elemente-Programm STRAFE6

A.1 Übersicht

Im folgenden Anhang werden die Grundlagen der Modelltechnik für das in dieser Arbeit zur Anwendung kommende Mehrkontinuum-Modell STRAFE6 kurz vorgestellt. Für eine weiterführende Beschreibung wird auf BIRKHÖLZER (1994a,b,c) und JANSEN (1999) verwiesen.

A.2 Entwicklung des Mehrkontinuum-Modells

Charakteristische Merkmale eines Mehrkontinuum-Modells sind die Anzahl und die hydrogeologischen Eigenschaften der Komponenten sowie die Austausch- und Kopplungsmodelle. Ausgehend von der Auswertung bisheriger Arbeiten zu Mehrkontinuum-Modellen werden folgende Modellansätze für das Mehrkontinuum-Modell STRAFE6 berücksichtigt (vgl. JANSEN, 1999):

1. Die Anzahl der Komponenten ist modelltechnisch unbegrenzt.
2. Für permeable Komponenten ist ausschließlich eine globale Abbildung möglich.
3. Für poröse Komponenten ist optional eine globale oder lokale Abbildung möglich.
4. Für die Kopplung von zwei permeablen Komponenten (Mobilitätsmodell) wird ein Linearansatz gewählt.
5. Für die Kopplung einer permeablen mit einer porösen Komponente (Speichermodell) sind optional ein Linear- oder ein Gradientenansatz möglich.
6. Die simultane Kopplung mehrerer Komponenten ist optional parallel, seriell oder selektiv.
7. Die numerische Lösung der beschreibenden Gleichungen erfolgt nach der Standard GALERKIN-Finite-Elemente-Methode.
8. Die Kombination von ein-, zwei- und dreidimensionalen Elementtypen in einer Diskretisierung ist möglich.

Die numerische Umsetzung des Mehrkontinuum-Modells erfolgt aufbauend auf dem Programmsystem STRAFE in den Versionen 1 bis 4, die zwischen 1989 und 1994 am Lehrstuhl und Institut für Wasserbau und Wasserwirtschaft der RWTH Aachen entwickelt worden sind und ausschließlich die Behandlung klassischer Einkontinuum- bzw. Doppelkontinuum-Modelle betrachten (BIRKHÖLZER, 1994c; ROUVÉ & BIRKHÖLZER, 1994).

A.3 Beschreibende Gleichungen für das Mehrkontinuum-Modell

A.3.1 Übersicht

Die Formulierung der beschreibenden Gleichungen für Strömung und Stofftransport in den Komponenten geschieht analog der Vorgehensweise bei klassischen Einkontinuum-Modellen und beruht auf dem Gesetz der Massenerhaltung. Die physikalischen und mathematischen Grundlagen werden in Standardwerken zur Grundwasserhydraulik wie BEAR (1972); BEAR & BACHMAT (1990) oder FREEZE & CHERRY (1979) ausführlich behandelt.

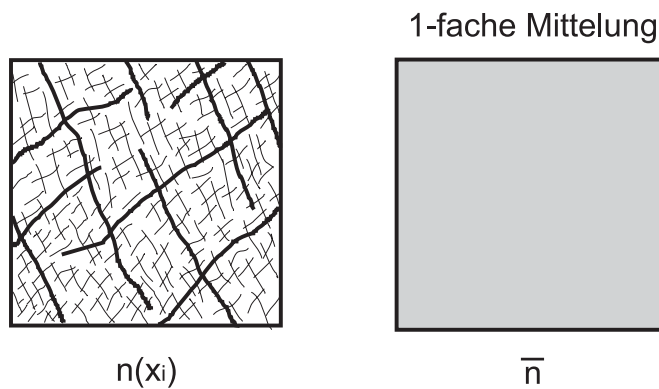
Die Technik der Mehrkontinuum-Modellierung, bei der die wirksamen hydraulischen Komponenten in getrennten, sich überlagernden Kontinua abgebildet werden, erfordert zusätzlich zu den Einkontinuum-Gleichungen eine besondere Beachtung der Volumenkonsistenz und die Berücksichtigung der Austauschterme.

A.3.2 Abbildung der Komponenten

Bei der Bezeichnung der Parameter und Zustandsgrößen in den beschreibenden Gleichungen wird die Anzahl der Mittelungsprozesse zur Bestimmung der Größen berücksichtigt. Die einfach quergestrichenen Größen in den beschreibenden Gleichungen sind äquivalente Kontinuum-Parameter, die zweifach quergestrichenen Größen sind zusätzlich über bestimmte Bereiche des Kontinuums gemittelte Größen. Die unterschiedlichen Mittelungsprozeduren werden in Abbildung A.1 verdeutlicht. Bei der Bestimmung eines äquivalenten Pa-

rameters wie der Porosität ist eine Mittelung der betrachteten Größe über das Repräsentative Elementarvolumen (REV) vorzunehmen. Ein Beispiel für die zweite Mittelung ist die Mittelung der Konzentrationsverteilung in einem Matrixblock über das Blockvolumen zu einem einzigen äquivalenten Mittelwert.

Bestimmung der äquivalenten Porosität n einer Kluftkomponente



Bestimmung der mittleren Konzentration C_M eines Matrixblocks

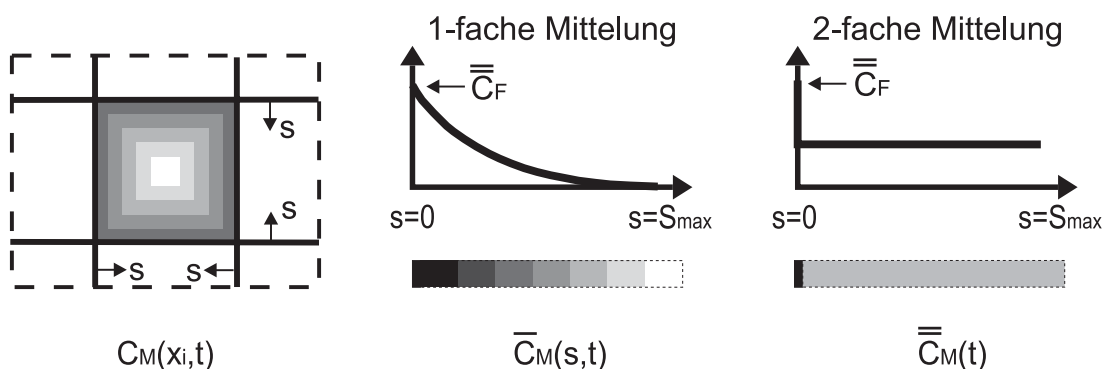


Abbildung A.1: Räumliche Mittelungsvorgänge bei der Homogenisierung der Komponenten nach JANSEN (1999)

Abbildung einer Komponente als globales Kontinuum

Die Kontinuumgleichungen entsprechen der instationären Strömungsfeldgleichung und der Advektions-Dispersions-Gleichung für konservative Tracer. Die beschreibenden Gleichungen werden zusätzlich zu den bekannten Termen (Speicher-, Fließ-, Quell- und Senkenterm, Advektions- und Dispersionsterm) um die Austauschterme $W_{\alpha\beta}$ und die relativen Bezugsvolumina Φ_α erweitert. Die Gleichungen gelten für das Kontinuum α . Der Index β in den Austauschtermen kennzeichnet das mit Kontinuum α gekoppelte Kontinuum β .

STRAFE6 berücksichtigt ebenfalls Ad- und Desorptionsprozesse, mikrobiologische Abbaureaktionen und radioaktiven Zerfall mit Hilfe von einfachen Gleichgewichtsansätzen bzw. Abbautermen erster Ordnung. Da diese Prozesse aber nicht dem vorrangigen Interesse des vorliegenden Berichts entsprechen, sind die entsprechenden Terme in den beschreibenden Gleichungen für den Stofftransport nicht aufgeführt.

Die Strömungsfeldgleichung, formuliert für die Standrohrspiegelhöhe als gesuchte Zustandsgröße, lautet dann für eine permeable Komponente (vgl. z. B. JANSEN, 1999):

$$\Phi_\alpha \left(\bar{S}_{S,\alpha} \frac{\partial \bar{h}_\alpha}{\partial t} - \frac{\partial}{\partial x_i} \bar{K}_{ij,\alpha} \frac{\partial \bar{h}_\alpha}{\partial x_j} + \bar{Q}_{Q,S,\alpha} \right) + \Phi_\alpha \Phi_\beta W_{QI,\alpha\beta} = 0 \quad (\text{A.1})$$

und die erweiterte Advektions-Dispersionsgleichung lautet entsprechend:

$$\begin{aligned} \Phi_\alpha \left(\bar{n}_\alpha \frac{\partial \bar{C}_\alpha}{\partial t} + \bar{q}_{i,\alpha} \frac{\partial \bar{C}_\alpha}{\partial x_i} - \frac{\partial}{\partial x_i} \bar{D}_{ij,\alpha} \frac{\partial \bar{C}_\alpha}{\partial x_j} + \bar{Q}_{Q,S,\alpha} (C_R - \bar{C}_\alpha) \right) \\ + \Phi_\alpha \Phi_\beta W_{C,\alpha\beta} = 0 \end{aligned} \quad (\text{A.2})$$

Der Tensor der hydrodynamischen Dispersion wird nach SCHEIDEGGER (1961) bestimmt zu:

$$\bar{D}_{ij} = \bar{\alpha}_t \delta_{ij} |\bar{q}| + (\bar{\alpha}_l - \bar{\alpha}_t) \frac{\bar{q}_i \bar{q}_j}{|\bar{q}|} + \bar{n} \bar{D}_{mol,ij} \quad (\text{A.3})$$

Für den zweidimensionalen Fall ist die Bestimmung einer longitudinalen und einer transversalen Dispersivität $\bar{\alpha}_l$ und $\bar{\alpha}_t$ erforderlich. Für den dreidimensionalen Fall ist die Vorgabe einer transversalen Dispersivität für die horizontale Ebene $\bar{\alpha}_{th}$ und eine für die vertikale Ebene $\bar{\alpha}_{tv}$ erforderlich. Der Tensor der effektiven molekularen Diffusion berücksichtigt die durch die Tortuosität des porösen Mediums eingeschränkte Diffusion des Stoffes gegenüber der Ausbreitung in Wasser in der Form:

$$\bar{D}_{mol,ij} = \bar{T} D_{aq} \quad (\text{A.4})$$

Entsprechend den Ausführungen von BEAR (1972) ist $\bar{D}_{mol,ij}$ der Tensor der effektiven molekularen Diffusion in einem porösen Medium und D_{aq} ist der Diffusionskoeffizient in Wasser. $\bar{T}$ ist der Tensor der Tortuosität. Auf die Indizierung der Parameter wird an dieser Stelle verzichtet, da sich Gleichung (A.3) und (A.4) jeweils immer nur auf

eine Komponente α beziehen.

Bei der Formulierung der Gleichungen für ausschließlich poröse Komponenten entfallen alle strömungsabhängigen Terme und damit alle Terme mit globalen Ortskoordinaten. Da poröse Komponenten (Speicherkomponenten) sowohl in Verbindung mit Linear- als auch mit Gradientenansätzen eingesetzt werden, ist eine Unterscheidung für die Kontinuum-Gleichungen erforderlich. In Verbindung mit Linearansätzen werden die Kontinuum-Gleichungen für das globale räumliche Koordinatensystem formuliert. Die entsprechenden strömungsunabhängigen Gleichungen lauten für das Strömungsproblem:

$$\Phi_{\alpha} \left(\bar{S}_{S,\alpha} \frac{\partial \bar{h}_{\alpha}}{\partial t} + \bar{Q}_{Q,S,\alpha} \right) + \Phi_{\alpha} \Phi_{\beta} W_{Ql,\alpha\beta} = 0 \quad (\text{A.5})$$

bzw. für das Stofftransportproblem:

$$\Phi_{\alpha} \left(\bar{n}_{\alpha} \frac{\partial \bar{C}_{\alpha}}{\partial t} + Q_{Q,S,\alpha} (C_R - \bar{C}_{\alpha}) \right) + \Phi_{\alpha} \Phi_{\beta} W_{C,\alpha\beta} = 0 \quad (\text{A.6})$$

Abbildung als lokales Kontinuum

Die Abbildung einer Komponente als lokales, eindimensionales Subkontinuum ist wegen der Unabhängigkeit der beschreibenden Gleichungen von globalen Ortskoordinaten ausschließlich für poröse Komponenten möglich. Die Subkontinua können z.B. einzelne Matrixblöcke oder, bei mikroskaliger Betrachtungsweise, auch einzelne Bodenteilchen sein. Die in dieser Form betrachteten Subsysteme sind

voneinander unabhängig und werden nur durch die Randbedingungen an ihrer Interface mit der übergeordneten Komponente beeinflusst. Aufgrund dieses lokalen Charakters der betrachteten Prozesse werden eindimensionale Gleichungen in Richtung einer lokalen Ortsvariable s formuliert. Die lokale Ortsvariable ist auf das Zentrum des Subkontinuums gerichtet. Die entsprechenden Gleichungen lauten für das Strömungsproblem:

$$\bar{S}_{S,\alpha} \frac{\partial \bar{h}_\alpha}{\partial t} - \frac{1}{A(s)} \bar{K}_\alpha \frac{\partial}{\partial s} \left(\bar{A}_\alpha(s) \frac{\partial \bar{h}_\alpha}{\partial s} \right) + \bar{Q}_{Q,S,\alpha\beta} = 0 \quad (\text{A.7})$$

und für das Stofftransportproblem:

$$\bar{n}_\alpha \frac{\partial \bar{C}_\alpha}{\partial t} - \frac{1}{A_\alpha(s)} \bar{n}_\alpha \bar{D}_{mol,\alpha} \frac{\partial}{\partial s} \left(\bar{A}_\alpha(s) \frac{\partial \bar{C}_\alpha}{\partial s} \right) + \bar{Q}_{Q,S,\alpha} (C_R - \bar{C}_\alpha) = 0 \quad (\text{A.8})$$

Da die Gleichungen (A.7) und (A.8) auf das Volumen des Subkontinuums bezogen sind und nicht auf das Modellvolumen V_0 transformiert werden, entfällt die Multiplikation der Gleichungen mit dem jeweiligen relativen Bezugsvolumen Φ_α . $A(s)$ ist dabei die für den Fluss verfügbare Querschnittfläche A bei einer Penetrationstiefe s im Subkontinuum und wird als Interface-Funktion bezeichnet. Zur Lösung der Differentialgleichungen (A.7) und (A.8) dienen die Randbedingungen (A.9) bis (A.12).

Strömung:

$$\bar{h}_\alpha(s = 0.0, x, y, z, t) = \bar{h}_\beta(x, y, z, t) \quad (\text{A.9})$$

$$\frac{\partial \bar{h}_\alpha}{\partial s}(s = s_{max}, x, y, z, t) = 0.0 \quad (\text{A.10})$$

Stofftransport:

$$\bar{C}_\alpha(s = 0.0, x, y, z) = \bar{C}_\beta(x, y, z, t) \quad (\text{A.11})$$

$$\frac{\partial \bar{C}_\alpha}{\partial s}(s = s_{\max}, x, y, z, t) = 0.0 \quad (\text{A.12})$$

A.4 Austausch zwischen den Komponenten

A.4.1 Übersicht

In den bisherigen numerischen Mehrkontinuum-Modellen werden ausschließlich lineare Austauschmodelle nach BARENBLATT ET AL. (1960) verwendet. Wegen der bedingten Anwendbarkeit des Linearansatzes für ausgeprägt instationäre Prozesse wird mit dem Gradientenansatz nach HUYAKORN ET AL. (1983a,b) zusätzlich ein alternatives Austauschmodell berücksichtigt, das sich bereits in ausführlichen Studien bewährt hat (vgl. BIRKHÖLZER, 1994b; JANSEN, 1999; KÖNGETER ET AL., 1997).

A.4.2 Linearansatz

Austauschmodelle mit Linearansatz basieren auf der Annahme einer direkten Proportionalität des Fluid - und Stofftransfers $W_{\alpha\beta}$ zur Differenz der Zustandsgrößen der betrachteten Komponenten α und β an einem Ort.

Gleichung (A.13) beschreibt den Fluidaustausch in Richtung des lokalen Druckgradienten senkrecht zur Grenzfläche der Kompo-

ten. Die erforderlichen Parameter zur Quantifizierung des lokalen Fluidaustausches sind die spezifische Oberfläche $\bar{\Omega}_0$ und der Fluidaustauschkoeffizient $\bar{\alpha}_Q$. Die spezifische Oberfläche $\bar{\Omega}_0$ ist definiert als das Verhältnis von Interfacefläche zu Gesteinsvolumen und ist ein Maß für den Zerklüftungsgrad der Gesteinsformation. Gleichung (A.14) beschreibt die Mischung der Fluidströme von unter- und übergeordneter Komponente. Der regionale Fluidaustausch ist definiert als der Betrag aus dem Produkt eines symmetrischen Tensors zweiter Ordnung, der spezifischen Kluftfläche $\bar{\Omega}_{w,ij}$, und dem Vektor des spezifischen Durchflusses $\bar{q}_i$ in der untergeordneten Komponente. Der Tensor $\bar{\Omega}_{w,ij}$ beschreibt die richtungsabhängige spezifische Kluftfläche, die senkrecht zur regionalen Strömungsrichtung gerichtet und für die Mischung der Fluidströme bei der Kopplung mit einem Kluftkontinuum maßgebend ist.

$$W_{Ql,\alpha\beta} = \bar{\Omega}_{0,\beta}^2 \bar{\alpha}_{Q,\beta} (\bar{h}_\alpha - \bar{h}_\beta) \quad (\text{A.13})$$

$$W_{Qr,\alpha\beta} = |\bar{\Omega}_{w,ij,\alpha\beta} \bar{q}_{i,\beta}| \quad (\text{A.14})$$

Der gesamte Stoffaustausch W_C (Gleichung A.18) entspricht der Superposition der Anteile aus diffusivem, lokal advektivem und regional advektivem Austausch. Der diffusive Stoffaustausch in Gleichung (A.15) wird analog zum lokalen Fluidaustausch formuliert (Gleichung A.13) und ebenfalls über einen Austauschkoeffizienten α_C definiert. Die Austauschkoeffizienten sind abhängig von den Material- und Geometrieeigenschaften der Komponente β . Ist eine lokale Strömung zwischen den Komponenten zu berücksichtigen, wird der daraus resultierende lokal advektive Stofftransfer mit Gleichung (A.16)

beschrieben. Die Mischung der gelösten Stoffe infolge der regionalen Advektion wird durch Gleichung (A.17) erfasst.

$$W_{Dl,\alpha\beta} = \bar{\Omega}_{0,\beta}^2 \bar{\alpha}_{C,\beta} (\bar{C}_\alpha - \bar{C}_\beta) \quad (\text{A.15})$$

$$W_{Al,\alpha\beta} = |W_{Ql,\alpha\beta}| (\bar{C}_\alpha - \bar{C}_\beta) \quad (\text{A.16})$$

$$W_{Ar,\alpha\beta} = |W_{Qr,\alpha\beta}| (\bar{C}_\alpha - \bar{C}_\beta) \quad (\text{A.17})$$

$$W_{C,\alpha\beta} = W_{Dl,\alpha\beta} + W_{Al,\alpha\beta} + W_{Ar,\alpha\beta} \quad (\text{A.18})$$

Der Austauschterm W_{Al} zur Beschreibung der lokalen Advektion ist nur bei einströmendem Massenfluss und instationärem Strömungsfeld zu berücksichtigen, da sich die Konzentration bei ausströmendem Massenfluss in der betrachteten Komponente nicht verändert. Diese Überlegung ist analog zu der Behandlung des Quell - und Senkenterms in Gleichung (A.2).

A.4.3 Gradientenansatz

Zur Bestimmung der Flüsse zwischen den Kontinua wird bei Gradientenansätzen nicht ein mittlerer Gradient, sondern der Gradient unmittelbar an der Interface der Kontinua ($s = 0$) gewählt. Die Formulierung für den Fluidaustauschterm in Gleichung (A.19) entspricht

dem empirischen Gesetz zur Bestimmung des spezifischen Durchflusses für die lineare Strömung nach DARCY. Der diffusive Stofftransfer (A.20) wird mit dem ersten FICK'schen Gesetz bestimmt.

$$W_{Ql,\alpha\beta} = -\bar{\Omega}_{0,\beta} \bar{K}_\beta \frac{\partial \bar{h}_\beta}{\partial s} \Big|_{s=0.0} \quad (\text{A.19})$$

$$W_{D,\alpha\beta} = -\bar{\Omega}_{0,\beta} \bar{n}_\beta \bar{D}_{mol,\beta} \frac{\partial \bar{C}_\beta}{\partial s} \Big|_{s=0.0} \quad (\text{A.20})$$

Die Austauschterme W_{Ql} und W_D resultieren bei Verwendung des Gradientenansatzes unmittelbar aus der Lösung der lokalen, eindimensionalen Strömungs- und Transportgleichungen (A.7) und (A.8) als Randüberströme an der Grenzfläche der Komponenten ($s = 0$). Die numerische Lösung der Gleichungen (A.7) und (A.8) erfolgt gemäß des Ansatzes von HUYAKORN ET AL. (1983b) mit Hilfe der Finite-Elemente-Methode.

Lebenslauf

12.11.71 geboren in Nettetal, Deutschland
verheiratet, ein Kind
Staatsangehörigkeit: niederländisch

Schule/Studium

05.91	Albert-Einstein-Gymnasium, Kaarst	Allgemeine Hochschulreife
10.91	RWTH, Aachen	Studienbeginn Bauingenieurwesen
06.93	RWTH, Aachen	Vordiplom (cand.-ing.) Bauingenieurwesen
07.93 - 08.93	University of Technology, Delft	Course on Physical Planning, Nature Development and Watermanagement
03.97	RWTH, Aachen	Diplomhauptprüfung zum Dipl.-Ing. im Fach Bauingenieurwesen

Beruflicher Werdegang

07.91 - 08.91	Hubertus Zimmerling, Düsseldorf	Ingenieurbüro (Praktikum)
03.92 - 04.92	HOCHTIEF, Düsseldorf	Baustelle Shadow Arkaden (Praktikum)
10.92 - 03.97	RWTH, Aachen	Institut für Wasserbau und Wasserwirtschaft; studentischer Mitarbeiter
05.95 - 08.95	Züblin, Xiaolangdi, China	Baustelle Xiaolangdi (Praktikum) Multipurpose Dam Project, P.R. of China
04.97 – 03.03	RWTH, Aachen	Institut für Wasserbau und Wasserwirtschaft; wissenschaftlicher Mitarbeiter
01.03 – 12.03	Ingenieurgesellschaft für Wasser und Umwelt mbH, Aachen	Leitender Projektingenieur

Aachen, Februar 2004

Vincent Legendijk