

Experimentelle und numerische Untersuchungen  
zur Dispersion von Dichteströmungen  
in einem stochastischen Modellaquifer

Vom Fachbereich Bauingenieurwesen  
der Universität Kassel  
zur Erlangung des akademischen Grades eines  
Doktor-Ingenieurs (Dr.-Ing.)  
genehmigte Dissertation

vorgelegt von  
Dipl.-Ing. Bettina Starke

Kassel im Juli 2005

Erster Gutachter: Prof. Dr. rer. nat. Manfred Koch  
Zweiter Gutachter: Priv. Doz. Dr.-Ing. Ekkehard Holzbecher

Tag der mündlichen Prüfung: 17. November 2005

## VORWORT

Die in der vorliegenden Arbeit beschriebenen Untersuchungen entstanden während meiner fünfjährigen Tätigkeit als wissenschaftliche Angestellte am Fachbereich Bauingenieurwesen der Universität Kassel.

Wissenschaftlich gefördert und betreut wurde meine Arbeit in erster Linie durch meinen Betreuer Prof. Dr. rer. nat. Manfred Koch. Ihm möchte ich ganz herzlich für seine tatkräftige Unterstützung, seine wertvollen Anregungen und sein Verständnis danken.

Herrn Dr.-Ing. habil. Ekkehard Holzbecher danke ich für sein Interesse an meiner Arbeit und für seine Bereitschaft, das Korreferat zu übernehmen.

Ein besonderer Dank gilt auch Herrn Dipl.-Ing. R. Feldner, der mir stets mit großer Geduld und zahlreichen Anregungen und Hilfeleistungen bei der Betreuung der Versuchsanlage zu Rate stand. Ebenso möchte ich Herrn Dr.-Ing. R. Hassinger für die wertvollen Anregungen und Hilfeleistungen bei der Konzeption der Modellversuche danken.

Die Autorin bedankt sich bei ihren jetzigen und ehemaligen Kollegen für die Hilfeleistungen bei der Bepackung des Modelltankes, den zahlreichen Diskussionen über das hier vorgestellte Thema, die mit ihrem Interesse und ihrer Hilfsbereitschaft ein angenehmes Arbeitsklima geschaffen haben.

Außerdem danke ich den Dipl.-Ingenieuren Tobias Wunschik, Axel Waldhoff und Bernd Krüger-Reimer für das Überlassen von Projektarbeiten und Erfahrungen zu den experimentellen Untersuchungen sowie Prof. Dr. Claire Welty und Prof. Dr. Tissa H. Illangasekare für die geleistete fachliche Vorarbeit.

Schließlich möchte ich meinem Sohn Konstantin danken. Ohne sein Verständnis und seine Rücksichtnahme hätte ich diese Arbeit nicht vollenden können.

Kassel, den 18.07.2005

## KURZFASSUNG

Es ist bekannt, dass die Dichte eines gelösten Stoffes die Richtung und die Stärke seiner Bewegung im Untergrund entscheidend bestimmen kann. Eine Vielzahl von Untersuchungen hat gezeigt, dass die Verteilung der Durchlässigkeiten eines porösen Mediums diese Dichteffekte verstärken oder abmildern kann. Wie sich dieser gekoppelte Effekt auf die Vermischung zweier Fluide auswirkt, wurde in dieser Arbeit untersucht und dabei das experimentelle sowohl mit dem numerischen als auch mit dem analytischen Modell gekoppelt.

Für den Fall einer stabilen Schichtung wurde in einem Modelltank (10m x 1.2m x 0.1m) der Universität Kassel eine Serie von zweidimensionalen Experimenten an drei repräsentativen heterogenen porösen Medien durchgeführt. Dabei durchströmten Fluidpaare kontrastierender Dichte den mit Quarzsand einer vorgegebenen stochastischen Verteilung der Permeabilitäten gepackten Tank. Die stationäre räumliche Konzentrationsausbreitung der sich ausbreitenden Salzwasserfahne wurde anhand der Leitfähigkeit gemessen und aus der Höhendifferenz des 84- und 16%igen relativen Konzentrationsdurchgang die Dispersion berechnet. Parallel dazu wurde ein numerisches Modell mit dem *dichteabhängigen* Finite-Elemente-Strömungs- und Transport-Programm SUTRA mit insgesamt  $n_x \times n_y = 392 \times 98 = 38416$  Elementen aufgestellt. Mit dem kalibrierten numerischen Modell wurden Prognosen für mögliche Transportszenarien, Sensitivitätsanalysen und stochastische Simulationen nach der Monte-Carlo-Methode durchgeführt. Die Einstellung der Strömungsgeschwindigkeit erfolgte – sowohl im experimentellen als auch im numerischen Modell - über konstante Druckränder an den Ein- und Auslauftanks. Dabei zeigte sich eine starke Sensitivität der räumlichen Konzentrationsausbreitung hinsichtlich lokaler Druckvariationen.

Die Untersuchungen ergaben, dass sich die Konzentrationsfahne mit steigendem Abstand von der Einströmkante wellenförmig einem effektiven Wert annähert, aus dem die Makrodispersivität ermittelt werden kann. Dabei zeigten sich sichtbare nichtergodische Effekte, d.h. starke Abweichungen in den zweiten räumlichen Momenten der Konzentrationsverteilung der deterministischen Experimente von den Erwartungswerten aus der stochastischen Theorie. Die transversale Makrodispersivität stieg proportional zur Varianz und Korrelation der lognormalen Permeabilitätsverteilung und umgekehrt proportional zur Strömungsgeschwindigkeit und Dichtedifferenz zweier Fluide. Die aus der stochastischen Methode entwickelte Formel für die transversale Makrodispersion konnte verifiziert werden.

Die in dieser Arbeit durchgeführten Versuche liefern eine Verifikationsmöglichkeit, wie sie bisher kaum für die Untersuchung der transversalen Vermischung in einem heterogenen porösen Medium zur Verfügung stand.

# INHALTSVERZEICHNIS

<b>1</b>	<b>EINLEITUNG</b>	<b>1</b>
1.1	Problemstellung und Stand der Forschung .....	1
1.2	Ziel dieser Forschungsarbeit.....	3
<b>2</b>	<b>STRÖMUNG UND TRANSPORT IN PORÖSEN MEDIEN</b>	<b>5</b>
2.1	Strömungsprozesse .....	5
2.1.1	Betrachtungsebenen und Phänomene.....	5
2.1.2	Herleitung der Strömungsgleichung.....	8
2.2	Transportmechanismen .....	12
2.2.1	Advektion.....	13
2.2.2	Hydrodynamische Dispersion.....	13
2.2.3	Sorption.....	16
2.2.4	Biochemischer Abbau und radioaktiver Zerfall .....	16
2.3	Allgemeine Transportgleichung .....	17
2.4	Zustandsgleichungen .....	18
<b>3</b>	<b>GRUNDLAGEN ZUR BESCHREIBUNG DER DISPERSION</b>	<b>20</b>
3.1	Skalenabhängigkeit der Dispersion.....	20
3.1.1	Abhängigkeit vom Längenmaßstab L .....	20
3.1.2	Abhängigkeit vom Maßstab der Heterogenität I .....	21
3.1.3	Abhängigkeit vom Maßstab der Messungen und Berechnungen .....	21
3.2	Dispersionskoeffizienten.....	23
3.3	Klassische Dispersionsmodelle .....	24
3.3.1	Geometrische und geometrisch- statistische Modelle .....	24
3.3.2	Wahrscheinlichkeitsmodelle.....	24
3.3.3	Kontinuums-Modelle .....	25
3.3.4	Stochastische Modelle.....	26
3.4	Bestimmung der Dispersionskoeffizienten.....	29
3.4.1	Grundlegende Betrachtungen .....	29
3.4.2	Methoden zur Ermittlung der Dispersion .....	33
<b>4</b>	<b>KONZEPTE ZUR BESCHREIBUNG DER MAKRODISPERSION</b>	<b>38</b>
4.1	Stochastische Methoden.....	39
4.1.1	Grundbegriffe der Stochastik.....	39
4.1.2	Perturbations- oder Störungsmethode .....	41
4.2	Monte-Carlo-Methode .....	52

4.3	Fraktale Analyse.....	53
4.4	Fließwegansätze .....	54
4.5	Upskaling-Verfahren .....	55
4.6	Mehrschichtenansätze.....	55
<b>5</b>	<b>TRANSPORT HOHER STOFFKONZENTRATIONEN</b>	<b>57</b>
5.1	Entwicklung konzentrationsabhängiger Konzepte.....	57
5.2	Modelle zur Beschreibung dichteabhängiger Stoffströme.....	60
5.2.1	Thermodynamischer Ansatz.....	60
5.2.2	Stochastischer Ansatz .....	64
5.3	Diskussion und Vergleich nichtlinearer Dispersionsansätze.....	65
<b>6</b>	<b>EXPERIMENTE IN EINEM STOCHASTISCHEN MODELLAQUIFER</b>	<b>67</b>
6.1	Konfiguration des experimentellen Modells.....	67
6.1.1	Aufbau der Versuchsanlage.....	67
6.1.2	Abmessungen und Kenngrößen.....	70
6.1.3	Fließschema.....	71
6.1.4	Versuchsdurchführung .....	72
6.2	Modellsande .....	75
6.3	Messmethoden.....	81
6.3.1	Durchflüsse .....	81
6.3.2	Ermittlung der Konzentrationsverteilung .....	81
6.3.3	Bestimmung der hydraulischen Durchlässigkeit .....	82
6.3.4	Messung der Abstandsgeschwindigkeit und der Porosität .....	84
6.4	Experimentelle Ergebnisse .....	85
6.4.1	Normierte räumliche Konzentrationsausbreitung.....	85
6.4.2	Varianzen der normierten Konzentrationsausbreitung .....	98
6.4.3	Transversale Makrodispersivität.....	102
6.4.4	Diskussion und Vergleich mit dem analytischen Modell .....	109
<b>7</b>	<b>GRUNDLAGEN ZUR NUMERISCHEN MODELLIERUNG</b>	<b>111</b>
7.1	Numerische Methoden.....	111
7.1.1	Finite-Differenzen-Methode (FDM) .....	112
7.1.2	Finite-Elemente-Methode (FEM) .....	117
7.1.3	Charakteristiken-Verfahren .....	119
7.1.4	Particle-Tracking-Verfahren.....	120
7.2	Stabilität und Konsistenz.....	120
7.3	Numerische Dispersion und Oszillationen .....	121
7.4	Verifizierung, Kalibrierung und Prognose .....	123
7.5	Inverse Modellierung .....	125

<b>8</b>	<b>NUMERISCHE UNTERSUCHUNGEN</b>	<b>126</b>
8.1	Strömungs- und Transportmodell SUTRA.....	126
8.2	Konfiguration des numerischen Modells.....	127
8.2.1	Räumliche Diskretisierung .....	127
8.2.2	Zeitliche Diskretisierung .....	129
8.2.3	Numerische Fehler.....	129
8.2.4	Hydraulische Randbedingungen .....	130
8.3	Kalibrierung .....	134
8.3.1	Anpassung des numerischen Modells an das Experiment .....	134
8.3.2	Dichteunabhängige Experimente .....	134
8.3.3	Dichteabhängige Experimente.....	137
8.4	Sensitivitätsanalysen.....	140
8.4.1	Variation der Strömungsgeschwindigkeit.....	141
8.4.2	Lokale Druckvariationen.....	142
8.4.3	Variabilität der Konzentration .....	146
8.4.4	Variabilität der Viskosität.....	151
8.4.5	Variation der korngerüstbedingten Dispersivitäten.....	152
8.4.6	Variation der Heterogenität .....	154
8.4.7	Sensitivitätsmatrix .....	158
<b>9</b>	<b>MONTE-CARLO-SIMULATIONEN</b>	<b>161</b>
9.1	Dichteunabhängige Monte-Carlo-Simulationen .....	161
9.2	Dichteabhängige Monte-Carlo-Simulationen .....	168
9.3	Diskussion und Vergleich mit dem analytischen Modell .....	177
<b>10</b>	<b>ZUSAMMENFASSUNG UND AUSBLICK</b>	<b>180</b>
10.1	Zusammenfassung der Ergebnisse.....	180
10.2	Ausblick auf zukünftige Forschungen.....	183
	<b>LITERATURVERZEICHNIS</b>	<b>185</b>
	<b>ANLAGEN</b>	<b>- 1 -</b>
	<b>Anlage 2:</b> Koordinaten x und y aller Messpunkte in m.	- 2 -
	<b>Anlage 3:</b> Histogramme der ausgewählten Sandpackungen 1 bis 3.	- 3 -
	<b>Anlage 4:</b> Variogramm $\gamma(\xi)$ in a) x-Richtung und b) y-Richtung sowie Korrelogramm $r(\xi)$ in c) x-Richtung und d) y-Richtung für die Sandpackung 1.	- 4 -
	<b>Anlage 5:</b> Variogramm $\gamma(\xi)$ in a) x-Richtung und b) y-Richtung sowie Korrelogramm $r(\xi)$ in c) x-Richtung und d) y-Richtung für die Sandpackung 3.	- 5 -
	<b>Anlage 6:</b> Abhängigkeit der Konzentration $c_o$ von der Leitfähigkeit für das Leitfähigkeitsmessgerät LF 3000.	- 6 -

- Anlage 7:** Experimentelle normierte Konzentrationsverteilung  $c/c_0$  über die relative Höhe des Tankes  $h/h_0$  an den Messebenen 37 und 47 für die Sandpackung 1 und a), b)  $u = 1$  m/d und c), d)  $u = 4$  m/d. - 7 -
- Anlage 8:** Experimentelle normierte Konzentrationsverteilung  $c/c_0$  über die relative Höhe des Tankes  $h/h_0$  an den Messebenen 37 und 47 für die Sandpackung 2 und a), b)  $u = 1$  m/d und c), d)  $u = 4$  m/d. - 8 -
- Anlage 9:** Experimentelle normierte Konzentrationsverteilung  $c/c_0$  über die relative Höhe des Tankes  $h/h_0$  an den Messebenen 37 und 47 für die Sandpackung 2 und a), b)  $u = 8$  m/d. - 9 -
- Anlage 10:** Experimentelle normierte Konzentrationsverteilung  $c/c_0$  über die relative Höhe des Tankes  $h/h_0$  an den Messebenen 37 und 47 für die Sandpackung 3 und a), b)  $u = 1$  m/d und c), d)  $u = 4$  m/d. - 10 -
- Anlage 11:** Experimentelle normierte Konzentrationsverteilung  $c/c_0$  über die relative Höhe des Tankes  $h/h_0$  an den Messebenen 37 und 47 für die Sandpackung 3 und a), b)  $u = 2$  m/d und c), d)  $u = 8$  m/d. - 11 -
- Anlage 12:** SUTRA-simulierte transversale Makrodispersivität in Abhängigkeit von der Fließlänge  $x$  für die Sandpackung 1 und a)  $u = 1$  m/d; b)  $u = 4$  m/d und c)  $u = 8$  m/d. die Sandpackung 1 und a)  $u = 1$  m/d; b)  $u = 4$  m/d und c)  $u = 8$  m/d. - 12 -

# SYMBOLVERZEICHNIS

## EINHEITEN

[-]	dimensionslos
[L]	Längeneinheit
[M <sub>f</sub> ]	Masseneinheit des Fluids
[M <sub>s</sub> ]	Masseneinheit des gelösten Inhaltsstoffes
[T]	Zeiteinheit

## GRIECHISCHE SYMBOLE

$\alpha$	Komponente eines Mehrkomponentensystems
$\alpha_L$	longitudinale Dispersivität [L]
$\alpha_T$	transversale Dispersivität [L]
$\alpha$	Kompressibilität der porösen Matrix [M/(L·T <sup>2</sup> )] <sup>-1</sup>
$\beta$	Kompressibilität des Fluids [M/(L·T <sup>2</sup> )] <sup>-1</sup>
$\beta$	Dichtekoeffizient [-]
$\delta_{ij}$	Kronecker- Konstante ( $\delta_{ij} = 1$ für $i = j$ ; $\delta_{ij} = 0$ für $i \neq j$ )
$\phi$	Wichtungsfaktor [-]
$\phi$	Basisfunktion [-]
$\gamma$	Fluss- oder Strömungsfaktor [-]
$\gamma(\xi)$	Variogramm
$\lambda$	Wellenlänge [L]
$\lambda_x$	longitudinale Korrelationslänge [L]
$\lambda_y$	transversale Korrelationslänge [L]
$\mu$	dynamische Viskosität [M/(Lj)]
$\nu$	kinematische Viskosität [L <sup>2</sup> /T]
$\rho$	Dichte [M/L <sup>3</sup> ]
$\sigma_c^2$	Varianz der räumlichen Konzentrationsausbreitung [L <sup>2</sup> ]
$\sigma_{lnk}^2$	Varianz der lognormalen Permeabilitätsverteilung [-]
$\xi$	Separationsvektor
$\psi$	Stromfunktion [L <sup>2</sup> /T]
$\psi$	Wahrscheinlichkeit [-]
$\psi$	Gewichtsfunktion [-]
$\bar{\nabla}$	Nabla- Operator: $\nabla = (\partial / \partial x, \partial / \partial y, \partial / \partial z)$

## LATEINISCHE SYMBOLE

A	Fläche [L <sup>2</sup> ]
A <sub>ij</sub>	Tensor der Makrodispersivität [L]
A <sub>L</sub>	longitudinale Makrodispersivität [L]
A <sub>T</sub>	transversale Makrodispersivität [L]
c	Konzentration: Massenfraktion [M <sub>s</sub> /M <sub>f</sub> ]
C(ξ)	Kovarianzfunktion
d <sub>m</sub>	mittlerer Korndurchmesser [L]
D <sub>ij</sub>	Dispersionstensor [L <sup>2</sup> /T]
D <sub>L</sub>	longitudinaler Dispersionskoeffizient [L <sup>2</sup> /T]
D <sub>T</sub>	transversaler Dispersionskoeffizient [L <sup>2</sup> /T]
D <sub>0</sub>	molekulare Diffusionskonstante [L <sup>2</sup> /T]
g	Erdbeschleunigung [L/T <sup>2</sup> ]
G <sub>i</sub>	Vektor des Konzentrationsgradienten [L <sup>-1</sup> ]
h	Piezometerhöhe [L]
J	hydraulischer Gradient [-]
j	Massenfluss [M/(L <sup>2</sup> ·T)]
k	Permeabilität [L <sup>2</sup> ]
K	hydraulische Durchlässigkeit [L/T]
M <sub>i,j,k</sub>	zentrales räumliches Moment [L <sup>n</sup> ]
N	Schwerkraftzahl [-]
n <sub>e</sub>	effektive Porosität [-]
Pe	Pecletzahl [-]
Q	Durchfluss [M/(L <sup>3</sup> ·T)]
Q <sub>P</sub>	externer Zufluss (positiv) oder externer Abfluss (negativ) [M/(L <sup>3</sup> ·T)]
Ra	Rayleighzahl [-]
Re	Reynoldszahl [-]
S <sub>w</sub>	Sättigung [-]
S <sub>o</sub>	Speicherkoeffizient [L <sup>-1</sup> ]
S <sub>op</sub>	spezifischer Druckspeicherkoeffizient [M/(L·T <sup>2</sup> )] <sup>-1</sup>
t	Zeit [T]
T	Temperatur [°C]
u	Abstands- oder Strömungsgeschwindigkeit [L/T]
v	Darcy- oder Filtergeschwindigkeit [L/T]
V	Volumen [L <sup>3</sup> ]
Z	Zufallsprozess

# 1 Einleitung

## 1.1 Problemstellung und Stand der Forschung

Da das Grundwasser mit ca. 70 % den größten Anteil an der Trinkwasserversorgung ausmacht, spielt sein Schutz eine entscheidende Rolle. Um das zukünftige Verhalten gelöster Wasserinhaltsstoffe bzw. die Folgen eines hypothetischen Stoffeintrages zu erfassen und eventuelle Schutz- und Sanierungsmaßnahmen zu planen, müssen die Strömungs- und Transportprozesse im Untergrund qualitativ und quantitativ erfasst werden.

Ein wesentlicher Transportprozess - der hier untersucht werden soll - ist die hydrodynamische Dispersion, d.h. die Gesamtheit aller Ausbreitungs- und Vermischungsprozesse von Wasserinhaltsstoffen im Untergrund. Vor ca. 40 Jahren begann man die Dispersion eines Wasserinhaltsstoffes extensiv zu erforschen [u.a. *Josselin de Joug*, 1960; *Scheidegger*, 1958; *Bear*, 1972, 1979]. Aufgrund der Komplexität der Strömungs- und Transportprozesse war es jedoch nicht möglich, eine exakte mathematische Beschreibung auf der mikroskopischen Porenebene aufzustellen. So haben verschiedene Wissenschaftler Modelle entwickelt, die physikalischen Gesetzmäßigkeiten dieser Prozesse makroskopisch zu beschreiben, beispielsweise das grundlegende *Bear-Scheiddeggersche*-Modell der korngerüstbedingten Dispersion [*Bear*, 1972]. Zur makroskopischen Beschreibung der Vermischung wurde ein Dispersionskoeffizient eingeführt, welcher ein Tensor zweiter Ordnung ist und sowohl von den Eigenschaften des Fluids als auch des porösen Mediums abhängt [*Pickens et al.*, 1981; *Sudicky et al.*, 1986; *Dagan*, 1986; *LeBlanc et al.*, 1991; *Boggs et al.*, 1992; *Garabedian et al.*, 1991]. Experimentelle [u. a. *Spitz*, 1985; *Schincariol and Schwartz*, 1990, 1993, 1994, 1997; *Oostrom et al.* 92a,b; *Isok and Humphrey*, 1995; *Oswald et al.*, 1996; *Moser*, 1995], theoretische [u.a. *Thiele*, 1986, 1997] und numerische Untersuchungen [u.a. *Koch*; 1992, 1993; *Koch und Zhang*, 1992; *Opheys*, 1997] haben jedoch gezeigt, dass dieses Modell und das klassische Fick'sche Gesetz, das auf einen linearen Zusammenhang zwischen dem Gradienten der Konzentration und dem Stoffstrom basiert, für höhere Konzentrationen nicht

mehr gültig ist [ *Watson et al*, 2001, 2002; *Schotting et al.*, 1999]. Es traten Phänomene auf, die mit bisherigen Modellen nicht erklärbar waren [*Welty et al.*, 1997]: beispielsweise bewegten sich Salzwasserfahnen von bis zu 100000 ppm sehr langsam am Boden eines Aquifers und veränderten sich kaum [*Hayworth et al.*, 1993]. *Neuman et al.* [1987]; *Neuman and Zhang* [1990]. *Gelhar and Axness* [1983] zeigten, dass die Anisotropie und die Heterogenität eines Aquifers bedeutende Effekte auf das Ausbreitungsverhalten eines gelösten Inhaltsstoffes haben.

Aus physikalischer Sicht treten hier zwei Effekte auf: der durch die hohe Dichte in die Strömungsgleichung eingehende zusätzliche Auftriebsterm lenkt bzw. beeinflusst die Strömungsrichtung, die Inhomogenitäten des Aquifers führen zu örtlichen Schwankungen der Strömungsgeschwindigkeit. Beides kann ein völlig verändertes Ausbreitungs- und Strömungsverhalten gegenüber dem dichteunabhängigen verursachen. Es wird somit notwendig, die Dispersionskoeffizienten  $D_L$  und  $D_T$  in Abhängigkeit von dem Dichtegradienten und der Heterogenität neu zu definieren.

Die Problematik der *dichteabhängigen* Strömungs- und Transportvorgänge findet man in vielen Bereichen der Grundwasserhydrologie, so z.B. bei der Unterschichtung des Grundwassers durch salzhaltige Wässer, der Salzwasserintrusion in Küstenaquifere, dem Salzwasseraufstieg in einen Trinkwasserbrunnen, der Überströmung eines Salzwasserstockes und allgemein dem Transport von Schadstoffen mit unterschiedlicher Dichte.

Je nach der Lage der strömenden Fluide unterscheidet man die stabile, bei der das dichtere unterhalb und die instabile Strömung, bei der sie oberhalb der weniger dichten fließt. Für den instabilen Fall beobachtete man bei schon geringen Dichteunterschieden Instabilitäten, an der Schichtgrenze entstehen Ausbuchtungen, so genannte „Finger“, die sich in der Schicht fortpflanzen. [*Koch*; 1992, 1993, 1994; *Koch und Zhang*, 1992, 1998; *Schincariol and Schwartz*, 1990, 1991, 1993; *Oostrom et al.*, 1992, *Hayworth et al.*, 1993]] Man nimmt eine Vergrößerung der Dispersion mit wachsendem Dichtegradienten an, im stabilen Fall das Gegenteil. Hier wurde eine Verringerung der Vermischungsbreite mit wachsendem Dichteunterschied, sinkender Strömungsgeschwindigkeit, wachsender mittlerer Korngröße sowie wachsender Inhomogenität beobachtet [*u.a. Spitz*, 1985; *Thiele*, 1997].

Eine analytische Beschreibung des Stofftransportes ist für die Praxis oft nicht möglich, da diese sich auf einfache Randbedingungen beschränken und die Komplexität der Prozesse nicht widerspiegeln können. Numerisch-deterministische Modellierungen machen es möglich, durch schrittweise Berechnung der örtlichen und zeitlichen Prozesse mittels analytischer Zusammenhänge die makroskopischen Phänomene zu ermitteln. Problematisch ist jedoch, dass die Kalibrierung eines Transportmodelles – weit stärker als das Strömungsmodell – oft uneindeutig und ohne eine verlässliche Datenbasis nicht sinnvoll ist. Außerdem kann die

Unsicherheit hinsichtlich der räumlichen Verteilung der Strömungs- und Transportparameter nicht berücksichtigt werden. Die deterministisch berechneten Ergebnisse geben eine Aussage über einen konkreten Zustand, sagen aber nichts über die Wahrscheinlichkeit eines Zustandes und seiner Extremwerte aus. Für die Praxis ist gerade dies aber oft wichtig: beispielsweise bei der Festlegung von Trinkwasserschutzonen, bei der Gefährdungsabschätzung eines Schadstofftransportes oder der Sanierung von Altlasten. Mit der stochastischen Modellierung ist diese Möglichkeit gegeben. Es werden keine Einzellösungen gegeben, sondern eine Wahrscheinlichkeitsverteilung der Lösung mit einem Erwartungswert und einer Varianz.

Aus diesem Grund wurden stochastische Modelle der Makrodispersion entwickelt [u.a. *Gelhar & Axness*; 1979, 1983; *Neuman et al.*, 1987; *Dagan*, 1982, 1984, 1989, 1990; *Welty et al.*, 1989, 1991, 2003]. Es wird angenommen, dass die stochastische Verteilung der hydraulische Durchlässigkeiten die das Strömungs- und Transportverhalten am stärksten beeinflussende Bodenkenngröße ist. Demgegenüber können die Variationen in der Porosität und den örtlichen Dispersionen vernachlässigt werden [*Gelhar & Axness*; 1983, 1997; *Kinzelbach*, 92]. Die stochastische Modellierung betrachtet das Ensemble aller Aquiferrealisationen, deren Verteilung der Durchlässigkeiten die selben statistische Eigenschaften (Mittelwert, Varianz, Korrelationslängen) hat wie diejenige des realen und untersucht deren Zusammenhänge mit denen der daraus resultierenden Systemzustandsgrößen wie Konzentrations- und Geschwindigkeitsverteilung.

## 1.2 Ziel dieser Forschungsarbeit

Während die dichteunabhängige Tracerströmung im homogenen und heterogenen [u.a. [*Josselin de Joung*, 1960; *Scheidegger*, 1958; *Bear*, 1972, 1979; *Freeze et al.*, 1975; *de Marsily*, 1987; *Güven et al.*, 1986; *Spitz*; 1985] und die *dichteabhängige* im homogenen [*Hayworth et al.*, 1993] und heterogenen [u.a. *Koch*, 1992, 1993; *Koch and Zhang*, 1992; *Schincariol and Schwartz*, 1990, 1994, 1997; *Thiele*, 1997] bereits umfassend untersucht und dokumentiert wurden, fehlt es insbesondere an verifizierten Kenntnissen in der dichteinduzierten Strömung im stochastisch heterogenen Untergrund.

Dies ist das Hauptziel dieser vorliegenden Arbeit: die qualitative und quantitative Beschreibung der gekoppelten Effekte der Fluidichte und des Heterogenitätsgrades auf die Dispersion eines gelösten Stoffes. Grundlage ist die oben genannte stochastische Methode, die in der vorliegenden Arbeit experimentell und numerisch verifiziert und ergänzt wird.

Analytische und numerische Modellansätze allein sind in ihrer Aussagekraft sehr variabel. Erst das Experiment erbringt den endgültigen Test, ob eine Theorie die Realität widerspiegeln kann [*Bear*, 1972]. Aufgrund der Komplexität der im Untergrund stattfindenden Prozesse müssen diese im ersten Schritt getrennt voneinander erforscht werden. In einem in der

Wasserbauhalle der Universität Kassel zuvor gebauter Modelltank aus Plexiglas (10 m x 1.2 m x 0.1 m) wurden die physikalische Prozesse der Dispersion und Advektion durch entsprechende Randbedingungen von anderen Prozessen (Abbau, Zerfall und Adsorption) isoliert. Umfangreichen Versuchsreihen an drei repräsentativen stochastischen Modellaquiferen dienten dazu, den Einfluss der Fluidichte und der Heterogenität auf die Dispersionskoeffizienten zu untersuchen.

Ein weiteres Ziel ist die numerische Verifizierung und Kalibrierung des Laborversuches. Wir erhalten damit ein numerisches Modell, mit dem wir die verschiedensten Strömungs- und Transport-Szenarien simulieren können. Sensitivitätsanalysen zeigen, wie stark die Variation einzelner Größen das Fließ- und Transportverhalten im Untergrund beeinflussen kann. Damit ergibt sich in diesem Projekt die einmalige Möglichkeit, Laborexperimente sowohl mit analytischen als auch mit numerischen Modellen zu koppeln und die Vor- und Nachteile der jeweiligen Konzepte zu definieren.

Um die Effekte, die durch die Dichte und Heterogenität verursacht werden, mit denen durch die Geschwindigkeiten verursachten nicht zu verwischen, müssen auch für Tracer und in homogenen Medium experimentelle und numerische Untersuchungen gemacht werden. Damit erhalten wir Vergleichssituationen, auf die wir die oben genannten Einflüsse beziehen können.

Die stochastische Modellierung beantwortet folgende Fragen: Welchen Einfluss haben die einzelnen statistischen Eigenschaften (Varianzen, Mittelwert, Korrelationslängen in x und z-Richtung) auf das Ausbreitungsverhalten in einem typischen Aquifer? Welcher dieser Einflüsse ist dominant? Es soll ein in die Dispersionsgleichung eingehender heterogenitätsbedingter Term ermittelt werden, der diese Einflüsse berücksichtigt.

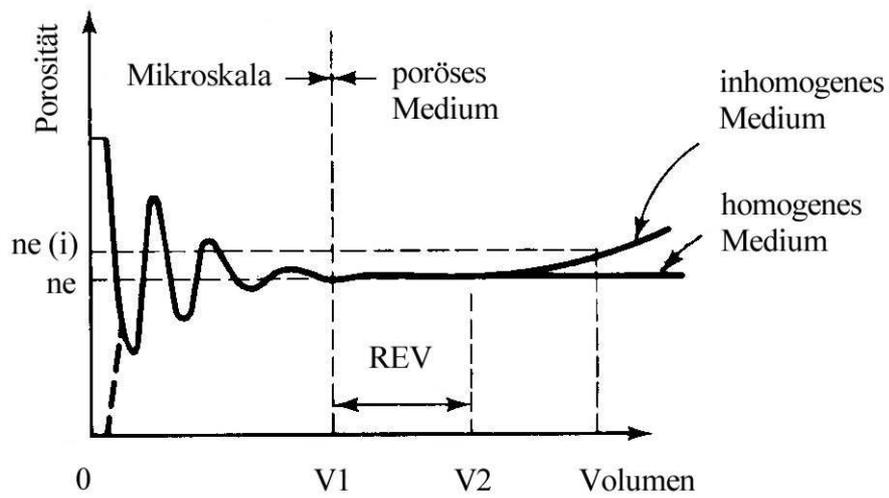
Die vorliegende Arbeit gliedert sich in drei Hauptteile: den theoretischen, den experimentellen und den numerische Teil zur Lösung oben genannter Problematik. In den ersten fünf Kapiteln werden die allgemeinen Grundlagen zu den Prozessen im Untergrund und zu den Dispersionsprozessen im Besonderen gegeben, die Modelle zur Beschreibung der Makrodispersion und zum Transportes hoher Stoffkonzentrationen beschrieben. Kapitel 6 zeigt den Aufbau, Ablauf, und die Resultate der experimentellen Versuche an einem Modelltank. Die Grundlagen zur numerischen Modellierung werden im 7. Kapitel beschrieben, anschließend im Kapitel 8 die numerischen Simulationen und Sensibilitätsanalysen, im Kapitel 9 die Monte-Carlo-Simulationen und deren Ergebnisse aufgeführt, diskutiert und sofern möglich, mit den analytischen und experimentellen Lösungen verglichen. In Kapitel 10 werden Schlussfolgerungen dieser Forschungen gezogen, Resultate diskutiert und Vorschläge für zukünftige Forschungen gemacht.

# 2 Strömung und Transport in porösen Medien

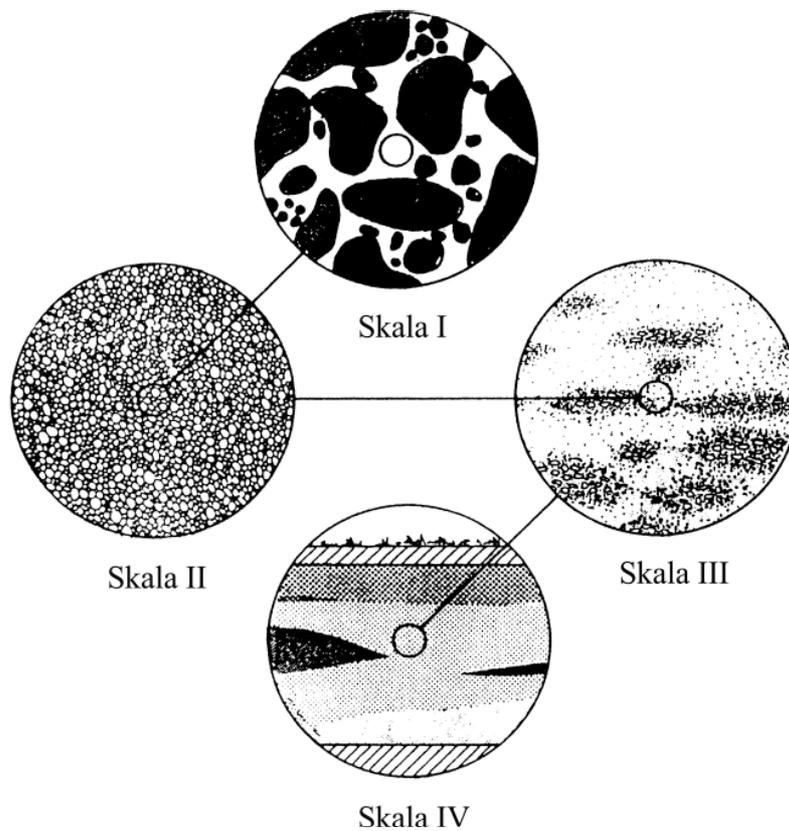
## 2.1 Strömungsprozesse

### 2.1.1 Betrachtungsebenen und Phänomene

Das exakte Erfassen der Strömungsvorgänge ist Grundlage jeder Berechnung des Stofftransportes im Untergrund. Aus mikroskopischer Sicht besteht der Untergrund aus einem diskontinuierlichen Medium aus Festkörpern (Gesteinsmaterial) und Hohlräumen (Poren), dem porösen Medium. Das Fluid bewegt sich innerhalb der Poren des Mediums in Abhängigkeit von der Porengeometrie und Reibung an der Porenoberfläche mit unterschiedlicher Geschwindigkeit. Eine exakte Bestimmung der räumlichen Geschwindigkeiten ist somit praktisch nicht möglich. Es muss ein Übergang vom mikroskopischen zum makroskopischen Betrachtungsmaßstab geschaffen werden: das örtlich differenzierte poröse Medium wird durch ein äquivalentes Kontinuum ersetzt, das *repräsentative Elementarvolumen (REV)* [Bear, 1972]. Durch eine statistische Mittelung aller effektiven Parameter über dieses Volumen wird damit eine Weiterbehandlung mit den Mitteln der Kontinuumsmechanik ermöglicht. Bild 2.1 zeigt diesen Mittelungsprozess am Beispiel der Porosität. Sind bei kleinem Volumen noch starker Schwankungen vorhanden, schwächen diese sich jedoch mit zunehmendem Volumen ab, bis ein konstanter Bereich, ein Volumen  $V_1$ , erreicht wird, bei dem das Medium als Kontinuum betrachtet werden kann. Die obere Grenze des REV's ist ein charakteristisches Volumen  $V_2$ , bei dem das poröse Medium nicht mehr als homogen angenommen werden kann.



**Bild 2.1:** Definition des repräsentativen Elementarvolumens anhand der Porosität [nach Bear, 1979]



**Bild 2.2:** Betrachtungsskalen des Untergrundes [nach Spitz, 1985]

Es ergeben sich für die Berechnung der Strömungs- und Transportprozesse im Untergrund folgende 4 Betrachtungsskalen [Bild 2.2 nach Spitz, 1985]:

*Mikroskala* (Skala I). Auf dieser Skala überwiegen die Poreneffekte, es können keine repräsentierenden Mittelwerte angegeben werden. Strömungs- und Transportprozesse werden hier über Navier-Stokes-Gleichungen anhand der Größe und Form der Einzelkörner berechnet.

*Repräsentatives Elementarvolumen* (Skala II). Im REV sind die physikalischen Prozesse über oben beschriebene mittlere Größen berechenbar. Wir befinden uns im Bereich:  $V_1 \leq \text{REV} \leq V_2$ .

*Makroskala* (Skala III). Ist  $V_2 \leq V \leq V_3$ , nehmen die Inhomogenitäten zu, das Medium kann jetzt nicht mehr ausschließlich über gemittelte Parameter repräsentiert werden. Die Berechnung der Prozesse geschieht hier auf der Basis einer geostatistischen Betrachtung der Parameterverteilung. Die in dieser Arbeit vorgestellten experimentellen und numerischen Untersuchungen beziehen sich auf diesen Bereich.

*Feldskala* (Skala IV). Für  $V > V_3$  beeinflusst der geologische Aufbau und die Schichtung des Untergrundes zunehmend die Strömungs- und Transportprozesse. Die analytische Berechnung wird komplizierter und muss an die gegebene geologische Situation angepasst werden. Hier können die für die Skala III gefundenen Gesetzmäßigkeiten angewendet und geprüft werden. Folgende im REV gemittelte Eigenschaften des Untergrundes werden für die weitere Betrachtung wichtig:

Die *Porosität*  $n$  [-] entspricht dem Anteil des Hohlraumvolumens  $V_H$  am Gesamtvolumen  $V_G$  des repräsentativen Elementarvolumens:

$$n = \frac{V_H}{V_G} \quad (2.1)$$

Für die Praxis relevant ist jedoch nur die nutzbare Porosität  $n_e$ , d.h. der entwässerbare Anteil des Hohlraumvolumens, wobei  $n_e \leq n$  ist.

Die *Sättigung*  $S_w$  [-] ist der Anteil des mit Fluid gefülltem Hohlraum-Volumens  $V_F$ :

$$S_w = \frac{V_F}{V_H} \quad (2.2)$$

Die Sättigung liegt zwischen 0 und 1. Die Untersuchungen für die hier vorliegende Arbeit beziehen sich ausschließlich auf ein vollgesättigte Medium mit  $S = 1$ .

Die *Permeabilität*  $k$  [ $L^2$ ] ist eine reine Bodenkenngröße und beschreibt den Widerstand, den ein Gestein dem Fluss eines homogenen Fluids entgegensetzt. Berücksichtigt man zusätzlich dazu die Eigenschaften des Fluids, erhält man die *hydraulische Durchlässigkeit*  $K$  [ $L/T$ ]:

$$K = k \cdot \frac{\rho g}{\mu} \quad (2.3)$$

- $\rho$  Dichte des Fluids [ $M L^{-3}$ ]  
 $g$  Erdbeschleunigung  $g = 9.81 \text{ m/s}^2$   
 $\mu$  dynamische Viskosität des Fluids [ $M L^{-1} T^{-1}$ ]

Die *Transmissivität*  $T$  [ $L^2/T$ ] eines Aquifers definiert seine zweidimensionale Durchlässigkeit über die Mächtigkeit des Aquifers  $m$  [ $L$ ]:

$$T = K \cdot m \quad (2.4)$$

### 2.1.2 Herleitung der Strömungsgleichung

Zur formalen Beschreibung der Grundwasserströmung werden zwei Gesetze verwendet:

1. das Kontinuitätsgesetz und
2. das Darcy-Gesetz.

#### Das Kontinuitätsgesetz

Das Kontinuitätsgesetz beschreibt die Massenerhaltung eines Inhaltsstoffes in einem Systemvolumen. Es besagt, dass die Summe aller Zu- und Abflüsse über die Volumengrenzen gleich dem gespeichertem Fluid sowie der externen Flüsse ist. Die Massenerhaltung des Inhaltsstoffes Wasser im Systemvolumen ergibt folgende Gleichung:

$$\frac{\partial}{\partial t} (n_e \rho S_w) = -\bar{\nabla} \cdot (\rho \mathbf{v}) + Q_p \quad (2.5)$$

- $\mathbf{v}$  Tensor der Darcy- bzw. Filtergeschwindigkeit [ $L T^{-1}$ ]  
 $Q_p$  externer Zufluss (positiv) oder externer Abfluss (negativ) [ $M/(L^3 \cdot T)$ ]  
 $\bar{\nabla}$  Nabla Operator  $\bar{\nabla} = i \frac{\partial}{\partial x} + j \frac{\partial}{\partial y} + k \frac{\partial}{\partial z}$

#### Das Darcy-Gesetz

Das Gesetz von Darcy beschreibt den Zusammenhang zwischen Filtergeschwindigkeit  $\mathbf{v}$  und dem Gradienten der Standrohrspiegelhöhen  $h$ . Vereinfacht für den eindimensionalen,

stationären, und isotropen Fall wurde von Darcy im Jahre 1856 folgender Zusammenhang gefunden:

$$v_x = -K \frac{\partial h}{\partial x} \quad (2.6)$$

wobei  $\partial h / \partial x$  [-] der Gradient der Standrohrspiegelhöhe  $h$  in  $x$ -Richtung ist. Die Standrohrspiegelhöhe – auch Piezometerhöhe genannt – ist dabei wie folgt definiert:

$$h = \frac{p}{\rho g} - z \quad (2.7)$$

wobei  $p$  der Druck [Pa] und damit  $h_p = p / (\rho g)$  die Druckhöhe [L] sowie  $z$  die geodätische Höhe [L] ist. Die Gleichung (2.6) ist zugleich auch Definition der hydraulischen Durchlässigkeit  $K$  und kann zu dessen experimenteller Ermittlung verwendet werden. Die allgemeine Form des Darcy-Gesetzes für anisotrope, *dichteabhängige* Strömungen ergibt:

$$\mathbf{v} = -\frac{1}{\mu} \mathbf{k} \cdot (\nabla p - \rho \mathbf{g}) \quad (2.8)$$

wobei die Filtergeschwindigkeit  $\mathbf{v}$  und die Erdbeschleunigung  $\mathbf{g}$  als Vektoren sowie die Permeabilität  $\mathbf{k}$  als Tensor zu betrachten sind. Gleichung (2.8) macht deutlich, dass die Strömungsprozesse und damit auch die Transportprozesse neben den Bodeneigenschaften wie Permeabilität und Porosität ebenso von den Fluideigenschaften wie Dichte und Viskosität abhängen. Das Darcy-Gesetz in seiner vereinfachten und allgemeinen Form (Gleichungen 2.6 und 2.8) gilt jedoch nur unter der Voraussetzung hinreichend kleiner Reynoldszahlen  $Re$  [Bear 1972]:

$$Re = \frac{d_{50} \cdot u}{\nu} \leq 10 \quad (2.9)$$

Dabei ist  $d_{50}$  der mittlere Korndurchmesser [L],  $\nu$  die kinematische Viskosität [ $L^2/T$ ] mit  $\nu = \mu / \rho$  sowie  $u$  die Abstandgeschwindigkeit [L/T]. In dieser Arbeit bewegen sich die Reynoldszahlen der Strömungs- und Transportversuche zwischen  $0.007 < Re < 0.06$  und damit im Gültigkeitsbereich des Darcy-Gesetzes.

Die *Filtergeschwindigkeit*  $v$  (oder Darcy-Geschwindigkeit) bezeichnet den Durchfluss  $Q$  durch einen betrachteten Flächenquerschnitt  $A$ :

$$v = \frac{Q}{A} \quad (2.10)$$

Wird diese Filtergeschwindigkeit nur auf den Porenraum bezogen, ergibt sich die *Abstandsgeschwindigkeit*  $u$  mit:

$$u = \frac{v}{n_e} \quad (2.11)$$

## Strömungsgleichung

Die allgemeine Gleichung einer stationären dreidimensionalen Strömung kann für den wie in der hier vorliegenden Arbeit gesättigten Fall mit  $S_w = 1$  wie folgt aus dem Kontinuitäts- und dem Darcy-Gesetz gebildet werden:

$$\frac{\partial}{\partial t}(n_e \rho) = \bar{\nabla} \cdot \left( \rho \frac{1}{\mu} \mathbf{k} \cdot (\bar{\nabla} p - \rho \mathbf{g}) \right) + Q_P \quad (2.12)$$

Bei instationärer Strömung ist sowohl die Porosität des porösen Mediums  $n_e$  als auch die Dichte des Fluids  $\rho$  vom Druck  $p$  abhängig. Es kommt durch eine Änderung des Druckes  $p$  bzw. der Standrohrspiegelhöhe  $h$  zur Änderung des gespeicherten Wasservolumens je Volumeneinheit. Somit wird aus (2.12) folgende instationäre Strömungsgleichung:

$$S_{op} \frac{\partial p}{\partial t} = \bar{\nabla} \cdot \left( \rho \frac{1}{\mu} \mathbf{k} \cdot (\bar{\nabla} p - \rho \mathbf{g}) \right) + Q_P \quad (2.13)$$

wobei  $S_{op}$  der spezifischer Druckspeicherkoeffizient  $[M/(L \cdot T^2)]^{-1}$  ist, aus dem sich der Speicherkoeffizienten  $S_o [L^{-1}]$  wie folgt berechnet wird:

$$S_o = \rho |g| S_{op} \quad (2.14)$$

Der spezifischer Druckspeicherkoeffizient  $S_{op}$  ergibt sich aus den Kompressibilitäten  $\alpha$  der porösen Matrix  $[M/(L \cdot T^2)]^{-1}$  und  $\beta$  des Fluids  $[M/(L \cdot T^2)]^{-1}$  wie folgt:

$$S_{op} = (1 - n_e) \alpha + n_e \beta \quad (2.15)$$

Reines Wasser hat bei einer Temperatur  $T = 20^\circ\text{C}$  eine Kompressibilität von  $\beta \sim 4.47 \times 10^{-10} [\text{kg}/(\text{m} \cdot \text{s}^2)]^{-1}$  [Voss, 2003]. Der Faktor  $\alpha$  bewegt sich zwischen  $\alpha \sim 10^{-10} [\text{kg}/(\text{m} \cdot \text{s}^2)]^{-1}$  für Felsgestein bis zu  $\alpha \sim 10^{-7} [\text{kg}/(\text{m} \cdot \text{s}^2)]^{-1}$  für Ton [Freeze and Cherry, 1979; Voss, 2003]. Für gespannte Aquifere können die Speicherkoeffizienten durch Pumpversuche oder mittels inverser Modellierung (siehe Abschnitt 7.5) bestimmt werden.

Ist die Strömung dichteunabhängig, kann die Gleichung (2.13) mit  $S_o = \rho|g|S_{op}$  und  $K = k \cdot \rho g / \mu$  wie folgt vereinfacht werden:

$$S_o \frac{\partial h}{\partial t} - \bar{\nabla} \cdot (K \bar{\nabla} h) = Q^* \quad (2.16)$$

wobei  $Q^* = Q_p / \rho$  [ $T^{-1}$ ] der volumetrische Quellterm des Fluids ist. Ist die Strömung stationär, d.h. der Druckgradient ändert sich wie in dieser vorliegenden Arbeit zeitlich nicht, ergibt sich unter Vernachlässigung des Quelltermes mit  $Q^* = 0$  folgende vereinfachte Strömungsgleichung:

$$\bar{\nabla} \cdot (K \bar{\nabla} h) = 0 \quad (2.17)$$

sowie für den *dichteabhängigen* Fall:

$$\bar{\nabla} \cdot (\rho v) = 0 \quad (2.18)$$

## Rand- und Anfangsbedingungen

In den vorherigen Ausführungen wurde gezeigt, dass Grundwasserströmungen durch Differenzialgleichungen zweiter Ordnung beschrieben werden können. Dieses System ist jedoch ohne weitere Bedingungen unbestimmt. Es werden Rand- und Anfangsbedingungen für die unbekannt Variablen angegeben, um das Problem lösbar zu machen. Während Randbedingungen Aussagen zu den Variablen an den Volumengrenzen machen, beschreiben die *Anfangsbedingungen* die Strömung zum Zeitpunkt  $t = 0$ :

$$h = h(x, y, z, t = 0) \quad (2.19)$$

Es werden folgende 3 Arten von Randbedingungen unterschieden:

*Randbedingung 1. Art* (auch Dirichlet-Randbedingung). Die Piezometerhöhe  $h$  auf der Berandung  $\Omega$  ist in Abhängigkeit von der Zeit ist bekannt:

$$h = h(t) \text{ auf } \partial\Omega \quad (2.20)$$

*Beispiele:* Sohlflächen von Gewässern; Grenzflächen zwischen stark und schwer durchlässigen Schichten, wenn die Betrachtungsebene die schwer durchlässige ist; abgesenkter Grundwasserstand in unvollkommenen Filterbrunnen.

*Randbedingung 2. Art* (auch Neumann-Randbedingung). Die Zu- und Abflüsse  $v_n$  über eine Berandung  $\Omega$  sind bekannt und entsprechen nach dem Darcy-Gesetz dem hydraulischen Gradienten  $\partial h / \partial n$  senkrecht zur Berandung:

$$\frac{\partial h}{\partial n} = h(t) \text{ auf } \partial\Omega \quad (2.21)$$

*Beispiele:* Sohlflächen von Gewässern; undurchlässige Ränder:  $v_n = 0$ ; Grenzflächen zwischen stark und schwer durchlässigen Schichten, wenn die Betrachtungsebene die stark durchlässige ist; Symmetriestromflächen; künstliche Einbauten (Spundwände, Bauwerke).

*Randbedingung 3. Art* (auch Cauchy-Randbedingung). Zwischen der Fläche bekannter Potentialverteilung und der Berandung  $\Omega$  existieren konstante oder variable Widerstände  $\alpha_\Omega, \beta_\Omega$ :

$$\alpha_\Omega h + \beta_\Omega \frac{\partial h}{\partial n} = h(t) \text{ auf } \partial\Omega \quad (2.22)$$

*Beispiele:* kolmatierte, d.h. halbdurchlässige Sohlschichten von Oberfläche-Gewässern und Versickerungsbecken sowie kolmatierte Brunnenwandungen und -filter. Außerdem gibt es bewegliche Ränder, längs derer die Piezometerhöhe mit der geodätischen Höhe gekoppelt ist, beispielsweise freie Grundwasseroberflächen mit und ohne Zufluss oder Sickerflächen.

## 2.2 Transportmechanismen

Stofftransportprozesse im porösen Medium sind instationäre Prozesse von Zustandsänderungen hinsichtlich der Konzentrationen der im Grundwasser gelösten Inhaltsstoffe, die durch das komplexe Zusammenwirken von physikalischen, chemischen und biologischen Prozessen verursacht werden. Da eine analytische Beschreibung des Transportes aufgrund seiner Vielfältigkeit für den allgemeinen Fall praktisch nicht möglich ist, werden folgende Unterscheidungen getroffen:

1. *nach der Lage des durchströmten Bereiches im Untergrund:*

- a) den Transport durch die ungesättigte Zone, Sickerwassertransport und
- b) den Transport durch die gesättigte Zone, den eigentlichen Grundwassertransport;

2. *nach der Stoffaktivität:*

- a) ein hydrodynamisch neutraler Stoff, wenn er die Dichte und Viskosität des Wassers nicht verändert oder
- b) ein hydrodynamisch aktiver Stoff, wenn er die Fluideigenschaften durch seine veränderte Dichte oder Viskosität beeinflusst;

### 3. nach dem Lösungsgrad des Stoffes:

a) der gelöste Transport, wenn der Stoff vollständig im Wasser gelöst ist und mit diesem eine Phase bildet (auch Einphasen- Transport genannt) sowie

b) der nicht- gelöste Transport, wenn der Stoff nicht oder nur unvollständig im Wasser gelöst ist und eine eigene Phase bildet (auch Mehrphasen- Transport genannt);

### 4. nach der Erhaltung der Masse des Stoffes:

a) konservativer Prozess, wenn sich die Masse des Stoffes nicht ändert (Advektion, Dispersion) oder

b) nicht-konservativer Prozess, wenn sich die Masse des Stoffes ändert bzw. verringert (Abbau/Zerfall, Adsorption).

In den Ausführungen dieser Arbeit wird nur der gelöste Transport sowohl neutraler als auch aktiver Wasserinhaltsstoffe in der Grundwasserzone untersucht, auf die Behandlung der anderen Fälle wird hier nicht näher eingegangen. Folgende grundlegende Transportprozesse werden unterschieden:

1. Advektion
2. hydrodynamische Dispersion
3. Adsorption
4. Abbau- und Zerfall.

## 2.2.1 Advektion

Die Advektion beschreibt den Transport eines Wasserinhaltsstoffes mit der Wasserströmung. Die Stofffahne wird dabei nicht verändert, sondern nur in Strömungsrichtung mit der Abstandsgeschwindigkeit  $u$  verschoben. Der Prozess Advektion ist somit in seiner reinen Form identisch mit der Grundwasserströmung (siehe Kapitel 2.1.). Konvektion ist die durch Dichte- und Viskositätsänderung hervorgerufene Grundwasserströmung. In natürlichen Aquiferen kommt die reine Advektion nicht vor. Sie kann jedoch näherungsweise angenommen werden, wenn die Strömungsgeschwindigkeit sehr groß wird.

## 2.2.2 Hydrodynamische Dispersion

Die hydrodynamische Dispersion ist die konservative Ausbreitung und Vermischung eines Wasserinhaltsstoffes, die nicht durch den konvektiven Transport verursacht wird. Sie wird in molekulare Diffusion und Dispersion unterteilt.

## Diffusion

Durch eine regellose Bewegung der Moleküle, der Brown'schen Molekularbewegung, bewirkt die molekulare Diffusion einen Massenfluss proportional zum Konzentrationsgefälle und damit eine Vermischung. Sie wird durch das Fick'sche Gesetz beschrieben:

$$\mathbf{j}_0 = -\rho D_0 \bar{\nabla} c \quad (2.23)$$

$\mathbf{j}_0$	diffuser Massenfluss [M/(L <sup>2</sup> · T)]
$D_0$	molekularer Diffusionskoeffizient [L <sup>2</sup> /T]
$\bar{\nabla} c$	Konzentrationsgradient [L <sup>-1</sup> ]

Die molekulare Diffusion ist unabhängig von Richtung und Betrag der Strömung und findet auch in unbewegter Flüssigkeit statt. Somit ist die Diffusion der vorherrschende Prozess, wenn die Strömungsgeschwindigkeiten sehr klein sind.

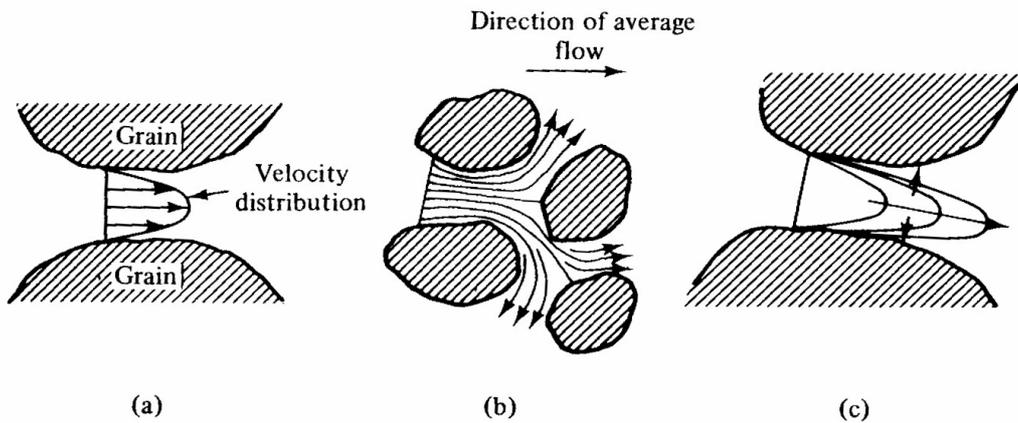
Die molekulare Diffusion ist im porösen Medium einem Widerstand ausgesetzt und ist hier demzufolge geringer als im freien Wasser. Dies wird über einen Tortuositätsfaktor  $\tau$  korrigiert. Der molekulare Diffusionskoeffizient kann für die meisten Stoffe wie folgt angenommen werden:

$$D_0 \approx 10^{-9} \frac{\text{m}^2}{\text{s}}. \quad (2.24)$$

## Dispersion

Während es in der Mikroebene nur die Advektion und die Diffusion gibt, kommt im REV ein weiterer Transportprozess hinzu, der durch die mikroskopische Variabilität der Porengeschwindigkeit verursacht wird, die korngerüstbedingte Dispersion. Sie entsteht durch komplexes Zusammenwirken folgender Ursachen (Bild 2.3):

- (a) unterschiedliche Geschwindigkeiten in den Porenkanälen durch parabolische Geschwindigkeitsverteilung;
- (b) unterschiedliche Geschwindigkeitsrichtungen durch unterschiedlich lange Transportwege;
- (c) unterschiedliche Geschwindigkeitsbeträge durch unterschiedliche Porendurchmesser.



**Bild 2.3:** Ursachen der Dispersion [Bear, 1979]

So ist die mechanische Dispersion im engeren Sinne kein echter physikalischer Prozess, sondern nur eine makroskopische Erscheinung, um die unmöglich zu erfassenden mikroskopischen Fließgeschwindigkeiten und Wege der einzelnen Stoffe mathematisch zu beschreiben. Die Dispersion ist, phänomenologisch betrachtet, die statistische Abweichung der Wanderung einer Komponente gegenüber ihrem statistischen Mittelwert [Beims, 1983]. Da die Geschwindigkeitsvariationen mit der Fließlänge zunehmen, ist die Dispersion maßstabs- bzw. skalenabhängig. Während es in einem homogenen porösen Medium nur die korngerüstbedingte Dispersion gibt, kommt es im realen heterogenen Aquifer aufgrund der geostatistischen Verteilung der Permeabilitäten zu einem weiteren Dispersionsanteil.

Da in einem natürlichen Grundwasser die molekulare Diffusion nicht von der mechanischen Dispersion getrennt werden kann, werden beide in der hydrodynamischen Dispersion zusammengefasst:

$$\mathbf{D} = D_0 + \mathbf{D}_1 \quad (2.25)$$

wobei  $\mathbf{D}$  der so genannte Dispersionskoeffizient [ $L^2/T$ ] ist und  $D_1$  der Anteil des Dispersionskoeffizienten, der sich aus der mechanischen Dispersion ergibt. Das Fick'sche Gesetz für den dispersen Massenstrom  $\mathbf{j}_d$  [ $M/(L^2 \cdot T)$ ], der sowohl Anteile aus der molekularen Diffusion (2.19) als auch aus der Dispersion enthält, kann wie folgt definiert werden:

$$\mathbf{j}_d = -\rho \mathbf{D} \bar{\nabla} c \quad (2.26)$$

Der Dispersionskoeffizient ist als Tensor zu betrachten und beschreibt sowohl Eigenschaften des Fluids als auch des porösen Mediums.

### 2.2.3 Sorption

Als Sorption wird die Interaktion zwischen gelöstem Stoff und Kornmatrix bezeichnet. Stoffteilchen aus dem Fluid lagern sich an der Oberfläche des Festkörpers an (Adsorption) oder lösen sich von dieser ab (Desorption). Die Beziehung zwischen gelösten und gebundenen Konzentrationen hängt hauptsächlich von der Art der Wasserinhaltsstoffe, vom Aufbau und der Oberfläche des porösen Mediums sowie dem Umgebungsmilieu ab und wird mathematisch durch Isotherme beschrieben. Folgende grundlegende Ansätze gibt es:

$$\text{Freundlich-Isotherme:} \quad c_a = k \cdot c_w^n \quad (2.27)$$

$$\text{Langmuir-Isotherme:} \quad c_a = \frac{c_\infty \cdot c_w}{k + c_w} \quad (2.28)$$

$$\text{Lineare Isotherme:} \quad c_a = k \cdot c_w \quad (2.29)$$

wobei  $c_a$  die adsorbierte Konzentration des Stoffes,  $c_w$  die im Wasser gelöste Konzentration des Stoffes ist sowie  $k$  die Sorptionsisotherme. Zwar ist der eigentliche Sorptionsprozess ein nichtlinearer Vorgang, er kann aber in den meisten praktischen Fällen als linearer approximiert werden. Durch die Sorptionsprozesse kommt es zu einer Verzögerung bzw. Verlangsamung der Partikel-Geschwindigkeit, der so genannten Retardation, die über einen Retardationsfaktor  $R$  in die Transportgleichung eingeht.

### 2.2.4 Biochemischer Abbau und radioaktiver Zerfall

Unter Abbau- bzw. Zerfallsprozesse versteht man die Veränderungen des Wasserinhaltsstoffes, die durch biologische chemische, biochemische oder radioaktive Prozesse entstehen. Das Zusammenspiel dieser Prozesse ist sehr komplex und hängt von einer Vielzahl von Faktoren ab (Art und Konzentration des Stoffes, Mikroorganismen, Milieubedingungen etc.), die jedoch in einem vollständigen die Natur repräsentierenden Modell berücksichtigt werden müssen.

Einfache Abbauprozesse lassen sich als Reaktion erster Ordnung wie folgt berechnen:

$$\frac{\partial c}{\partial t} = -\lambda \cdot c \quad (2.30)$$

Die Abbaukonstanten  $\lambda$  sind nur für wenige Schadstoffe bekannt und werden durch Kurvenanpassung an gemessene Daten gewonnen. Beim radioaktiven Zerfall kann sie aus Halbwertszeit des jeweiligen Stoffes gewonnen werden.

## 2.3 Allgemeine Transportgleichung

Die analytische Beschreibung des Stofftransportes kann analog der Strömungsgleichung aus den Masse- und Energieerhaltungssätzen sowie den Massenflussgleichungen von Darcy, Fourier und Fick hergeleitet werden. Energieerhaltungssatz und Fouriersgesetz - die die Temperaturänderung behandeln - werden hier nicht betrachtet, da in dieser Arbeit von einer konstanten Temperatur von  $T = 20^\circ\text{C}$  ausgegangen wird und sich alle Berechnungen auf diese Temperatur beziehen. Während bei der Strömungsgleichung die Masse des Wassers die Erhaltungsgröße war, ist es bei der Transportgleichung die Konzentration des im Wasser gelösten Stoffes. Für den Fall, dass wie in der vorliegenden Arbeit Retardationseffekte, Abbau und Zerfall sowie externe Quellen und Senken durch entsprechende Randbedingungen ausgeschlossen werden, ergibt sich folgende vereinfachte Erhaltungsgleichung für die Änderung der Konzentration eines gelösten Inhaltsstoffes:

$$\frac{\partial(\rho c)}{\partial t} = -\bar{\nabla} \cdot (\mathbf{j}_{\text{ad}} + \mathbf{j}_{\text{d}}) \quad (2.31)$$

wobei  $\mathbf{j}_{\text{ad}}$  [ $\text{M}/(\text{L}^2 \cdot \text{T})$ ] der advective (2.32) und  $\mathbf{j}_{\text{d}}$  [ $\text{M}/(\text{L}^2 \cdot \text{T})$ ] der disperse Massenstrom (2.33) des gelösten Inhaltsstoffes ist:

$$\mathbf{j}_{\text{ad}} = \rho \mathbf{u} c \quad (2.32)$$

$$\mathbf{j}_{\text{d}} = -\rho \mathbf{D} \bar{\nabla} c \quad (2.33)$$

sowie  $\mathbf{D}$  der Tensor der Dispersion [ $\text{L}^2/\text{T}$ ]. Setzt man die Gleichungen für die Massenströme (2.32) und (2.33) in diese Erhaltungsgleichung (2.31) ein, erhält man mit  $n_e = \text{konstant}$  und  $\mathbf{v} = \mathbf{u} \cdot n_e$  die Gleichung für den Transport eines gelösten Inhaltsstoffes:

$$n_e \frac{\partial(\rho c)}{\partial t} + \bar{\nabla}(\rho \mathbf{v} c) = \bar{\nabla} \cdot (n_e \rho \mathbf{D} \bar{\nabla} c) \quad (2.34)$$

wobei  $c$  die Massenfraktion [ $\text{M}_s/\text{M}_f$ ] ist, d.h. die Masse des gelösten Inhaltsstoffes  $\text{M}_s$  pro Masse eines Fluids  $\text{M}_f$ .

Die Strömungsgleichung (2.13) ist über die Darcy-Geschwindigkeit  $\mathbf{v}$  (2.8) mit der Transportgleichung (2.34) gekoppelt. Ist die Stoffkonzentration des gelösten Wasserinhaltsstoffes gering, verändern sich deren Dichte und Zähigkeit im Vergleich zum reinen Wasser nur vernachlässigbar wenig. In diesem Falle besteht die Koppelung beider Gleichungen nur in einer Richtung: von der Strömungsgleichung zur Transportgleichung und das Gleichungssystem kann separat berechnet werden. Ist der Inhaltsstoff jedoch in hoher Konzentration vorhanden, ist diese Vereinfachung nicht mehr möglich. Bei dem wie in dieser

Arbeit verwendeten Wasserinhaltsstoff NaCl vergrößert sich die Dichte  $\rho$  als auch die Viskosität  $\mu$  mit steigender Konzentration  $c$  und führt damit über eine veränderte Darcy-Geschwindigkeit (2.8) zur Rückkoppelung der Transportgleichung mit der Strömungsgleichung. Die Zusammenhänge zwischen den Zustandsgrößen Dichte  $\rho$  und Viskosität  $\mu$  und der Konzentration  $c$  des Inhaltsstoffes werden über Zustandgleichungen definiert.

## 2.4 Zustandsgleichungen

Üblicherweise werden lineare Beziehungen zwischen den Zustandsgrößen und den Konzentrationen angenommen, die sich aus Taylorreihenentwicklungen erster Ordnung ergeben:

$$\rho(c) = \rho_0 + \frac{(\rho - \rho_0)}{\rho_s} c \quad (2.35)$$

$$\mu(c) = \mu_0 + \frac{(\mu - \mu_0)}{\mu_0} c \quad (2.36)$$

$\rho_0$  Dichte des Süßwassers [ $M L^{-3}$ ]

$\mu_0$  dynamische Viskosität des Süßwassers [ $M L^{-1} T^{-1}$ ]

Das hat den Vorteil, dass höhere Terme von  $c$  in den Gleichungen verschwinden, ist jedoch nur für kleine und mittelgroße Konzentrationen geeignet. Über den gesamten Konzentrationsbereich betrachtet gibt eine exponentielle Kurve die beste Anpassung [Oswald, 1998]. Mögliche und häufig verwendete Annäherungen sind nach Holzbecher [1998] für die Dichte  $\rho$  und die dynamische Viskosität  $\mu$  folgende:

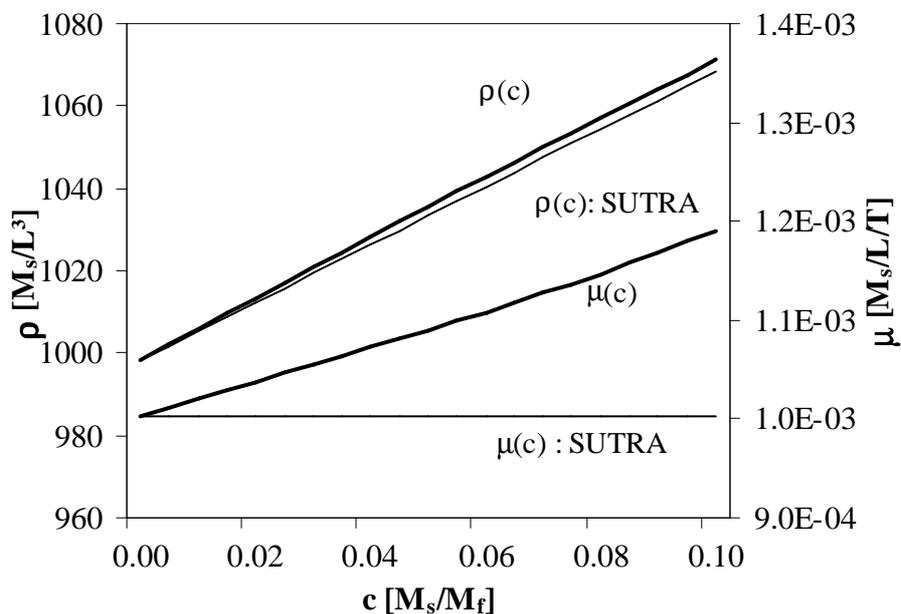
$$\rho(c) = 1000 \cdot \left(1 + 0.0805c - 6.5 \cdot 10^{-6} (T - 4 + 220c)^2\right) \quad (2.37)$$

$$\mu(c) = \mu_0 \cdot \left(1 + 1.85c - 4.1c^2 + 44.5c^3\right) \quad (2.38)$$

wobei  $T$  die Temperatur ist,  $c$  die Massefraktion [ $M_s/M_f$ ] und  $\mu_0 = 0.001002$  kg/m/s die dynamische Viskosität des Fluids mit einer Konzentration von  $c = 0$ . Das für die numerischen Untersuchungen dieser vorliegenden Arbeit verwendete Programm SUTRA benutzt die lineare Proportionalität für die Dichte sowie konstante Viskositäten:  $\mu(c) = \mu_0$ . Bild 2.4. zeigt die exponentiellen Funktionen (2.37) und (2.38) im Vergleich mit den im SUTRA verwendeten. Es wird erkennbar, dass die lineare Beziehung der Dichte im SUTRA in dem in dieser Arbeit relevanten Konzentrationsbereich bis 0.1 kg/kg eine gute Annäherung an oben genannte exponentielle ist. Ob die Annahme konstanter Viskositäten gerechtfertigt ist, bleibt zunächst noch offen (Abschnitt 8.3.5). Daneben gibt es auch noch eine Abhängigkeit der

Dichte und Viskosität eines Wasserinhaltsstoffes von der Temperatur und dem Druck des jeweiligen Ortes. Die Abhängigkeit vom Druck kann näherungsweise vernachlässigt werden bzw. wird für die Dichte über einen Speicherterm berücksichtigt. Der Temperatureinfluss auf die Dichte und Viskosität kann aus experimentellen Ergebnissen über entsprechende Beziehungen berechnet werden, wird jedoch in dieser Arbeit aufgrund der annähernd gleich bleibenden Werte am Versuchsstand vernachlässigt. Weitergehende Informationen über die verschiedenen Ansätze zur Dichte- und Viskositätsabhängigkeit können u. a. *Holzbecher* [1998], *Oswald* [1998] entnommen werden.

In einer so genannten *Oberbeck-Boussinesq-Approximation* wird die Strömungs- und Transportkonfiguration insofern vereinfacht, dass 1. nur die Dichte von der Konzentration des Stoffes abhängig ist, die Viskosität bleibt demgegenüber konstant und 2. die Dichteänderungen nur im Auftriebsterm des Darcy-Gesetzes (2.8) berücksichtigt werden und in allen anderen Termen der Strömungs- und Transportgleichung (2.34) vernachlässigt werden können. Diese Näherung wird in der Grenzschichttheorie freier Fluidströmungen und der Wärmetransporttheorie fast ausschließlich angewendet [*Thiele*, 1997], gilt jedoch nur für geringe Variationen der Konzentrationen.



**Bild 2.4:** Exponentielle und lineare Änderung der Dichte und der dynamischen Viskosität in Abhängigkeit von der Konzentration  $c$  [ $M_s/M_f$ ].

# 3 Grundlagen zur Beschreibung der Dispersion

## 3.1 Skalenabhängigkeit der Dispersion

Damit die Stofftransportgleichung analytisch oder numerisch lösbar wird, müssen die Transportparameter Dispersionskoeffizient und Diffusion bekannt sein. Während die Diffusion einfach zu bestimmen ist und ihr Einfluss mit zunehmender Fließlänge und Strömungsgeschwindigkeit abnimmt, sind die Koeffizienten der mechanischen Dispersion nicht konstant, sondern skalen- und maßstabsabhängig. Nach *Dagan* [1986] können 3 Maßstäbe werden: 1. der Längenmaßstab, 2. der Maßstab der Heterogenität und 3. der Maßstab der Messungen und Berechnungen.

### 3.1.1 Abhängigkeit vom Längenmaßstab $L$

Die Strömungs- und Transportprozesse sind durch die Längenskala der räumlichen Ausbreitung charakterisiert. Dabei werden prinzipiell drei Skalen unterschieden: die Laborskala, die lokale und regionale Skala. Von der Porenskala, in der nur die korngerüstbedingte Dispersivität vorkommt, nimmt mit wachsender Transportentfernung der Einfluss der Inhomogenitäten des Aquifers zu und die so genannte Makrodispersion setzt ein. Nach hinreichend großer Transportentfernung von ca. 10 bis 100 Korrelationslängen [*Kinzelbach*, 1992] nähert sich diese einem asymptotischen Wert an, der Fick'schen *Makrodispersivität*. Demgegenüber können die Dispersionsprozesse im präasymptotischen Bereich nicht mit dem Fick'schen Gesetz beschrieben werden [u.a. *Neuman et al.*, 1987]. Dabei zeigen die Eigenwerte des Dispersionstensors unterschiedliches Verhalten. Die longitudinale Dispersivität wächst proportional zur zurückgelegten Transportentfernung bzw. zur Größe des Längenmaßstabes (Bild 3.2). Wohingegen die Querdispersivitäten kein

ausgeprägtes Skalenverhalten zeigen (Bild 3.1). Nach *Neuman et al.* [1987], *Thiele* [1993] und *Opheys* [1997] nehmen sie nach anfänglichem Wachstum bei asymptotischen Verhältnissen wieder bis auf die Größe der korngerüstbedingten Querdispersivität ab.

### 3.1.2 Abhängigkeit vom Maßstab der Heterogenität I

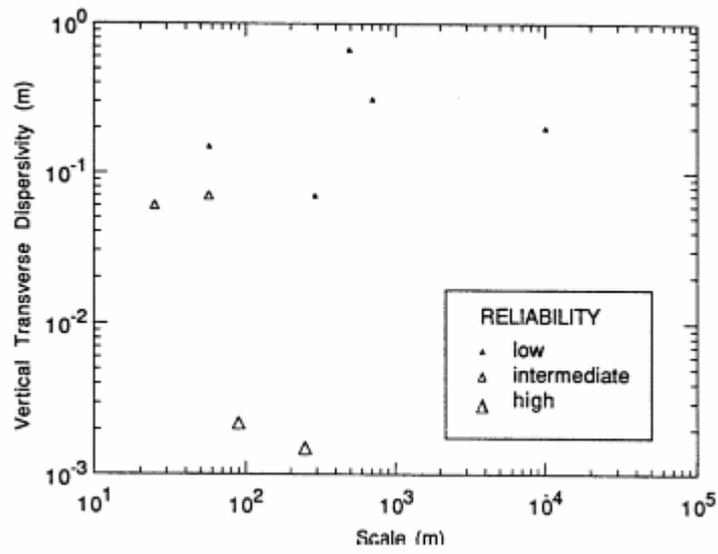
Der Maßstab der Heterogenität I beschreibt die räumliche Korrelation der räumlichen Verteilung einer Größe, hier der Permeabilitätsverteilung und kann wie folgt definiert werden [nach *Dagan*, 1986]:

$$I_{\ln k} = \frac{\int_0^{\infty} C_{\ln k}(r) dr}{\sigma_{\ln k}^2} \quad (3.1)$$

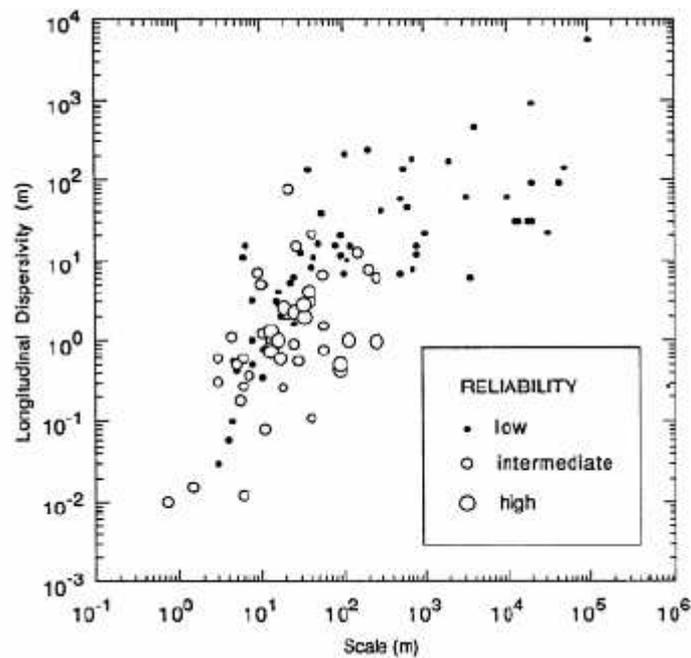
wobei  $C(r)$  die Kovarianzfunktion der räumlichen Permeabilitätsverteilung  $Y = \ln k$  ist,  $\sigma_{\ln k}^2$  die Varianz der lognormalen Verteilung der Permeabilität und  $r$  ein Abstandsvektor zwischen zwei Punkten  $r = x_i - x_j$ . Die drei zu den vorgenannten Skalen des Längenmaßstabes korrespondierenden Skalen von  $I_{\ln k}$  sind: die Porenskala, die lognormale Permeabilitätsskala sowie die integrale lognormale Transmissivität. Aquifereigenschaften und die entsprechenden Variablen werden als Zufallsfunktionen betrachtet, die zwei Bedingungen erfüllen: 1. die Bedingung der Stationarität des Prozesses und 2. muss die Längenskala sehr viel größer als die Skala der Heterogenität sein:  $L \gg I$ .

### 3.1.3 Abhängigkeit vom Maßstab der Messungen und Berechnungen

Der zusätzliche Maßstab der Messungen und Berechnungen hängt von der Wahl des Mess- und Erkundungsverfahrens ab, das zur Ermittlung der Transportparameter verwendet wird und davon, welche räumliche Mittelung für das Berechnungsverfahren erfolgt. In beiden Fällen interessiert der Bereich der Längenskala, über welche die entsprechenden Variablen gemittelt werden. Das Hauptziel der Untersuchungen ist es, die Strömungs- und Transportprozesse einerseits einer einheitlichen Theorie anzunähern, andererseits aber auch die spezifischen Aspekte jeder einzelnen Skala zu untersuchen.



**Bild 3.1:** Skalenabhängigkeit der vertikalen transversalen Dispersivität [Gelhar et al., 1992]



**Bild 3.2:** Skalenabhängigkeit der longitudinalen Dispersivität [Gelhar et al., 1992]

### 3.2 Dispersionskoeffizienten

Die Dispersion kann auf jeder Skalenebene durch einen Tensor 2. Stufe beschrieben werden [Scheidegger, 1961; Bear 1972]:

$$\mathbf{D} = \begin{vmatrix} D_{xx} & D_{xy} & D_{xz} \\ D_{yx} & D_{yy} & D_{yz} \\ D_{zx} & D_{zy} & D_{zz} \end{vmatrix} \quad (3.2)$$

Die Dispersionskoeffizienten  $D_{ij}$  des Dispersionstensors  $\mathbf{D}$  verknüpfen die Strömungseigenschaften mit den Eigenschaften des porösen Mediums und lassen sich für den allgemeinen Fall wie folgt berechnen:

$$D_{ij} = \sum_{k,m} (a_{ij})_{k,m} \frac{u_k \cdot u_m}{|\bar{u}|} \quad (3.3)$$

$a_{ij}$  Dispersivitäten bzw. Dispersionslängen [L]

Ist das poröse Medium isotrop und liegt eine der Koordinatenachsen in Hauptströmungsrichtung, vereinfacht sich die Dispersionsmatrix zu:

$$\mathbf{D} = \begin{vmatrix} D_L & 0 & 0 \\ 0 & D_T & 0 \\ 0 & 0 & D_T \end{vmatrix} \quad (3.4)$$

Und für den in dieser Arbeit relevanten zweidimensionalen Fall ergibt sich:

$$\mathbf{D} = \begin{vmatrix} D_L & 0 \\ 0 & D_T \end{vmatrix} \quad (3.5)$$

wobei  $D_L$  die longitudinalale Dispersion  $D_L$  (entlang der Strömungsrichtung) und  $D_T$  die transversale Dispersion (senkrecht bzw. normal zur Strömungsrichtung) sind, die wie folgt definiert werden können:

$$D_L = a_L |u| \quad (3.6)$$

$$D_T = a_T |u| \quad (3.7)$$

Dieser Dispersionsansatz (Gleichung 3.2 bis 3.7) gilt prinzipiell auch für ein anisotropes Medium, wobei sich hier die Dispersionslängen nicht mehr in zwei Parameter ausdrücken lassen, sondern wesentlich komplexer sind.

### 3.3 Klassische Dispersionsmodelle

Geschlossene analytische Lösungen für die dreidimensionale Transportgleichung und die mathematische Beschreibung der Dispersion sind sehr kompliziert und existieren nur für eine Auswahl an Grundwasserszenarien mit vereinfachten Annahmen, wie beispielsweise eine stationäre Strömung, Homogenität der Dispersionskonstanten sowie Isotropie des Durchlässigkeitstensors. Um diese Prozesse dennoch mathematisch zu beschreiben wurden in den letzten Jahrzehnten verschiedene Modelle entwickelt, die prinzipiell wie folgt einzuteilen sind [Moser, 1987]:

1. geometrische und geometrisch-statistische Modelle,
2. Wahrscheinlichkeitsmodelle,
3. Kontinuummodelle sowie
4. Stochastische Modelle.

#### 3.3.1 Geometrische und geometrisch- statistische Modelle

Die geometrischen und geometrisch- statistischen Modelle, die den mikroskopischen Porenraum betrachten, waren sie ersten Ansätze zur Lösung des Dispersionsproblems [Taylor, 1954; Aris, 1954; De Josselin de Jong, 1958, Bear and Bachmat, 1967, Saffmann, 1960]. Die komplexe Struktur des porösen Mediums wird dabei durch geometrische Annahmen soweit vereinfacht, bis die Lösung der Strömungs- und Transportgleichung über Navier-Stokes-Ansätze möglich wird. Da die Dispersion ihre Ursache in der Geschwindigkeitsvariabilität im komplexen Gefüge des porösen Mediums hat, sind diese Modelle jedoch ungeeignet, die Dispersion im porösen Medium zu beschreiben.

#### 3.3.2 Wahrscheinlichkeitsmodelle

Den geometrischen Modellen stellt Scheidegger [1958] ein Modell zufälliger Ereignisse gegenüber. Jedem Flüssigkeitsteilchen im Koordinatensystem  $(x', t')$  wird eine zufällige Geschwindigkeit  $u$  zugeordnet, die von anderen Orten unabhängig ist. Diese wird ersetzt durch die Gesamtheit aller möglichen Geschwindigkeiten, die alle Fluidteilchen im porösen Medium aufweisen können. Ist die verstrichene Zeitspanne groß genug, entspricht die Funktion  $\Psi$  einer Gaussverteilung:

$$\frac{\partial \psi(x', t)}{\partial t'} = D \frac{\partial^2 \psi(x', t')}{\partial x'^2} \quad (3.8)$$

Die Konzentration  $c$  an einem bestimmten Ort ist die Wahrscheinlichkeit  $\Psi$ , mit der dort ein Teilchen zu finden ist. Transformiert man diese Gleichung in das Koordinatensystem  $(x, t)$  ergibt sich ergibt sich mit:

$$x = x' + ut' \quad (3.9)$$

folgende bekannte eindimensionale Dispersionsgleichung:

$$\frac{\partial c}{\partial t} + u \frac{\partial c}{\partial x} = D \frac{\partial^2 c}{\partial x^2} \quad (3.10)$$

Wobei die Konzentration  $c$  an einem Ort die Wahrscheinlichkeit  $\Psi$  ist, mit der an dieser Stelle ein Teilchen der Flüssigkeit zu finden ist.

### 3.3.3 Kontinuums-Modelle

In diesem Dispersionsmodell wird das poröse Medium durch ein Kontinuum angenähert [Bear, 1972; Hassanizadeh and Gray, 1979a]. Hier lassen sich die Strömungsgeschwindigkeit  $u$  und die Konzentration  $c$  als Mittelwerte  $(\bar{u}, \bar{c})$  über den Porenraum und deren jeweiligen örtlichen Variationen  $(\delta u, \delta c)$  ausdrücken:

$$u = \bar{u} + \delta u \quad (3.11)$$

$$c = \bar{c} + \delta c \quad (3.12)$$

Es wird von der Transportgleichung im mikroskopischen Porenbereich (Skala 0) ausgegangen. Hier existieren nur zwei grundlegende Transportmechanismen: die Konvektion und die Diffusion:

$$\frac{\partial c}{\partial t} + \bar{\nabla} \cdot (\mathbf{u}c) = \bar{\nabla} \cdot (D_0 \bar{\nabla} c) \quad (3.13)$$

Durch Einsetzen von (3.11 und 3.12) in (3.13) ergibt sich im REV (Skala I) folgende Transportgleichung:

$$\frac{\partial(\bar{c} + \delta c)}{\partial t} + \bar{\nabla} \cdot (\bar{\mathbf{u}}\bar{c} + \bar{\mathbf{u}}\delta c + \delta \mathbf{u}\bar{c} + \delta \mathbf{u}\delta c) = \bar{\nabla} \cdot (D_0 \bar{\nabla}(\bar{c} + \delta c)) \quad (3.14)$$

Der Mittelwert dieser Gleichung (3.14) ist die Transportgleichung für das repräsentative Elementarvolumen:

$$\frac{\partial \bar{c}}{\partial t} + \bar{\nabla} \cdot (\bar{\mathbf{u}}\bar{c} + \overline{\delta \mathbf{u}\delta c}) = \bar{\nabla} \cdot (D_0 \bar{\nabla} \bar{c}) \quad (3.15)$$

Die Gleichung (3.15) enthält im Vergleich zur Gleichung (3.13) für die mikroskopische Ebene im REV einen zusätzlichen dispersen Massenstrom, der sich aus den Geschwindigkeitsvariationen innerhalb des REV ergibt. Der Gesamtstrom im REV besteht demzufolge aus einem konvektivem, einem diffusen und einem dispersen Anteil. Der disperse Massestrom kann über das Fick'sche Gesetz analog dem diffusen als linear proportional zum gemittelten Konzentrationsgradienten beschrieben werden:

$$\overline{\delta \mathbf{u} \delta c} = -\mathbf{D}_I \cdot \bar{\nabla} c \quad (3.16)$$

Der Faktor  $\mathbf{D}_I$  ist hierbei ein dem Diffusionskoeffizienten ähnlicher Dispersionstensor im REV, der korngerüstbedingte Dispersionstensor. Somit erhalten wir im homogenen porösen Medium folgende Transportgleichung für einen Inhaltsstoff:

$$\frac{\partial c}{\partial t} + \bar{\nabla} \cdot (\bar{\mathbf{u}} c) = \bar{\nabla} \cdot ((\mathbf{D}_0 + \mathbf{D}_I) \bar{\nabla} c) \quad (3.17)$$

Die Gleichungen (3.16) und (3.17) und die Definition dieses Tensors  $\mathbf{D}$  ist jedoch nur unter der Annahme eines homogenen Repräsentativen Elementarvolumens gültig

### 3.3.4 Stochastische Modelle

Für Untersuchungsbereiche, deren Länge sehr viel größer als die Länge  $L$  als obere Grenze des REV sind, wurden stochastische Modellkonzepte entwickelt, bei der die Transportparameter als stochastische Variablen, d.h. räumliche Zufallsvariablen betrachtet werden [u.a. *Gelhar and Axness*, 1983; *Gelhar*, 1983, 1986, 1993; *Dagan*, 1982, 1984, 1987, 1988; *Neumann et al.*, 1987; *Welty et al.*, 2003;]. Es wird davon ausgegangen, dass die räumliche Verteilung der Durchlässigkeiten prozessbestimmend ist, die Auswirkungen der räumlichen Verteilung der Porositäten und lokalen Dispersivitäten sind demgegenüber gering und vernachlässigbar. Im realen Aquifer findet man eine einzige Realisation einer unbekanntenen Verteilung der Durchlässigkeiten. Die stochastische Modellierung betrachtet dabei das Ensemble aller Aquifereigenschaften mit denselben statistischen Eigenschaften wie diejenige des tatsächlichen Aquifers und berechnet daraus die mittleren Größen der abhängigen Zustandsgrößen und deren Varianzen. Grundsätzlich gibt es bisher zwei Ansätze, die Strömungs- und Transportprozesse stochastisch zu betrachten:

1. die Methode nach Lagrange (Particle-Tracking-Methode) und
2. die Methode nach Euler (Perturbationsmethode).

Diese beiden Methoden unterscheiden sich dabei in der relativen Bewegung der Teilchen. Während bei der Methode nach Lagrange die Koordinaten eines sich bewegenden Partikels

als zeitabhängige Funktion betrachtet werden, untersucht man bei dem Euler'schen Ansatz den Zustand an bestimmten fixen Punkten, wenn die Partikel diese Punkte passieren.

### Die Methode nach Lagrange

Grundlage dieser Methode sind nicht teilbare Partikel, die ein zufälliges Konzentrationsfeld repräsentieren [Dagan, 1982, 1984, 1987,1997]:

$$\Delta c(x, t) = \frac{\Delta M}{n_e} \delta(x - X_t) \quad (3.18)$$

wobei  $M$  die Masse des Partikels ist,  $c$  die Partikel als Masse des gelösten Stoffes pro Volumen des Fluids,  $X_t = dX/dt$  die zufällige Verschiebung des Partikels von seinem Ursprung  $x$  ist und  $\delta$  die Dirac-Verteilung. Die Verschiebung  $X_t$  genügt folgender Differentialgleichung:

$$\frac{dX_t}{dt} = V(X_t) + V_d \quad (3.19)$$

wobei  $V_d$  ein Brown'scher Prozess ist und die molare Diffusion repräsentiert. Der Prozess  $X_d = \int V_d dt$  entspricht einer Normalverteilung mit einem Erwartungswert von Null und einer Varianz  $X_{d,ij} = 2D_{ij}t$ , wobei  $D_{ij}$  ( $i, j = 1, 2, 3$ ) der Tensor der korngerüstbedingten Dispersionskoeffizienten ist.

Vollständige analytische Lösungen dazu wurden u.a. von Dagan [1984, 1987,1988] und Neuman et al. [1987] vorgestellt. Nachteilig bei dieser Methode ist, dass sie nur für einen Bereich großer Pecletzahlen gilt und für Varianzen der lognormalen Permeabilitäten kleiner als Eins.

### Die Methode nach Euler

Die Methode nach Euler beruht auf einem störungstheoretischen Ansatz [u.a. Naff, 1990; Gelhar and Axness, 1979, 1983; Welty et al., 2003]. Dieser basiert auf der Grundannahme, dass sich eine stochastische Variable aus einem konstanten Mittelwert (Erwartungswert) und den Fluktuationen zusammensetzt. Die Variablen der Transportgleichung eines homogenen porösen Mediums (3.17) werden wie folgt gestört:

$$\ln k = \overline{\ln k} + \ln k' \quad v = \bar{v} + v' \quad c = \bar{c} + c' \quad (3.20)$$

wobei der Erwartungswert der Fluktuationen gleich Null ist. Setzt man die Gleichungen (3.20) in die differentiale Transportgleichung des homogenen porösen Mediums ein (2.34) ein, ergibt sich für  $n_e = \text{konstant}$  und  $\mathbf{u} = \mathbf{v}/n_e$  folgender Gleichung:

$$\frac{\partial(\bar{c} + c')}{\partial t} + \bar{\nabla} \cdot (\bar{\mathbf{u}}\bar{c} + \bar{\mathbf{u}}c' + \mathbf{u}'\bar{c} + \mathbf{u}'c') = \bar{\nabla} \cdot (\mathbf{D}\bar{\nabla}(\bar{c} + c')) \quad (3.21)$$

Den Erwartungswert aus der gesamten Transportgleichung im heterogenen Medium (3.21) ist folgender:

$$\frac{\partial \bar{c}}{\partial t} + \bar{\nabla} \cdot (\overline{\bar{\mathbf{u}}\bar{c} + \bar{\mathbf{u}}c' + \mathbf{u}'\bar{c} + \mathbf{u}'c'}) = \bar{\nabla} \cdot (\mathbf{D}\bar{\nabla}\bar{c}) \quad (3.22)$$

Mit  $\overline{\mathbf{u}'\bar{c}} = 0$  und  $\overline{\bar{\mathbf{u}}c'} = 0$  erhält man folgendes:

$$\frac{\partial \bar{c}}{\partial t} + \bar{\nabla} \cdot (\bar{\mathbf{u}}\bar{c}) = \bar{\nabla} \cdot (\mathbf{D}\bar{\nabla}\bar{c} - \mathbf{j}_h) \quad (3.23)$$

wobei  $\mathbf{j}_h = E\{v'(x)c'(x,t)\}$  und  $\mathbf{D}$  der korngerüstbedingte Dispersionstensor ist. Subtrahiert man Gleichung (3.22) von (3.21) und vernachlässigt Terme höherer Ordnung, so erhält man folgende Gleichung für die Fluktuationen:

$$\frac{\partial c'}{\partial t} + \bar{\nabla} \cdot (\mathbf{u}'c') = \bar{\nabla} \cdot (\mathbf{D}\bar{\nabla}c') + \mathbf{w}(x,t) \quad (3.24)$$

Während die Gleichung (3.23) der deterministischen Transportgleichung (2.34) entspricht, stellt die Gleichung (3.24) eine Beziehung zwischen den Fluktuationen der Konzentrationen und den Strömungsgeschwindigkeiten  $\mathbf{w}(x,t) = -\mathbf{u}' \cdot \bar{\nabla}\bar{c}$  her. Die Lösung der Gleichung ist somit der Mittelwert der Konzentrationen für ein Ensemble an Aquiferrealisationen. Im Vergleich zur Stofftransportgleichung in einem homogenen Medium tritt hier ein weiterer Term  $\mathbf{N} = E\{\mathbf{u}'(x)c'(x,t)\}$  auf, der den zusätzlichen dispersen Massenfluss  $\mathbf{j}_h$  [ $M/(L^2 \cdot T)$ ] beschreibt, der sich aus den Inhomogenitäten innerhalb der makroskopischen Skala ergibt:

$$\mathbf{j}_h = -\mathbf{u} \cdot A_{ij} \bar{\nabla}c \quad (3.25)$$

wobei der  $A_{ij}$  der makroskopische Dispersionstensor ist, der durch die Inhomogenitäten eines Aquifers entsteht. Damit ergibt sich folgende makroskopische Transportgleichung eines Inhaltsstoffes im heterogenen porösen Medium:

$$\frac{\partial \bar{c}}{\partial t} + \bar{\nabla} \cdot (\bar{\mathbf{u}}\bar{c}) = \bar{\nabla} \cdot ((\mathbf{D}_I + \mathbf{u}A_{ij})\bar{\nabla}c) \quad (3.26)$$

Erkennbar wird, dass sich die Dispersionstensenoren jeweils aus dem Produkt aus Konzentrations- und Geschwindigkeitsabweichungen im jeweiligen Betrachtungs-Maßstab beschreiben lassen.

### 3.4 Bestimmung der Dispersionskoeffizienten

#### 3.4.1 Grundlegende Betrachtungen

##### Dimensionsanalyse

Die Dispersionskoeffizienten können aus experimentellen und numerischen Transportversuchen bestimmt werden. Vor der Durchführung von hydraulischen Modellversuchen untersucht man zunächst die Abhängigkeiten einzelner physikalischer Größen mittels Dimensionsanalyse. [Rinnert, 1983]. Die im Experiment zu ermittelnde Größe wird dabei als Funktion aller möglichen voneinander unabhängigen Parameter dargestellt. Für den Dispersionskoeffizienten  $D_{ij}$  ergeben sich somit folgende Abhängigkeiten:

$$D_{ij} = f(d_m, u_i, \nu_{1,2}, \rho_{1,2}, D_0, g) \quad (3.27)$$

wobei  $d_m$  [L] der mittlere Korndurchmesser,  $\nu_{1,2}$  [ $L^2/T$ ] die kinematischen Viskositäten und  $\rho_{1,2}$  die Dichte des verdrängten (1) sowie des verdrängenden Fluids (2) sind. Nach dem Buckingham'schen Pi-Theorem kann jede dimensionsmäßig homogene Gleichung, die  $n$  physikalische Parameter mit  $r$  Dimensionen enthält, zu einer Gleichung mit  $n - r$  dimensionslose Größen reduziert werden. Die Transportgleichung enthält  $r = 3$  Dimensionen: Masse, Länge und Zeit. So können die sieben physikalischen Größen in (3.27) auf folgende vier dimensionslose Parameter reduziert werden:

$$\frac{D_{ij}}{D_0} = f\left(\frac{u_i d_m}{D_0}, \frac{\nu_1}{\nu_2}, \frac{\Delta\rho \cdot g \cdot k \cdot H}{\mu_1 \cdot D}\right) \quad (3.28)$$

wobei  $H$  [L] eine normierte Längeneinheit ist. Folgende Kennzahlen werden dabei verwendet.

$$\text{molekulare Pecletzahl} \quad \text{Pe}_{\text{mol}} = \frac{u_x d_m}{D_0} \quad (3.29)$$

$$\text{Rayleighzahl} \quad \text{Ra} = \frac{\Delta\rho \cdot g \cdot k \cdot H}{\mu_1 \cdot D} \quad (3.30)$$

Die molekulare Pecletzahl beschreibt das Verhältnis des dispersen oder advektiven zum diffusen Transport, d.h. bei kleiner Pecletzahl und entsprechend kleinen

Strömungsgeschwindigkeiten überwiegen diffuse Prozesse. In der Mobilitätszahl  $Mo = \nu_1 / \nu_2$  werden die Viskositätsunterschiede beider Fluide dargestellt, wobei man sich hier auf kinematische Viskosität bezieht, weil diese von der Dichte unabhängig und damit nicht schon in einer anderen Kennzahl enthalten ist. Für ein vollständiges Boussinesq-System, das eine Konstanz der Viskosität annimmt, entfällt diese Kennzahl jedoch. Die eigentliche dichtebeschreibende Kennzahl ist die so genannte Rayleighzahl  $Ra$ . Sie definiert das Verhältnis von Schwerkraft und Zähigkeit. In der Literatur zum *dichteabhängigen* Transport werden verschiedene Modifikationen der Rayleighzahl  $Ra$  genannt. *Moser* [1987] verwendet eine modifizierte Rayleighzahl, die im Zähler anstatt der Permeabilität das Quadrat des mittleren Korndurchmessers enthält. Da die Permeabilität eine annähernd quadratische Funktion des mittleren Korndurchmessers ist (Bild 6.10), sind beide dimensionslose Zahlen Ausdruck desselben Sachverhaltes.

$$Ra^* = \frac{\Delta\rho \cdot g \cdot d_m^2}{\mu_1 \cdot u_x} \quad (3.31)$$

*Landman* [2003] stellt eine zur Rayleighzahl analoge Schwerkraftzahl  $N$  vor:

$$N = \frac{\Delta\rho \cdot g \cdot k}{\mu_1 \cdot v} \quad (3.32)$$

Beide Modifikationen verwenden anstelle des Dispersionskoeffizienten eine Geschwindigkeit. Ein anderer Ansatz von *Oostrom* [1992] verwendet im Zähler eine Variable  $H_{dp}$ , die die Dicke einer Stofffahne definiert, bzw. seine Eindringtiefe:

$$Ra^{**} = \frac{H_{dp} K_{sat} \Delta\rho / \rho_0}{n_e D_T} \quad (3.33)$$

wobei  $K_{sat}$  die hydraulische Leitfähigkeit des gesättigten Mediums ist. Eine weitere Methode ist die Verwendung einer so genannten Nichtähnlichkeitsvariable  $\xi$  [*Minkowycz*, 1984, *Thiele*, 1985], die das Verhältnis des Dichtekontrasten zur horizontalen Geschwindigkeit beschreibt bzw. das Maß für das relative Gewicht von freier zu erzwungener Konvektion:

$$\xi = \frac{Ra_x}{Pe_x^{2/3}} \quad (3.34)$$

wobei die ortsabhängigen Terme Pecletzahl  $Pe_x$  und die Rayleighzahl  $Ra_x$  wie folgt sind:

$$Ra_x = \frac{k \cdot g \cdot \Delta\rho \cdot x}{\mu_0 \cdot D_T} \quad Pe_x = \frac{u_x \cdot x}{D_T} \quad (3.35)$$

Die Nichtähnlichkeitsvariable  $\xi$  enthält damit alle relevanten dimensionslosen Parameter in einer Variable.

Die zuvor beschriebenen dimensionslosen Parameter sind jedoch nur für homogene Medien sinnvoll. Für heterogene poröse Medien kommt die Abhängigkeit der Dispersion von der lognormalen Verteilung der Permeabilitäten hinzu. Stochastische Analysen von [u.a. *Gelhar*, 1979; *Gelhar and Axness*, 1983; *Neuman et al.*, 1987; *Welty et al.* 1989, 2003] haben gezeigt, dass die Makrodispersivität  $A_{ij}$  proportional sowohl zur räumlichen Varianz als auch zur Korrelation der Permeabilitätsverteilung ist. Für den Fall, dass ein poröses Medium isotrop heterogen ist, wird deshalb für die Untersuchung der transversalen als auch der longitudinalen Makrodispersivität folgender dimensionsloser Parameter vorgeschlagen:

$$\frac{A_{ij}}{H} \quad (3.36)$$

wobei  $H$  die Heterogenität des porösen Mediums ist:

$$H = \sigma^2 \cdot \lambda_x \quad (3.37)$$

Dabei ist  $\sigma^2$  die Varianz der lognormalen Permeabilitätsverteilung und  $\lambda_x$  die Korrelationslänge dieser Verteilung in  $x$ -Richtung. Für anisotrope Verteilungen kann ein normierter Parameter verwendet werden, der die konzentrationsabhängige Dispersivität auf jene im Tracerfall bezieht:

$$\frac{D_{ij}(c)}{D_{ij}(c=0)} \quad (3.38)$$

denn die Einflüsse von Heterogenität und Dichte sind in diesem Falle - wie später in dieser Arbeit noch erläutert - im Gegensatz zu isotropen Medien komplex kombiniert.

## Strömungsbereiche

In den experimentellen Untersuchungen vieler Wissenschaftler [*Bear*, 1972, 1979; *Pfannkuch*, 1963; *Saffman*, 1960] erkennt man eine deutliche, nahezu lineare Abhängigkeit der Dispersionskoeffizienten von der molekularen Pecletzahl. *Bear* [1979] hat folgenden funktionalen Zusammenhang zwischen dem experimentell ermittelten  $D_L/D_{mol}$  und der molekularen Pecletzahl dargestellt (Bild 3.3).

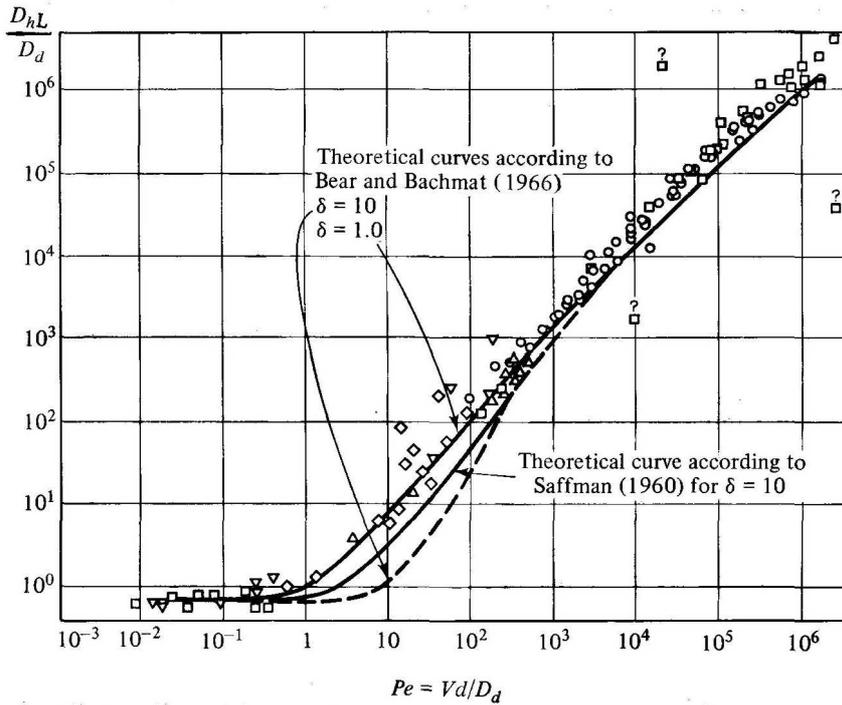
Es ist erkennbar, dass im Bereich geringer molekularer Pecletzahlen ca.  $Pe < 0.5$  die Diffusion der vorherrschende Prozess der hydrodynamischen Dispersion ist, wobei diese sich mit  $u \rightarrow \infty$  einem geschwindigkeitsunabhängigen Wert annähert, dem Dispersions-

koeffizienten. In der so genannten Übergangszone ( $0.5 \leq Pe \leq 5$ ) liegen die Anteile an Diffusion und Dispersion etwa in gleicher Größenordnung vor. Im Bereich  $5 \leq Pe \leq 100$  (und unter Annahme der Gültigkeit des Darcy-Gesetzes:  $Re < 1$ ) überwiegt die mechanische Dispersion, die vertikale Vermischung durch die molekulare Diffusion führt jedoch zu einer Verringerung der Ausbreitung des Inhaltsstoffes in Längsrichtung und bremst damit ein schnelles Ansteigen von  $D_T/D_{mol}$ . Ist die molekulare Pecletzahl im Bereich von ca.  $100 \leq Pe \leq 10^5$ , dominiert die mechanische Dispersion und nur in diesem Bereich ist die lineare Beziehung zwischen der Strömungsgeschwindigkeit und dem Dispersionskoeffizienten über eine nur vom porösen Medium abhängige Konstante zulässig. Annähernd kann sie jedoch auch für molekulare Pecletzahlen zwischen 5 und 100 verwendet werden. Ist  $Pe \geq 10^5$ , wird die Strömung zunehmend turbulent ( $Re > 1$ ) und übersteigt damit die Gültigkeit des Darcy-Gesetzes. Da die realen Grundwasserströmungen weitaus geringer sind, hat dieser Bereich praktisch keine Bedeutung für die Untersuchung der Ausbreitungsvorgänge im Untergrund.

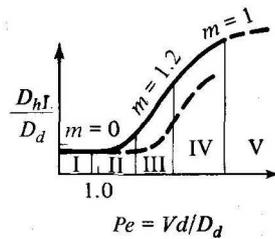
Über den gesamten Bereich möglicher Pecletzahlen sind die transversalen korngerüstbedingten Dispersionskoeffizienten im homogenen porösen Medium stets gleich oder kleiner gegenüber den longitudinalen:

$$0 < D_T / D_L < 10 \tag{3.39}$$

Die in dieser Arbeit untersuchten Strömungsvorgänge bewegen sich im Bereich der Pecletzahlen von ca. 7 bis 56, d.h. einem Bereich mit überwiegender mechanischer Dispersion, in dem die Diffusion allerdings noch nicht vernachlässigt werden darf.



(a)



(b)

**Bild 3.3:** Hydrodynamische Dispersivität als Funktion der molekularen Pecletzahl [aus Bear, nach Pfannkuch, 1963, Saffman, 1960].

### 3.4.2 Methoden zur Ermittlung der Dispersion

#### Theoretische Grundlagen

Die Dispersivitäten können experimentell aus der räumlichen Konzentrationsverteilung ermittelt werden, wobei es wesentlich weniger Erfahrungen mit der experimentellen Bestimmung der transversalen gegenüber der longitudinalen Dispersivität gibt. Das liegt einerseits am höheren versuchstechnischen Aufwand und andererseits an der gewonnenen Erkenntnis, dass die beiden Parameter in ihren Werten proportional zueinander sind [Bear, 1972, 1979; Rinnert, 1983]. Zwei grundsätzliche experimentelle Methoden zur Bestimmung von  $A_T$  können unterschieden werden:

1. punktförmige Einleitung in eine gleichförmige Strömung
2. Zweischichtenströmung

Im ersten Fall wird zum Zeitpunkt ( $t = 0$ ) am Ort ( $z = 0$ ) pulsformig eine Tracermenge  $M$  in eine gleichförmige eindimensionale Strömung eingeleitet und die Konzentrationsverteilung an einem bestimmten Zeitpunkt  $t$  ermittelt, um daraus sowohl  $D_L$  als auch  $D_T$  zu bestimmen. Die Lösung lautet dann wie folgt:

$$c(x, y, t) = \frac{M}{4\pi \cdot n_e \sqrt{D_L \cdot D_T}} \cdot \exp\left(\frac{-(x - u_a \cdot t)^2}{4D_L \cdot t} - \frac{y^2}{4D_T \cdot t}\right) \quad (3.40)$$

Die 2. Methode der Zweischichtenströmung wird aufgrund der vereinfachten Transportgleichung der 1. Methode weitaus häufiger vorgezogen. Bei dieser Methode wird der Zulauf einer konstanten quasi-eindimensionalen Strömung ( $u = u_x$ ) in zwei Bereiche geteilt: in der oberen Hälfte fließt Süßwasser, in der unteren Wasser mit einer konstanten Tracerkonzentration  $c = c_0$ . Die Grenzlinie zwischen beiden Bereichen ist durch  $y = B$  definiert. Mit zunehmender Fließlänge zerläuft die Tracerfront in horizontaler und vertikaler Richtung. Für  $t \rightarrow \infty$  stellt sich eine stationäre Konzentrationsverteilung ein, bei der die longitudinalale Dispersion vernachlässigt werden kann. Die Transportgleichung ergibt sich für diesen Fall damit wie folgt:

$$u \frac{\partial c}{\partial x} \approx D_T \frac{\partial^2 c}{\partial y^2} \quad (3.41)$$

Folgende Randbedingungen werden vorausgesetzt:

$$c(0, y) = c_0 \quad \text{für} \quad -B < y \leq 0 \quad (3.42a)$$

$$c(0, y) = 0 \quad \text{für} \quad 0 < y < +B \quad (3.42b)$$

$$\frac{\partial c}{\partial y} = 0 \quad \text{für} \quad y = \pm B \quad (3.42c)$$

Als Lösung der Gleichung (3.41) erhält man die räumliche Konzentrationsverteilung einer zweidimensionalen Schichtenströmung im stationären Endzustand:

$$\frac{c(x, y)}{c_0} = \frac{1}{2} \left( 1 - \operatorname{erf} \left( \frac{y}{2\sqrt{D_T \cdot x/u}} \right) \right) \quad (3.43)$$

Dabei ist  $c/c_0$  die auf die maximale Konzentration bezogene normierte Konzentration. Die Verteilung der Konzentrationen entspricht damit einer Normalverteilung. Prinzipiell gibt es 3 Verfahren, die Dispersivität aus einer räumlichen Konzentrationsverteilung zu bestimmen:

1. die graphische Auswertungsmethode,
2. die Methode der kleinsten Quadrate sowie
3. die Momenten-Methode.

## Methoden zur Bestimmung der Dispersivität

### Graphischen Auswertungsmethode

Die von *Bear* [1979] vorgeschlagene Methode, bei der der Dispersionskoeffizient aus der Steigung der Durchbruchkurve an der Stelle  $x = 0,5$  berechnet werden kann ist für eine präzisere Messung wie in diesen Messreihen zu ungenau und musste verworfen werden.

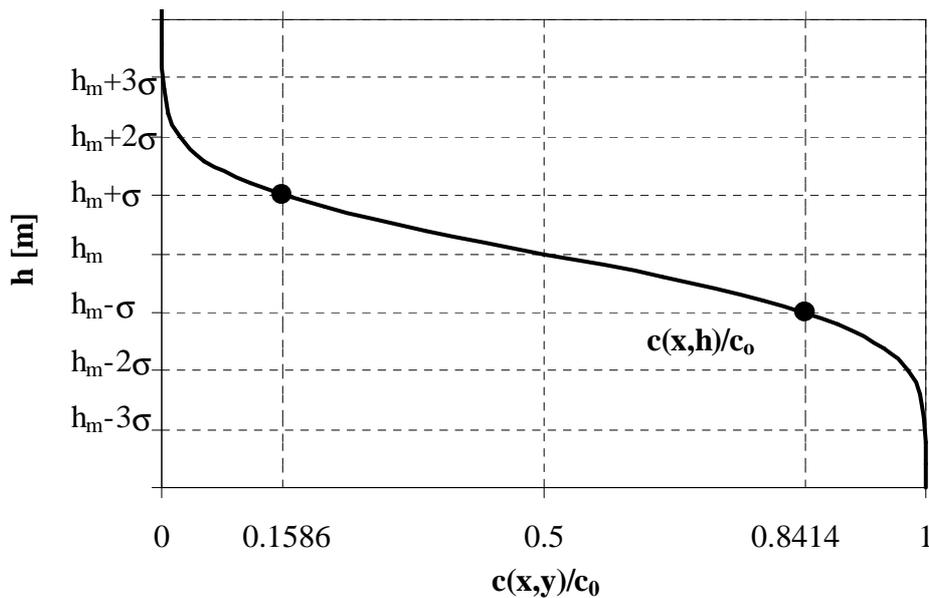
Eine andere, ebenfalls von *Bear* [1972, 1979] vorgeschlagene Methode nutzt die Eigenschaft der Gauß'schen Normalverteilung, wonach das Argument der Fehlerfunktion an den Punkten  $h(c/c_0 = 0.1586)$  und  $h(c/c_0 = 0.8414)$  gerade den Wert  $\pm \sigma$  annimmt (Bild 3.4):

$$\sigma = \frac{h(c/c_0 = 0.1586) - h(c/c_0 = 0.8414)}{2} \quad (3.44)$$

Da die Lösungsfunktion (3.43) formal einer Normal- bzw. einer Gaußverteilung entspricht, kann die räumliche Konzentrationsverteilung als Normalverteilung mit einem Mittelwert  $x = 0$  und einer Varianz  $\sigma^2 = 2D_T t$  betrachtet werden. Damit kann aus der räumlichen Konzentrationsverteilung die transversale Dispersion an jedem Ort  $x$  von der Einströmstelle wie folgt ermittelt werden:

$$D_T = 0.5 \cdot \frac{\sigma^2}{x} \cdot u \quad \text{bzw.} \quad A_T = 0.5 \cdot \frac{\sigma^2}{x} \quad (3.45)$$

Die graphische Methode setzt voraus, dass es sich um eine quasieindimensionale Schichtenströmung in einem zweidimensionalen Aquifer mit oben genannten Randbedingungen und Voraussetzungen handelt. Sind diese Voraussetzungen gegeben - wie auch in den experimentellen und numerischen Untersuchungen dieser vorliegenden Arbeit - ist dies jedoch die rechnerisch einfachste Methode der Berechnung der Dispersivität.



**Bild 3.4:** Durchbruchkurve der Konzentration an der Stelle  $x$  von der Einströmkannte bei kontinuierlicher Tracerzugabe.

### Methode der kleinsten Fehlerquadrate

Bei dieser klassischen Auswertungsmethode werden die Dispersionskoeffizienten durch Anpassung der analytischen Lösung an die gemessenen oder berechneten Konzentrationsverläufe ermittelt [Jobson, 1987]. Dies geschieht durch eine Minimierung der Summe  $S$  der quadratischen Abweichungen beider Kurven:

$$S = \sum_{i=1}^N (c_i^g - c_i^a)^2 \quad \text{mit} \quad S \rightarrow \text{Minimum} \quad (3.46)$$

wobei  $N$  die Anzahl der Messpunkte ist,  $c_i^g$  die gemessene Konzentration an der Stelle  $i$  sowie  $c_i^a$  die analytische Lösung der Konzentration an der Stelle  $i$ . Für die Lösung der Minimierungsaufgabe gibt es verschiedene Verfahren, wie beispielsweise das Gauß-Newton-Verfahren, das Verfahren von Marquardt, das Powell-Verfahren oder das iterative Quasi-Newton-Verfahren. Problematisch dabei sind die Nichteindeutigkeit der Lösung einerseits und andererseits die Tatsache, dass das gefundene Minimum nicht unbedingt das gewünschte globale Minimum ist bzw. die Lösung sehr stark von der Wahl der Startparameter abhängt. Wie die vorgenannte graphische setzt die Methode der kleinsten Fehlerquadrate eine bekannte analytische Lösung der Transportgleichung voraus, die jedoch von Gleichung (3.43) verschieden sein kann.

### Analyse der räumlichen Momente

Das Momenten-Verfahren wurde bisher am häufigsten verwendet, insbesondere für die Auswertung von Tracerversuchen [Garabedian *et al.* 1991; Freyberg, 1986; Adams and Gelhar, 1992; Mackay *et al.*, 1994; Ursino *et al.*, 2001, Rajaram *et al.*, 1991]. Dabei können die Transportparameter aus der Analyse der zentralen räumlichen Momente ermittelt werden [Aris, 1956]. Die allgemeine Gleichung für diese Momente ist wie folgt [Freyberg, 1986]:

$$M_{i,j,k} = n \int \int \int_{-\infty}^{\infty} c(x, y, z) x^i y^j z^k dx dy dz \quad (3.47)$$

Das 0. Moment entspricht der Masse M:

$$M_{000} = \int \int \int_{-\infty}^{\infty} nc(x, y, z) dx dy dz \quad (3.48)$$

Das 1. Moment definiert die Schwerpunktkoordinaten ( $x_s$ ,  $y_s$ ,  $z_s$ ) eines Inhaltsstoffes:

$$x_s = M_{100}/M_{000} \quad y_s = M_{010}/M_{000} \quad z_s = M_{001}/M_{000} \quad (3.49)$$

Mit dem 2. Moment über dem Massezentrum beschreibt man den räumlichen Kovarianz-tensor  $\sigma$ :

$$\begin{aligned} \sigma_{xx} &= \frac{M_{200}}{M_{000}} - x_s^2 & \sigma_{yy} &= \frac{M_{020}}{M_{000}} - y_s^2 & \sigma_{zz} &= \frac{M_{002}}{M_{000}} - z_s^2 \\ \sigma_{xy} &= \sigma_{yx} = \frac{M_{110}}{M_{000}} - x_s y_s & \sigma_{xz} &= \sigma_{zx} = \frac{M_{101}}{M_{000}} - x_s z_s \\ \sigma_{yz} &= \sigma_{zy} = \frac{M_{011}}{M_{000}} - y_s z_s \end{aligned} \quad (3.50)$$

Aus den 2. zentralen räumlichen Momenten (3.50) lassen sich die Dispersions-Koeffizienten und Dispersivitäten analog über  $D_T = 0.5\sigma^2 u / x$  bzw.  $A_T = 0.5\sigma^2 / x$  berechnen. Mit dieser Methode lassen sich im Gegensatz zur graphischen Methode und der Methode der kleinsten Quadrate auch Dispersivitäten für kompliziertere Transportprozesse ermitteln, bei denen die Lösung nicht bekannt ist. Sie ist somit die allgemein verwendbare Lösungsmethode. Während die beiden erst beschriebenen Methoden auf ein zweidimensionales Medium beschränkt sind, können mit der Momenten-Methode auch dreidimensionale Transportmodelle berechnet werden.

# 4 Konzepte zur Beschreibung der Makrodispersion

Während im Abschnitt 3.3 die klassischen Modelle beschrieben wurden, werden im Folgenden Konzepte vorgestellt, die die Dispersion ausschließlich im makroskopischen Raum beschreiben. Es existieren verschiedene Theorien, um den makroskaligen Transport der gelösten Stoffe in einem heterogenen porösen Medium zu beschreiben, wobei die Forschung auf diesem Gebiet zum heutigen Zeitpunkt noch nicht abgeschlossen ist. Zu den wichtigsten zählen folgende: die stochastische Analyse oder Störungs-/Perturbationsmethode (nach Euler [Gelhar and Axness, 1983] als auch nach Lagrange [u.a. Dagan, 1982, 1984, 1987, 1989, 1990; Fiori and Dagan, 2000; Neuman and Zhang, 1990, Zhang and Neuman, 1990]), die Monte-Carlo-Methode [Smith and Schwartz, 1980], die Upscaling-Methode ( u. a. Volumenmittelung, Homogenisierungs-Methode), die fraktale Methode [Cushman and Ginn, 1993], die nichtlokale Transporttheorie nach Euler [Deng et al., 1993], die Kumulanten-Expansions-Methode [Sposito and Barry, 1987; Kabala and Sposito, 1991; Wood, 1998; Wood and Kavvas, 1999], die Euler-Lagrange-Theorie [Neuman, 1993], die Renormierungsgruppen-Theorie [Jaekel and Vereecken, 1997; Schwarze et al., 2001] sowie die Momenten-Methode [ Edwards et al., 1993]. Daneben gibt es empirische Methoden, die Lösungen für bestimmte Randbedingungen und Modellvereinfachungen anbieten (Mehrschichten-, Fließweg-Ansatz).

Die Zielstellung all dieser Methoden ist die gleiche:

1. Es werden makroskalische Transportgleichungen entwickelt, die die Statistik des Konzentrationsfeldes beschreiben (Mittelwert, Varianz, Momente etc.).
2. Die zugrunde liegende mikroskalischen Struktur und die physikalischen Eigenschaften der Prozesse werden mit assoziierenden effektiven Parametern verbunden.

Die aus der Sicht des Autors wichtigsten Methoden werden im Folgenden beschrieben.

## 4.1 Stochastische Methoden

Die stochastische Lösung der Transportgleichung ist das klassische Modellkonzept zur Beschreibung der Dispersion in heterogenen porösen Medien [Gelhar *et al.*, 1979; Neuman *et al.*, 1987; Matheron and de Marsily, 1980; Gelhar and Axness, 1983; Gelhar, 1986; Dagan, 1982, 1984, 1988]. Hierbei erfolgt die Ermittlung der Makrodispersion auf der Grundlage der Störungs- oder Perturbationsmethode, die in Abschnitt 3.3.4 bereits einführend für die klassischen Modelle der Dispersion beschrieben wurde.

### 4.1.1 Grundbegriffe der Stochastik

Ein stochastischer Prozess ist die Menge der Funktionen  $Z(x)$ , die von einem nicht-zufälligen und einem zufallsvariablen Parameter abhängen. Die Gesamtheit aller möglichen Ereignisse ergibt diesen stochastischen Prozess. Jede Zufallsfunktion ist durch eine multivariante Wahrscheinlichkeitsverteilung definiert. Wird aus allen Werten  $Z_i(x_i)$  einer Realisation der Mittelwert und die Varianz sowie höhere Momente berechnet, nennt man es univariante Statistik.

Aus einer einzigen Realisation dieses Prozesses und den daraus ermittelten Momenten lassen sich unter der Voraussetzung ergodischer Prozesse bereits Aussagen über den gesamten Prozess machen. Ergodizität bedeutet, dass bei allen stationären Prozessen die aus einer Realisation gewonnenen Momente mit größer werdender Zeit oder Raum gegen die Ensemblemomente konvergieren. Die Ensemblemittelwerte sind dann durch die zeitlichen bzw. räumlichen Mittelwerte austauschbar. Dadurch ergibt sich die Notwendigkeit, dass die Längen, über die Korrelationen zwischen den Werten bestehen (Korrelationslängen  $\lambda_i$ ), sehr viel kleiner sein müssen als die Skala des betrachteten Modells:  $\lambda_i \ll L$ . Die zweite Bedingung für die stochastische Betrachtung ist die Stationarität. Ein Prozess ist statistisch stationär, wenn der Erwartungswert der ortsabhängigen Variablen im gesamten Untersuchungsgebiet gleich ist und die räumliche Kovarianz und die Varianz der Differenzen zwischen zwei Zufallsvariablen nicht vom Ort, sondern nur vom Abstand zwischen den Datenpunkten abhängt. Für stochastische Analysen ist die Stationarität 2. Ordnung ausreichend, d.h. nur die ersten beiden Momente (Mittelwert und Varianz) müssen ortsunabhängig sein, höhere Momente können durchaus variieren. Die Stationarität ist für jede Realisation dieses Projektes gegeben, denn die Varianzen und Erwartungswerte einer jeweiligen lognormalen Permeabilitätsverteilung ändern sich räumlich praktisch nicht, sichtbar in den asymptotischen Varianzen der Histogramme für die Sandpackungen 1 bis 3.

In der Grundwasserströmung ist die räumliche Variabilität der hydraulischen Durchlässigkeit prozessbestimmend, demgegenüber kann der Einfluss von Porositätsschwankungen und der Variationen der lokalen Dispersivitäten vernachlässigt werden [Gelhar and Axness, 1983; Kinzelbach, 1992]. Eine große Zahl experimenteller Studien belegen, dass die Durchlässigkeiten lognormal verteilt sind [u.a. Freeze, 1975; Sudicky, 1986]. Eine Normalverteilung  $F(Z)$  eines Prozesses  $Z$  sowie seine Dichtefunktion  $f(Z)$  lassen sich durch 2 Parameter, den Mittelwert  $\mu$  und die Standardabweichung  $\sigma$  wie folgt beschreiben:

$$f(Z) = \frac{1}{\sigma\sqrt{2\pi}} e^{-\frac{(Z-\mu)^2}{2\sigma^2}} \quad \text{bzw.} \quad F(Z) = \frac{1}{\sigma\sqrt{2\pi}} \int_{-\infty}^Z e^{-\frac{(Z-\mu)^2}{2\sigma^2}} \quad (4.1)$$

Mit  $Y = \ln Z$  ergibt sich folgende Gleichung:

$$f(Z) = \frac{1}{Z\sigma\sqrt{2\pi}} e^{-\frac{(\ln Z - \mu)^2}{2\sigma^2}} \quad \text{bzw.} \quad F(Z) = \frac{1}{Z\sigma\sqrt{2\pi}} \int_{-\infty}^Z e^{-\frac{(\ln Z - \mu)^2}{2\sigma^2}} \quad (4.2)$$

Bild 4.1a zeigt die Dichte- und Verteilungsfunktionen der Normalverteilung im Vergleich zur Lognormalverteilung (Bild 4.1b). Die Verwendung der Lognormalverteilung hat die Vorteile, dass einerseits keine negativen Werte möglich sind und die Werte symmetrisch sind und andererseits wird die Varianz damit dimensionslos.

In der stochastischen Theorie interessiert neben der Verteilung der Durchlässigkeiten außerdem die räumliche Korrelation der Durchlässigkeiten. Dazu wird eine Kovarianzfunktion  $C(\zeta_{ij})$  aufgestellt:

$$C(\zeta_{ij}) = E\{(Z_i - E\{Z_i\}) \cdot (Z_j - E\{Z_j\})\} \quad \text{mit } i, j = 1, 2, \dots, n \quad (4.3)$$

$\zeta_{ij}$  Separations- oder Abstandsvektor zwischen zwei Punkten  $i$  und  $j$

Ein weiterer wichtiger Zusammenhang, der die räumliche Verteilung der Durchlässigkeiten beschreibt, ist das Variogramm:

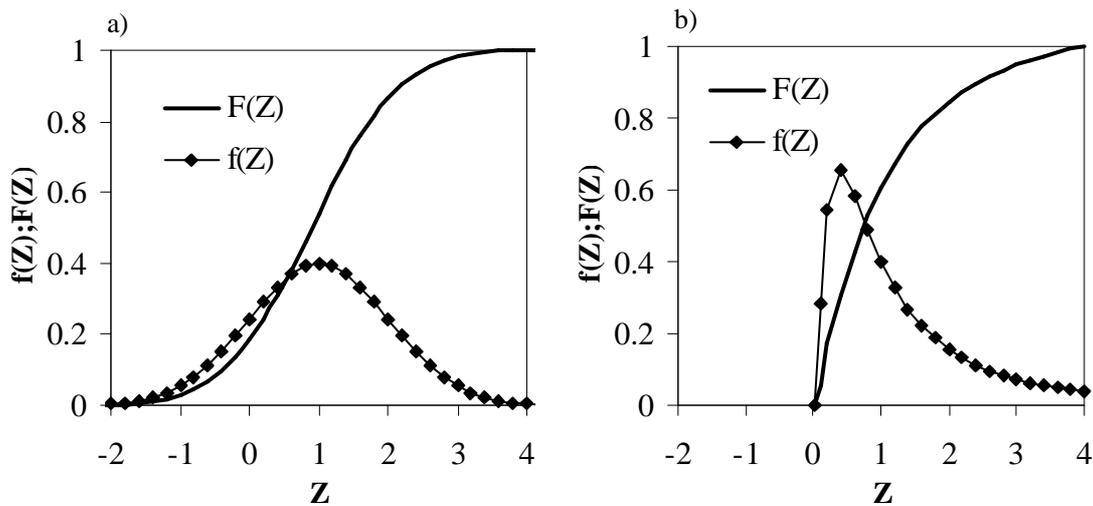
$$\gamma(\zeta_{ij}) = \frac{1}{2} E\{(Z_i - Z_j)^2\} \quad \text{mit } i, j = 1, 2, \dots, n \quad (4.4)$$

Kovarianzfunktionen und Variogramme können aus Messdaten gewonnen werden und genügen meistens einfachen mathematischen Formeln. Am häufigsten findet man exponentielle Kovarianzfunktionen, die für den isotropen Fall wie folgt lautet:

$$C(\zeta) = \sigma^2 e^{-\frac{\zeta}{\lambda}} \quad \text{und für den anisotropen:} \quad (4.5)$$

$$C(\zeta) = \sigma^2 e^{-\sqrt{(\zeta_x / \lambda_x)^2 + (\zeta_y / \lambda_y)^2 + (\zeta_z / \lambda_z)^2}} \quad (4.6)$$

wobei  $\zeta_x$ ,  $\zeta_y$  und  $\zeta_z$  die Abstandsvektoren in die Richtungen x, y und z sind und  $\lambda_i$  die so genannten *Korrelationslängen*  $\lambda$  dieser Richtungen. Die Korrelationslänge  $\lambda_i$  beschreibt das Maß der Wiederholbarkeit einer räumlichen Zufallsgröße in den entsprechenden Richtungen  $x_i$ . Andere mögliche Kovarianzfunktionen sind in Abschnitt 4.1.2. erwähnt. Detaillierte Angaben darüber findet man in *Dagan* [1989].



**Bild 4.1:** Dichtefunktion  $f(Z)$  und Wahrscheinlichkeitsfunktion  $F(Z)$  a) der Normalverteilung NV und b) der Lognormalverteilung LNV.

#### 4.1.2 Perturbations- oder Störungsmethode

Mit der stochastischen Methodik kann der Einfluss der Heterogenität und - im gekoppelten System - der Dichtevariabilität auf die Transportprozesse gelöster Inhaltsstoffe quantifiziert werden. *Gelhar et al.* [1979], *Gelhar and Axness* [1983] lösen die stochastischen Differentialgleichungen der Strömungs- und Transportprozesse mit den Mitteln der Spektral- bzw. Perturbationstheorie nach Euler (Abschnitt 3.3.4.1) für geringe Konzentration und damit dichteunabhängig. Die von *Welty et al.* [1989], *Welty and Gelhar* [1991], *Gelhar* [1993] und *Welty et al.* [2003] entwickelte allgemeine Lösung für den von der Dichte abhängigen Stofftransport soll im folgenden Abschnitt vorgestellt werden. Im gekoppelten System der Strömung und des Transportes über die Zustandsgleichungen eines Inhaltsstoffes werden die lognormale Permeabilitätsverteilung des porösen Mediums und ihre abhängigen Variablen Konzentration, Druck und Geschwindigkeit als Zufallsfelder betrachtet.

### Prozess- und Zustandsgleichungen

Die Strömung wird durch die allgemeine Darcy-Gleichung beschrieben:

$$v_i = -\frac{k}{\mu} \left( \frac{\partial p}{\partial x_i} - \rho g \right) \quad (4.7)$$

wobei  $v_i$  die Darcy-Geschwindigkeit in die Richtung  $x_i$  ist. Unter Annahme nur kleiner Dichteunterschiede wird die Massenerhaltung eines Fluids wie folgt approximiert:

$$\partial v_i / \partial x_i \approx 0 \quad (4.8)$$

Dabei tritt die Dichtevervariabilität nur im Auftriebsterm der Darcy-Gleichung auf (Boussinesq-Approximation). Setzt man Gleichung (4.7) in (4.8) ein, erhält man die Gleichung für die Strömung:

$$\frac{\partial}{\partial x_i} \left[ \frac{k}{\mu} \left( \frac{\partial p}{\partial x_i} - \rho g \right) \right] = 0 \quad (4.9)$$

Die in (4.9) enthaltenen Variablen Dichte und Viskosität sind von der Konzentration abhängig und werden durch logarithmierten Zustandsgleichungen beschrieben [Welty *et al.*, 1991]:

$$\ln \rho = \ln \rho_0 + a(c - c_0) \quad (4.10)$$

$$\ln \frac{1}{\mu} = \ln \left( \frac{1}{\mu_0} \right) - \beta(c - c_0) \quad (4.11)$$

wobei  $c_0$  die Konzentration,  $\rho_0$  die Dichte und  $\mu_0$  die dynamische Viskosität des Tracerfluids sind, sowie  $a = d(\ln \rho) / dc$  und  $\beta = \ln(1/\mu) / dc$ . Die lokale Gleichung für den Transport eines hydrodynamisch aktiven, konservativen gelösten Inhaltsstoffes ist folgende:

$$n_e \frac{\partial c}{\partial t} + \frac{\partial}{\partial x_i} (v_i c) = \frac{\partial}{\partial x_i} \left( n_e D_{ij} \frac{\partial c}{\partial x_j} \right) \quad (4.12)$$

Die Transportgleichung (4.12) ist über die Zustandsgleichungen (4.10) und (4.11) mit der approximierten Darcy-Gleichung (4.9) gekoppelt.

### Stochastische Zufallsfelder

Grundlage der Perturbationsmethode ist die Annahme der lognormalen Permeabilitäten als ein statistisch homogenes dreidimensionales Zufallsfeld mit einem Mittelwert und der Fluktuation:

$$\ln k(\mathbf{x}) = f(\mathbf{x}) = \bar{f}(\mathbf{x}) + f'(\mathbf{x}) \quad (4.13)$$

Dabei ist  $\mathbf{x} = (x_1, x_2, x_3)$  der Vektor der räumlichen Koordinaten. Ein statistisch homogener Prozess wird durch eine Kovarianzfunktion  $C(\xi)$  charakterisiert:

$$C(\xi) = E\{f'(\mathbf{x} + \xi)f'(\mathbf{x})\} \quad (4.14)$$

Die Kovarianzfunktion kann durch verschiedene Zusammenhänge beschrieben werden, beispielsweise durch eine exponentielle, die modifiziert exponentielle oder die sphärische Funktion. Ein in natürlichen Systemen oft vorgefundener und damit gebräuchlicher Zusammenhang ist der exponentielle. In vielen Feldversuchen wurde eine gute Übereinstimmung mit den beobachteten Daten gefunden [Sudicky, 1986; Hess et al. 1992; Rehfeldt et al. 1992]:

$$C(\xi) = \sigma_f^2 \lambda_1 \lambda_2 \lambda_3 \exp\left[-\left(\xi_1^2 / \lambda_1^2 + \xi_2^2 / \lambda_2^2 + \xi_3^2 / \lambda_3^2\right)^{1/2}\right] \quad (4.15)$$

Dabei ist  $\sigma_f^2$  die Varianz der lognormalverteilten Permeabilität und  $\lambda$  die Korrelation. Das Spektrum für diese Kovarianzfunktion (4.15) wird wie folgt definiert:

$$S_{ij}(\mathbf{k}) = \frac{\sigma_f^2 \lambda_1 \lambda_2 \lambda_3}{\pi^2 (1 + \lambda_1 k_1^2 + \lambda_2 k_2^2 + \lambda_3 k_3^2)^2} \quad (4.16)$$

wobei  $\mathbf{k} = (k_1, k_2, k_3)$  der Vektor der Wellenzahl ist. Da die Permeabilität den Strömungs- und Transportprozess bestimmt, werden auch die abhängigen Variablen Druck, Geschwindigkeit und Konzentration als dreidimensionale stochastische Zufallsfelder betrachtet, die aus jeweils einem Mittelwert und den Fluktuationen bestehen. Neben den Störungsfunktionen für die Geschwindigkeit sowie die Konzentration bei Dichteunabhängigkeit werden im gekoppelten System außerdem die bei höherer Dichte konzentrationsabhängigen Parameter Druck  $p$  und die logarithmierten Werte der Dichte  $\rho$  und der inversen dynamischen Viskosität  $\mu$  gestört:

$$v(\mathbf{x}) = \bar{v}(\mathbf{x}) + v'(\mathbf{x}) \quad (4.17a)$$

$$c(\mathbf{x}) = \bar{c}(\mathbf{x}) + c'(\mathbf{x}) \quad (4.17b)$$

$$p(\mathbf{x}) = \bar{p}(\mathbf{x}) + p'(\mathbf{x}) \quad (4.17c)$$

$$\ln \rho(\mathbf{x}) = r(\mathbf{x}) = \bar{r}(\mathbf{x}) + r'(\mathbf{x}) \quad (4.17d)$$

$$\ln \frac{1}{\mu}(\mathbf{x}) = m(\mathbf{x}) = \bar{m}(\mathbf{x}) + m'(\mathbf{x}) \quad (4.17e)$$

Ist ein Zufallsprozess stationär, können die gestörten Variablen durch Fourier-Stieltjes-Integrale der Winkelfrequenz  $\mathbf{k}$  ersetzt werden kann [Naff, 1984]:

$$f' = \int \int \int_{-\infty}^{\infty} e^{i(\mathbf{k} \cdot \mathbf{x})} dZ_f(\mathbf{k}) \quad (4.18a)$$

$$v'_i = \int \int \int_{-\infty}^{\infty} e^{i(\mathbf{k} \cdot \mathbf{x})} dZ_{v_i}(\mathbf{k}) \quad (4.18b)$$

$$p' = \int \int \int_{-\infty}^{\infty} e^{i(\mathbf{k} \cdot \mathbf{x})} dZ_p(\mathbf{k}) \quad (4.18c)$$

$$c' = \int \int \int_{-\infty}^{\infty} e^{i(\mathbf{k} \cdot \mathbf{x})} dZ_c(\mathbf{k}) \quad (4.18d)$$

Ein stochastischer Prozess unterliegt in den oben genannten Integralen (4.18) zwei Bedingungen. Die erste besagt, dass der Erwartungswert des stochastischen Prozesses  $Z(\mathbf{k}) = 0$  ist, und die zweite, dass zwei Differenziale von  $Z$  zu zwei verschiedenen Frequenzen unkorreliert sind. Unter der Voraussetzung einer homogenen Winkelfrequenz  $k_1 = k_2 = k$  gilt wie folgt:

$$E\{dZ(\mathbf{k})dZ^*(\mathbf{k})\} = d\Phi(\mathbf{k}) = S(\mathbf{k})dk \quad (4.19)$$

wobei  $\Phi(\mathbf{k})$  das integriertes Spektrum,  $S(\mathbf{k})$  die spektrale Dichtefunktion bzw. das Spektrum ist sowie  $dZ^*(\mathbf{k})$  der konjugiert-komplexe Teil des stochastischen Prozesses.

### Spektrale Lösung für die Darcy-Gleichung

Ersetzt man Variablen der Darcy-Gleichung (4.7) durch ihre Zufallsfelder (4.13) und (4.17) erhält man die stochastische Gleichung für die Darcy-Geschwindigkeit:

$$\bar{v}_i + v'_i = -k_L \frac{1}{\mu_L} (\exp(f' + m')) \left\{ \frac{\partial}{\partial x_i} (\bar{p} + p') - [\rho_L \exp(r') g_i] \right\} \quad (4.20)$$

wobei  $k_L = \exp(\bar{f})$ ,  $\mu_L = \exp(-\bar{m})$  und  $\rho_L = \exp(\bar{r})$  die Erwartungswerte der Zustandsgrößen sind. Entwickelt man die exponentialen Terme der mittleren Zustandsgrößen, berücksichtigt

nur Terme bis zur 2. Ordnung erhält man aus dem Erwartungswert der Gleichung (4.20) die mittlere Gleichung für die Darcy-Geschwindigkeit:

$$\begin{aligned} \bar{v}_i = -k_L \frac{1}{\mu_L} & \left[ \left( 1 + \frac{\overline{f'^2}}{2} + \frac{\overline{m'^2}}{2} + \overline{f'm'} \right) \frac{\partial \bar{p}}{\partial x_i} \right. \\ & \left. - \rho_L g_i \left( 1 + \frac{\overline{f'^2}}{2} + \frac{\overline{m'^2}}{2} + \frac{\overline{r'^2}}{2} + \overline{f'r'} + \overline{f'm'} \right) + \overline{(f' + m') \frac{\partial p'}{\partial x_i}} \right] \end{aligned} \quad (4.21)$$

Subtrahiert man diese mittlere Gleichung (4.21) von (4.20), vernachlässigt Terme höherer Ordnung und ersetzt die gestörten Zustandvariablen  $m' = -\beta c'$  und  $r' = -ac'$  ergibt das die Störungsgleichung erster Ordnung für die Darcy-Geschwindigkeit:

$$v'_i = -k_L \frac{1}{\mu_L} \left[ \frac{\partial p'}{\partial x_i} + (f' - \beta c') \frac{\partial \bar{p}}{\partial x_i} - \rho_L g_i (f' + (a + \beta) c') \right] \quad (4.22)$$

Die Darcy-Gleichung wird demzufolge im gekoppelten Prozess neben den Perturbationen des lognormalen Permeabilitätsfeldes und des Druckes – die im Tracerfall auftreten – auch von den Störungen der Konzentration beeinflusst. In analoger Weise wie die Darcy-Gleichung wird die Strömungsgleichung (4.9) gestört. Substituiert man die gestörten Variablen aus (4.22) und der Störungsgleichung der Strömung durch ihre Fourier-Stieltjes-Repräsentationen, setzt beide resultierende Gleichungen ineinander ein, erhält man folgende Lösung für das Fourier-Stieltjes-Integral der Strömungsgeschwindigkeit:

$$dZ_{v_i} = L_i dZ_f + M_i dZ_c \quad (4.23)$$

wobei  $L_j$  und  $M_j$  wie folgt ergibt:

$$L_j = -k_L \frac{1}{\mu_L} \left( \delta_{jm} - \frac{k_j k_m}{k^2 - ik_n \beta G_n} \right) \left( \frac{\partial \bar{p}}{\partial x_n} + \rho_L g_m \right) \quad \text{und} \quad (4.24)$$

$$\begin{aligned} M_j = -k_L \frac{1}{\mu_L} & \left\{ \left( \delta_{jm} - \frac{k_j k_m}{k^2 - ik_n \beta G_n} \right) \left( -\beta \frac{\partial \bar{p}}{\partial x_n} + (a - \beta) \rho_L g_m \right) \right. \\ & \left. + \frac{ik_i [a(a - \beta)] \rho_L g_m G_m}{k^2 - ik_n \beta G_n} \right\} \end{aligned} \quad (4.25)$$

wobei  $\delta_{im}$  die Kronecker-Konstante ( $\delta_{im} = 1$  für  $i = n$ ;  $\delta_{im} = 0$  für  $i \neq n$ ) ist. Es ist erkennbar, dass  $dZ_{q_i}$  im *dichteabhängigen* Fall sowohl von den Störungen des lognormalen Permeabilitätsfeldes  $dZ_f$  als auch der Konzentrationen  $dZ_c$  abhängig ist. Im *dichteabhängigen*

Fall, wenn eine Dichtevergrößerung durch hohe Konzentrationen nicht mehr zu vernachlässigen ist, muss hierbei die spektrale Lösung der Strömungsgleichung mit der spektralen Lösung der Transportgleichung gekoppelt werden.

### Spektrale Lösung für die Transportgleichung

Zuerst werden wiederum die Variablen der Stofftransportgleichung durch statistisch homogene statistische Zufallsprozesse aus Mittelwert und Fluktuationen (4.17) substituiert und daraus der Erwartungswert der resultierenden Transportgleichung ermittelt:

$$n_e \frac{\partial \bar{c}}{\partial t} + \frac{\partial}{\partial x_i} (\bar{c} \bar{v}_i + \overline{c'v'}) = n_e D_{ij} \frac{\partial^2 \bar{c}}{\partial x_i \partial x_j} \quad (4.26)$$

Durch Subtraktion der mittleren Lösung (4.25) von der gesamten Transportgleichung erhält man die Transportgleichung der Fluktuationen:

$$n_e \frac{\partial c'}{\partial t} + \frac{\partial}{\partial x_i} (c' \bar{v}_i + \bar{c} v'_i) = n_e D_{ij} \frac{\partial^2 c'}{\partial x_i \partial x_j} \quad (4.27)$$

*Gelhar and Axness* [1983], *Welty et al.* [1991] ersetzen das bestehende durch ein bewegliches Koordinatennetz mit  $\xi_1 = x_1 - vt/n$ ,  $\xi_2 = x_2$  und  $\xi_3 = x_3$ . Durch Substitution der gestörten Variablen aus dieser Gleichung (4.16) durch ihre entsprechenden Fourier-Stieltjes-Repräsentationen (4.18) sowie Einsetzen des Dispersionskoeffizienten  $D_{ij} = \alpha_{ij} v_1 / n_e + \delta_{ij}$  mit entsteht damit folgende resultierende Fourier-Stieltjes-Amplitude der Konzentration  $dZ_c$  als eine Funktion der Fourier-Stieltjes-Amplitude der Strömungsgeschwindigkeit  $dZ_v$ .

$$\frac{d}{dt} (dZ_c) \Big|_{\xi_i} + \left[ ik_1 + \alpha_L k_1^2 + \alpha_T (k_2^2 + k_3^2) \frac{q}{n} \right] dZ_c = \frac{G_i}{n} dZ_{v_i} = \frac{G_j}{n} dZ_{v_j} \quad (4.28)$$

Wobei  $G_j = -\partial \bar{c} / \partial x_j$  der Vektor des mittleren Konzentrationsgradienten [ $L^{-1}$ ] ist. *Welty et al.* [1991] setzten (4.22) in (4.27) ein und entwickelten folgende asymptotische Lösung:

$$dZ_c \approx \frac{G_j L_j (1 - e^{-Bt})}{n_e B} dZ_f \quad (4.29)$$

mit  $L_j$  nach (4.23) und  $B$ :

$$B = \left[ ik_1 + \alpha_L k_1^2 + \alpha_T (k_2^2 + k_3^2) \right] \frac{q}{n_e} - \frac{G_j M_j}{n_e} \quad (4.30)$$

Setzt man (4.29) in (4.22) ein, erhält man folgende resultierende Gleichung für Fourier-Stieltjes-Amplitude der Strömungsgeschwindigkeit als Funktion der Fourier-Stieltjes-Amplitude der lognormalverteilten Permeabilitäten:

$$dZ_{v_i} = \left[ L_i + \frac{G_m L_m (1 - e^{-Bt})}{n_e B} M_i \right] dZ_f \quad (4.31)$$

wobei die Faktoren  $L_i$ ,  $M_i$  und  $B$  den Einfluss beschreibt. Gleichung (4.31) zeigt damit, dass die spektralen Lösungen für die Strömungs- und Transportgleichung nicht unabhängig voneinander entwickelt werden können.

### Entwicklung der Makrodispersivität

Der Term  $\overline{c'v'_i}$  aus der mittleren Transportgleichung (4.26) repräsentiert den makroskopischen dispersen Massenfluss und ist definiert als das Integral des Kreuzspektrums zwischen Strömung und Konzentration über den Bereich der Wellenzahl [Welty *et al.*, 1991]:

$$\overline{c'v'_i} = \int_{-\infty}^{\infty} \int \int S_{cv_i}(\mathbf{k}) d\mathbf{k} = v A_{ij} G_j \quad \text{mit } i, j = 1, 2, 3 \quad (4.32)$$

wobei  $A_{ij}$  der Tensor der Makrodispersion [L]. Das Kreuzspektrum  $S_{cv_i}(\mathbf{k})$  wird nach der spektralen Repräsentationstheorie als Erwartungswert des Produktes aus der Fourier- Stieltjes-Amplitude der Konzentration und dem konjugiert-komplexen Teil der Fourier- Stieltjes-Amplitude der Strömungsgeschwindigkeit ermittelt:

$$E\{dZ_c(\mathbf{k})dZ_{v_i}^*(\mathbf{k})\} = S_{cv_i}(\mathbf{k})d\mathbf{k} \quad (4.33)$$

Wird nun  $dZ_c$  (4.29) mit dem konjugierten komplexen Teil  $dZ_{v_i}^*$  von (4.31) multipliziert, ergibt sich damit folgendes Integral für den *dichteabhängigen* Makrodispersionstensor:

$$A_{ij} = \int \int \int \frac{L_j (1 - e^{-Bt})}{qn_e B} \left[ L_i^* + \frac{M_i^* (G_m L_m)^* (1 - e^{-Bt})^*}{n_e B^*} \right] S_{ff}(\mathbf{k}) d\mathbf{k} \quad (4.34)$$

Für  $a = \beta = 0$  reduziert sich  $A_{ij}$  auf die Lösung im Tracerfall [Gelhar and Axness, 1983: Gleichung 29]. Integriert man die Gleichung (4.33) erhält man die Eigenwerte der Makrodispersivitäten. Die resultierenden  $A_{ij}$  sind Funktionen aus Fluid- und Aquifereigenschaften und einem so genannten Flussfaktor  $\gamma$ , der aus der Darcy- Gleichung hergeleitet werden kann. Welty *et al.* [2003] stellten folgende Lösung für die transversale *dichteabhängige* Makrodispersivität  $A_{33}$  im anisotropen Medium vor:

$$\begin{aligned}
 A_{33} = & \left\{ \frac{\sigma_f^2 \lambda \varepsilon}{\gamma_3^2} \frac{2\xi + 1}{2(\xi + 1)^2} \right\} - \left\{ \frac{\sigma_f^2 \lambda \Gamma_3}{\gamma_3} \frac{\varepsilon}{\xi^2} \left( - \frac{G_1^2 \Gamma_1 G_3 \left( \frac{\Gamma_1}{\gamma_3} - \frac{\Gamma_3}{\gamma_1} \right)}{(G_3 \Gamma_3)^2 (G_1 \Gamma_1 \vartheta + G_3 \Gamma_3)} S_1 \right. \right. \\
 & \left. \left. + \frac{\frac{G_1}{\gamma_1} \vartheta - \frac{G_3}{\gamma_3}}{\vartheta^2 (G_1 \Gamma_1 \vartheta + G_3 \Gamma_3)} S_2 + \left[ \frac{G_1 \left( \frac{\Gamma_1}{\gamma_3} - \frac{\Gamma_3}{\gamma_1} \right)}{G_3 \Gamma_3^2 \vartheta^2} - \frac{1}{\Gamma_3 \gamma_3 \vartheta} \right] S_3 - \frac{1}{\Gamma_3 \gamma_3 \vartheta} S_4 \right) \right\} \quad (4.35)
 \end{aligned}$$

Die dabei auftretenden Parameter errechnen sich wie folgt:

$$\Gamma_i = \beta \frac{-k_L \left( \frac{1}{\mu} \right)_L \left( \frac{\partial \bar{p}}{\partial x_i} + \frac{\alpha - \beta}{\beta} \rho_L g_i \right)}{q} \quad (4.36)$$

$$\gamma_i = \frac{q}{-k_L \left( \frac{1}{\mu} \right)_L \left( \frac{\partial \bar{p}}{\partial x_i} + \rho_L g_i \right)} \quad (4.37)$$

$$S_1 = \exp(-2\bar{x} G_1 \Gamma_1) \sum_{n=1}^{\infty} \left[ \frac{(-2\bar{x} G_3 \Gamma_3)^n}{n!} \sum_{k=1}^n \left( \frac{-G_1 \Gamma_1}{G_3 \Gamma_3} \right)_K \frac{(2n - 2k - 1)!!}{(2n - 2k)!!} \right] \quad (4.38)$$

$$S_2 = \xi \left[ 1 - \exp\left(-2\bar{x} \left( G_1 \Gamma_1 + \frac{G_3 \Gamma_3}{\vartheta} \right)\right) \right] \quad (4.39)$$

$$+ \exp(-2\bar{x} G_1 \Gamma_1) \sum_{n=1}^{\infty} \left[ \frac{(-2\bar{x} G_3 \Gamma_3)^n}{n!} \sum_{k=1}^n \frac{(2n - 2k - 1)!!}{\vartheta^k (2n - 2k)!!} \right] \quad (4.40)$$

$$S_3 = 1 - \left[ \exp(-2\bar{x} G_1 \Gamma_1) \sum_{n=0}^{\infty} \frac{(-2\bar{x} G_3 \Gamma_3)^n}{n!} \frac{(2n - 1)!!}{(2n)!!} \right] \quad (4.41)$$

$$S_4 = \frac{1}{2} - \left[ \exp(-2\bar{x} G_1 \Gamma_1) \sum_{n=0}^{\infty} \frac{(-2\bar{x} G_3 \Gamma_3)^n}{n!} \frac{(2n + 1)!!}{(2n + 2)!!} \right] \quad (4.42)$$

$$\varepsilon = \frac{\lambda_3}{\lambda_1} \quad (4.43)$$

$$\xi^2 = \sin^2 \phi + \varepsilon^2 \cos^2 \phi \quad (4.44)$$

$$\vartheta = 1 - \frac{1}{\varepsilon^2} \quad (4.45)$$

$$a = d(\overline{\ln \rho}) / d\bar{c} = 0.7 \quad (4.46)$$

$$\beta = d(\overline{\ln(1/\mu)}) / d\bar{c} = 2.0 \quad (4.47)$$

Für das in dieser Arbeit zu untersuchende Transportmodell einer Schichtenströmung gibt es nur den Konzentrationsgradienten in der  $x_3$ -Richtung, d.h.  $G_1 = G_2 = 0$ . Da die Hauptströmungsrichtung mit der Richtung einer Korrelation bzw. der Bettung zusammenfällt, ist der Neigungswinkel  $\phi = 0$ . und es ergibt sich aus (4.44)  $\varepsilon = \xi$ .

Werden Terme höherer Ordnung vernachlässigt, erhält man mit den zuvor genannten Vereinfachungen aus (4.35) folgende Funktion 1. Ordnung für die *dichteabhängige* transversale Makrodispersivität  $A_{33}$  im anisotropen heterogenen porösen Medium:

$$A_{33} = \frac{\sigma_f^2 \lambda_1 a_2}{\gamma_3^2} \{1 - a_3 \Gamma_3 \bar{x} G_3\} \quad \text{mit} \quad (4.48)$$

$$a_2 = \frac{\xi(2\xi + 1)}{2(\xi + 1)^2} \quad a_3 = \frac{(\xi + 1)^2}{2(1 - \xi^2)(2\xi + 1)} \quad (4.49)$$

wobei  $a_2, a_3 = f(\lambda_3/\lambda_1)$  zwei Faktoren sind, die den Einfluss der Anisotropie beschreiben. Die Gleichung (4.48) ist die in dieser Arbeit experimentell und numerisch zu prüfende analytische Lösung für die transversale anisotrope Makrodispersivität.

Dabei ist ersichtlich, dass der *dichteabhängige* Makrodispersionstensor als eine Summe aus zwei Integralen beschrieben werden kann [Welty *et al.*, 2003]:

$$A_{ij} = \{I_1\} + \{I_2\} \quad (4.50)$$

Während das erste Integral  $\{I_1\}$  den Anteil darstellt, der die Dichte unberücksichtigt lässt und nur die Heterogenität bzw. die Eigenschaften des porösen Mediums betrachtet, hängt das zweite Integral  $\{I_2\}$  sowohl von der Anisotropie des porösen Mediums als auch von den Fluideigenschaften ab. Die Matrix des *dichteabhängigen* Makrodispersionstensors ist somit unsymmetrisch.

Der so genannte Flussfaktor  $\gamma_i$  definiert den inversen Anteil der Darcy-Geschwindigkeit in die Richtung  $x_i$  an der resultierenden Darcy-Geschwindigkeit:

$$\gamma_i = v / K_{ij} J_i \quad (4.51)$$

wobei  $K_{ij}$  die effektive hydraulische Leitfähigkeit ist. Die Entwicklung des Flussfaktors  $\gamma_1$  geschieht analog der oben beschriebenen spektralen Entwicklung von  $\overline{c'q'_i}$  durch Störung der Darcy-Gleichung. Die Lösung ist nach Welty *et al.* [1989] für  $\gamma_1$  wie folgt:

$$\gamma_1 = \left\{ 1 + \frac{\sigma_f^2}{6} + \sigma_f^2 \frac{\alpha_T}{\lambda} \left[ \frac{b_1^2}{4} - b_1 \right] \right\} \quad \text{mit} \quad b_1 = \frac{\beta G_1 \lambda^2}{\gamma \alpha_T} \quad (4.52)$$

Somit ist  $\gamma_1$  eine von sich selbst abhängige Größe und muss iterativ gelöst werden. Für den zweidimensionalen Fall wie in der hier vorliegenden Fall ist die effektive hydraulische Leitfähigkeit  $K_{ij}$  identisch mit ihrem geometrischen Mittel  $K_G$  [Gelhar, 1993]:

$$K_{ij} = K_G \delta_{ij} \quad \text{mit } i, j = 1, 2 \quad (4.53)$$

Daraus ergibt sich mit  $v = K_g J_1$  für den Flussfaktor  $\gamma_1 = 1$  [Gelhar, 1993]. Den Koeffizienten  $\Gamma_i$  erhält man durch Einsetzen von Gleichung (4.36) in (4.37):

$$\Gamma_i = \frac{2(\partial \bar{p} / \partial x_i - 0.65 \rho_L g_i)}{\partial \bar{p} / \partial x_i - \rho_L g_i} \cdot \gamma_i^{-1} \quad (4.54)$$

Für den Fall vernachlässigbarer Konzentrationsunterschiede des transportierten Inhaltsstoffes erhält man aus (4.48) mit  $G_3 = 0$ ,  $a = d(\ln \rho) / d\bar{c} = 0$  sowie  $\beta = d(\ln(1/\mu)) / d\bar{c} = 0$  die Gleichung für die dichteunabhängige transversale Makrodispersion [Gelhar, 1993]:

$$A_{33} = \frac{\sigma_f^2 \lambda_1 \xi (2\xi + 1)}{\gamma_3^2 2(\xi + 1)^2} \quad (4.55)$$

*Dichteabhängige isotrope Makrodispersion.* Welty and Gelhar [1992] stellten mittels oben beschriebener Perturbationsmethode folgende Lösung für die *dichteabhängige* longitudinale Dispersivität im isotropen Medium vor:

$$A_{11} = \frac{\sigma_f^2 \lambda \varepsilon}{\gamma_1^2} \exp(-2a_1) \quad \text{mit} \quad a_1 = \beta G_1 \bar{x} \left[ \frac{1}{\gamma_1} + \frac{\partial \rho_L}{\partial \mu_L} \frac{k_L g}{v} \right] \quad (4.56)$$

*Dichteunabhängige isotrope Makrodispersion.* Für den vereinfachten Fall des isotropen heterogenen dreidimensionalen Mediums lässt sich die dichteunabhängige Makrodispersion  $A_{ij}$  nach Gelhar and Axness [1983] aus den stochastischen Eigenschaften des Mediums, seiner korngerüstbedingten Dispersivitäten und dem Flussfaktor berechnen:

$$A_{11} = \frac{\sigma^2 \cdot \lambda}{\gamma^2} \quad (4.57)$$

$$A_{22} = A_{33} = \frac{\sigma^2}{15\gamma^2} (\alpha_L + 4\alpha_T) \quad (4.58)$$

Da die horizontale Längenskala eines Aquifers mindestens eine Größenordnung höher als die vertikale ist, werden Grundwasserströmungsprozesse oft als zweidimensional angenommen, was außerdem zu einer enormen Verringerung des experimentellen und numerischen Aufwandes führt [Gelhar, 1993]. Kovarianzfunktion  $C(\xi)$  und Spektrum  $S_{ij}(\vec{k})$  sind für die zweidimensionale Betrachtung wie folgt:

$$C(\xi) = \sigma_f^2 \lambda_1 \lambda_2 \exp\left[-\left(\xi_1^2 / \lambda_1^2 + \xi_2^2 / \lambda_2^2\right)^{1/2}\right] \quad (4.59)$$

$$S_{ij}(\mathbf{k}) = \frac{\sigma_f^2 \lambda_1 \lambda_2}{\pi(1 + \lambda_1 k_1'^2 + \lambda_2 k_2'^2)} \quad (4.60)$$

Aus der Annahme  $\gamma = 1$  im zweidimensionalen Fall werden die Makrodispersivitäten daraus wie folgt

$$A_{11} = \sigma^2 \cdot \lambda \quad (4.61)$$

$$A_{22} = \frac{\sigma^2}{8} (\alpha_L + 3\alpha_T) \quad (4.62)$$

Im isotropen porösen Medium sind die transversalen Makrodispersivitäten somit nicht wie im anisotropen Medium von der Korrelation der Permeabilitätsverteilung abhängig, sondern von der korngerüstbedingten Dispersivität.

Nach *Neuman et al.* [1987] besteht der Makrodispersionstensor aus einer lokalen ( $D_I$ ) Komponente und einer Komponente auf der Feldskala ( $D_{II}$ ):

$$D = D_I + D_{II} \quad (4.63)$$

Es wird eine dimensionslose Größe eingeführt, die heterogene Pecletzahl, die das Größenverhältnis von Heterogenität zur körngerüstbedingten Dispersivität berücksichtigt:

$$Pe_h = \frac{u_{II} \lambda}{D_I} = \frac{u_{II} \lambda}{\alpha_L u_I} \quad (4.64)$$

*Neuman et al.* [1987] weist darauf hin, dass  $u_I$  die Porengeschwindigkeit ist und deshalb nicht identisch mit der mittleren Geschwindigkeit im Strömungsmodell  $u_{II}$ . Bei ergodischen Verhältnissen (große Zeiten oder Lauflängen) kann dies jedoch angenommen werden. Der von *Neuman et al.* [1987] analytisch ermittelte Makrodispersionstensor ist für ein exponentiale Spektrum identisch mit dem von *Gelhar and Axness* [1983], *Gelhar* [1993] ermittelten. Der Flussfaktor  $\gamma$  wird als überflüssig erachtet und vernachlässigt:  $\gamma = 1$ . Ist das Spektrum nicht exponential, differieren ihre Lösungen allerdings. Während hier nach *Gelhar*

and Axness [1983] in jedem Falle - d.h. auch wenn die Strömungsrichtung mit der Richtung der Bettung zusammenfällt - alle Eigenwerte des Makrodispersionstensors von Null verschieden sind, ist nach Neuman *et al.* [1987] nur die Längsdispersion konvektiv kontrolliert, alle anderen Eigenwerte tendieren mit steigender inverser heterogener Pecletzahl (4.52) zu Null. Eine Dichteabhängigkeit wurde jedoch nicht berücksichtigt.

Dagan [1982, 1984, 1988] und Dagan and Fiori [1997] nutzten die Perturbations-Methode nach Langrange (Abschnitt 3.3.4.2), um den dichteunabhängigen Dispersionstensor für ein isotropes [Dagan, 1982, 1984] und ein anisotropes poröses Medium [Dagan, 1988] zu entwickeln. Analog Neuman [1987] werden in Dagan [1988] der Flussfaktor  $\gamma = 1$ , die transversalen Dispersivitäten  $A_{22}$  und  $A_{33}$  für große Zeiten  $t$  und Fließlängen zu Null und die longitudinalen Dispersivität erreicht einen konstanten asymptotischen Wert.

## 4.2 Monte-Carlo-Methode

Bei diesem methodisch einfachen, häufig verwendeten Verfahren werden numerische Transportsimulationen an einer großen Anzahl von zufälligen, jedoch statistisch gleichwertigen Aquiferrealisationen durchgeführt, um daraus den Erwartungswert und die Varianz der Konzentrationsausbreitung zu ermitteln [Smith and Schwartz, 1980; Zang and Seo, 2004, Tompson *et al.*, 1989, Tompson and Gelhar, 1990, Naff *et al.*, 1998]. Es verbindet damit stochastische Methoden mit der Zufälligkeit der Random-Walk-Methoden, indem es die stochastischen Prozesse der Störungstheorie mittels zufälliger numerischer Realisationen nachvollzieht. Die Monte-Carlo-Methode basiert auf dem Gesetz der großen Zahlen, das folgendes besagt:

Liegen  $n$  unabhängige Zufallsvariablen mit derselben Verteilungsfunktion und endlichem Erwartungswert  $\mu$  vor, dann strebt das arithmetische Mittel  $X_n$  mit wachsendem  $n$  gegen  $\mu$ ; und zwar fast sicher, d.h. mit Wahrscheinlichkeit EINS.

Die Anzahl der Realisationen  $n$  ist dabei unbekannt und erst dann erreicht, wenn der Mittelwert der Dispersivität asymptotisch einen konkreten Wert erreicht bzw. die Varianz seiner Abweichungen Null wird. Je nach vorgegebenen stochastischen Eigenschaften kann diese jedoch sehr hoch werden. Bellin [1992] erwähnt ca. 1500 notwendige Realisationen für eine 3D-dichteunabhängige Modellierung, Vorteil dieser Methode ist, dass sie einfach zu handhaben und dass die bei der Störungstheorie unphysikalische Annahme der minimalen Fluktuationen nicht erforderlich ist.

### 4.3 Fraktale Analyse

Dieser Ansatz ist eine Methode der Beschreibung der Makrodispersion, die erst in den letzten Jahren entwickelt wurde [Wheatcraft and Tyler, 1988; Ababou and Gelhar, 1990; Kemblowski and Wen, 1993; Kemblowski and Chang, 1993; Schwartz et al., 1996; Zhang and Wheatcraft, 1996]. Im Gegensatz zur stochastischen Theorie, die auf einer räumlichen korrelierten Verteilung der Inhomogenitäten basiert, ist hier die Heterogenitätsstruktur ungeordnet, fraktal heterogen und sich selbstähnlich. Nach Zhang and Wheatcraft [1996] sind die Makrodispersivitäten nicht nur abhängig von der maximalen Längenskala  $L_{\max}$ , sondern auch von der fraktalen Dimension  $D$ . Die longitudinale Dispersivität lässt sich damit für den 1-dimensionalen Fall im isotropen porösen Medium wie folgt berechnen:

$$A_{11} = \frac{1}{2} \sigma_0^2 \frac{(L_{\max}/2\pi)^2}{\alpha_T} \quad (4.65)$$

Während die longitudinale Dispersivität in einer eindimensionalen isotropen Strömung proportional zu  $L_{\max}^2$  ist, ist sie in einer isotropen zwei- oder dreidimensionalen Strömung proportional zu  $L_{\max}$ :

$$A_{11}(2D) = \frac{\sigma_0^2}{\gamma^2} \left( \frac{6-2D}{7-2D} \right) \left( \frac{L_{\max}}{2\pi} \right) \quad (4.66)$$

$$A_{11}(3D) = \frac{\sigma_0^2}{\gamma^2} \frac{\pi}{2} \left( \frac{8-2D}{9-2D} \right) \left( \frac{L_{\max}}{2\pi} \right) \quad (4.67)$$

Im Gegensatz zur longitudinalen Dispersivität hängt die transversale nicht von der Korrelationslänge des Untergrundes, sondern von den korngerüstbedingten longitudinalen und transversalen Dispersivitäten ab und ist für den zweidimensionalen als auch den dreidimensionalen Fall identisch mit der jeweiligen Gleichung der stochastischen Methode (4.58) und (4.62) von [Gelhar and Axness, 1983; Gelhar, 1993; Neuman et al., 1987].

Vollständige Lösungen für die zwei- und dreidimensionale Makrodispersivitäten werden u.a. von [Zhang and Wheatcraft, 1996] vorgestellt. Im Falle einer Strömung horizontal zur anisotropen Schichtung des Untergrundes ergibt sich die transversale Makrodispersivität  $A_{33}$ :

$$A_{22} = \frac{\sigma^2}{8\gamma^2} \left[ (\alpha_L + 3\alpha_T) + \alpha_T(4-D) \left( 1 - \frac{\alpha_y^2}{\alpha_x^2} \right) \right] \quad (4.68)$$

wobei  $\alpha_x$  und  $\alpha_y$  Koeffizienten sind, die die Anisotropie beschreiben. Nach der fraktalen Methode ist demnach die transversale Makrodispersivität im Gegensatz zur stochastischen

Theorie nicht nur von der Heterogenität, sondern auch von den korngerüstbedingten Dispersivitäten abhängig.

Da die fraktale Korrelationslänge  $L_{\max}$  im Gegensatz zu den Korrelationslängen der stochastischen Theorie sehr groß sein kann, so werden auch die Makrodispersivitäten entsprechend größer. Es bleibt zu prüfen, ob dieser Ansatz die realen Prozesse besser beschreiben kann. Ist doch die Annahme der Stationarität und der räumlichen Periodizität in der stochastischen Theorie eine Begrenzung und nicht immer in natürlichen Vorgängen anzutreffen. Die Einteilung des bekannten Borden Aquifer in verschiedene Permeabilitätszonen wäre ein solches Beispiel [Sudicky *et al.*, 1983; Wheatcraft and Tyler, 1988].

#### 4.4 Fließwegansätze

Die so genannten Fließwegansätze sind empirische Formeln zur Beschreibung der Dispersion im präasymptotischen Bereich. Es wird davon ausgegangen, dass die longitudinale Dispersion linear [Matheron and de Marsily, 1980] oder potential mit der Fließlänge anwachsen. Beims [1983] und Luckner [1984] haben aus Tracerexperimenten folgende empirische Formel gefunden:

$$A_L = a \cdot x^b \quad (4.69)$$

Während vor genannte Autoren ein unbegrenztes Anwachsen der Längsdispersion mit der Fließlänge  $x$  annehmen, berücksichtigt Naff [1984] bereits ein asymptotisches Verhalten:

$$D_L(t) = D_{L,\infty} \left( 1 - \exp\left(\frac{-t}{p}\right) \right) \quad (4.70)$$

Die oben genannten Parameter  $p$ ,  $a$  und  $b$  müssen aus Experimenten empirisch gewonnen werden und sind nur für den beobachteten Fall bzw. Untergrund gültig. Es können keine Prognosen für andere poröse Medien gemacht werden.

Ein einfacher Ansatz zur Beschreibung der Makrodispersivität im heterogenen Aquifer entwickelte Gelhar [1996]. Dabei wird ein einfach geschichteter Aquifer und eine zur Schichtung parallele Strömung vorausgesetzt und die Varianz der Partikelverschiebung kann wie folgt definiert werden:

$$\sigma_x^2 = E\{(x - \bar{x})^2\} = \bar{x}^2 \frac{\sigma_k^2}{\bar{K}^2} \quad (4.71)$$

Das bedeutet, dass die Varianz der Konzentrationsverteilung  $\sigma_x^2$  direkt proportional zur quadratischen mittleren Fließlänge  $\bar{x}$  und zur Varianz der Durchlässigkeitsverteilung ist. Aus (4.71) kann die von der Fließlänge abhängige longitudinale Dispersivität berechnet werden:

$$A_L = \frac{1}{2} \frac{d\sigma_x^2}{d\bar{x}} = \frac{\sigma_k^2}{K^2} \bar{x} \quad (4.72)$$

## 4.5 Upskaling-Verfahren

Beim den so genannten Upscaling-Verfahren werden die Permeabilitäten eines heterogenen porösen Mediums hoch skaliert, um aus den Bilanzgleichungen der mikroskopischen Skala die makroskopischen Bilanzgleichungen zu erhalten. Durch die unterschiedliche Art der Vorgehensweise können folgende Upskaling-Verfahren unterschieden werden: Die einfachste Upscaling-Methode ist die Volumenmittelung. [Hassanazideh et al., 1979; Wood et al., 2003; Bayer-Raich et al., 2004; Drew et al., 1999]. In dieser Methode werden die Heterogenitäten für Volumen einer kleineren Skala entsprechend gemittelt und daraus geschlossene Lösungen für die größeren Skalen berechnet. Obwohl in der Forschung bezüglich chemischer Stoffe bereits seit langem intensiv genutzt, fand diese Methode bisher kaum Verwendung in der Grundwasserhydrologie. Eine zweite Upskalings-Methode ermittelt aus lokalen Lösungen für die Feinskala die gemittelten makroskopischen Lösungen. Eine nur beschränkt einsetzbare weitere Methode des Upskaling's ist die Homogenisierung [Lunati et al., 2002]. Effektive Werte lassen sich hier nur explizit für solche porösen Medien angeben, deren Heterogenitäten periodisch verteilt sind, nicht jedoch wenn sie stochastisch verteilt sind.

## 4.6 Mehrschichtenansätze

Bei diesem Konzept wird ein idealgeschichteter Aquifer angenommen. Die geologischen Gegebenheiten einer jeweiligen Schicht werden hinsichtlich ihrer hydraulischen Durchlässigkeiten schematisiert und durch mittlere Werte beschrieben. So entstehen vereinfachte ein- oder zweidimensionale Schichtenmodelle. In einem eindimensionalen Modell wird die Querdispersivität vernachlässigt und es kommt zum unbegrenzten Ansteigen der Längsdispersivität [Mercado, 1967]. Gelhar et al. [1979] fanden hierfür folgende Gleichung für die makroskopische Längsdispersion:

$$A_{L,\infty} = \frac{\pi}{3} \frac{\sigma^2}{K_G^2} \frac{\lambda^2}{\alpha_T} \quad (4.73)$$

Hierbei ist  $\lambda$  die Korrelationslänge der Durchlässigkeit quer zur Strömungsrichtung und entspricht im ideal geschichteten Medium der mittleren Dicke der Einzelschichten. Bei einem

häufig verwendetes Verfahren, das auch die transversale Dispersivität berücksichtigt werden kann, wird der Grundwasserleiter in zwei horizontale Bereiche mit unterschiedlichen hydraulischen Eigenschaften eingeteilt [Rinnert, 1983, Chen, 1985; Thiele, 1985; Schäfer, 1991]. In natürlichen Systemen kommt ein ideal geschichteter Aquifer jedoch nicht vor, deshalb sollte von einer Variabilität der Durchlässigkeit in mindestens 2 Dimensionen ausgegangen werden. Vereinfacht kann es sich jedoch als sinnvoll erweisen, ein zweidimensionales Schichtenmodell zu entwickeln, beispielsweise wenn erste konservative Aussagen für den Transport eines Schadstoffes gemacht werden müssen.

# 5 Transport hoher Stoffkonzentrationen

## 5.1 Entwicklung konzentrationsabhängiger Konzepte

Alle existierenden Modelle des Stofftransportes in porösen Medien basieren auf zwei grundlegenden empirischen Zusammenhängen: dem Darcy- und dem Fick'schen Gesetz. Beide Gesetze beschreiben den linearen Zusammenhang zwischen einem Potentialgradienten und dem Massenfluss des Wassers (Darcy-Gesetz) bzw. des im Wasser gelösten Stoffes (Fick'sches Gesetz). Vergrößert sich der Potentialgradient über einen bestimmten Wert hinaus, scheint diese Linearität jedoch keine ausreichende Näherung mehr zu sein. Die Frage ist, ob das Darcy-Gesetz und das Fick'sche Gesetz bei hohen Konzentrationen noch gültig sind bzw. welche Modifikationen diese Gesetze erfahren müssen, um dem Phänomen hoher Stoffkonzentrationen Rechnung zu tragen.

Die in Kapitel 3 vorgestellten Dispersionsmodelle beschreiben ausnahmslos das Transportverhalten geringer Stoffkonzentrationen. Eine mikroskopische Beschreibung der Dispersion über Taylor- und Navier-Stokes-Gleichungen lassen keinen Einfluss der Fluideigenschaften auf die Dispersion zu. Eine erhöhte Viskosität des Fluid bewirkt lediglich eine Veränderung in den Absolutwerten für die mittlere und maximale Geschwindigkeit in einer Pore, nicht aber deren Verteilung [Moser, 1985]. Somit bleibt der Dispersionskoeffizient in mikroskopischen Modellen unabhängig von der Konzentration des Inhaltsstoffes. Wahrscheinlichkeitsmodelle, die die Transportprozesse als normalverteilte Zufallsprozesse beschreiben, betrachten die Brown'sche Bewegung als Auslöser für die Vermischungsprozesse. Den Teilchen werden zufällige Bewegungen, jedoch keine Fluideigenschaften zugeteilt, und damit lassen sich mit diesen Modellen ebenfalls keine Abhängigkeiten der Dispersionskoeffizienten von den Fluideigenschaften beschreiben. Auch in den Kontinuummodellen lassen sich die Fluideigenschaften nicht berücksichtigen. Die

Transportgleichung wird hier durch einen Volumenmittelungsprozess aus den mikroskopischen Bilanzgleichungen hergeleitet und der Dispersionskoeffizient ist damit nur abhängig von der Strömungsgeschwindigkeit und den Eigenschaften des porösen Mediums, nicht jedoch von den Fluideigenschaften.

Die Mehrzahl der Wissenschaftler gehen von der Gültigkeit des Fick'schen Gesetzes in der mikroskopischen Ebene aus und bilden daraus über Mittelungsprozesse die makroskopischen Bilanzgleichungen [Bear, 1972; Bear and Bachmat, 1967, 1991]. Eine solche Beschreibung ist jedoch beschränkt und bleibt physikalisch unrichtig. Spitz [1985] leitet aufbauend auf Modellvorstellungen für Fluidströmungen durch poröse Medien von De Josselin de Jong [1958] folgende konzentrationsabhängige laterale Dispersion für eine Schichtenströmung her:

$$\frac{D'_T}{D_T} = \left(1 + \frac{\partial \rho}{\rho_0 J_0}\right)^{-1} \quad (5.1)$$

Der *dichteabhängige* Dispersionskoeffizient  $D'_T$  ist damit umgekehrt proportional zum Dichteunterschied  $\partial \rho$  sowie proportional zum hydraulischen Gradienten  $J_0$ .

Thiele [1997] entwickelte unter Annahme eines vollständigen Boussinesq-System einer Grenzschichtströmung eine approximative analytische Lösung für die transversale Dispersion. Durch Reihenentwicklung über die normierte Konzentration  $\theta = c/c_0$  ergibt für die stabile Dichteströmung folgende Gleichung:

$$\theta(\xi, \eta) = \frac{1}{2} \left(1 - \operatorname{erf} \frac{1}{2} \eta\right) - \frac{\beta_1}{4\sqrt{\pi}} e^{-\frac{\eta^2}{4}} \operatorname{erf} \frac{1}{2} \eta \cdot \xi + \dots \quad (5.2)$$

wobei  $\xi$  die Nichtähnlichkeitsvariable nach (3.30) ist, der Faktor  $\beta$  der Anteil der mechanischen an der Gesamtdispersion:

$$\beta_1 = \frac{\alpha_T u}{D_{\text{mol}} + \alpha_T u} \quad (5.3)$$

sowie  $\eta$  ein dimensionsloser Parameter, der eine normierte Höhe beschreibt:

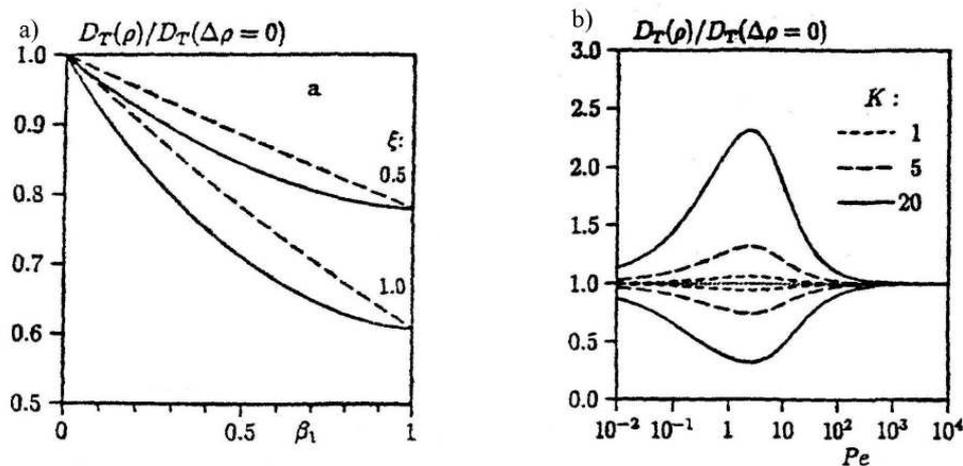
$$\eta = \frac{y}{x} \operatorname{Pe}_x^{1/2} = \frac{y}{x} \left(\frac{\mathbf{u} \cdot \mathbf{x}}{D_T}\right)^{1/2} \quad (5.4)$$

Damit können für beliebige  $\eta$  und nicht zu große  $\xi$  die entsprechenden normierten Konzentrationen  $\theta$  berechnet werden und aus den Konzentrationsprofilen direkt die *dichteabhängigen* transversalen Dispersivität [Spitz, 1985; Thiele, 1997]:

$$\frac{D_T(\rho)}{D_T} = \left[ \frac{\sigma(\rho)}{\sigma_0} \right]^2 = \left[ \frac{\eta(\theta = 0.8413) - \eta(\theta = 0.1587)}{2\sqrt{2}} \right]^2 \quad (5.5)$$

In Bild 5.1 ist der transversalen Dispersionskoeffizienten  $D_T$  in Abhängigkeit von dem Verhältnis der mechanischen zur hydrodynamischen Dispersion  $\beta_1$  und der Pecletzahl dargestellt [aus Thiele, 1997]. Folgende Schlussfolgerungen können daraus gezogen werden:

- Thiele [1997] zeigte die Unabhängigkeit des Diffusionskoeffizienten  $D_0$  von der Dichtedifferenz  $\Delta\rho$  und damit die physikalische Konsistenz des konstanten Diffusionskoeffizienten  $D_0$ . Demzufolge gibt es keine Dichteeffekte in einem reinen Diffusionsmodell, d.h. wenn  $\beta_1 = 0$  (Bild 5.1a).
- Im Übergangsbereich vom Diffusions- zum Dispersionsmodell, d.h. dem Bereich, in dem molekulare Diffusion und mechanische Dispersion in gleichen Anteilen auftreten ( $1 < Pe < 10$ ) ist der Dichteeffekt am stärksten sichtbar (Bild 5.1b).
- Für  $Pe < 1$  und  $Pe > 10$  sinkt die dichtebedingte Verminderung des Dispersionskoeffizienten mit  $Pe \rightarrow 0$  bzw.  $Pe \rightarrow \infty$  (Bild 5.1b).



**Bild 5.1:** Abhängigkeit des normierten dichteabhängigen transversalen Dispersionskoeffizienten  $D_T$  von a) dem Verhältnis der mechanischen zur hydrodynamischen Dispersion  $\beta_1$  für verschiedene Nichtähnlichkeitsfaktoren  $\xi$  und b) von der Pecletzahl für verschiedene konstante Durchlässigkeiten  $K$  [Thiele, 1997].

Die *dichteabhängigen* Dispersivitäten nach *Spitz* [1985] und *Thiele* [1997] beschränken sich jedoch auf den transversalen Eigenwert einer reinen Scherschichtströmung in einem homogenen porösen Medium.

Im Folgenden werden zwei derzeitig grundlegende und allgemeingültige Ansätze zur Beschreibung des konzentrationsabhängigen Transportes vorgestellt und miteinander verglichen:

1. der thermodynamische Ansatz und
2. der stochastische Ansatz.

## 5.2 Modelle zur Beschreibung dichteabhängiger Stoffströme

### 5.2.1 Thermodynamischer Ansatz

*Hassanizadeh & Gray* [1979a,b; 1986a,b; 1990] stellten eine neue fundamentale und allgemein gültige Theorie zur Beschreibung der Transportphänomene in porösen Medien vor. Auf der Grundlage thermodynamischer Gesetze entwickelten sie ein Modell der Mehrkomponentenströmung, mit dem auch nichtlineare Transportprozesse beschrieben werden können.

Die in Kapitel 3. beschriebenen Modelle der Stofftransportes bzw. der Dispersion gehen von geringen Konzentrationen des Inhaltsstoffes aus und entkoppeln die Transportgleichung von der Strömungsgleichung. Bei hohen Stoffkonzentrationen ist die Gültigkeit dieser Annahme jedoch nicht mehr gewährleistet. Der disperse Massenstrom des Inhaltsstoffes ist somit nicht mehr klein gegenüber dem Gesamtmassenstrom und ergibt eine zusätzliche Masse innerhalb der Masseerhaltung des Fluids. Noch komplizierter wird es, sobald zusätzlich dazu noch Temperaturgradienten oder Ionenkräfte auftreten. Die Beschreibung solch gekoppelter Effekte ist damit nach *Hassanizadeh* [1986a] nur möglich, wenn die Erhaltungsgleichungen für Masse, Momente und Energie grundlegend formuliert werden.

*Hassanizadeh & Gray* [1986a] stellen diese mikroskopische Bilanzgleichungen einer thermodynamischen Eigenschaft  $\psi^\alpha$  für jede Komponente  $\alpha$  ( $\alpha = 1$  bis  $N$ ) der flüssigen Phase wie folgt auf:

$$\frac{\partial}{\partial t} (\rho^\alpha \psi^\alpha) + \bar{\nabla} \cdot (\rho^\alpha \psi^\alpha \mathbf{v}^\alpha) - \bar{\nabla} \cdot \mathbf{i}^\alpha - \rho^\alpha \chi^\alpha = \rho^\alpha G^\alpha \quad (5.6)$$

Wobei  $\mathbf{i}^\alpha$  ein Vektor des Massenflusses ist,  $\chi^\alpha$  ein externer und  $G^\alpha$  ein interner Quellen- und Senkenvektor ist. Diese Bilanzgleichungen können durch entsprechende Ausdrücke für die

thermodynamischen Eigenschaften Masse, Moment oder Impuls, Energie und Entropie aufgestellt werden. Eine genaue Herleitung dieser Gleichungen kann in *Hassanizadeh & Gray* [1986a] nachgelesen werden. Durch entsprechende Randbedingungen entfallen die Bilanzgleichungen für die Energie und die Entropie und wir erhalten folgende mikroskopischen Massebilanz- (5.7) und Momenten-Bilanzgleichung (5.8) für jede Komponente  $\alpha$  des Mehrphasensystems:

$$\frac{\partial \rho^\alpha}{\partial t} + \bar{\nabla} \cdot (\rho^\alpha \mathbf{v}^\alpha) = \rho^\alpha r^\alpha \quad (5.7)$$

$$\frac{\partial \rho^\alpha}{\partial t} (\rho^\alpha \mathbf{v}^\alpha) + \bar{\nabla} \cdot (\rho^\alpha \mathbf{v}^\alpha \mathbf{v}^\alpha) - \bar{\nabla} \cdot \boldsymbol{\sigma}^\alpha - \rho^\alpha \mathbf{g}^\alpha = \rho^\alpha \mathbf{t}_i^\alpha \quad (5.8)$$

wobei  $\boldsymbol{\sigma}$  ein Tensor für die Schubspannung der Komponente  $\alpha$  ist und  $\mathbf{t}_i$  innere Kräfte sind, die von anderen Inhaltsstoffen auf die Komponente  $\alpha$  ausgeübt werden sowie  $r$  ein Quellen- und Senkenterm. Streng genommen muss auch das poröse Medium als Mehrphasenkontinuum angenommen werden und entsprechende Bilanzgleichungen aufgestellt werden. Es wird jedoch davon ausgegangen, dass die Bewegungen der Komponenten innerhalb und um die Gesteinsphase nicht bedeutend ist und damit vernachlässigt werden kann. *Hassanizadeh & Gray* [1986a] bezieht in seinem Ansatz auch die Grenzschicht zwischen Fluid und Gestein mit ein und stellt entsprechende Bilanzgleichungen auf. Über Mittelungsprozesse [*Hassanizadeh & Gray*, 1979a] erhält man für jede Komponente und jede Eigenschaft des Mehrphasensystems jeweils eine makroskopische Massenbilanzgleichung. Somit ergeben sich für die makroskopischen Massebilanzgleichungen der gesamten Flüssigkeitsmasse die bekannte Strömungsgleichung (2.11) und für den transportierten Inhaltsstoff die Transportgleichung (2.25). Die Impulserhaltungsgleichungen für die gesamte Fluidphase (5.9) und für die darin enthaltene Komponente  $\alpha$  (5.10) sind folgendermaßen:

$$n_e \rho \frac{\partial \mathbf{v}}{\partial t} + n_e \rho \mathbf{v} \bar{\nabla} \cdot \mathbf{v} - \bar{\nabla} \cdot \boldsymbol{\sigma} - n_e \rho \mathbf{g} = \mathbf{T}^f \quad (5.9)$$

$$n_e \rho^\alpha \frac{\partial \mathbf{v}^\alpha}{\partial t} + n_e \rho^\alpha \mathbf{v}^\alpha \bar{\nabla} \cdot \mathbf{v}^\alpha - \bar{\nabla} \cdot \boldsymbol{\sigma}^\alpha - n_e \rho^\alpha \mathbf{g} = \mathbf{T}^\alpha \quad (5.10)$$

Der Term  $\mathbf{T}^\alpha$  ist dabei der Impulsaustausch der Komponente  $\alpha$  mit den anderen Inhaltsstoffen der gesamten Fluidphase. Unter Annahme vernachlässigbarer Trägheitskräfte und mittels thermodynamischer Bestimmungsgleichungen können die Gleichungen (5.9) und (5.10) nach *Hassanizadeh & Gray* [1980, 1986a] wie folgt vereinfacht werden:

$$\bar{\nabla} p - \rho \mathbf{g} = \boldsymbol{\tau}^f(\rho, \omega, \mathbf{v}, \mathbf{j}) \quad (5.11)$$

$$\bar{\nabla} \hat{\mu}^\alpha = \boldsymbol{\tau}^\alpha(\rho, \omega, \mathbf{v}, \mathbf{j}) \quad (5.12)$$

- $\tau^f$       der Fließwiderstand des porösen Mediums gegenüber der Strömung  
 $\tau^\alpha$       der Widerstand des Gesamtsystems gegenüber dem dispersen Transport  
 $\hat{\mu}^\alpha$       relatives chemisches Potential der Komponente  $\alpha$

Wobei  $\tau^f$  der Fließwiderstand des porösen Mediums gegenüber der Strömung des Fluids ist und  $\tau^\alpha$  der Widerstand des Gesamtsystems gegenüber dem dispersen Transport. Der disperse Transport wird damit sowohl vom porösen Medium als auch vom Wasser selbst behindert. Gleichungen (5.11) und (5.12) sind nur gültig unter der Annahme isothermer Bedingungen sowie der Gravitationskraft als einziger wirkender externer Körperkraft. Gleichung (5.11) lässt sich als Tendenz der Flüssigkeit auffassen, von Bereiche hohen dynamischen Drucks in Bereiche niedrigeren Drucks zu bewegen. Der Fließwiderstand  $\tau^f$ , der dieser Bewegung entgegenwirkt, ist wiederum abhängig von Fließgeschwindigkeit und lässt sich durch Taylorreihenentwicklung bezüglich der Darcy-Geschwindigkeit  $v$  darstellen. Für kleine Geschwindigkeiten ist damit eine lineare Gleichung eine ausreichende Näherung und es entsteht die bekannte Darcy-Gleichung. Für höhere Geschwindigkeiten müssen höhere Taylorterme berücksichtigt werden und es ergibt sich die so genannte Forchheimer-Gleichung [Hassanizadeh and Gray [1986a]:

$$(1 + a\mathbf{v})\mathbf{v} = -(\mathbf{k} / \mu) \cdot (\nabla p - \rho\mathbf{g}) \quad (5.13)$$

wobei  $a$  der Forchheimer-Koeffizient ist. Analog dazu kann der  $\tau^\alpha$  als Widerstand gegenüber der Tendenz des Inhaltstoffes betrachtet werden, sich von Gebieten hohen chemischen Potentials zu denen niedrigeren Potentials zu bewegen und kann durch Taylorreihenentwicklung über  $j$  definiert werden. Für kleine Stoffströme  $j$  ist eine lineare Beziehung und damit das Fick'sche Gesetz ausreichend. Wenn der Konzentrationsgradient sehr groß wird, kann unter Vernachlässigung von Taylortermen höherer als zweiter Ordnung folgende quadratische Beziehung zwischen  $\tau^\alpha$  und dem dispersen Massenstrom  $j$  aufgestellt werden:

$$\tau^\alpha = -R^\alpha (1 + \beta_c \cdot j') j' \quad (5.14)$$

Dabei ist  $\mathbf{j}'$  der *dichteabhängige* Massenstrom,  $j'$  die Magnitude des Tensors  $\mathbf{j}'$  ist sowie  $\mathbf{R}^\alpha$  ein Tensor zweiter Ordnung, der den Widerstand des porösen Mediums gegenüber der Dispersion des Fluids beschreibt. Ersetzt man  $\hat{\mu}^\alpha$  durch den Konzentrationsgradienten  $\nabla c$  und setzt isotherme Bedingungen voraus, ergibt sich  $j' = -\rho\mathbf{D} \cdot \nabla c$ .  $\mathbf{D}$  ist der Dispersionstensor, der nach Hassanizadeh and Leijnse [1995] von dem inversen Widerstand  $\mathbf{R}^\alpha$  abhängt:

$$\mathbf{D} = \frac{1}{\rho} \frac{\partial \hat{\mu}^\alpha}{\partial c} (\mathbf{R}^\alpha)^{-1} \quad (5.15)$$

Setzt man die Gleichungen (5.12), (5.15) und (5.14) ein, erhält man folgende nichtlineare Dispersionsgleichung:

$$(1 + \beta_c \cdot \mathbf{j}') \mathbf{j}' = -\rho \mathbf{D} \cdot \nabla c \quad (5.16)$$

wobei  $\beta_c$  ein Koeffizient ist, der durch experimentelle Anpassung an den nichtlinearen Dispersionsansatz empirisch ermittelt werden kann [Hassanizadeh and Gray, 1990]. Watson et al. [2002] führten eindimensionale Säulenversuche zur Verifizierung des Fick'schen Gesetzes im Bereich hoher Konzentrationen bis 200 g/l durch. Sie fanden einen proportionalen Zusammenhang zwischen  $\beta_c$  und der inversen Strömungsgeschwindigkeit  $u$ :

$$\beta_c = R |u|^{-s} \quad (5.17)$$

wobei  $R$  und  $s$  Parameter sind, die von der Körnungsart des porösen Mediums abhängen. Nach Schotting et al. [1999] können nichtlineare Fick'sche Massenströme vernachlässigt werden, wenn die Strömungsgeschwindigkeit sehr groß wird ( $v > 259$  m/d).

Löst man die Gleichung (5.16) nach dem dichteabhängigen dispersen Stoffstrom auf, erhält man folgende Formel, die zur Implementierung in numerischen Programmen verwendet werden kann [Moser, 1986]:

$$\mathbf{j}' = \frac{-2\rho \mathbf{D}_{ij} \nabla c}{1 + \sqrt{1 - 4\beta_c \rho \mathbf{D}_{ij} \nabla c}} \quad (5.18)$$

Das Verhältnis des dichterduzierten zum Dispersionskoeffizienten im Tracerzustand  $D'_{ij} / D_{ij}$  ergibt sich aus (5.18) wie folgt:

$$\frac{D'_{ij}}{D_{ij}} = \frac{2}{1 + \sqrt{1 + 4\beta_c \rho \mathbf{D}_{ij} \nabla c}} \quad (5.19)$$

Der Dispersionskoeffizient  $D_{ij}$  sinkt mit:

- steigendem Konzentrationsgradienten  $\nabla c$  und
- steigendem Dispersionskoeffizient  $D_{ij}$  im Tracerzustand.

Experimentelle Untersuchungen von Schotting et al. [1999] ergaben, dass sich bereits für eine Dichtedifferenz von 6,4 kg/m<sup>3</sup> ( $c = 8000$  ppm) die Dispersivität um 13 % und für eine

Dichtedifferenz von  $21 \text{ kg/m}^3$  ( $c = 30000 \text{ ppm}$ ) um  $35 \%$  verringerte, wobei die Filtergeschwindigkeit  $v = 5.4 \cdot 10^{-4} \text{ m/s}$  betrug. Diese dichtebedingten Reduktionen des Dispersionskoeffizienten sind enorm und können deshalb bei der Lösung der Strömungs- und Transportgleichungen nicht vernachlässigt werden. Ohne Berücksichtigung nichtlinearen Stoffströme implizieren die numerischen Modelle größere Dispersivitäten als real anzutreffen. Eine Reduzierung der Dispersion mit steigenden Konzentrationskontrasten – wie sie in stabilen Dichteströmungen erwartet wird – kann dann nicht beobachtet werden.

## 5.2.2 Stochastischer Ansatz

Ein anderer Ansatz zu Beschreibung konzentrationsabhängiger Transportprozesse ist die bereits in 4.1.2 beschriebene stochastische Methode [Gelhar *et al.*, 1979, Gelhar and Axness, 1983; Gelhar and Welty, 1991, 1996, 2003]. Die durch Störung aller Variablen der Strömungs- und Transportgleichung einschließlich der Zustandsgrößen Dichte und Viskosität hergeleitete analytische Formel für die longitudinale Makrodispersion im isotropen porösen Medium kann nach Moser [1987] mit Substitution von  $\exp(-2a_1) = 1 - 2a_1$  wie folgt dargestellt werden:

$$A_{11} = \frac{\sigma_f^2 \lambda}{\gamma_1^2} e^{(-2a_1)} = \frac{\sigma_f^2 \lambda}{\gamma_1^2} (1 - 2a_1) \quad \text{mit} \quad (5.20)$$

$$a_1 = \beta_c G_1 \bar{x} \left[ \frac{1}{\gamma_1} + \frac{\partial \rho_L}{\partial \mu_L} \frac{K_L g}{v} \right] \quad (5.21)$$

wobei  $a_1$  ein Parameter ist, der sich nach (5.21) aus dem Konzentrationsgradienten  $G_1 = \nabla c$  und einer Konstanten zusammensetzt:  $a_1 = \varepsilon/2 \cdot \nabla c$ . Betrachtet man die Gleichung für die transversale Makrodispersion in einem anisotropen Medium (4.48), lässt diese wie folgt darstellen:

$$A_{33} = \frac{\sigma_f^2 \lambda}{\gamma_3^2} \cdot \frac{\xi(2\xi+1)}{2(\xi+1)^2} (1 - 2a_3) \quad \text{mit} \quad (5.22)$$

$$a_3 = G_3 \bar{x} \cdot \frac{1.3}{\gamma_3} \left[ \frac{(\xi+1)^2}{2(1-\xi^2)(2\xi+1)} \right] \quad (5.23)$$

wobei  $\xi = \lambda_y/\lambda_x$  ist. Der Parameter  $a_3$  ist wie im isotropen Fall (5.20) ein Produkt aus dem Konzentrationsgradienten und einer Konstante:  $a_3 = \varepsilon_c/2 \cdot \nabla c$ . Daraus lässt sich folgende Gleichung für die *dichteabhängige* Makrodispersivität  $A_{ij}$  schlussfolgern:

$$A'_{ij} = \frac{\sigma^2 \lambda_1}{\gamma^2} (1 - \varepsilon_c \bar{\nabla} c) \quad (5.24)$$

wobei  $\varepsilon_c$  Koeffizient ist, der analog  $\beta_c$  (Abschnitt 5.2.1) empirisch ermittelt werden kann. Unter der Annahme, dass die molekulare Diffusion und korngerüstbedingte Dispersivität Konstanten sind, kann daraus der *dichteabhängige* Stoffstrom  $\mathbf{j}'$  dabei wie folgt abgeleitet werden:

$$\mathbf{j}' = -\rho D \cdot \bar{\nabla} c (1 - \varepsilon_c \rho D \cdot \bar{\nabla} c) = (1 - \varepsilon \cdot j) \mathbf{j} \quad (5.25)$$

Unter Anwendung des Fick'schen Gesetzes erhält man aus (5.25) das Verhältnis des dichterereduzierten zum Dispersionskoeffizienten im Tracerzustand  $D'_T / D_T$ :

$$\frac{D'_{ij}}{D_{ij}} = 1 - \varepsilon_c \rho \cdot D_{ij} \bar{\nabla} c \quad (5.26)$$

Ebenso wie im zuvor diskutierten thermodynamischen Ansatz sinkt der Dispersionskoeffizient  $D_{ij}'$  mit:

- steigendem Konzentrationsgradienten  $G_i = \nabla c$
- steigendem Dispersionskoeffizienten  $D_{ij}$  im Tracerfall.

### 5.3 Diskussion und Vergleich nichtlinearer Dispersionsansätze

Betrachtet man die beiden in Abschnitt 5.2 vorgestellten nichtlinearen Dispersionsansätze aus den Gleichungen (5.16) und (5.25) wird folgendes sichtbar:

[1] Das Fick'sche Gesetz bleibt selbst mit hohen Konzentrationsgradienten weiterhin gültig und wird lediglich durch einen zusätzlichen Term im Sinne einer Taylorreihenentwicklung hinsichtlich des Stoffstromes generalisiert.

[2] Die Ansätze unterscheiden sich in diesem Term, sind jedoch in ihrer Aussage identisch. Während mit dem stochastischen Ansatz ein quadratischer Term vom Stoffstrom im Tracerfall abgezogen wird (5.27), addiert man mit dem thermodynamischen Ansatz zum *dichteabhängigen* Massestrom einen quadratischen Term hinzu (5.28).

$$\mathbf{j}' = (1 - \varepsilon_c \cdot j) \mathbf{j} \quad (5.27)$$

$$(1 + \beta_c \cdot j') \mathbf{j}' = \mathbf{j} \quad (5.28)$$

Die Sensitivität des Faktor  $\beta_c$  ist nach Moser [1987] geringer als für den Faktor  $\varepsilon$ . Für hohe Strömungsgeschwindigkeiten bzw. Pecletzahlen sowie geringe Konzentrationen können beide Faktoren vernachlässigt werden.

[3] Beide Ansätze sind für Transportprozesse in anisotropen porösen Medien gültig. Zwar wurde der thermodynamische Ansatz unabhängig von der Heterogenität eines Aquifers entwickelt, da Heterogenitäts- und Dichteinfluss jedoch als zwei getrennte Terme in die Gleichung der Makrodispersivität eingehen, ist dieser Ansatz auch für heterogene poröse Medien gültig.

[4] Um die Transportvorgänge auch mit hohen Konzentrationsgradienten richtig zu modellieren, muss der modifizierte disperse Stoffstrom in einen entsprechenden numerischen Programmcode implementiert werden. Der nichtlineare Massenstrom  $\mathbf{j}'$  (5.18) oder (5.25) ersetzt den linearen Massenstrom  $\mathbf{j}$  in der Transportgleichung. Aus der Transportgleichung mit linearen Massenströmen:

$$n_e \frac{\partial(\rho c)}{\partial t} + \bar{\nabla} \cdot (\rho \mathbf{v} c) = -\bar{\nabla} \cdot (\rho \mathbf{D} \cdot \bar{\nabla} c) \quad (5.29)$$

entstehen durch Einsetzen von (5.18) bzw. (5.25) folgende modifizierte Transportgleichungen nach dem stochastischen Ansatz (5.30) sowie nach dem thermodynamischen Ansatz (5.31):

$$n_e \frac{\partial(\rho c)}{\partial t} + \bar{\nabla} \cdot (\rho \mathbf{v} c) = -\bar{\nabla} \cdot (\rho \mathbf{D} \cdot \bar{\nabla} c (1 - \varepsilon_c \rho \mathbf{D} \cdot \bar{\nabla} c)) \quad \text{bzw.} \quad (5.30)$$

$$n_e \frac{\partial(\rho c)}{\partial t} + \bar{\nabla} \cdot (\rho \mathbf{v} c) = -\bar{\nabla} \cdot \left[ \frac{-2 \rho \mathbf{D} \bar{\nabla} c}{1 + \sqrt{1 - 4 \beta_c \rho \mathbf{D} \bar{\nabla} c}} \right] \quad (5.31)$$

wobei der jeweiligen Parameter  $\varepsilon_c$  und  $\beta_c$  als konstante Eingabeparameter definiert werden müssen.

# 6 Experimente in einem stochastischen Modellaquifer

## 6.1 Konfiguration des experimentellen Modells

### 6.1.1 Aufbau der Versuchsanlage

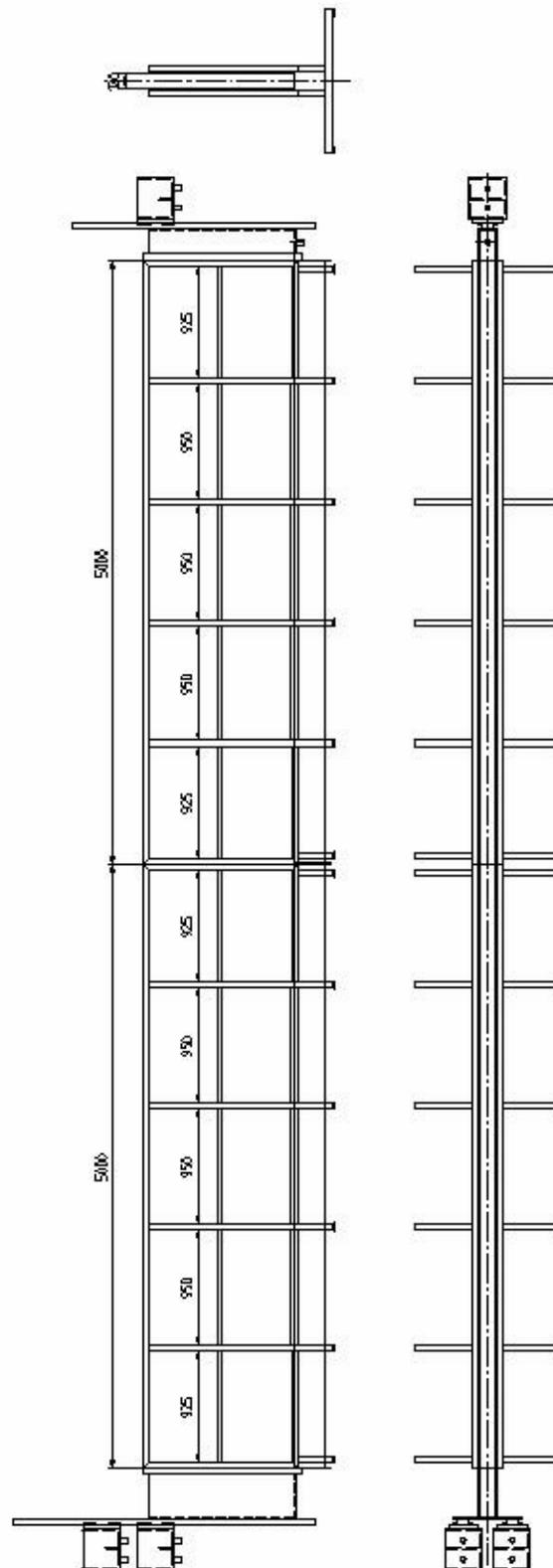
Zur Verifizierung der stochastischen Modelle wurden experimentelle Studien an einem 9.8 m langen, 1.225 m hohen und 10 cm breiten Modelltank der *Versuchsanstalt für Wasserbau und Wasserwirtschaft der Universität Kassel* durchgeführt (Bild 6.1). Mit dieser Versuchseinrichtung bietet sich die einmalige Möglichkeit, anhand von kontrollierten Strömungs- und Transportversuchen verschiedene Strömungs- und Transportmodelle in mittelskaligen zweidimensionalen Experimenten testen zu können. Das Ziel der Untersuchungen zur vorliegenden Arbeit war es, den gekoppelten Effekt der Fluidichte und der Heterogenität des Permeabilitätsfeldes auf die Makrodispersion zu quantifizieren.

Der Versuchstank besteht aus einer Stahlkonstruktion mit zwei Plexiglasplatten, die das poröse Medium umfassen. An den Stirnseiten des Tankes sind zwei Einlauf- und eine Auslaufkammer angebracht, die durch Lochblechgitter und zusätzlichem feinmaschigen Geotextilgewebe getrennt werden. Eine ca. 1 cm dicke Blähtonschicht am Boden des Tankes dichtet diesen nach unten ab. Anschließend wird der Sand zwischen vorübergehend eingesteckte Abstandhalter durch ein Rohr in Lagen von 2.5 cm - das entspricht der Packungshöhe - an die entsprechende Stelle gebracht und per Hand durch Stochern gleichmäßig verdichtet. Der Sand wird dabei nass eingebaut, um Lufteinschlüsse zu vermeiden. An der oberen Berandung werden zwischen Sandpackung und Tankdeckel eine 2 cm dicke Schaumstoffschicht und eine zusätzliche Gummimatte aufgebracht. Abschließend wird als Tankdeckel eine Abdeckplatte aus Plastik angeordnet, die mittels Stahlrohre und Schraubzwingen an die Sandpackung angepresst wird. Zur Einstellung der

Strömungsgeschwindigkeit befinden sich Überlaufbehälter am Einlauf und Auslauf, deren Höhen manuell einstellbar sind. Zur Messung des Konzentrationsverlaufes wurden an einer Seite Bohrungen ausgeführt und mit Probehähnen und Kanülen versehen. Genauere Erläuterungen zum konstruktiven Aufbau der Versuchsanlage sind in einer Projektbeschreibung von Ahrens u.a. [1999] enthalten. Bild 6.2 zeigt die An- und Draufsicht der Tankkonstruktion.



**Bild 6.1:** Tankmodell in der Versuchsanstalt für Umwelttechnik und Wasserbau der Universität Kassel.



**Bild 6.2:** Bauzeichnung des Versuchstand: Ansicht und Draufsicht [Ahrens u.a., 1999].

### 6.1.2 Abmessungen und Kenngrößen

Um die Größe des Tankmodells festzulegen, muss die zu erwartende Vermischungsbreite annähernd bekannt sein. Es kann angenommen werden, dass die longitudinale korngerüstbedingte Dispersionslänge etwa dem mittleren Korndurchmesser entspricht. Ermitteln wir den mittleren Korndurchmesser für die Sandpackungen 1 bis 3 ergibt sich damit folgende korngerüstbedingte Dispersivität  $\alpha_L$ :

$$\alpha_L \approx d_m = 6 \cdot 10^{-4} \text{ m} \quad (6.1)$$

Die transversale Dispersionslänge ist etwa eine Größenordnung kleiner als die longitudinale und kann vorab nach *Spitz* [1985] wie folgt angenommen werden:

$$\alpha_T \approx \frac{1}{8} \alpha_L = \frac{1}{8} d_m = 7.5 \cdot 10^{-5} \text{ m} \quad (6.2)$$

Im Fall, dass nur korngerüstbedingte Dispersion aufträte, erhielte man mit  $B = 2\sigma = \sqrt{2\alpha_T x}$  damit folgende maximale Vermischungsbreite  $B_{\max,1}$  an der am weitesten von der Einlaufkante entfernten Messebene mit  $x_{\max} = 9.3 \text{ m}$ :

$$B_{\max,1} = 2\sqrt{2 \cdot \alpha_T \cdot x_{\max}} = 2\sqrt{2 \cdot 7.5 \cdot 10^{-5} \cdot 9.3} = 7.5 \cdot 10^{-2} \text{ m} \quad (6.3)$$

Die größtmögliche Vermischungsbreite kann aus der Formel für die transversale Makrodispersivität (4.43) abgeschätzt werden. Dabei nimmt man an, dass in der Sandpackung 3 ( $\sigma^2 = 1.50$ ;  $\lambda_x = 0.3 \text{ m}$ ;  $\lambda_y = 0.075 \text{ m}$ ) die größten transversalen Makrodispersivitäten auftreten. Die Makrodispersivität wäre in diesem Fall mit  $\xi = \lambda_y/\lambda_x = 0.075/0.3 = 0.25$ :

$$A_T = \frac{\sigma_f^2 \lambda_x \xi}{\gamma_3^2} \frac{2\xi + 1}{2(\xi + 1)^2} = \frac{1.5 \cdot 0.3 \cdot 0.25}{1/0.1^2} \frac{2 \cdot 0.25 + 1}{2(0.25 + 1)^2} = 5.4 \cdot 10^{-4} \text{ m} \quad (6.4)$$

wobei  $\gamma_3 = J_1/J_3$  und der Strömungsgradient in z-Richtung ( $J_3$ ) durch numerische Tests mit maximal 1/10 des Gradienten in x-Richtung ( $J_1$ ) abgeschätzt wird. Daraus ergibt sich folgende maximal zu erreichende Vermischungsbreite:

$$B_{\max,2} = 2\sqrt{2 \cdot A_T \cdot x_{\max}} = 2\sqrt{2 \cdot 5.4 \cdot 10^{-4} \cdot 9.3} = 2.0 \cdot 10^{-1} \text{ m} \quad (6.5)$$

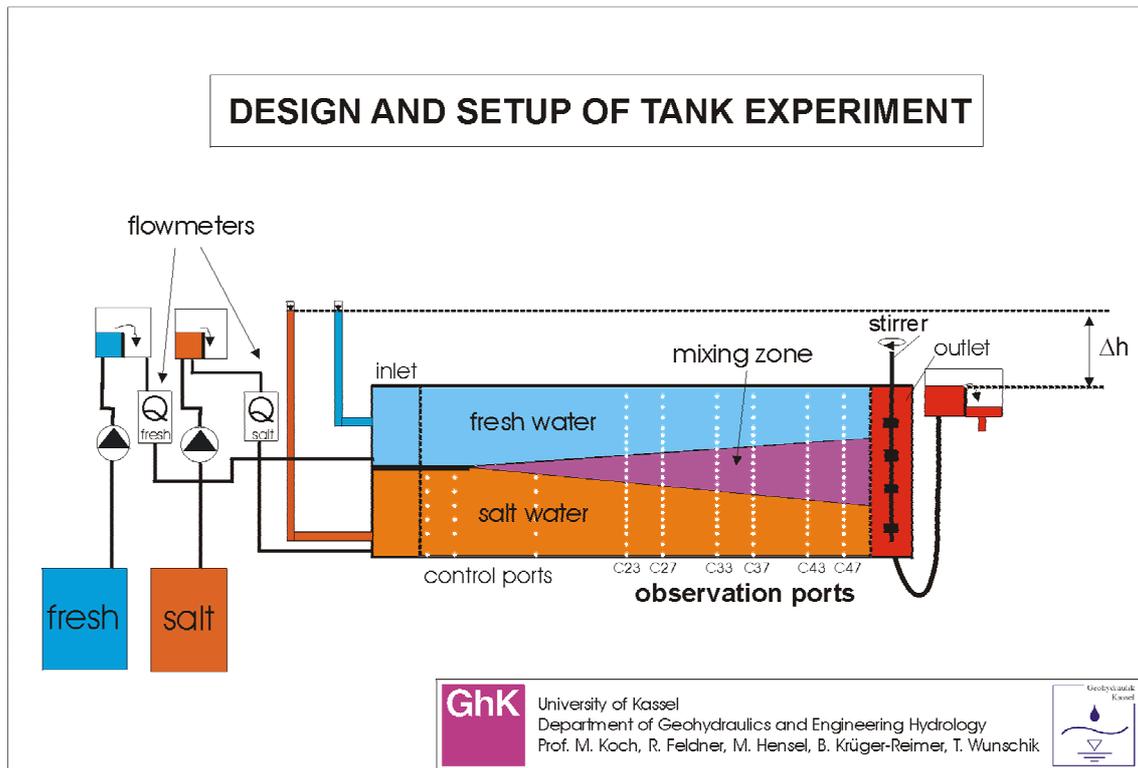
Die vorhandene Höhendimension von  $z = 1.225 \text{ m}$  ist damit das 6fache der maximal vermuteten Vermischungsbreite.

Untersucht man die Dimensionen in Hinsicht auf ergodische Zustände, kann folgendes festgestellt werden: Die Tanklänge mit  $x = 9.8$  m ist das 24fache der maximalen Korrelationslänge von  $\lambda_x = 0.4$  m. Damit sind die Dimensionen groß genug, um statistisch „homogene“ Verhältnisse zu erreichen, das heißt, das Untersuchungsobjekt ist um ein Vielfaches größer als die Heterogenitätsskala (Korrelationslänge) des stochastischen Mediums. Nach *Kinzelbach* [1992] reichen bereits 10 Korrelationslängen in Strömungsrichtung aus, um asymptotische Zustände zu erreichen.

### 6.1.3 Fließschema

Bild 6.3 zeigt schematisch den Ablauf der experimentellen Untersuchungen. Im Rahmen dieses Forschungsprojektes wurden experimentelle Untersuchungen zur Ermittlung der Dispersionskoeffizienten im heterogenen porösen Medium durchgeführt. Dazu durchströmten saline Tracer aus Natriumchlorid und entionisiertes und entgastes Süßwasser den unteren bzw. oberen Bereich des stochastischen Modellaquifers. Eine Entgasung des Fluids ist dabei wichtig, um eine vollgesättigte Strömung zu erzeugen.

Die Strömungsgeschwindigkeit wird über die Piezometerhöhen der Einlauf- und Auslaufbehälter eingestellt. Nach Erreichen des stationären Strömungszustandes wird die räumliche und zeitliche Konzentrationsverteilung der sich ausbreitenden Salzwasserfront an 6 vertikalen Messebenen mit insgesamt 126 Messstellen mittels elektrischer Leitfähigkeit ermittelt. Die Lage der Messpunkte im Versuchstank sowie die Koordinaten aller Messpunkte sind den Anlagen 1 und 2 zu entnehmen. Das zu verwendende Süß- und Salzwasser wird in jeweiligen Wassertanks gelagert. In der Auslaufkammer und im Salzwassertank befinden sich Kreiselpumpen bzw. ein Mixgerät, die das Fluid kontinuierlich homogen halten.



**Bild 6.3:** Fließschema des Tankversuches.

## 6.1.4 Versuchsdurchführung

### Versuchsprogramm

Um den gesamten Variantenbereich des zu untersuchenden Problems zu umfassen, die Anzahl der Versuche jedoch zu minimieren, bedient man sich der statistischen Versuchsplanung [Bandemer und Bellmann, 1988]. Diese besteht darin, die Faktoren so einzusetzen, dass sich ihre Effekte und Wechselwirkungen sowie die Variabilität dieser Effekte messen, untereinander vergleichen und gegen die zufällige Variabilität abgrenzen lassen. Sind  $k$  Faktoren zu prüfen, so benötigt man  $k$  Versuche und damit  $k^2$  Versuchseinheiten. Mit den Tankversuchen soll die Makrodispersivität in Abhängigkeit von der Verteilung der Permeabilitäten mit ihren Kenngrößen Varianz  $\sigma^2$  und Korrelationslängen  $\lambda_x$  und  $\lambda_y$  untersucht werden, d.h. es werden  $k = 3$  Faktoren in jeweils 3 Stufen untersucht. Mit 3 Sandpackungen können somit die 3 wichtigen Eigenschaften des heterogenen porösen Mediums stochastisch untersucht werden. Um die Abhängigkeiten der Konzentrationsausbreitung von den Parametern Konzentration und Strömungsgeschwindigkeit zu untersuchen, wurden diese Größen variiert, wobei bis zu 4 Stufen für die Geschwindigkeit sowie bis 4 Stufen für die Konzentrationen gewählt wurden,

da für beide Parameter ein nichtlineares Verhalten vermutet wurde. Insgesamt sind mit der ersten Versuchspackung 10, mit der zweiten 12 und der dritten 11 Versuche durchgeführt worden. Tabelle 6.1 zeigt alle durchgeführten Tankversuche.

Sandpackung <i>Nr.</i>	$\sigma_{\ln K}^2$	$\lambda_x$ [m]	$\lambda_y$ [m]	$u$ [m/d]	$c_{\text{NaCl}}$ [ppm]
1	0.25	0.20	0.05	1; 2; 4 1; 4	250 5000; 35000; 100000
2	1.00	0.40	0.20	1; 4; 8	250; 5000; 35000; 100000
3	1.50	0.30	0.075	1; 2; 4; 8 1; 4; 8	250; 5000 35000

**Tabelle 6.1:** Versuchsprogramm

## Versuchsablauf

### Einstellen der Randbedingungen

Um konstante Druckrandbedingungen im Einlaufbereich zu erhalten, muss die Piezometerhöhe für den Salzwasserbehälter  $h_{\text{salz}}$  in Abhängigkeit von der Dichte korrigiert werden. Aus der Bedingung, dass auf der Grenzlinie identischer Drücke vorhanden sein müssen, ergibt sich folgendes:

$$\rho_{\text{salz}} \cdot g \cdot h_{\text{salz}} = \rho_{\text{süß}} \cdot g \cdot h_{\text{süß}} \quad (6.6)$$

wobei  $\rho_{\text{salz}}, \rho_{\text{süß}}$  die Dichten der Fluide in den entsprechenden Süß- und Salzwasserbehältern sind. Daraus ergibt sich folgende äquivalente Piezometerhöhe für den Salzwasserbereich:

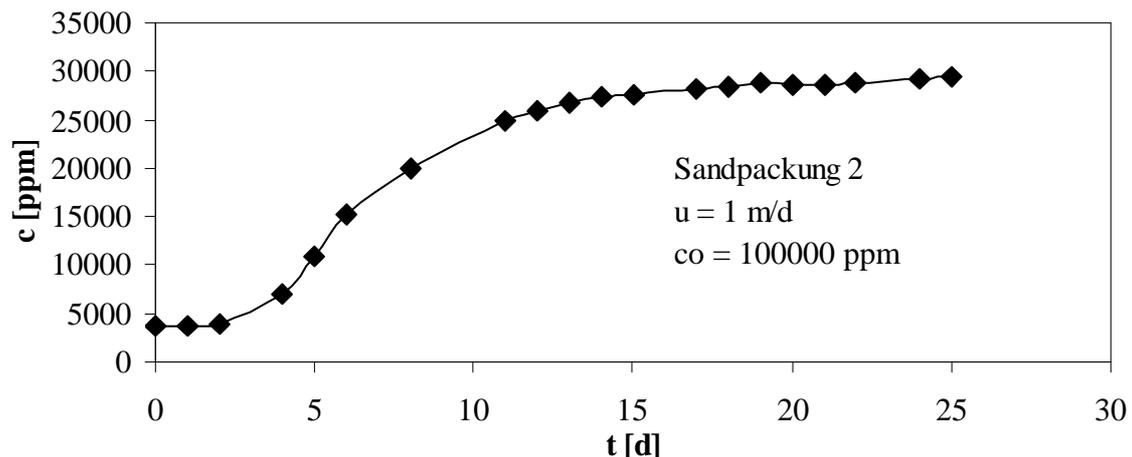
$$h_{\text{salz}} = \frac{\rho_{\text{süß}}}{\rho_{\text{salz}}} \cdot h_{\text{süß}} \quad (6.7)$$

Um homogene Durchflüsse an den Modellrändern zu erreichen, wird das Fluid im Salzwassertank vor dem Einlauf und der Auslaufbehälter kontinuierlich gemixt (siehe Abschnitt 8.2.3).

### Ermittlung des stationären Gleichgewichtszustandes

Um die transversale Dispersion nach der Modellkonfiguration einer Zweischichtenströmung (Abschnitt 3.4.3) zu ermitteln, darf diese sich mit der Zeit nicht mehr ändern. Mit fortschreitender Versuchszeit nähern sich die Strömungs- und Transportprozesse diesem Zustand an, dem so genannten stationären End- oder Gleichgewichtszustand. Über eine kontinuierliche Bestimmung der Leitfähigkeit im Auslauf wurde dieser Prozess bestimmt. Der stationäre Endzustand wurde in Abhängigkeit von der gewählten Abstandsgeschwindigkeit nach ca. 3 Tagen (für  $u = 8$  m/d) bis ca. 20 Tagen (für  $u = 1$  m/d) erreicht. Bild 6.4 zeigt den zeitlichen Verlauf der im Ablauf gemessenen Konzentrationen am Beispiel eines Versuches mit  $u = 1$  m/d und  $c = 100000$  ppm an der Sandpackung 2.

Bei einer Schichtenströmung werden zwei Anfangsbedingungen unterschieden: die Fahnenausbreitung und die Schichtenvermischung [Thiele, 1997]. Während bei der Fahnenausbreitung die anfänglichen Konzentrationen im gesamten Tankbereich Null sind, enthält der Modelltank bei der Schichtenvermischung zum Zeitpunkt  $t = 0$  schon die entsprechenden Fluidschichten, d.h.  $c_{\text{süß}} = 0$  und  $c_{\text{salz}} = c_0$ . Zwar ergaben sich durch unterschiedliche Anfangsbedingungen völlig verschiedene zeitliche Konzentrationsentwicklungen, die für  $t \rightarrow \infty$  jedoch demselben stationären Gleichgewichtszustand zustreben. Ist der untere Bereich zu Beginn des Versuches schon mit Salzwasser gefüllt - was bei der Schichtenströmung der Fall ist - wird dabei der stationäre Endzustand erheblich früher erreicht. Dies ist konform mit den Erkenntnissen von Thiele [1997].



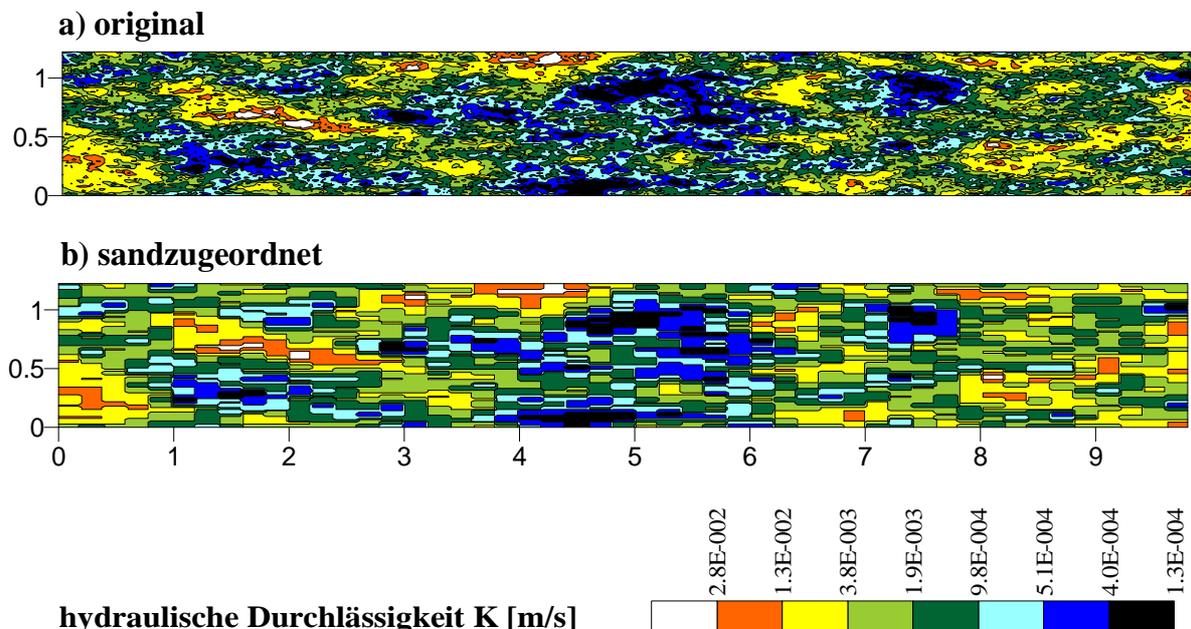
**Bild 6.4:** Zeitlicher Konzentrationsverlauf im Auslauf für einen Tankversuch mit  $u = 1$  m/d;  $c = 100000$  ppm an der Sandpackung 2.

## 6.2 Modellsande

Die jeweilige Sandpackung wurde im Vorfeld mittels Zufallsgenerator (Turning Band von *Tompson et al.*; 1989) als eine Realisationen eines korrelierten, lognormalverteilten Permeabilitätsfeldes mit vorgegebenen statistische Eigenschaften (Varianz  $\sigma^2$ , Mittelwert  $Y$ , Korrelationslängen  $\lambda_x$  und  $\lambda_y$ ) generiert.

Der Turning Band Algorithmus ist eine häufig verwendete Methode, mit der unter Vorgabe des Mittelwertes, der Varianz und der räumlichen Korrelation zwei- oder dreidimensionale stationäre Gauß'sche Zufallsfelder erzeugt werden können. Das mehrdimensionale Zufallsfeld wird dabei auf mehrere eindimensionale stochastische Prozesse reduziert, die anschließend mittels spektraler Methoden (Fourier-Transformation) generiert werden können. Für eine ausführliche Beschreibung des Turning Band Verfahrens wird auf *Tompson et al.* [1989] verwiesen.

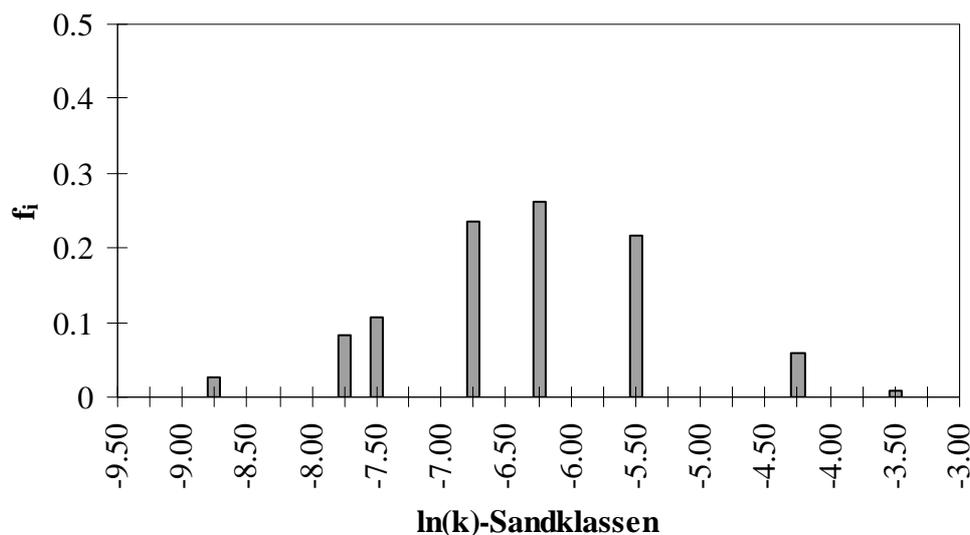
Das so erhaltene theoretische Feld wird durch geometrische Mittelungsprozesse in ein Gitter aus 20 cm breiten und 2.5 cm hohen Blöcken unterschiedlicher definierter Quarzsande approximiert. Diese Approximation war notwendig, um die Permeabilitätsverteilung der generierten Realisation optimal an die Permeabilitäten der vorhandenen Quarzsande anzupassen. Bild 6.5 zeigt am Beispiel der 2. Sandpackung, wie eine mit dem Generator erzeugte zufällige Realisation (6.5a) durch solch ein Blockgitter (6.5b) approximiert wird.



**Bild 6.5:** Entwicklung einer Sandpackung aus einem generierten Zufallsfeld am Beispiel der Sandpackung 2 mit  $\sigma^2 = 1.00$ ;  $\lambda_x = 0.4$  m;  $\lambda_y = 0.1$  m und  $K_G = 1.53$  m<sup>2</sup>/s.

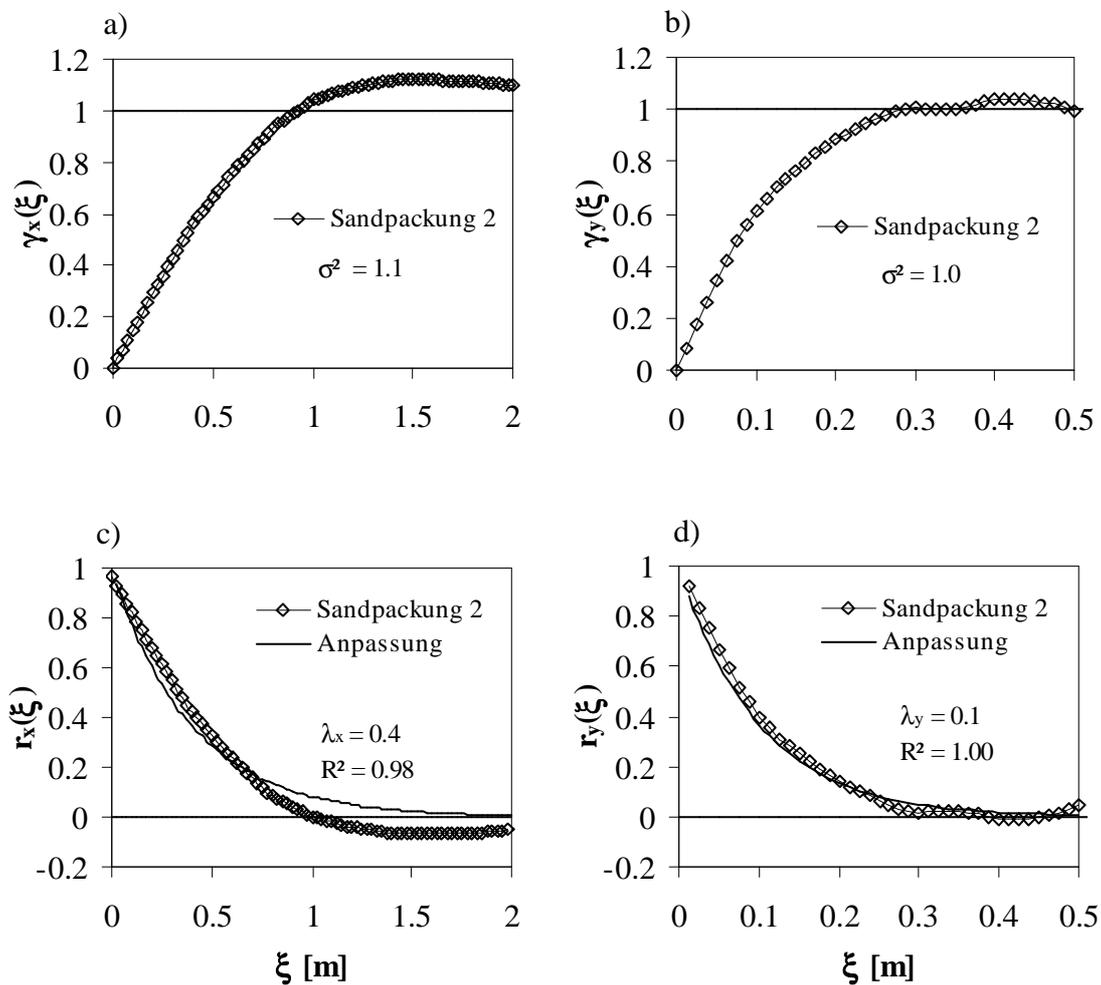
Im Histogramm (Bild 6.6) sieht man die Häufigkeitsverteilung der verwendeten Sande für die 2. Sandpackung. Analoge Histogramme für die 1. und 3. Sandpackung sind in Anlage 3 enthalten. Varianz und Korrelationslängen der approximierten Sandpackungen wurden mittels Programmpaket GSLIB [Deutsch et al., 1992] getestet, indem die Variogramme und Korrelogramme berechnet bzw. aus letzteren mit der Methode der kleinsten Fehlerquadrate die entsprechenden Korrelationslängen ermittelt wurden. Bild 6.7 zeigt die Variogramme und Korrelogramme am Beispiel der 2. Sandpackung. Analoge Darstellungen für die 1. und 3. Sandpackung sind in Anlage 4 und 5 zu finden.

Die Auswahl der stochastischen Eigenschaften orientierte sich dabei an den in der Literatur dokumentierten Feldstudien. Tabelle 6.2 zeigt einige ausgewählte Transportparameter der bekanntesten Feldexperimente, Tabelle 6.3 die Varianzen und geometrischen Mittel der Permeabilitäten einiger geologischer Formationen. Wir erkennen, dass die transversale jeweils bis zu 25fach kleiner ist als die longitudinale Dispersivität, die Varianzen für Sandformationen tendenziell sehr klein und für tonige Aquifer sehr groß sind. Eine umfangreiche Aufstellung der Aquifereigenschaften bisher weltweit durchgeführter Feldversuche ist in Gelhar et al. [1992] zu finden. Während für die erste Sandpackung eine relativ homogene mit einer Varianz von  $\sigma^2 = 0,25$  gewählt wurde, hat die zweite eine 4fach größere Varianz von  $\sigma^2 = 1$ , die dritte eine noch höhere  $\sigma^2 = 1,5$  (Bild 6.9a bis c). Größere Varianzen und Korrelationslängen waren nicht möglich, denn sie hätten für die notwendige Ergodizitätsbedingung eine größere Fließlänge erfordert. Andererseits ließen die im Handel erhältlichen Quarzsande kaum Spielraum für einen Modellaquifer höherer Varianz.



**Bild 6.6:** Relative Häufigkeit  $f_i$  der ausgewählten Sande für die Sandpackung 2.

Die für die Modelle verwendeten Sande sind reine Quarzsande unterschiedlicher Körnung und Sieblinie (Bild 6.10). Die Permeabilitäten der verwendeten Quarzsande wurden in Vorversuchen mittels Permeameter ermittelt und sind in Tabelle (6.4) inklusive der jeweiligen mittleren Korndurchmesser aufgeführt. Daneben gibt es empirische Methoden zur Ermittlung der Durchlässigkeit eines porösen Mediums, die auf einem Zusammenhang zwischen der Durchlässigkeit und den einfach zu ermittelnden Parametern Korngröße und Porosität beruhen. Eine empirische Untersuchung der ermittelten Permeabilitäten (Tabelle 6.4) ergab eine nahezu quadratische Abhängigkeit der Permeabilität der Sande vom mittleren Korndurchmesser (Bild 6.11).



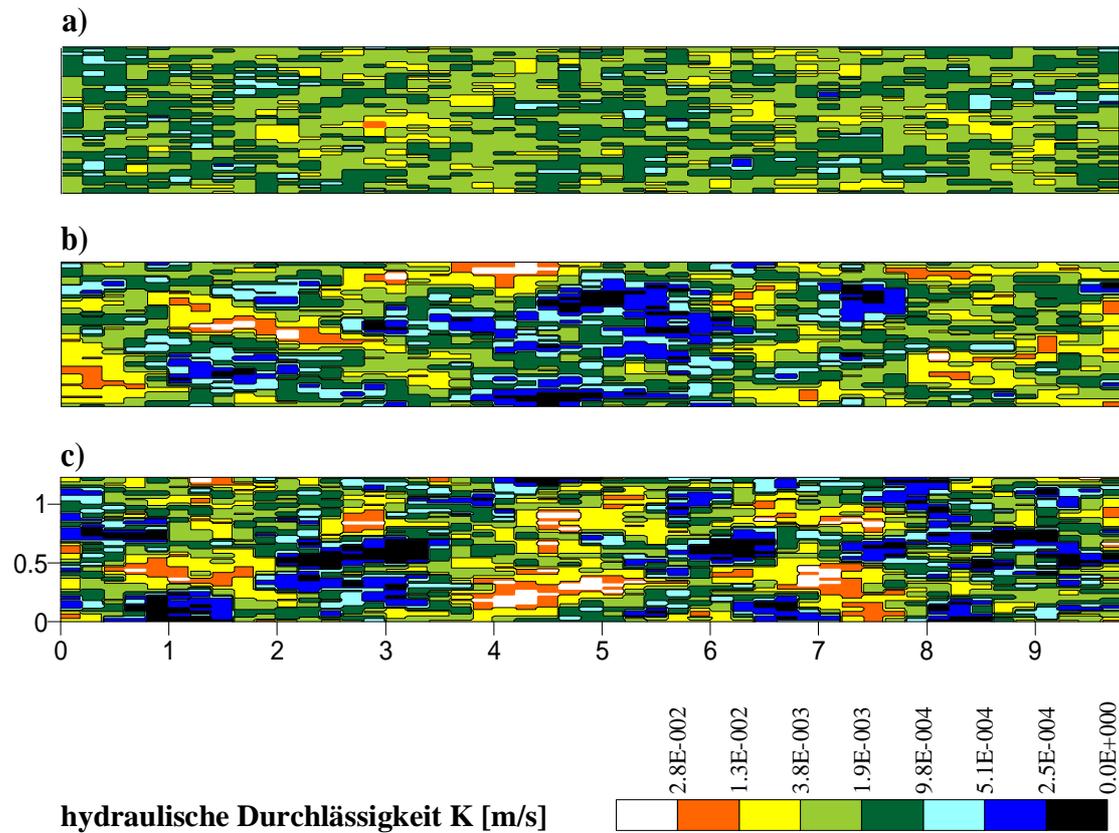
**Bild 6.7:** Variogramm  $\gamma(\xi)$  in a) x-Richtung und b) y-Richtung sowie Correlogramm  $r(\xi)$  in c) x-Richtung und d) y-Richtung am Beispiel der Sandpackung 2

Quelle	Ort	$\sigma^2_{\ln(k)}$	$\lambda_h$ [m]	$\lambda_v$ [m]	$K_G$ [m/s]	$\alpha_{LH}$ [m]	$\alpha_{TV}$ [m]
Hess et al. [92] Hess [87]	Cape Code site Massachusetts	0,25	5,45	0,28	$1,4 \cdot 10^{-3}$	0,35-0,78	
Rehfeld et al. [89,92] Boggs et al [90, 92]	Columbus site Mississippi	4,50	12,8	1,6	$5,35 \cdot 10^{-3}$	1,5-1,8	0,3– 0,6
Sudicky [86] Freyberg [86] Woodbury et al. [91]	Borden Site Canada	0,29	2,8	0,12	$9,75 \cdot 10^{-5}$	0,36	0,039
Gelhar & Axness [83]		1,00	7,6	7,6			
Jensen et al. [93]	Jutland site	0,37	1,75	1,75	$5,1 \cdot 10^{-4}$	0,45	0,0005

**Tabelle 6.2:** Statistische Parameter einiger Feldexperimente in der Literatur.

Formation	$K_G$ [cm/s]	$\overline{\ln K}$	$\sigma^2_{\ln K}$
Sandstein	$1,51 - 4,36 \times 10^{-5}$	- 11,10 bis - 10,04	0,21 bis 0,85
Sand und Kies	$1,5 \times 10^{-3}$	-6,50	1,02 bis 2,75
Sandiger Ton	$1 \times 10^{-5}$	-11,51	4,58
Lehmiger Sand	$2,09 \times 10^{-5}$	-10,78	3,92

**Tabelle 6.3:** Statistische Parameter einiger Bodenarten [aus: Dagan, 1989].

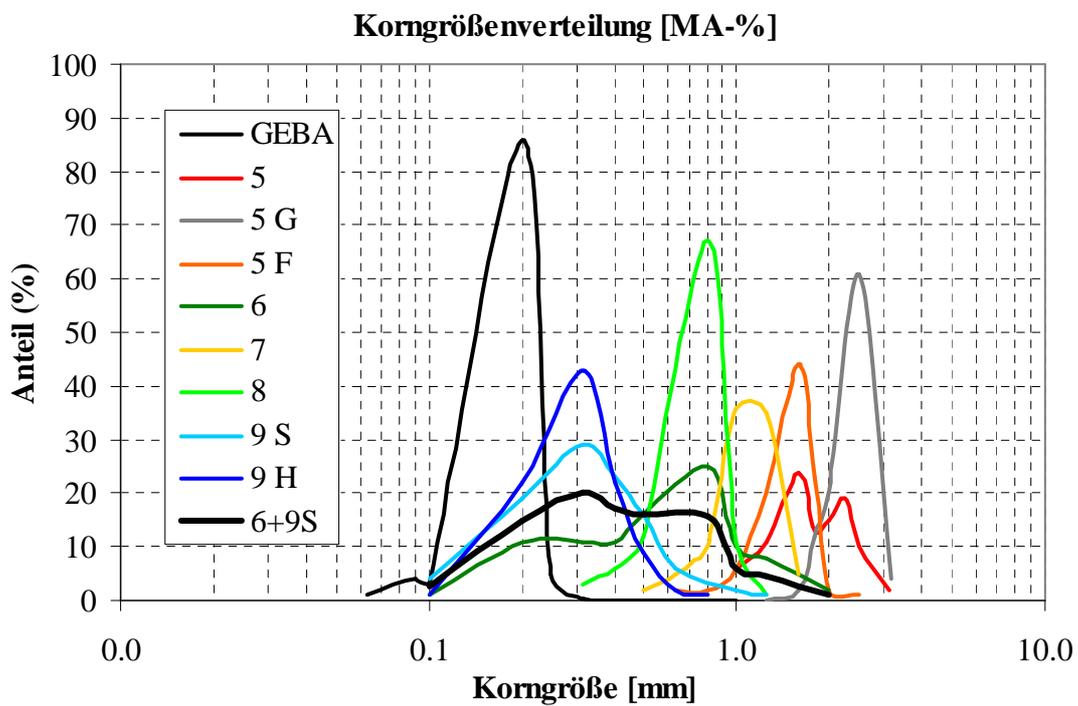


**Bild 6.8:** Stochastische Realisationen der Tankpackungen:

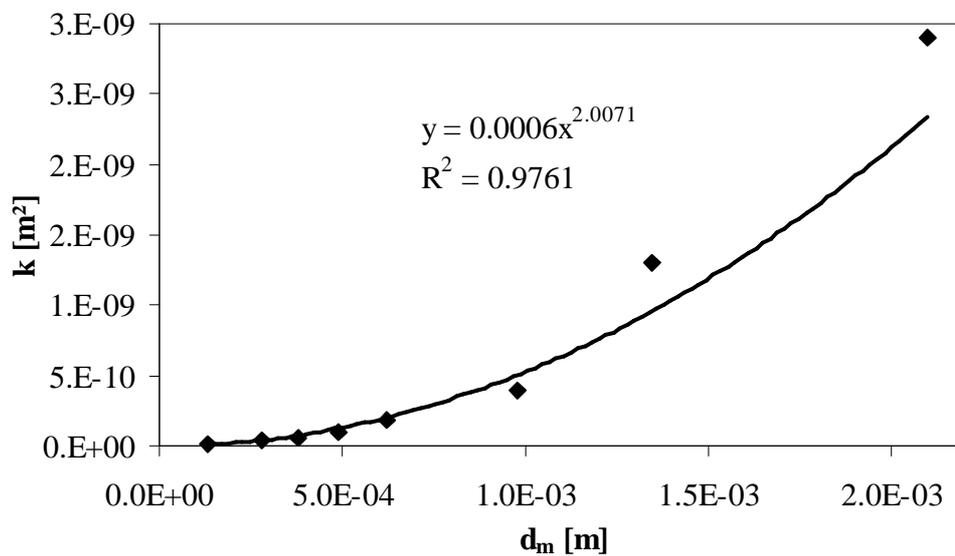
- a) Sandpackung 1:  $\overline{\ln(k)} = -13.25$ ,  $\sigma^2 = 0.25$ ,  $\lambda_x = 0.2$  m,  $\lambda_y = 0.05$  m  
 b) Sandpackung 2:  $\overline{\ln(k)} = -13.25$ ,  $\sigma^2 = 1.00$ ,  $\lambda_x = 0.4$  m,  $\lambda_y = 0.10$  m  
 c) Sandpackung 3:  $\overline{\ln(k)} = -13.25$ ,  $\sigma^2 = 1.50$ ,  $\lambda_x = 0.3$  m,  $\lambda_y = 0.075$  m.

Sand	Farbcodierung	k [cm <sup>2</sup> ]	d <sub>m</sub> [cm]
5G	Weiß	2.9E-05	0.210
5F	Orange	1.3E-05	0.135
7	Gelb	3.9E-06	0.098
8	Hellgrün	1.9E-06	0.062
6	Dunkelgrün	1.0E-06	0.049
9S	Hellblau	5.2E-07	0.038
9H	Dunkelblau	4.1E-07	0.028
GEBA	Schwarz	1.3E-07	0.013

**Tabelle 6.4:** Darstellung der Sande mit den zugehörigen Permeabilitäten k und mittleren Korndurchmessern d<sub>m</sub>.



**Bild 6.9:** Korngrößenverteilung der vorhandenen Quarzsande.



**Bild 6.10:** Permeabilität  $K$  als eine Funktion des mittleren Korndurchmesser  $d_m$ .

## 6.3 Messmethoden

### 6.3.1 Durchflüsse

Der Gesamtdurchfluss wurde am Ablauf des Versuchstankes über eine Wägemessung an einer Feinwaage innerhalb eines vorgegebenen Zeitfensters ermittelt. Die Verwendung zweier Schwebekörper-Durchflussmesser direkt vor dem Zulauf zum Versuchstank hatte sich nicht als sinnvoll erwiesen. Die Schwebekugel verengte die Durchflussquerschnitt im Messgerät derart stark, dass dadurch hohe Druckverluste entstanden, die wiederum zur Erhöhung der erforderlichen Überfallhöhen führten. Für einen Tankversuch mit  $u = 1 \text{ m/d}$  bzw. einen hydraulischen Gradienten von  $I = dh/dL = 2.90 \text{ cm}$  bedeutete dies ein Piezometerhöhenverlust von ca. 1 cm. Problematisch wurde dies jedoch erst, wenn die Konzentrationen in beiden Durchflussmessern sehr differierten oder im Fluid vorhandene kleine Teilchen verengten im Laufe der Versuchszeit den Kugelbereich des Durchflussmesser, so dass es zu unterschiedlichen Druckverlusten oder im Bereich kleiner Abstandsgeschwindigkeiten sogar zu Rückflüssen kam. Da diese Druckverluste abhängig von der Dichte der Lösung sind, war es mit den oben genannten eingebauten Durchflussmessern praktisch nicht möglich, die entsprechenden Höhen einzustellen und kontinuierlich beizubehalten.

### 6.3.2 Ermittlung der Konzentrationsverteilung

Eine direkte Messung der Salzkonzentration eines Fluids ist nicht möglich, sie kann aber indirekt über die elektrische Leitfähigkeit ermittelt werden, weil zwischen beiden Größen ein eindeutiger funktionaler Zusammenhang besteht. Die Leitfähigkeit außerhalb des Versuchsraumes, d.h. in den beiden Einlaufbehältern und im Auslaufbehälter wurde in regelmäßigen Abständen über einen portablen Konduktometer LF 597 gemessen, die Leitfähigkeit der Messproben über das Leitfähigkeitsmessgerät LF 3000.

Um eine exakte Umrechnung der mit den Konduktometern gemessenen Leitfähigkeiten in Konzentrationen zu gewährleisten, müssen diese vorher geeicht werden. Dazu wurden definierte Salzmengen exakt abgewogen und mit der entsprechenden Menge an deionisiertem Wasser vermischt. Zur Erhöhung der Genauigkeit wurde der gesamte Konzentrationsbereich von  $0 < c < 100000 \text{ ppm}$  in Unterbereiche eingeteilt und die jeweiligen Eichkurven ermittelt. Anlage 6 zeigt die Eichkurven für den Konduktometer LF 3000.

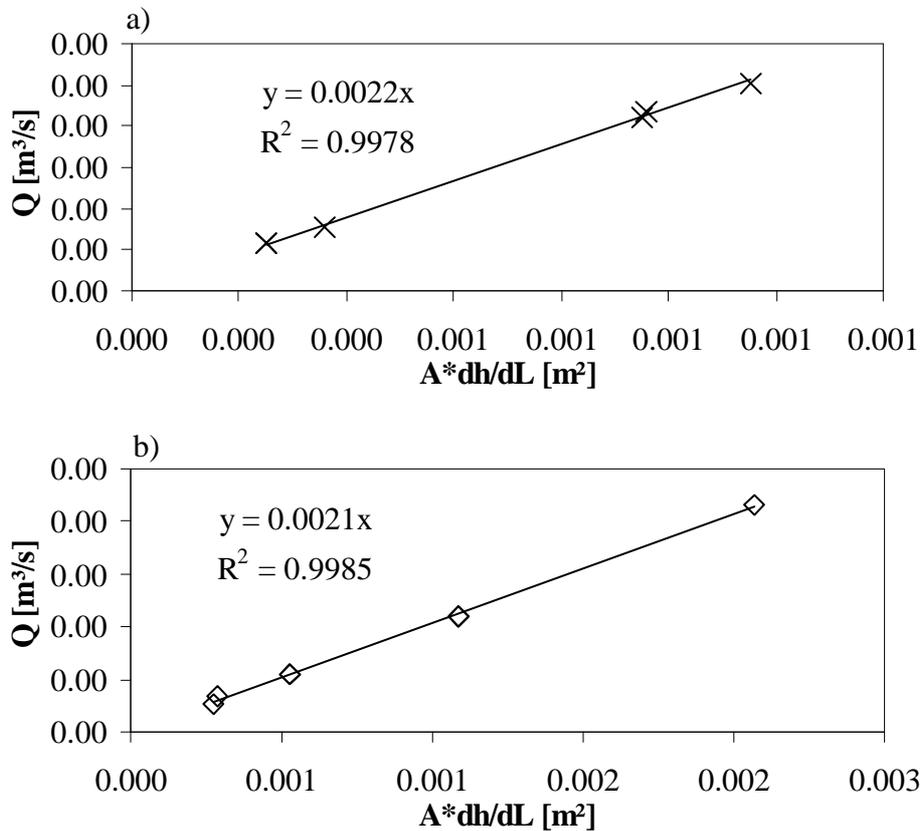
Die Leitfähigkeit einer wässrigen Lösung wird neben dem Ionengehalt auch entscheidend von der Temperatur beeinflusst. Diese Abhängigkeit wurde für beide Konduktometer mittels Vorversuche ermittelt. Dazu wurde die Temperatur drei verschiedener Lösungen unterschiedlicher Konzentrationen variiert und die entsprechenden Leitfähigkeiten gemessen.

### 6.3.3 Bestimmung der hydraulischen Durchlässigkeit

Die hydraulische Durchlässigkeit wurde nach der bekannter Methode von Darcy ermittelt. Es wurden pro Versuchspackung jeweils die Durchflüsse  $Q$  für 6 unterschiedliche hydraulische Gradienten  $dh$  gemessen. Die hydraulische Durchlässigkeit  $K$  ergab sich aus dem Darcy-Gesetz wie folgt:

$$K = \frac{Q \cdot L}{A \cdot dh} \quad (6.9)$$

wobei  $A$  die Querschnittsfläche und  $L$  die Länge des Tankes ist. Bild 6.12 zeigt die für die 2. und 3. Sandpackung gemessenen Durchflüsse  $Q$  in Abhängigkeit vom hydraulischen Gradienten  $I = dh/dL$  als nahezu linear.



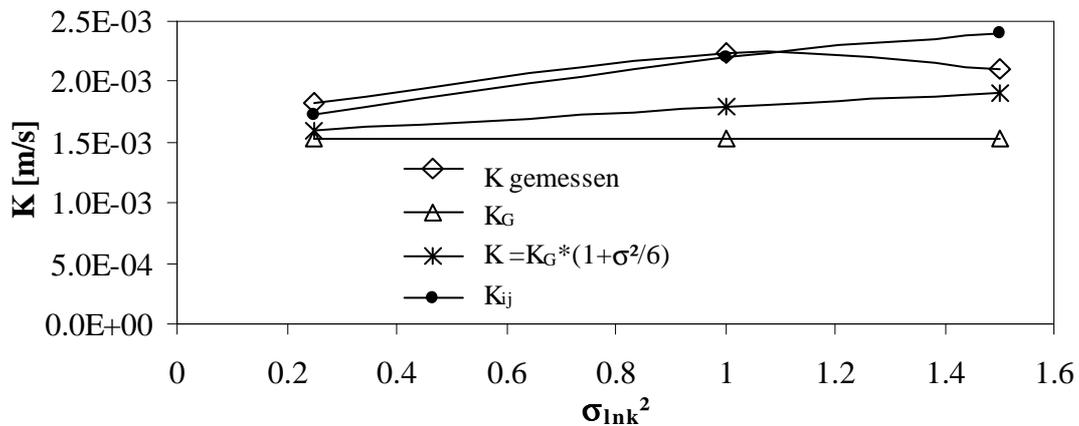
**Bild 6.11:** Gemessene Durchflüsse  $Q$  in Abhängigkeit von  $A \cdot dh/dL$  für a) die Sandpackung 2 und b) die Sandpackung 3.

In Tabelle 6.5 sind die experimentellen mittleren Durchlässigkeiten  $K_{\text{exp}}$  im Vergleich zum geometrischen Mittelwert  $K_G$ , dem korrigierten geometrischen Mittelwert sowie zur effektiven Durchlässigkeit aufgelistet. Bild 6.13 zeigt diese Werte in Abhängigkeit von der

Varianz der lognormalen Permeabilitätsverteilung. Die geometrische Mittelwerte der Durchlässigkeiten  $K_i$  der  $i = 1$  bis  $n$  Sandblöcke sind dabei mit  $K_G = \sqrt[n]{K_1 \cdot K_2 \cdot \dots \cdot K_n}$  um ca. 17 bis 31 % niedriger als die jeweiligen experimentell ermittelten Durchlässigkeiten der Sandpackungen 1 bis 3. Korrigiert man den geometrische Mittelwert wie in einem dreidimensionalen porösen Medium durch eine zur Varianz proportionale Änderung der Durchlässigkeit  $K_G^* = K_G(1 + \sigma^2/6)$  liegen die Abweichungen nur noch zwischen 9 und 20 %. Die beste Übereinstimmung mit den experimentellen Durchlässigkeiten ergibt sich durch eine Kombination von harmonischem und arithmetischem Mittelwert nach:

$$K_{ij} = \frac{L_x}{\sum (dx / \{ (\sum dy \cdot K_j) / L_y \})} \quad (6.10)$$

wobei  $L_x$  und  $L_y$  die Breite und Höhe des Tankes sowie  $dx$  und  $dy$  die Maße der Sandblöcke in  $x$ - und  $y$ -Richtung sind. Bild 6.13 zeigt die experimentellen mittleren Durchlässigkeiten im Vergleich zum geometrischen Mittelwert  $K_G$ , dem korrigierten geometrischen Mittelwert sowie zur effektiven Durchlässigkeit.



**Bild 6.12:** Gemessene Durchflüsse  $Q$  in Abhängigkeit von  $A \cdot dh/dL_x$  für a) die Sandpackung 2 und b) die Sandpackung 3.

[m/s]	Sandpackung 1	Sandpackung 2	Sandpackung 3
$K_{\text{exp}}$	1.83E-03	2.20E-03	2.10E-03
$K_{ij}$	1.72E-03	2.20E-03	2.40E-03
$K_G^*$	1.52E-03	1.54E-03	1.53E-03
$K_G(1 + \sigma^2/6)$	1.59E-03	1.79E-03	1.91E-03

**Tabelle 6.5:** Experimentelle mittlere Durchlässigkeiten  $K_{\text{exp}}$  in [m/s] im Vergleich zum geometrischen Mittelwert  $K_G$ , dem korrigierten geometrischen Mittelwert  $K_G^*$  sowie zur effektiven Durchlässigkeit  $K_{ij}$ .

### 6.3.4 Messung der Abstandsgeschwindigkeit und der Porosität

Grundsätzlich lassen sich zwei Methoden unterscheiden, die Abstandsgeschwindigkeit zu messen: die stationäre und die instationäre. Bei der stationären Methode wird an einer vorher bestimmten Messenkrechten mit einem gewählten Abstand  $x_g$  vom Einlauf des Versuchstankes die Zeit  $t_{50}$  ab Versuchsbeginn gemessen, zu der der Tracer mit 50%igem Konzentrationsdurchgang diesen Ort erreicht. Bei der instationären Messung werden zu einem gewählten Zeitpunkt  $t_g$  ab Versuchsbeginn die Konzentrationen an allen Messpunkten des Versuchstandes gemessen und damit der Ort  $x_{50}$  bestimmt, an dem sich der Tracer zu diesem Zeitpunkt mit 50%igem Konzentrationsdurchgang befindet. Die Abstandsgeschwindigkeiten ergeben sich wie folgt:

$$u = \frac{x_g}{t_{50}} \quad \text{für die stationäre bzw.} \quad (6.11a)$$

$$u = \frac{x_{50}}{t_g} \quad \text{für die instationäre Methode.} \quad (6.11b)$$

Für die 1. Sandpackung wurde die Abstandsgeschwindigkeit  $u$  über eine instationäre Messung [Wunschik und Waldhoff, 2000] gewonnen, für die 2. und 3. Sandpackung über eine stationäre Messung an der Stelle  $x = 9.3$  m von der Einlaufkante (col 47). Die stationäre ist dabei für diesen Fall die besser geeignete Methode, denn hier wird die Abstandsgeschwindigkeit der Stofffahne in der Nähe des Tankauslaufes gemessen, nachdem diese bereits eine Vielzahl von Korrelationslängen passiert hat. Man erhält damit einen mittleren Geschwindigkeitswert über die gesamte Tanklänge. Wohingegen bei der instationären Berechnung zum Zeitpunkt der Messung nur ein Teil der Stofffahne den gesamten Tankbereich passiert hat.

Die aus der ermittelten Abstandsgeschwindigkeit  $u$  berechneten effektive Porositäten  $n_e = Q/(u * A)$  für die Sandpackungen 1 bis 3 sind in Tabelle 6.6 aufgelistet.

	Sandpackung 1	Sandpackung 2	Sandpackung 3
Porosität $n_e$	0.465	0.44	0.38

**Tabelle 6.6:** Experimentell ermittelte Porositäten für die Sandpackungen 1 bis 3.

## 6.4 Experimentelle Ergebnisse

### 6.4.1 Normierte räumliche Konzentrationsausbreitung

Die im Gleichgewichtszustand gemessenen räumlichen Ausbreitungen der normierten Konzentration  $c/c_0$  geben Aufschluss über das Ausmaß der Dispersionsprozesse. In Bild 6.15, 6.16, 6.18 bis 6.24 sowie Anlage 7 bis 11 sind die normierten Konzentrationsausbreitungen  $c/c_0$  im stationären Endzustand aller Versuche über die normierte Höhe des Tankes  $h/h_0$  dargestellt. Dabei soll analysiert werden, welchen Einfluss 1) der steigende Dichteunterschied  $\rho$  2) die steigende Strömungsgeschwindigkeit  $u$  und 3) die stochastischen Eigenschaften des heterogenen porösen Mediums (Varianz  $\sigma^2$ , Korrelationslängen  $\lambda_x$  und  $\lambda_y$ ) auf die Vermischung eines gelösten Wasserinhaltsstoffes haben. Wesentlich dabei sind zwei Merkmale der Ausbreitung: 1) die Höhe des Schwerpunktes der Salzwasserfahne  $h_s$  sowie 2) die Vermischungsbreite  $B$ , d.h. den Höhenunterschiedes aus 16- und 84%igem Konzentrationsdurchgang im Gleichgewichtszustand  $B = h(c/c_0 = 0.1586) - h(c/c_0 = 0.8414)$ . Aus Konzentrationsausbreitungen aller Versuche kann folgendes festgestellt werden:

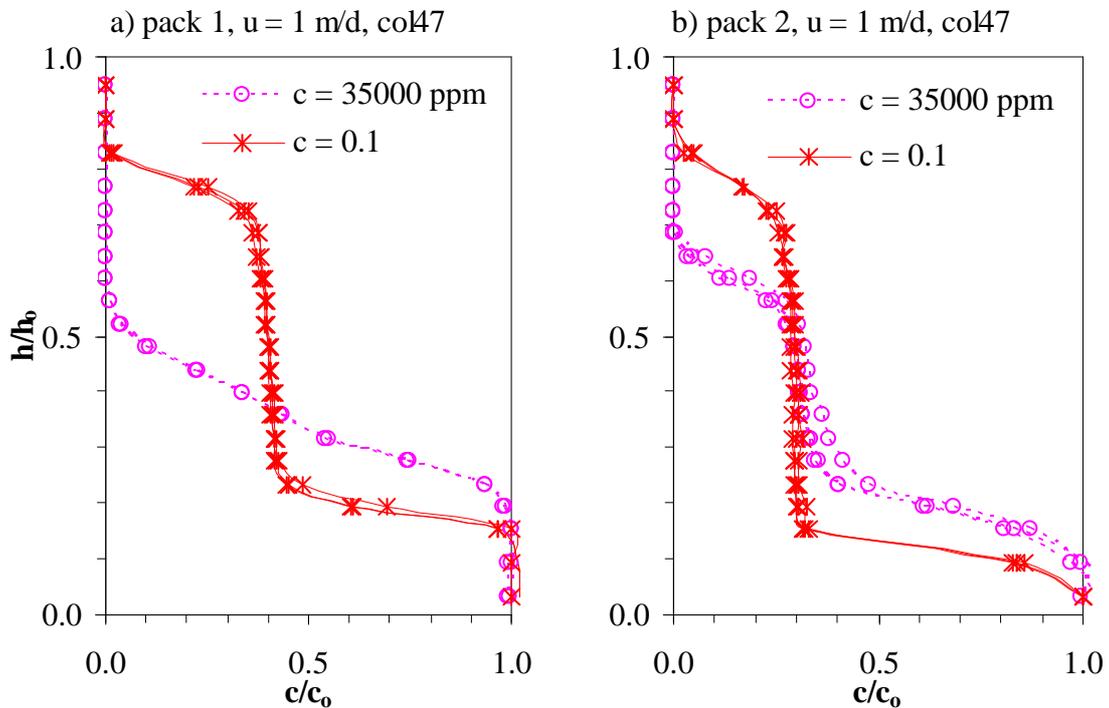
[1] Bei gleichem  $u$  sinkt die Salzwasserfahne geringfügig mit steigendem Dichtegradienten und steigender Fließlänge  $x$  ab, wobei dieser Effekt mit höherer Korrelationslänge der Lognormalverteilung und geringerer Geschwindigkeit stärker ist. Für die 1. Sandpackung ist für  $u = 1$  m/d bereits bei  $c = 5000$  ppm ein Absinken der Salzfahne gegenüber einer dem Süßwasser analogen Konzentration von  $c = 250$  ppm erkennbar, das sich mit weiterer Erhöhung der Konzentration nicht mehr verstärkte (Bild 6.15). Das Absinkverhalten war dabei geringfügig schwächer für Versuche mit größerer Abstandgeschwindigkeit von  $u = 4$  m/d (Bild 6.16). Hier war eine Absenkung des Fahnen Schwerpunktes erst ab  $c = 35000$  ppm sichtbar, ebenso wie für die Versuche in der 2. Sandpackung mit geringem  $u = 1$  m/d (Bild 6.18). Allerdings stieg hier der Schwerpunkt der Salzwasserfahne im Bereich von col37 bis col47 für  $c = 5000$  ppm gegenüber  $c = 250$  ppm auf, ebenso wie in den vorderen Bereichen (col 23 bis 43) der meisten Versuchen an der 3. Sandpackung (Bild 6.21 und 6.24). Betrachtet man die Höhe des Fahnen Schwerpunktes  $h_s$  in Abhängigkeit von der dimensionslosen Nichtähnlichkeitsvariable  $\xi = Ra / (Pe)^{2/3}$ , die sowohl den Einfluss der Konzentration als auch der Geschwindigkeit beschreibt, erkennt man nur für die 2. Sandpackung ein signifikantes Absinken der Stofffahne mit steigendem  $\xi$ . Für die 1. und 3. Sandpackung ist dieser Effekt nur im Bereich kleiner  $\xi$  vorhanden und verschwindet mit zunehmendem  $\xi$  (Bild 6.17).

[2] Untersucht man die Vermischungsbreite in der 1. Sandpackung, sieht man nur in den Experimenten mit geringer Strömungsgeschwindigkeit eine Verringerung der Vermischungsbreite mit steigender Konzentration von  $c = 250$  ppm zu  $c = 5000$  ppm,

demgegenüber gibt es für  $u = 4$  m/d praktisch keine Veränderung der Vermischung mit steigendem  $c$ . An einigen Messebenen, beispielsweise col43 ist sogar eine geringfügige Vergrößerung dieser mit steigender Konzentration und sinkender Geschwindigkeit erkennbar (Bild 6.15). Dies ist im Kontrast zu den experimentellen Ergebnissen von *Spitz* [1985] und den theoretischen von *Thiele* [1997], die eine Verkleinerung der transversalen Dispersivität  $A_T$  mit steigendem Konzentrations- bzw. Dichtegradienten beobachteten, vorausgesetzt dass die hydromechanische weitaus größer als die molare Dispersion ist, d.h. in einem Bereich der Pecletzahlen von  $Pe = u * d_m / D_m \gg 1$ . [Bear, 1979]. Da der mittlere Korndurchmesser der Sandpackungen  $d_m = 0.6$  mm ist und die daraus resultierenden Pecletzahlen  $Pe = 7$  und  $Pe = 56$  für die Strömungsgeschwindigkeiten  $u = 1$  und  $8$  m/d sind, dominiert damit besonders für die geringere Geschwindigkeit  $u = 1$  m/d noch die Diffusion, die mechanische Dispersion spielt noch keine wesentliche Rolle, im Gegensatz zu den Experimenten bei *Spitz* [1985], bei denen die Pecletzahlen zwischen  $Pe = 800$  bis  $Pe = 1200$  lagen [Koch and Starke, 2001].

[3] Für die Sandpackungen 2 und 3, d.h. größere Varianzen und Korrelationslängen im Vergleich zur 1. Sandpackung, nimmt die Vermischungsbreite mit größerem Dichtegradienten ab, wobei dieser Einfluss bei geringerer Strömungsgeschwindigkeit stärker wird (Bild 6.18 bis 6.24). Dies entspricht auch den Erkenntnissen von *Thiele* [1997]. Der Dichteinfluss wächst demzufolge mit zunehmender Heterogenität und abnehmender Strömungsgeschwindigkeit. Die Konzentrationsverläufe der 3. Sandpackung zeigen eine Verringerung der Vermischungsbreite erst mit einer Konzentration von  $c = 35000$  ppm gegenüber einer Tracerkonzentration von  $c = 250$  ppm, eine geringfügige Erhöhung auf  $c = 5000$  ppm führt demgegenüber zu einer geringfügigen Vergrößerung der Vermischungsbreite, die jedoch mit zunehmender Fließlänge  $x$  abnimmt (Bild 6.21 und 6.24).

[4] Bei einer geringen Strömungsgeschwindigkeit von  $u = 1$  m/d und hohen Konzentrationen von  $c > 35000$  ppm kommt es mit zunehmender Fließlänge  $x$  zu einer Konzentrationsverteilung, die nicht der Normalverteilung entspricht. Die Konzentrationsfahne weitet sich um einen Bereich annähernd konstanter Konzentration, die der Konzentration im Auslaufbehälter entspricht, wobei dieser Effekt in der 2. Sandpackung gegenüber der 1. größer ist, d.h. er ist proportional zur Heterogenität. Dies ist identisch mit den entsprechenden numerischen Untersuchungen. Bild 6.14 zeigt dies an der Messebene col47 für die Sandpackungen 1 und 2. In der 3. Sandpackung wurden aufgrund dieser Erkenntnisse nur Versuche mit Konzentrationsgradienten bis  $c = 5000$  ppm durchgeführt.



**Bild 6.13:** Experimentell ermittelte normierte Konzentrationen  $c/c_0$  über die normierte Höhe des Tanks  $h/h_0$  an der Messebene col47 ( $x = 9.3$  m) für  $u = 1$   $c = 35000$  und  $100000$  ppm für a) die Sandpackung 1 und b) die Sandpackung 2.

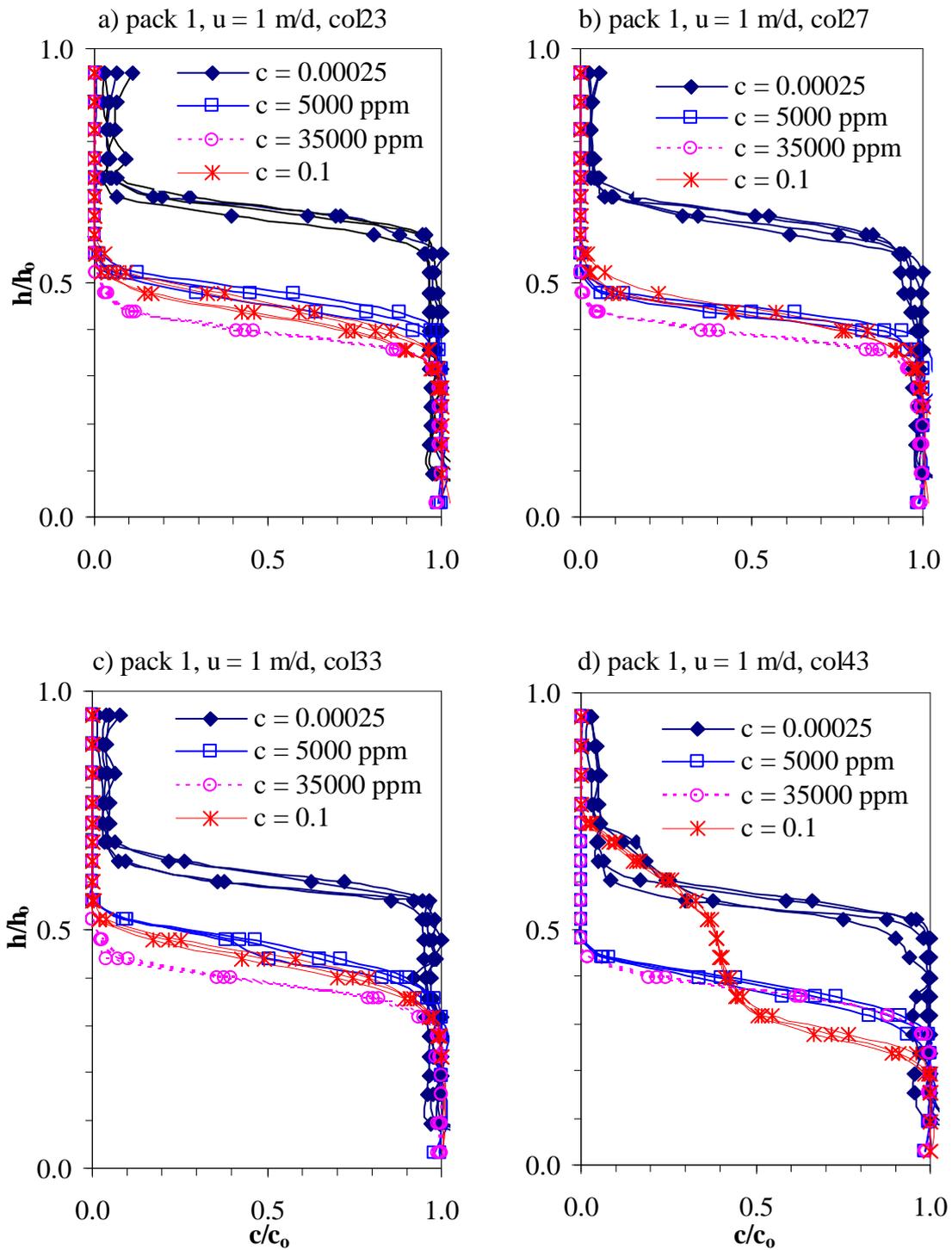
Zusammenfassend kann aus den Konzentrationsausbreitungen der Tankversuche zunächst qualitativ folgendes ausgesagt werden:

1. Die Höhe des Fahnschwerpunktes sinkt mit:

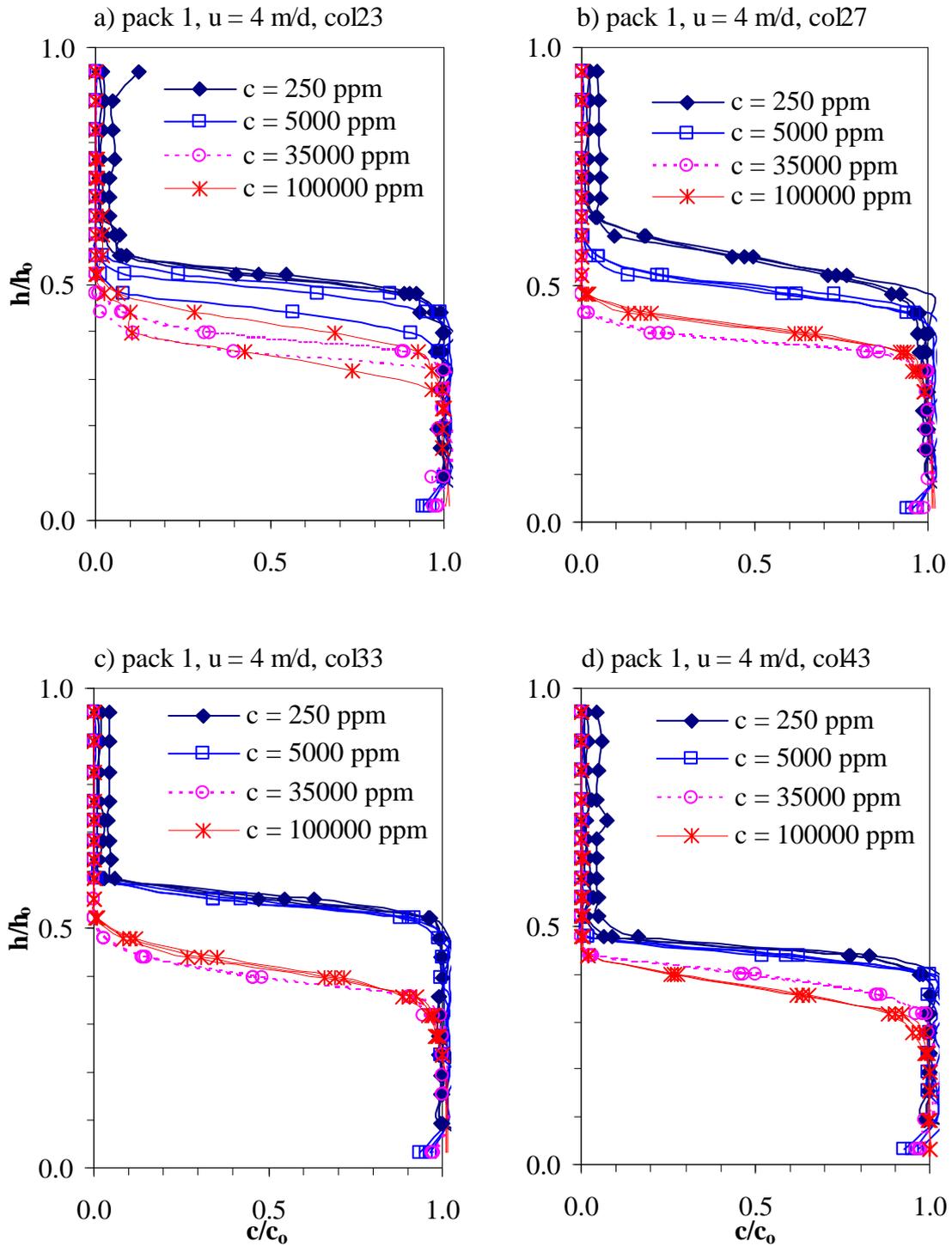
- steigender Salzwasser-Konzentration  $c_0$ ,
- sinkender Strömungsgeschwindigkeit  $u$  sowie
- steigendem Nichtähnlichkeitsfaktor  $\zeta$ .

2. Die Vermischungsbreite  $B$  steigt mit:

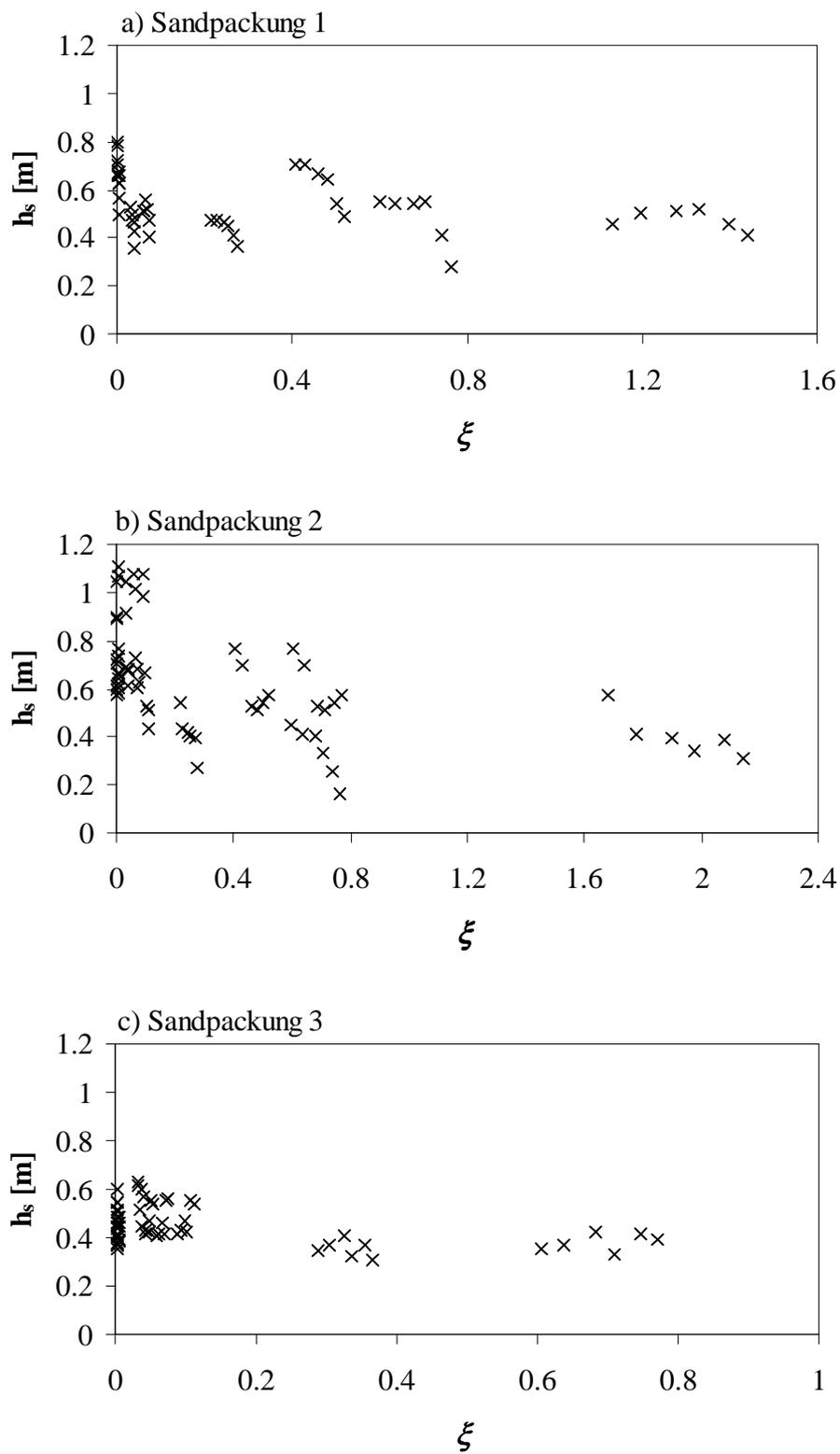
- steigender Salzwasser-Konzentration  $c_0$  für die Sandpackung 1,
- sinkender Salzwasser-Konzentration  $c_0$  für die Sandpackungen 2 und 3,
- sinkender Strömungsgeschwindigkeit  $u$  sowie
- steigender Varianz  $\sigma^2$  und Korrelation  $\lambda$ .



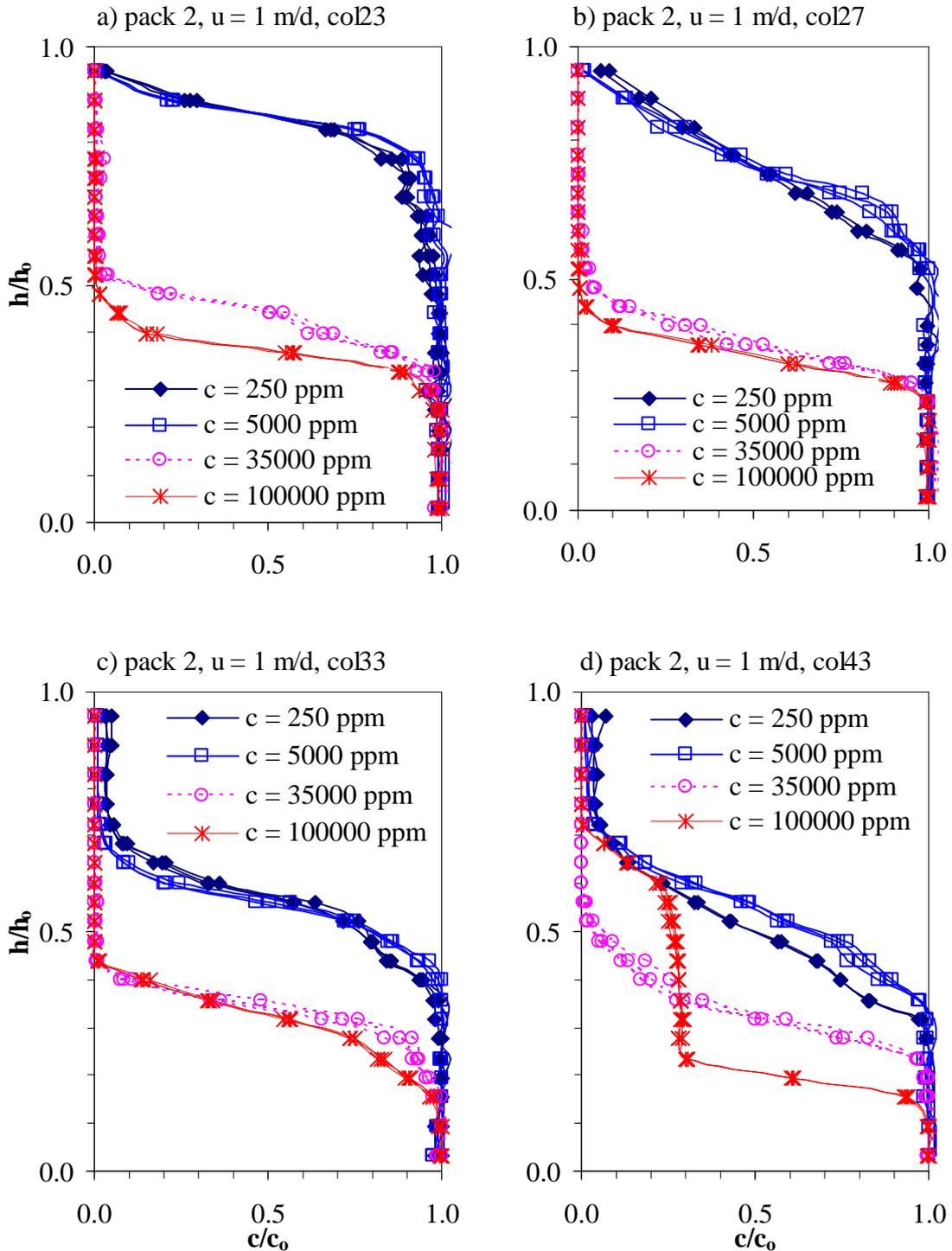
**Bild 6.14:** Experimentelle normierte Konzentrationsverteilung  $c/c_0$  über die relative Höhe des Tankes  $h/h_0$  an den Messebenen 23, 27, 33 und 43 für die Sandpackung 1 und  $u = 1 \text{ m/d}$ .



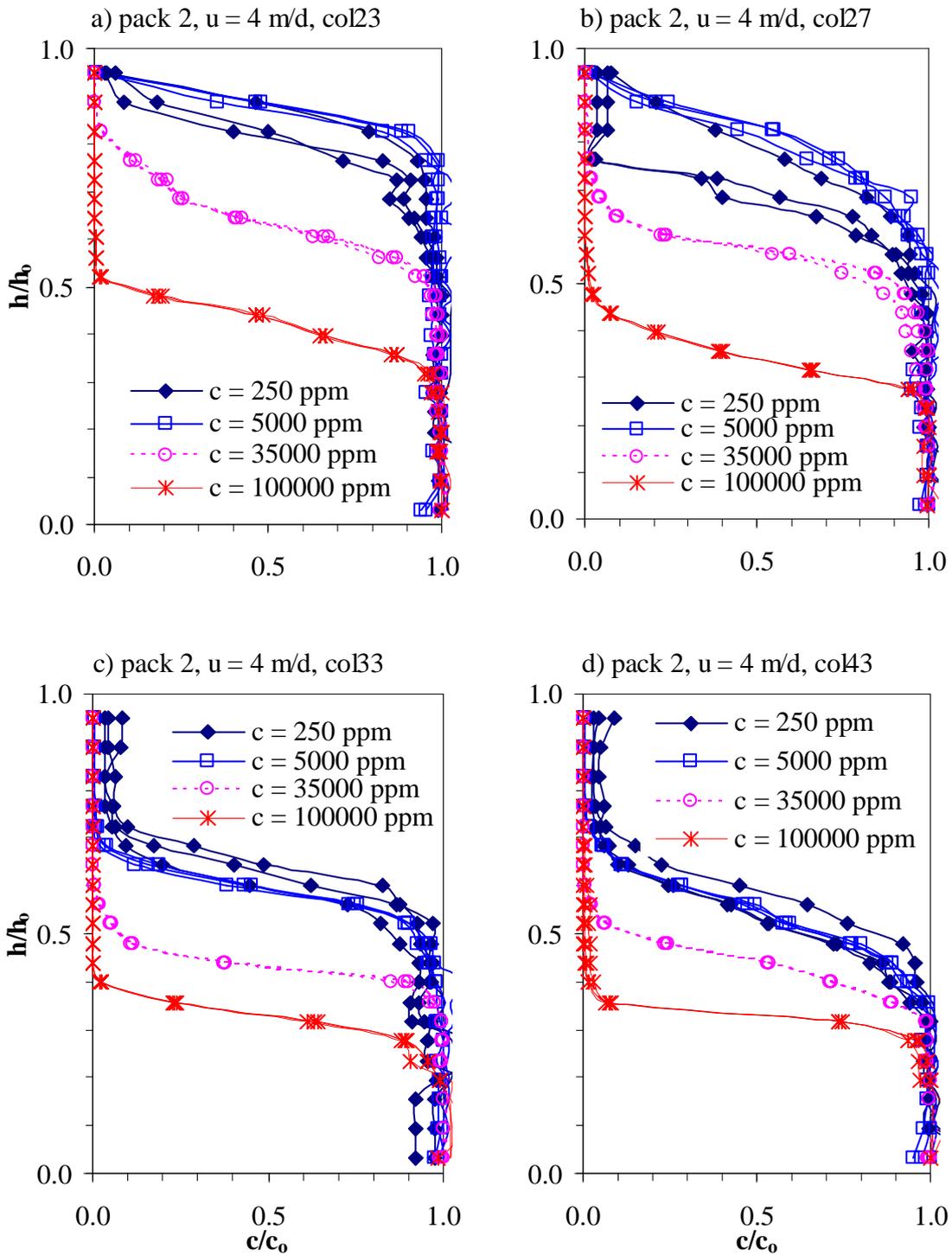
**Bild 6.15:** Experimentelle normierte Konzentrationsverteilung  $c/c_0$  über die relative Höhe des Tankes  $h/h_0$  an den Messebenen 23, 27, 33 und 43 für die Sandpackung 1 und  $u = 4$  m/d.



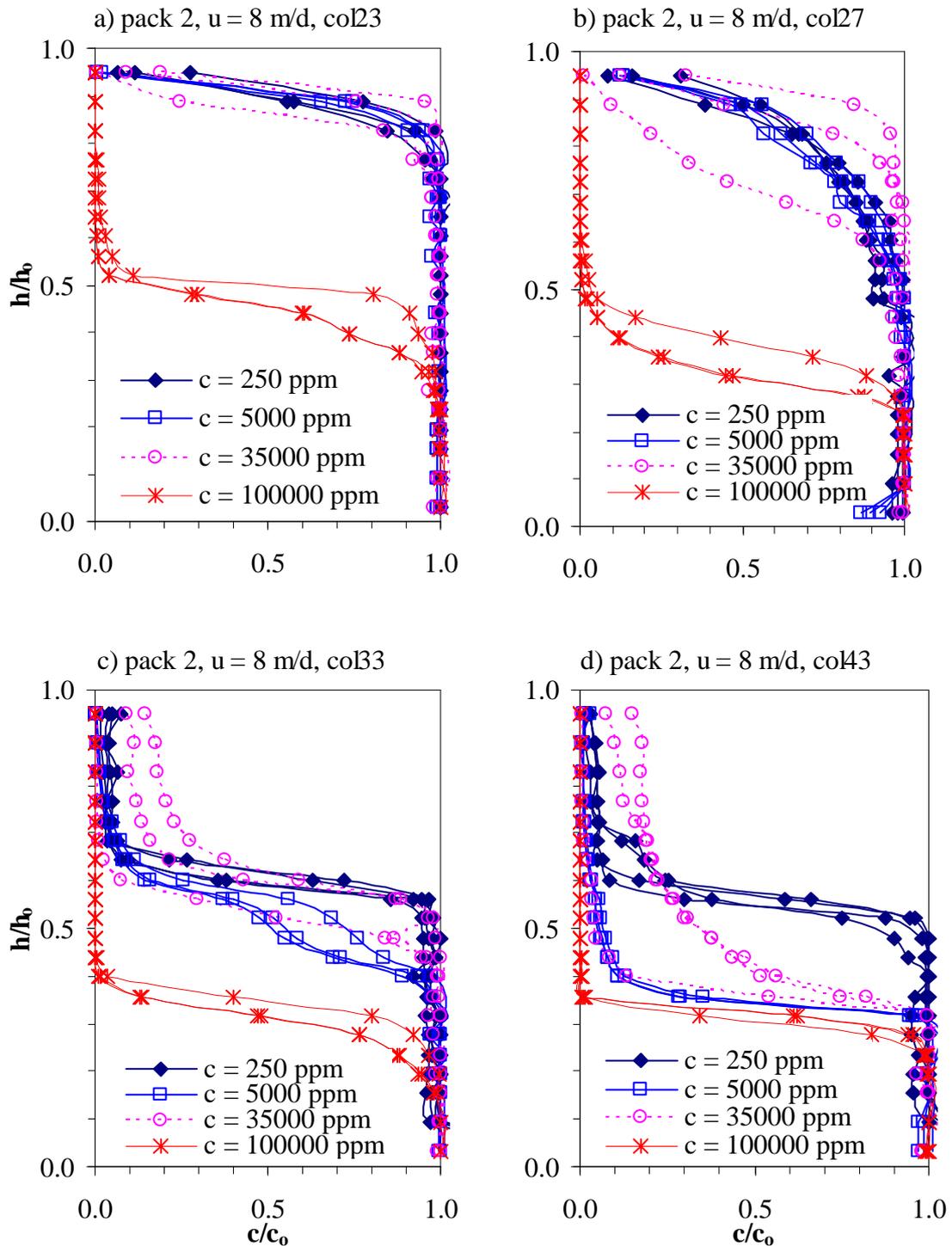
**Bild 6.16:** Höhe des Fahnenschwerpunktes  $h_s$  in Abhängigkeit von der Nichtähnlichkeitsvariable  $\xi$  für alle Experimente in a) der Sandpackung 1, b) der Sandpackung 2 und c) der Sandpackung 3.



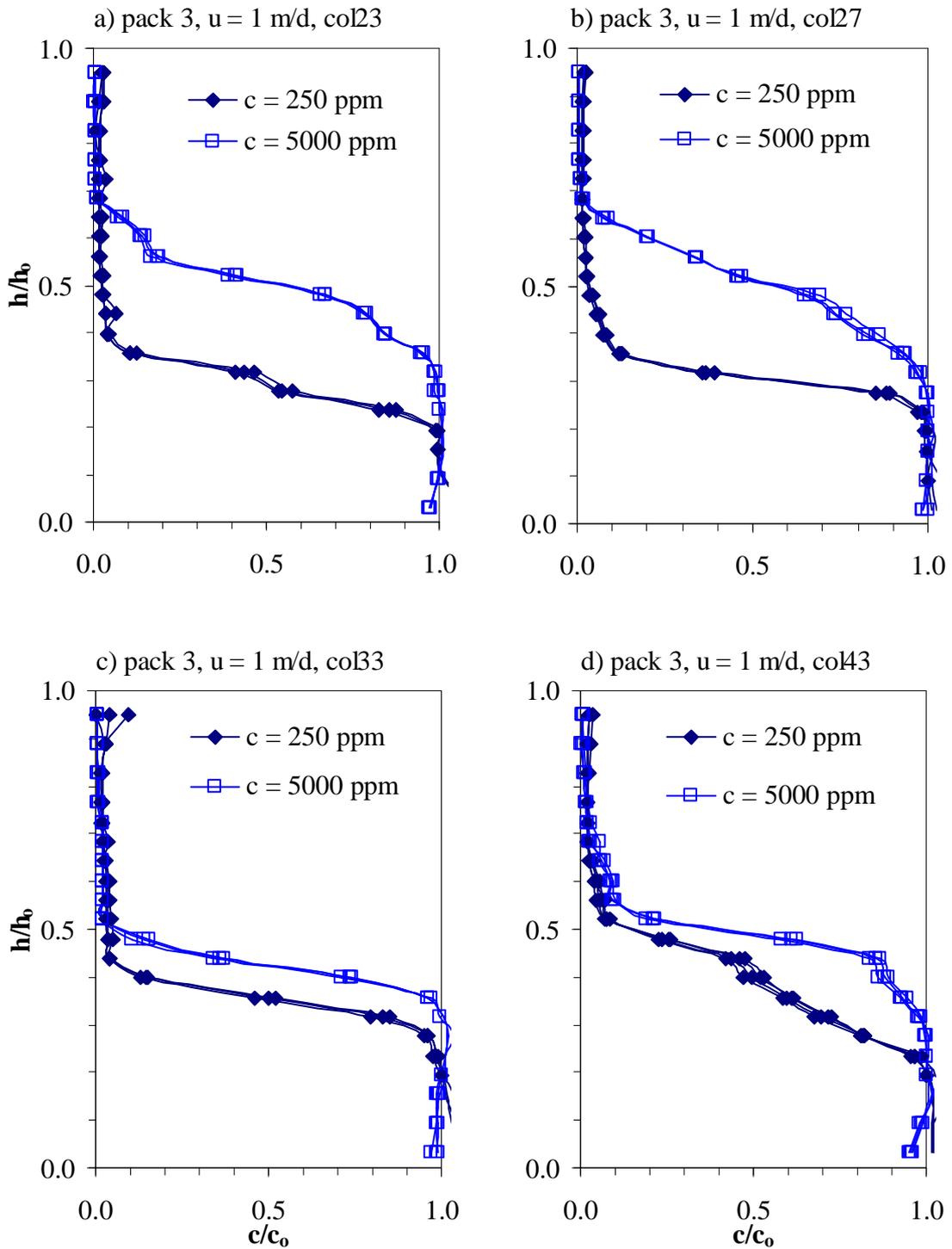
**Bild 6.17:** Experimentelle normierte Konzentrationsverteilung  $c/c_0$  über die relative Höhe des Tanks  $h/h_0$  an den Messebenen 23, 27, 33 und 43 für die Sandpackung 2 und  $u = 1$  m/d.



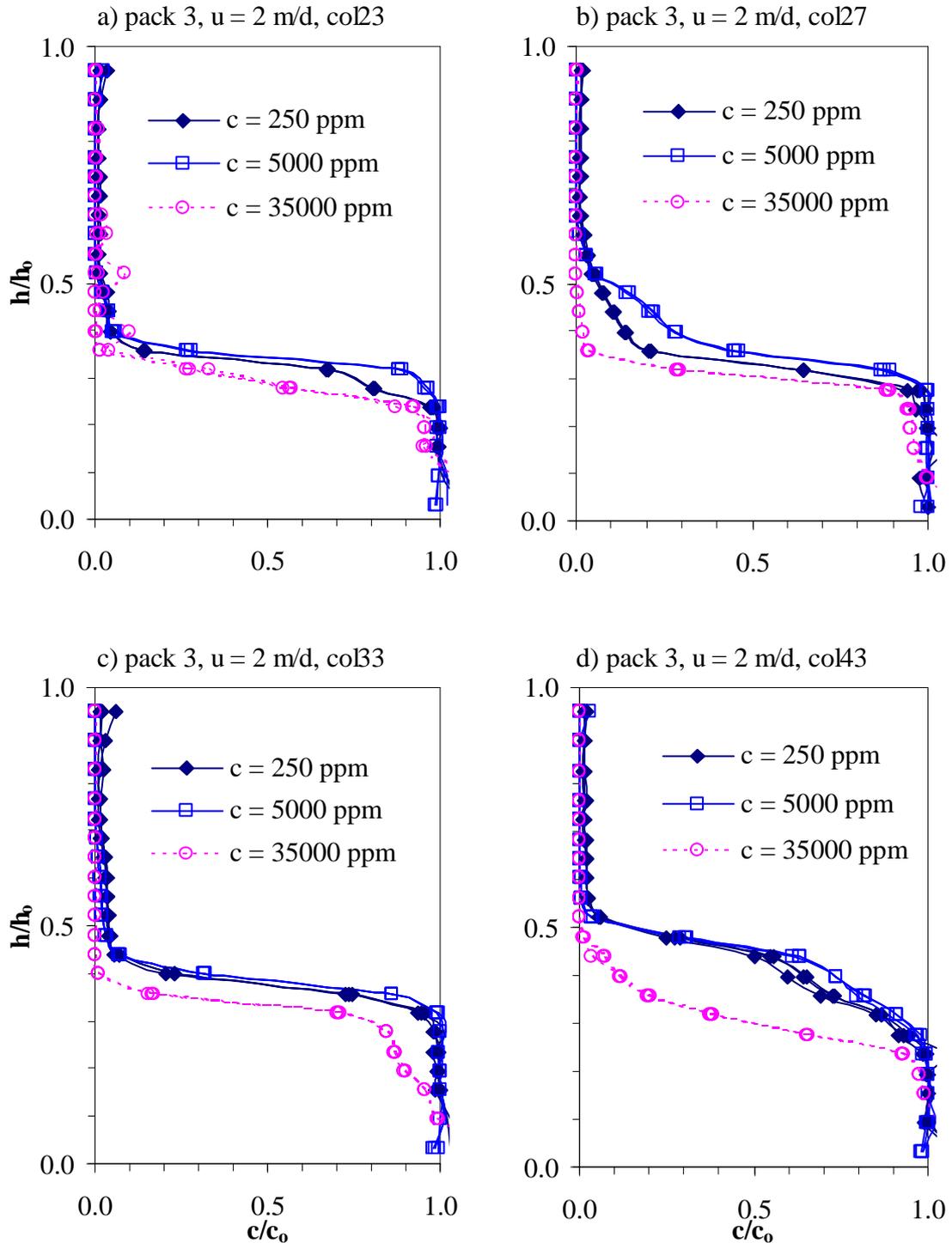
**Bild 6.18:** Experimentelle normierte Konzentrationsverteilung  $c/c_0$  über die relative Höhe des Tankes  $h/h_0$  an den Messebenen 23, 27, 33 und 43 für die Sandpackung 2 und  $u = 4$  m/d.



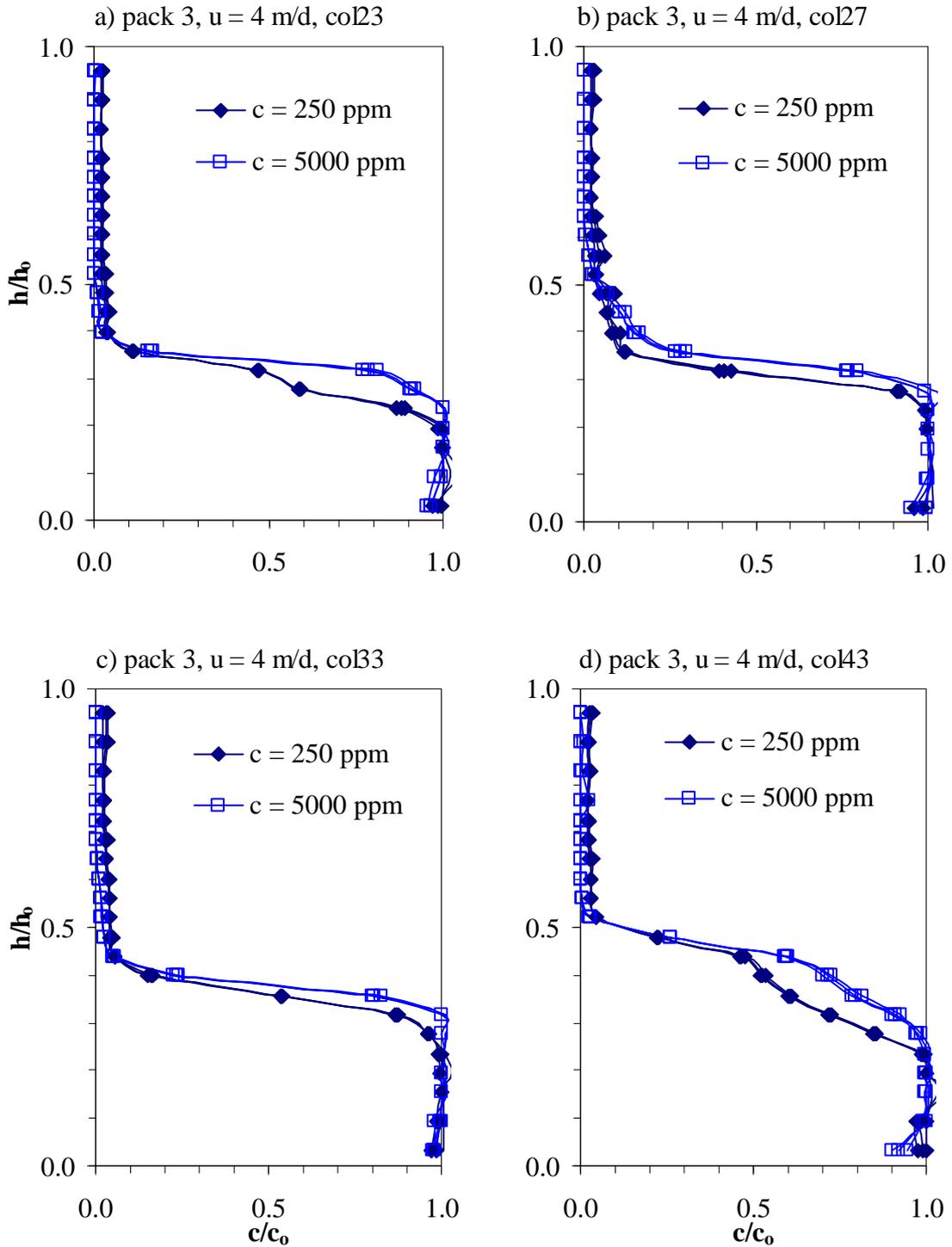
**Bild 6.19:** Experimentelle normierte Konzentrationsverteilung  $c/c_0$  über die relative Höhe des Tankes  $h/h_0$  an den Messebenen 23, 27, 33 und 43 für die Sandpackung 2 und  $u = 8$  m/d.



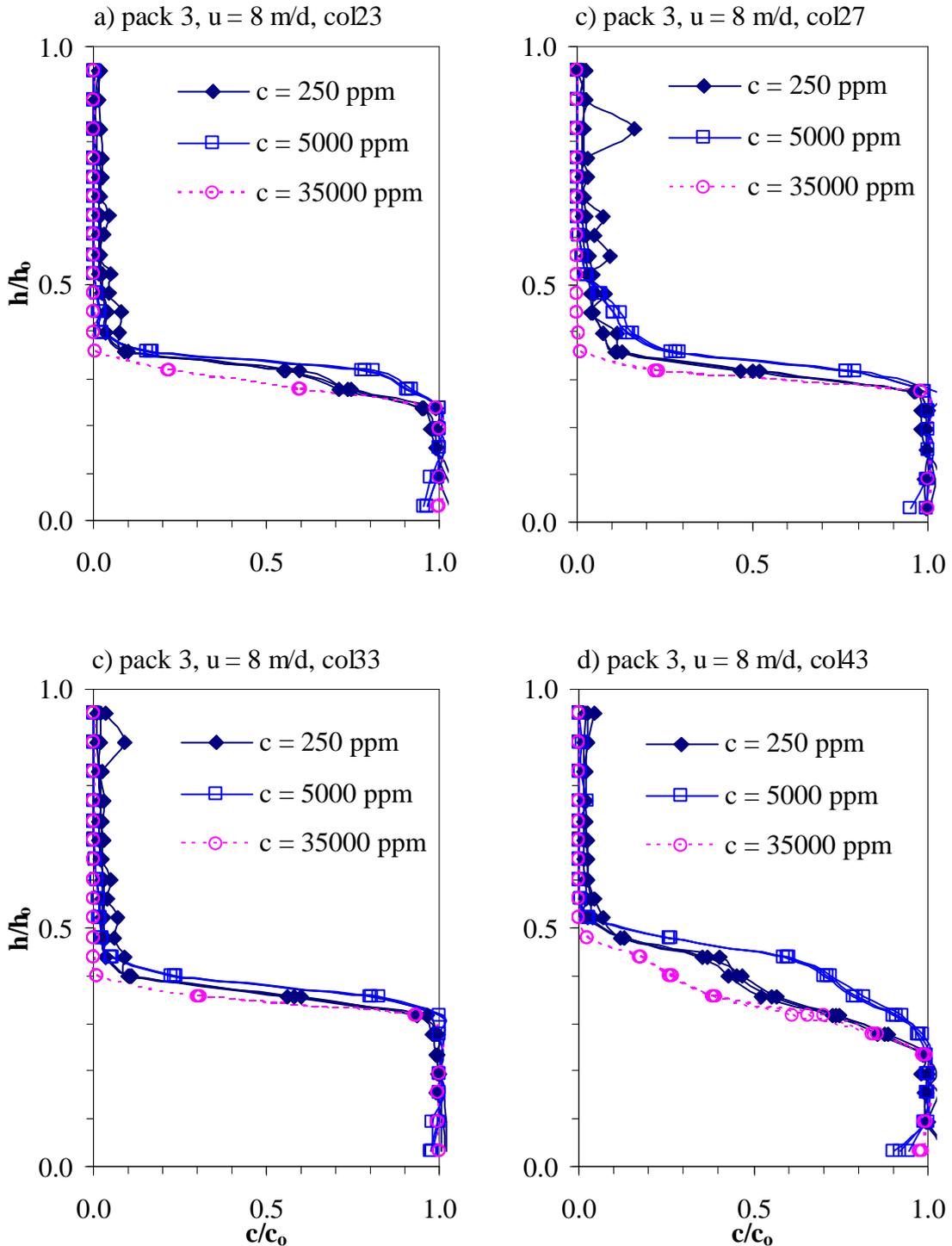
**Bild 6.20:** Experimentelle normierte Konzentrationsverteilung  $c/c_0$  über die relative Höhe des Tankes  $h/h_0$  an den Messebenen 23, 27, 33 und 43 für die Sandpackung 3 und  $u = 1$  m/d.



**Bild 6.21:** Experimentelle normierte Konzentrationsverteilung  $c/c_0$  über die relative Höhe des Tankes  $h/h_0$  an den Messebenen 23, 27, 33 und 43 für die Sandpackung 3 und  $u = 2$  m/d.



**Bild 6.22:** Experimentelle normierte Konzentrationsverteilung  $c/c_0$  über die relative Höhe des Tankes  $h/h_0$  an den Messebenen 23, 27, 33 und 43 für die Sandpackung 3 und  $u = 4$  m/d.



**Bild 6.23:** Experimentelle normierte Konzentrationsverteilung  $c/c_0$  über die relative Höhe des Tankes  $h/h_0$  an den Messebenen 23, 27, 33 und 43 für die Sandpackung 3 und  $u = 8$  m/d.

### 6.4.2 Varianzen der normierten Konzentrationsausbreitung

Im vorherigen Kapitel wurde die räumliche Ausbreitung der Konzentrationen nur qualitativ untersucht und diskutiert. Um das Ausbreitungsverhalten auch mathematisch zu erfassen, werden für alle Strömungsexperimente aus den Vermischungsbreiten  $B = \{h(c/c_0 = 0.1586) - h(c/c_0 = 0.8414)\}$  die Varianzen  $\sigma^2 = (B/2)^2$  der normierten Konzentrationsverteilung berechnet. Bild 6.25 bis 6.27 zeigt die Varianzen  $s^2$  Abhängigkeit vom Abstand  $x$  von der Einströmkante.

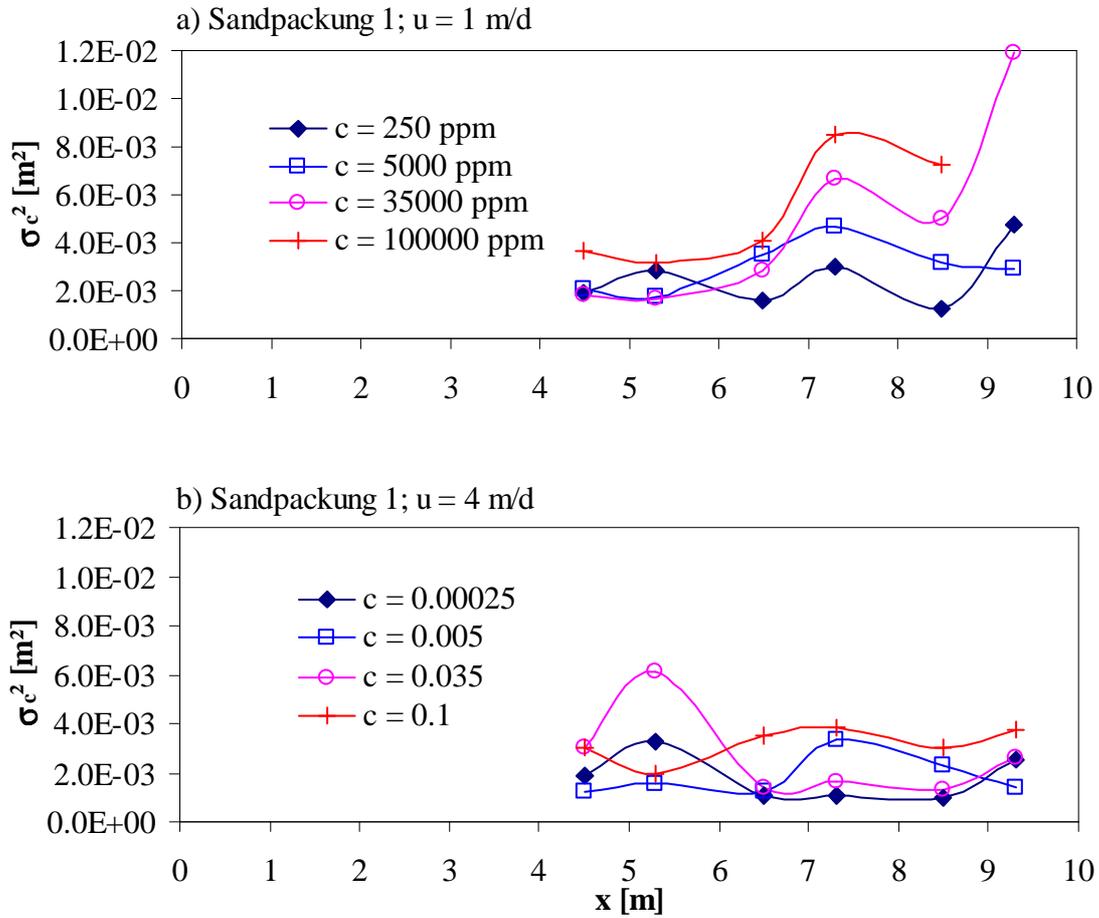
Die Varianz  $\sigma^2$  der räumlichen Konzentrationsausbreitung nähert sich mit steigendem Abstand  $x$  von der Einströmkante wellenförmig einem effektiven Wert an, aus dem die Makrodispersion errechnet werden kann.

*Die Schwankungen der räumlichen Varianzen steigen mit:*

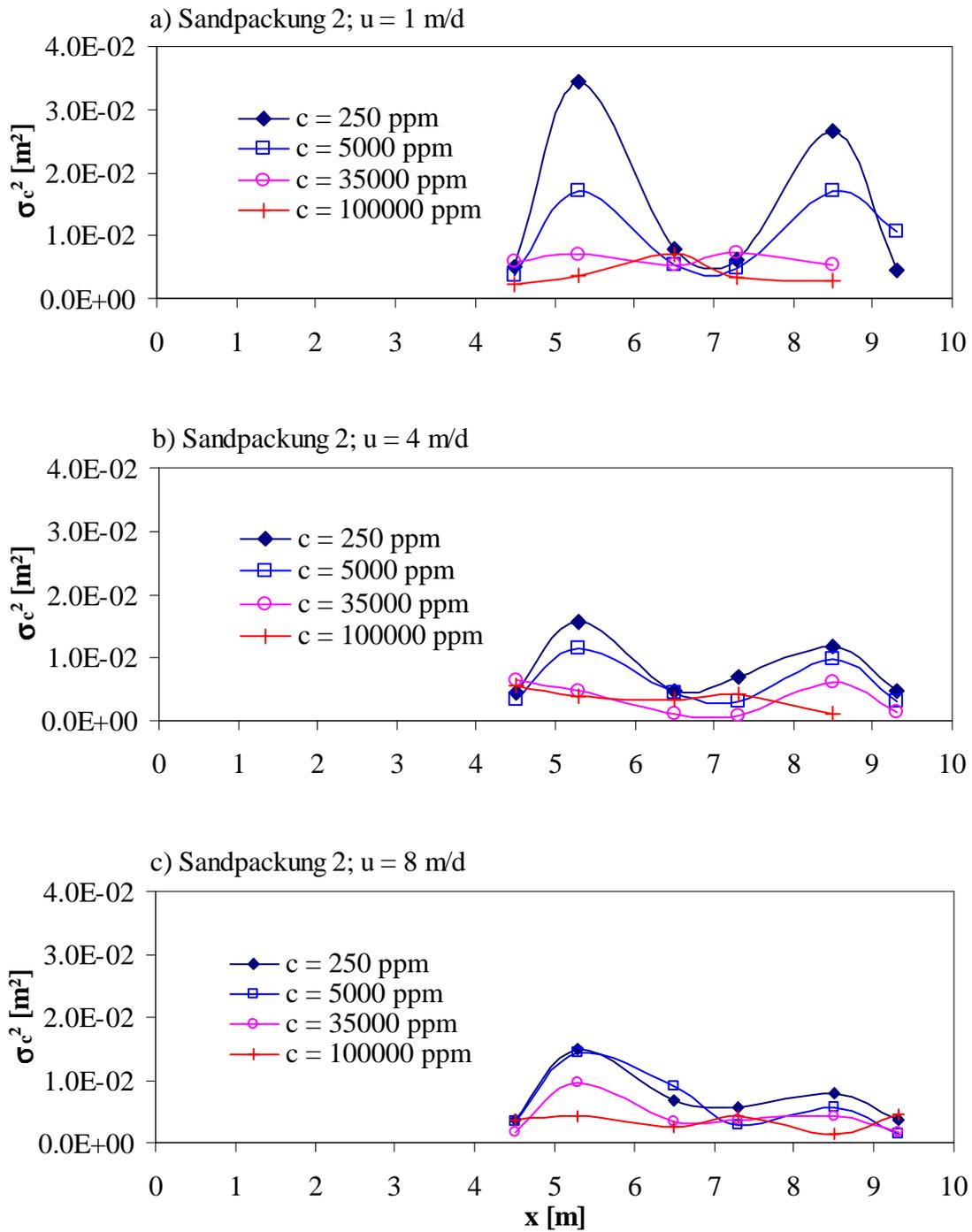
- *steigender Salzwasser-Konzentration  $c_o$  für die Sandpackung 1,*
- *sinkender Salzwasser-Konzentration  $c_o$  für die Sandpackungen 2 und 3,*
- *sinkender Strömungsgeschwindigkeit  $u$  sowie*
- *steigender Varianz  $\sigma^2$  und Korrelation  $\lambda$ .*

Die Wellenlänge  $\lambda$  dieser Schwankungen steigt mit zunehmender Heterogenität, ist jedoch unabhängig vom Konzentrations- bzw. Dichtegradienten und der Strömungsgeschwindigkeit. Während sie für die 1. Sandpackung ca.  $\lambda \approx 2$  m beträgt (Bild 6.25), ist sie für die 2. Sandpackung mit  $\lambda \approx 3.2$  m 1.6 mal größer (Bild 6.26). Für die 3. Sandpackung (Bild 6.27) liegt der Maximalwert der Amplitude vermutlich außerhalb des Tankbereichs und es ist anzunehmen, dass die Wellenlänge größer als bei den beiden anderen stochastischen Packungen ist.

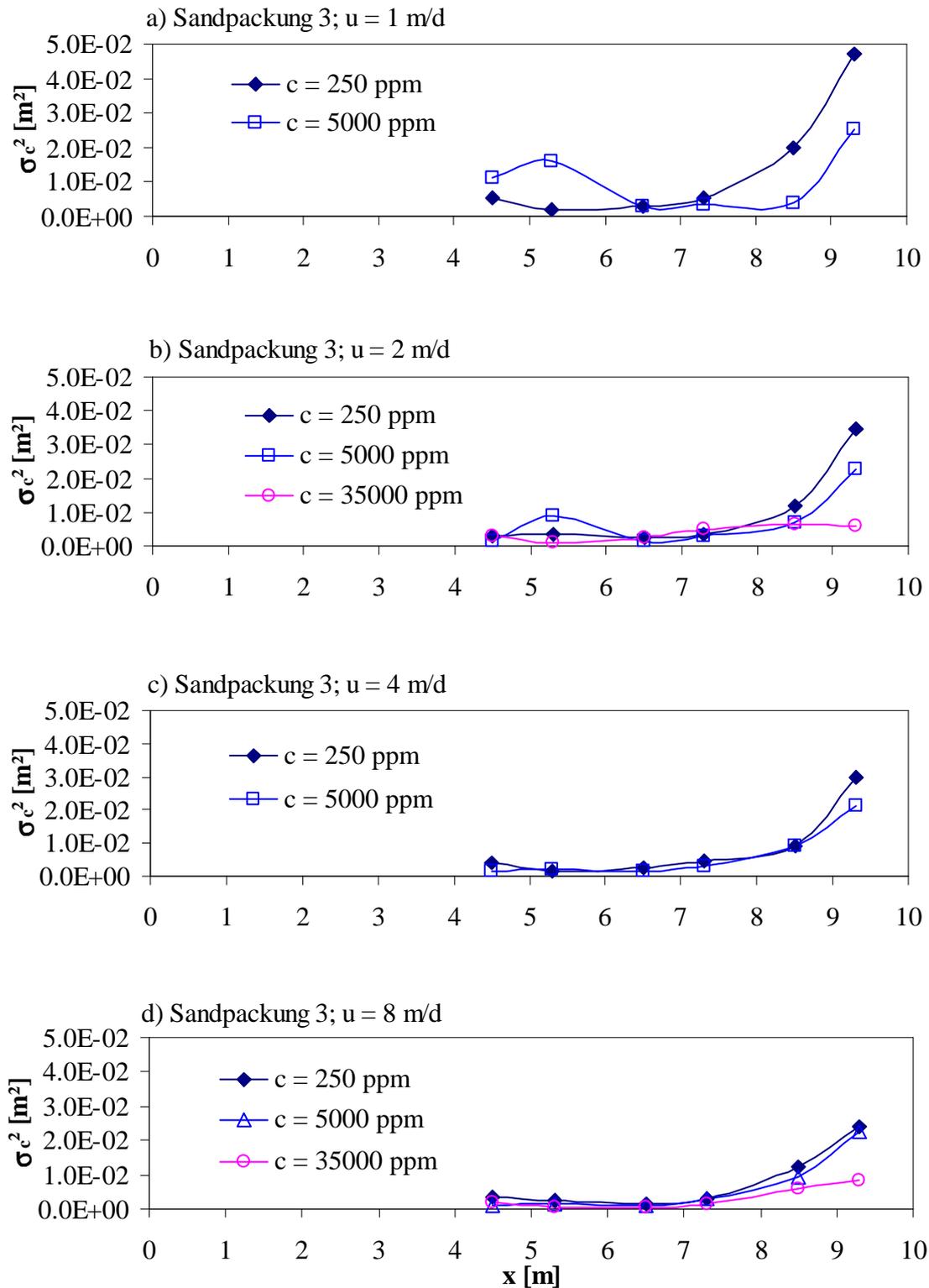
In den experimentellen Untersuchungen befand sich somit der Transportprozess noch im präasymptotischen Bereich, in dem der Ausbreitungsprozess noch von örtlichen Permeabilitäten bestimmt wird.



**Bild 6.24:** Experimentell ermittelte Varianzen der normierten Konzentrationsausbreitung  $\sigma^2$  für die Sandpackung 1 und Strömungsgeschwindigkeiten von a)  $u = 1$  m/d und b)  $u = 4$  m/d.



**Bild 6.25:** Experimentell ermittelte Varianzen der normierten Konzentrationsausbreitung  $\sigma^2$  für die Sandpackung 2 und Strömungsgeschwindigkeiten von a)  $u = 1$  m/d; b)  $u = 4$  m/d und c)  $u = 8$  m/d.



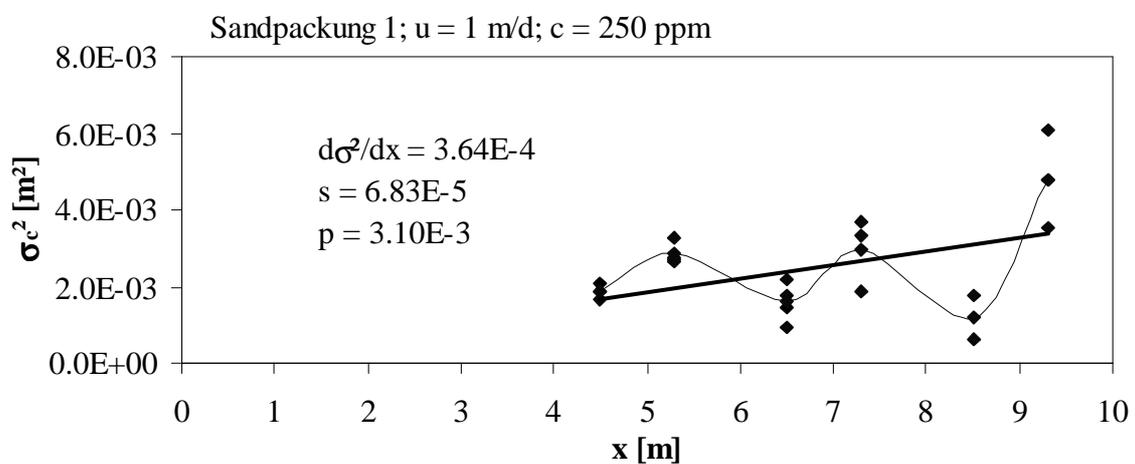
**Bild 6.26:** Experimentell ermittelte Varianzen der normierten Konzentrationsausbreitung  $\sigma^2$  für die Sandpackung 3 und Strömungsgeschwindigkeiten von a)  $u = 1$  m/d; b)  $u = 2$  m/d und c)  $u = 4$  m/d.

### 6.4.3 Transversale Makrodispersivität

Aus den Varianzen der normierten Konzentrationsverteilung errechnet man durch lineare Regression die effektive transversale Dispersion  $D_T$  bzw. die effektive transversale Dispersionslänge  $A_T$ :

$$D_T = 0.5 \cdot \frac{d\sigma^2}{dx} \cdot u \quad \text{bzw.} \quad A_T = 0.5 \cdot \frac{d\sigma^2}{dx} \quad (6.12)$$

Bild 6.27 zeigt dies am Beispiel der Versuchsauswertung für die 1. Sandpackung, wobei  $y = d\sigma^2/dx$  ist,  $s$  der Standardfehler und  $p$  die Irrtumswahrscheinlichkeit.



**Bild 6.27:** Experimentell ermittelte Varianzen der normierten räumlichen Konzentrationsausbreitung  $\sigma^2$  für die Sandpackung 1,  $c = 250$  ppm und  $u = 1$  m/d inklusive der linearen Regressionsgerade.

In Bild 6.29 ist diese effektive transversale Dispersionslänge  $A_T$  aller durchgeführten Tankexperimente in Abhängigkeit von der Strömungsgeschwindigkeit  $u$ , in Bild 6.30 in Abhängigkeit von der NaCl- Konzentration  $c_0$  und in Bild 6.31 in Abhängigkeit von dem Heterogenitätsfaktor  $H = \sigma^2 \cdot \lambda_x$  dargestellt. Sichtbar ist, dass  $A_T$  mit höherer Geschwindigkeit asymptotisch bis zu einem Endwert absinkt, wobei dieser Effekt mit geringerer Konzentration  $c$  und für die 2. und 3. gegenüber der 1. Sandpackung stärker ist.

Eine Dichtevergrößerung führt jedoch nicht wie erwartet für alle Versuchsreihen systematisch zur Absenkung von  $A_T$ . Ist diese bei der 2. Sandpackung bis zu einer Konzentration von 35000 ppm sichtbar, kommt es für die 1. Sandpackung mit höherem Dichtegradienten sogar zu einer Vergrößerung der transversalen Dispersionslänge  $A_T$ . Für Konzentrationen von  $c = 100000$  ppm ist der Heterogenitätseinfluss nahezu vernachlässigbar. Mit steigender Konzentration erreicht  $A_T$  einen geschwindigkeits- und heterogenitätsunabhängigen Wert von

ca.  $A_T = 2,5 \cdot 10^{-4}$  m, der nur von der korngerüstbedingter Dispersion und der molaren Diffusion bestimmt wird.

Für die 2. und 3. Sandpackung ist eine deutlich höhere transversale Dispersivität gegenüber der 1. Sandpackung sichtbar. Jedoch gibt es keine deutliche Erhöhung von  $A_T$  in der 3. Sandpackung gegenüber der 2. Ursache dafür ist die nur geringfügige Vergrößerung des Heterogenitätsfaktors  $H = \sigma \cdot \lambda_x$  (Abschnitt 3.4.1) der 3. Sandpackung mit  $H = 0.45$  gegenüber der 2. Sandpackung mit  $H = 0.40$ , wohingegen für die 1. Sandpackung  $H = 0.05$  ist.

In einem porösen Medium mit geringer Heterogenität (Sandpackung 1:  $\sigma^2 = 0.25$ ;  $\lambda_x = 0.2$  m;  $\lambda_y = 0.05$  m) steigt  $A_T$  proportional zur Salzwasser-Konzentration  $c_o$ . Dieses Verhalten kehrt sich mit steigender Heterogenität an einem bestimmten Wert um, wobei  $A_T$  danach umgekehrt proportional zum Konzentrationsgradienten absinkt (Bild 6.31).

Zusammenfassend lässt sich aus allen experimentellen Ergebnissen folgendes ableiten:

*Die transversale Makrodispersivität  $A_T$  steigt mit:*

- sinkender Salzwasser-Konzentration  $c_o$ ,
- sinkender Strömungsgeschwindigkeit  $u$  sowie steigendem Heterogenitätsfaktor  $H$ .

Folgender funktionaler Zusammenhang kann daraus abgeleitet werden:

$$A_T = f\{\sigma^2; \lambda; dc; u^{-1}\} \quad (6.13)$$

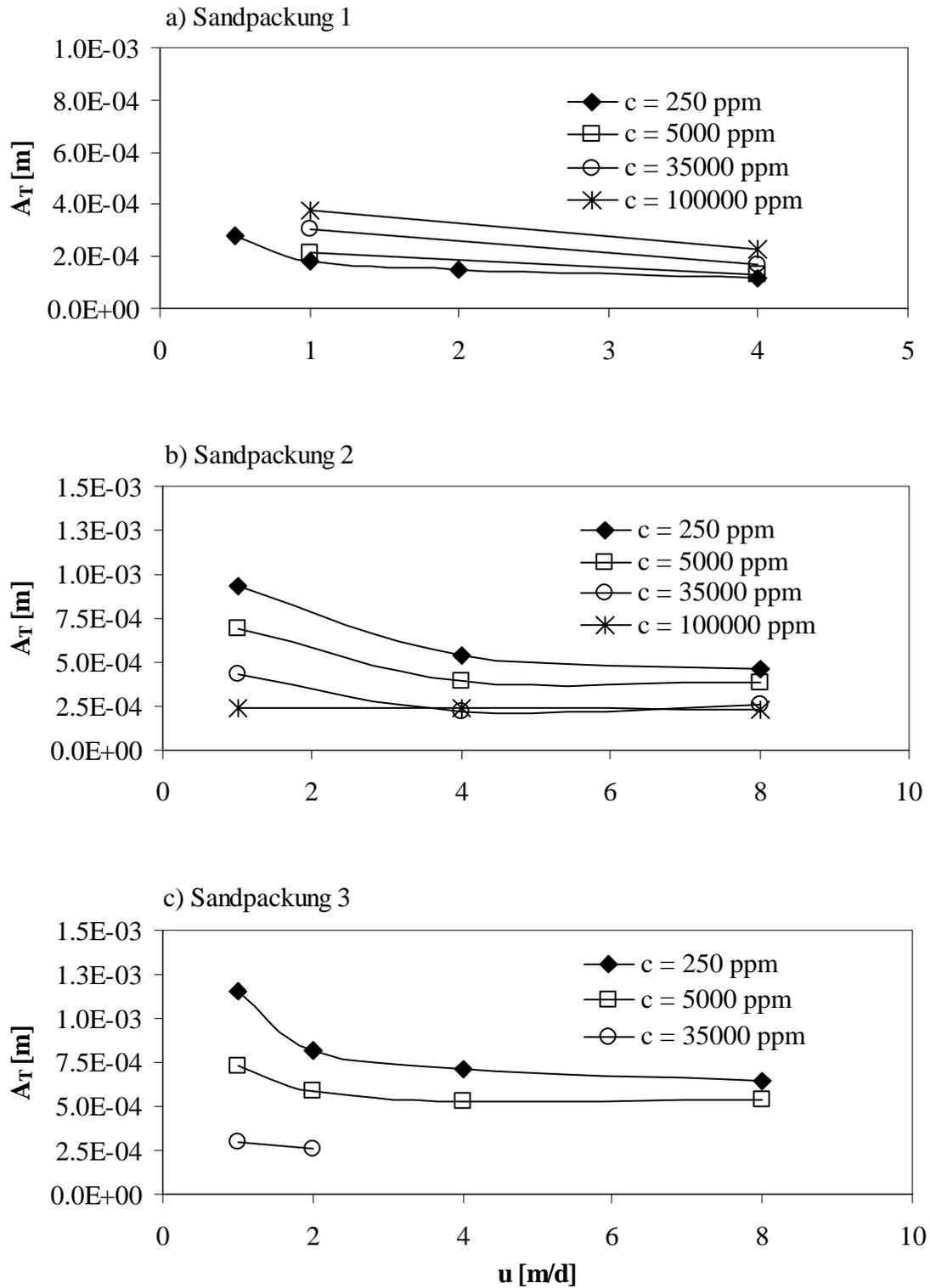
In Tabelle 6.8 sind alle experimentell ermittelten transversalen Makrodispersivitäten  $A_T$  inklusive der jeweiligen Standardfehler  $\sigma_{AT}$  sowie der Irrtumswahrscheinlichkeiten  $p$  aufgelistet. Es ist dabei eine gewisse Ungenauigkeit zu beachten, da  $A_T$  sich aus der linearen Regression aus nur jeweils 6 Datenpunkten ergab, deren Werte teilweise erheblich schwankten. Mit  $p$  zwischen  $1 \cdot 10^{-4}$  bis  $6 \cdot 10^{-2}$  können sie dennoch sichere Aussagen über die Dispersionsprozesse geben.

Tabelle 6.6 zeigt wie die stochastischen Eigenschaften der lognormalen Permeabilitätsverteilung ( $\sigma_{\ln K^2}$ ,  $\lambda_{x, \ln K^2}$ ,  $\lambda_{y, \ln K^2}$ ) mit den statistischen Eigenschaften der resultierenden Zustandsgrößen ( $\sigma_c^2$ ,  $\lambda_{x, c^2}$ ,  $A_c$ ,  $A_T$ ) qualitativ zusammenhängen. Dabei zeigt sich übereinstimmend u. a. mit den Erkenntnissen von Thiele [1997] und Spitz [1985] die stabilisierende Wirkung der steigenden Pecletzahl und der steigenden Konzentrationsunterschiede. Demgegenüber wirkt die Heterogenität des porösen Mediums

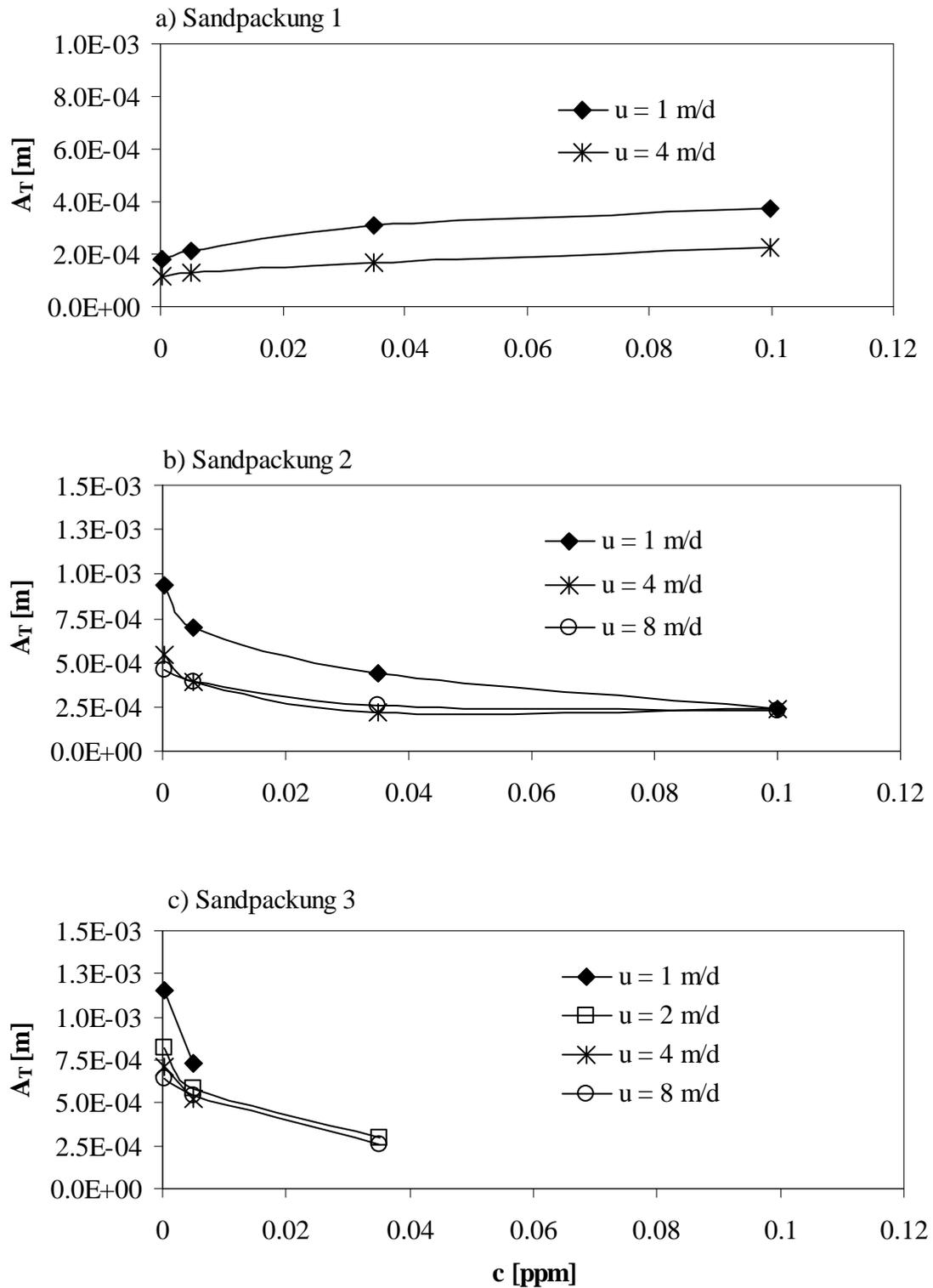
destabilisierend. Dies zeigen auch die stochastische Theorie u. a. von *Gelhar* [1979, 1996], *Gelhar and Axness* [1983], *Neuman et al.* [1987], *Welty et al.* [1989, 1991, 1992, 2003].

	c	u	$\sigma_{\ln k}^2$	$\lambda_{x,\ln k}^2$	$\lambda_{y,\ln k}^2$
$\sigma_c^2 \uparrow$	$\downarrow$	$\downarrow$	$\uparrow$	$\downarrow$	$\uparrow$
$\lambda_c \uparrow$	-	-	$\uparrow$	$\downarrow$	$\uparrow$
$A_c \uparrow$	$\downarrow$	$\downarrow$	$\uparrow$	$\downarrow$	$\uparrow$
$A_T \uparrow$	$\downarrow$	$\downarrow$	$\uparrow$	$\downarrow$	$\uparrow$
$y_s \downarrow$	$\downarrow$	$\downarrow$	-	-	-

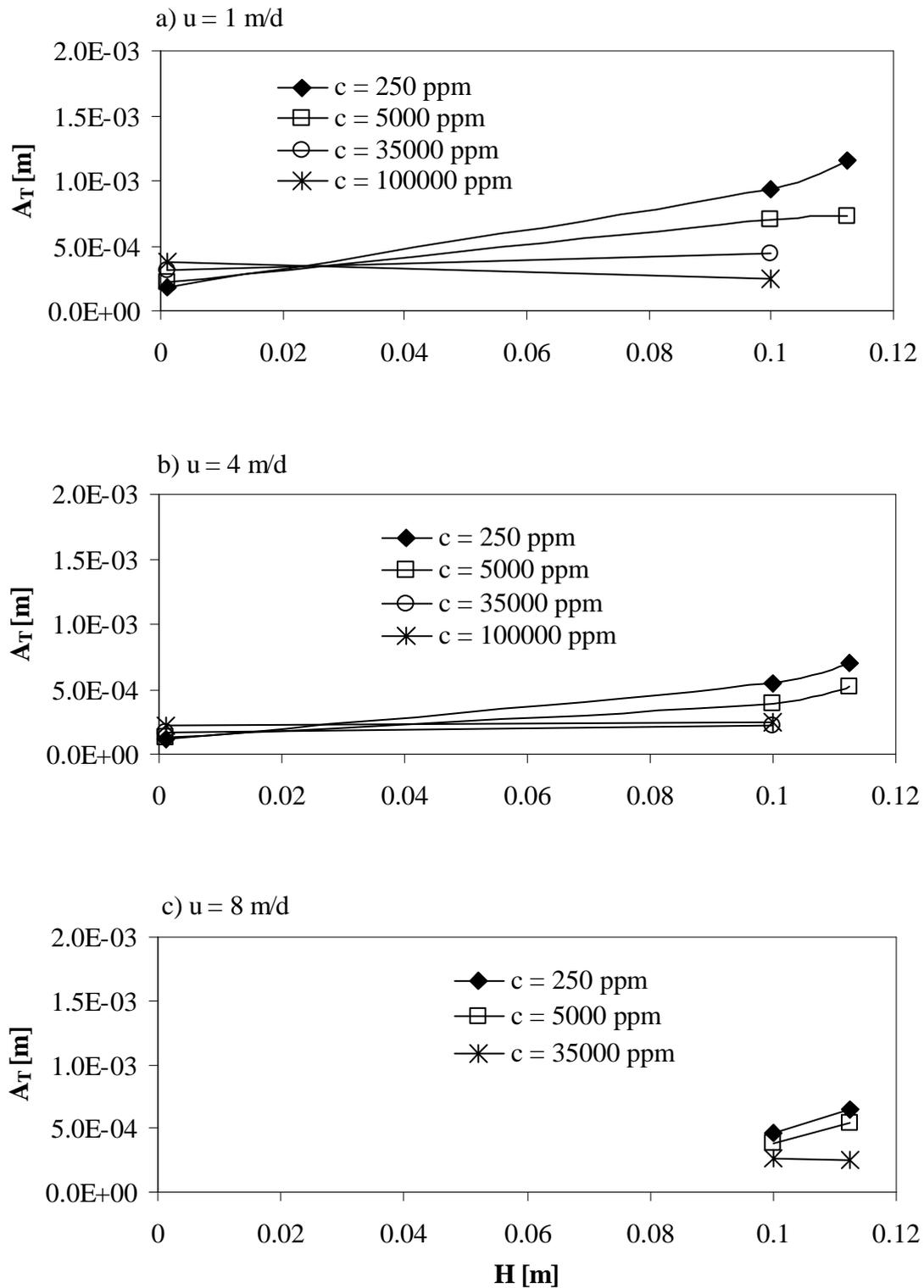
**Tabelle 6.7:** Proportionalitäten zwischen den stochastischen Eigenschaften der lognormalen Permeabilitätsverteilung ( $\sigma_{\ln k}^2$ ,  $\lambda_{x,\ln k}^2$ ,  $\lambda_{y,\ln k}^2$ ) und den statistischen Eigenschaften der resultierenden normierten räumlichen Konzentrationsverteilung ( $\sigma_c^2$ ,  $\lambda_{x,c}^2$ ,  $A_c$ ,  $A_T$ ).



**Bild 6.28:** Experimentell ermittelte transversale Makrodispersion  $A_T$  in Abhängigkeit von der Strömungsgeschwindigkeit  $u$  für a) Sandpackung 1, b) Sandpackung 2 sowie c) Sandpackung 3.



**Bild 6.29:** Experimentell ermittelte transversale Makrodispersion  $A_T$  in Abhängigkeit von der Konzentration  $c$  für a) Sandpackung 1, b) Sandpackung 2 sowie c) Sandpackung 3.



**Bild 6.30:** Experimentell ermittelte transversale Makrodispersion  $A_T$  in Abhängigkeit von der Heterogenität  $H$  mit  $H = \sigma^2 \lambda_x$  für a)  $u = 1 \text{ m/d}$ , b)  $u = 4 \text{ m/d}$  und c)  $u = 8 \text{ m/d}$ .

u [m/d]	c [mg/l]	$A_T = 0.5 \cdot d\sigma_c^2/dx$ [m]	$\sigma_{AT}$	p
Sandpackung 1				
1	250	1.822E-04	3.41E-05	3.10E-03
1	5000	2.149E-04	2.76E-05	5.63E-04
1	35000	3.077E-04	4.13E-05	6.86E-04
1	100000	3.754E-04	5.21E-05	8.04E-04
4	250	1.189E-04	3.30E-05	1.56E-02
4	5000	1.295E-04	2.34E-05	2.64E-03
4	35000	1.685E-04	6.40E-05	4.64E-02
4	100000	2.252E-04	2.10E-05	1.22E-04
2	250	1.487E-04	3.49E-05	7.99E-03
0.5	250	2.804E-04	5.44E-05	3.61E-03
Sandpackung 2				
1	250	9.365E-04	4.00E-04	6.63E-02
1	5000	6.950E-04	1.69E-04	9.34E-03
1	35000	4.372E-04	4.96E-05	3.12E-04
1	100000	2.426E-04	6.03E-05	1.01E-02
4	250	5.426E-04	1.53E-04	1.63E-02
4	5000	3.914E-04	1.22E-04	2.39E-02
4	35000	2.201E-04	8.96E-05	5.75E-02
4	100000	2.417E-04	8.01E-05	3.92E-02
8	250	4.627E-04	1.47E-04	2.51E-02
8	5000	3.883E-04	1.63E-04	6.35E-02
8	35000	2.607E-04	9.61E-05	4.22E-02
8	100000	2.328E-04	4.82E-05	4.75E-03
Sandpackung 3				
1	250	1.155E-03	4.21E-04	4.06E-02
1	5000	7.307E-04	2.54E-04	3.49E-02
2	250	8.202E-04	3.09E-04	4.53E-02
2	5000	5.833E-04	1.99E-04	3.25E-02
2	35000	2.960E-04	3.99E-05	7.00E-04
4	250	7.068E-04	2.59E-04	4.15E-02
4	5000	5.259E-04	1.86E-04	3.65E-02
8	250	6.453E-04	2.08E-04	2.66E-02
8	5000	5.428E-04	2.06E-04	4.60E-02
8	35000	2.561E-04	7.24E-05	1.66E-02

**Tabelle 6.8:** Aus der Regression der experimentellen Daten ermittelte transversale Makrodispersivitäten  $A_T$  inklusive Standardfehler  $\sigma_{AT}$  und Irrtumswahrscheinlichkeit p für alle Experimente.

#### 6.4.4 Diskussion und Vergleich mit dem analytischen Modell

Ob und mit welcher Wahrscheinlichkeit die experimentell ermittelten transversalen Makrodispersivitäten  $A_T$  (Tabelle 6.8) mit der aus der Störungstheorie hergeleitete Formel übereinstimmen, kann durch multiple lineare Regression überprüft werden. Die in Abschnitt 4.1.2 hergeleitete Formel für die stochastische transversale Makrodispersivität  $A_{33}$  ist wie folgt definiert:

$$A_{33} = \frac{\sigma_f^2 \lambda}{\gamma_3^2} \left\{ \frac{\xi(2\xi+1)}{2(\xi+1)^2} - 2\bar{x}G_3\Gamma_3 \left( \frac{1}{4\xi(1/\xi^2-1)} \right) \right\} \quad (6.14)$$

Durch Umstellen wird die Gleichung (6.14) in die Form der multiplen linearen Regressionsgleichung gebracht:

$$A_{33} = \frac{1}{\gamma_3^2} \left\{ \sigma_f^2 \lambda \frac{\xi(2\xi+1)}{2(\xi+1)^2} \right\} + \frac{\Gamma_3}{\gamma_3^2} \left\{ -2\bar{x}\sigma_f^2 \lambda G_3 \frac{1}{4\xi(1/\xi^2-1)} \right\} \quad (6.15)$$

wobei von folgender Regressionsgleichung ausgegangen wird:

$$y = X_1 \cdot b_1 + X_2 \cdot b_2 \quad \text{mit} \quad (6.16)$$

$$b_1 = \frac{1}{\gamma_3^2} \quad b_2 = \frac{\Gamma_3}{\gamma_3^2} \quad (6.17)$$

Die Regressoren  $x_1$  und  $x_2$  ergeben sich aus den beiden Klammertermen der Gleichung (6.15):

$$x_1 = \sigma_f^2 \lambda \frac{\xi(2\xi+1)}{2(\xi+1)^2} \quad x_2 = -2\bar{x}\sigma_f^2 \lambda G_3 \left( \frac{1}{4\xi(1/\xi^2-1)} \right) \quad (6.18)$$

Die aus der Regression ermittelten Faktoren  $b_1$  und  $b_2$  inklusive ihrer Standardfehler  $\sigma_{b_i}$  und Irrtumswahrscheinlichkeiten  $p$  sind aus der Tabelle 6.7 zu entnehmen. Aus den Faktoren  $b_1$  und  $b_2$  können die Parameter  $\gamma_3$  sowie  $\Gamma_3$  nach (6.17) folgendermaßen berechnet werden:

$$\gamma_3 = \sqrt{1/b_1} \quad \Gamma_3 = b_2/b_1 \quad (6.19)$$

Aus diesem Zusammenhang kann  $\gamma_3$  aus  $\gamma_1 K_g J_1 = v = \gamma_3 K_g J_3$  wie folgt ermittelt werden:

$$\gamma_3 = \gamma_1 \frac{K_{ij} J_1}{K_{ij} J_3} \quad (6.20)$$

Unter der Annahme von  $\gamma_1 = 1$  und  $K_{ij} = K_G$  im zweidimensionalen Modell [Gelhar, 1997] kann aus (6.20) der transversale hydraulischer Gradient  $J_3$  nach  $J_3 = J_1/\gamma_3$  ermittelt werden.

Wird der Strömungsfaktor  $\gamma_1$  nach der Gleichung (4.27) als von der Heterogenität abhängig angenommen, vergrößert sich die Irrtumswahrscheinlichkeit  $p$  für den Koeffizienten  $b_1$ . Mit größerer Wahrscheinlichkeit ist damit der Strömungsfaktor  $\gamma_1$  unabhängig von der Heterogenität und den Fluideigenschaften. Dies stimmt mit den Aussagen von Neuman *et al.* [1987] und Gelhar [1997] überein, bei denen  $\gamma_1 = 1$ .

Der Faktor  $\Gamma_3$  impliziert außerdem mit  $\Gamma_3 = 1.3$  eine Reduktion der transversalen Makrodispersion  $A_T$  mit steigender Konzentrations- bzw. Dichtedifferenz. Auch hier zeigt der Standardfehler von  $\sigma_{B_2} = 4 \cdot 10^{-3}$  eine gute Übereinstimmung der experimentellen Ergebnisse mit dem analytischen Modell. Unter der Annahme des heterogenitätsabhängigen Strömungsfaktor  $\gamma_1$  ergibt sich ein negativer Wert für den Faktor  $\Gamma_3$  (Tabelle 6.9). Dies impliziert mit (6.14) eine Zunahme der transversalen Makrodispersivität proportional zum Dichtegradienten, die in den experimentellen Ergebnissen nicht beobachtet wurde. Der Strömungsfaktor  $\gamma_1$  kann demzufolge auch hier als heterogenitätsunabhängig angenommen werden.

Die transversale Makrodispersion im heterogenen porösen Medium kann somit für die in dieser Arbeit durchgeführten Laborexperimente mit der aus der Störungsmethode hergeleiteten Formel (6.14) beschrieben werden.

$\gamma_1$	$b_1$	$\sigma_{b1}$	$p$	$b_2$	$\sigma_{b2}$	$p$	$J_3/J_1$	$\Gamma_3$
1	0.0106	8.4E-04	1.1E-26	0.0137	4.4E-03	2.4E-03	0.1030	1.3E+00
$f(c, \sigma^2)$	0.0168	1.8E-03	1.4E-16	-0.5081	1.4E-01	4.0E-04	0.1296	-3.0E+01

**Tabelle 6.9:** Regressionsfaktoren  $b_1$  und  $b_2$  inklusive deren Standardabweichungen  $s$  und Irrtumswahrscheinlichkeiten  $p$  für die multiple lineare Regressionsanalyse der transversalen Makrodispersion  $A_T$  sowie die Faktoren  $J_3/J_1$  und  $\Gamma_3 = b_2/b_1$ .

# 7 Grundlagen zur numerischen Modellierung

## 7.1 Numerische Methoden

Eine Vielzahl natürlicher stationärer Zustände sowie zeitabhängiger Prozesse lassen sich mit Differentialgleichungen in mehreren unabhängigen Variablen - partielle Differentialgleichungen (PDG) - beschreiben, so auch die Strömungs- und Transportprozesse im Untergrund.

Da eine vollständige analytische Lösung praktisch auf Prozesse mit vereinfachten Randbedingungen beschränkt bleibt, müssen die differentiellen Strömungs- und Transportgleichungen numerisch gelöst werden. Dazu verwendet man vornehmlich Finite-Differenzen- oder Finite-Elemente-Verfahren, wobei diese von einem ortsfesten Gitter ausgehen, dem Euler-Verfahren.

Nach der Art der differentiellen Ableitungen unterscheidet man elliptische, parabolische und hyperbolische PDG's. Parabolische PDG's bestehen nur aus Termen zweiter Ordnung, beispielsweise die Strömungs- und die Diffusionsgleichung. In elliptischen Differenzialgleichungen sind nur räumliche Ableitungen enthalten, nicht jedoch zeitliche. Ein Beispiel ist die stationäre Strömungsgleichung, die eine Laplace-Gleichung darstellt. Eine Differentialgleichung, die ausschließlich aus Termen erster Ordnung besteht – beispielsweise die Gleichung des rein advektiven Transportes (ohne Dispersionsterm) - nennt man hyperbolisch. In diesem Fall sind verwendet man vorzugsweise numerische Verfahren mit beweglichem Koordinatensystem (Lagrange-Verfahren). Eines dieses Verfahren wird Particle-Tracking-Verfahren genannt. Die allgemeine Transportgleichung hat sowohl einen hyperbolischen (Advektionsterm) als auch einen parabolischen Anteil (Dispersionsterm), sie ist gemischt hyperbolisch-parabolisch und damit numerisch besonders schwierig zu lösen. Hier verwendet man sowohl das Euler- als auch das Lagrange-Verfahren, wobei es hier je

nach Art des Verfahrens zu Stabilitätsproblemen bzw. numerischen Fehlern kommt (Abschnitt 7.2). Alternativ bietet sich hierfür das so genannte Charakteristiken-Verfahren an, bei welchem der advective Transport mithilfe des Charakteristiken-Verfahrens berechnet wird und der dispersive Transport mit einem Finite-Differenzen- oder Finite-Elemente-Verfahren.

Weitere Verfahren sind die Finite-Volumen-Methode - die ebenso wie die FE- und die FD-Methode zur Gruppe der Diskretisierungsverfahren gehört -, die Randintegral-Methode und die Bilanzmethode (CVM). Im Rahmen dieser Arbeit sollen diese jedoch nicht erläutert werden und es wird an dieser Stelle auf Quellen in der einschlägiger Literatur hingewiesen [u.a. *Kinzelbach*, 1992; *Holzbecher*, 1996].

### 7.1.1 Finite-Differenzen-Methode (FDM)

Die einfachste der numerischen Methoden - die Finite-Differenzen-Methode - teilt das Modellgebiet in Rechteckzellen auf: die Differentialgleichung zur Beschreibung der Strömung und des Stofftransports wird durch Differenzenquotienten in Raum und Zeit angenähert. Das Prinzip der Finiten Differenzen soll anhand der dichteunabhängigen Strömungs-(7.1) und Transportgleichung (7.2) ohne Quellen-, Abbau-, Zerfalls- sowie Adsorptionsterme diskutiert werden:

$$S_0 \frac{\partial h}{\partial t} = K \nabla^2 h \quad (7.1)$$

$$\frac{\partial \theta}{\partial t} + \mathbf{v} \bar{\nabla} \theta = \mathbf{D} \nabla^2 \theta \quad (7.2)$$

wobei  $\theta$  die entsprechende normierte Transportvariable Konzentration oder Temperatur ist. Zur besseren Anschaulichkeit werden die zweidimensionale Strömung im homogenen porösen Medium sowie der zweidimensionale Transport betrachtet. Die Gleichungen (7.1) und (7.2) können in ihrer differentiellen Form wie folgt geschrieben werden:

$$\frac{S_0}{K} \frac{\partial h}{\partial t} = \frac{\partial^2 h}{\partial x^2} + \frac{\partial^2 h}{\partial y^2} \quad (7.3)$$

$$\frac{\partial \theta}{\partial t} + v_x \frac{\partial \theta}{\partial x} + v_y \frac{\partial \theta}{\partial y} = D_L \frac{\partial^2 \theta}{\partial x^2} + D_T \frac{\partial^2 \theta}{\partial y^2} \quad (7.4)$$

wobei  $v_x$  und  $v_y$  die Darcy-Geschwindigkeiten in die beiden Richtungen  $x$  und  $y$  beschreiben. Das Prinzip der Finite-Differenzen-Methode besteht nun darin, die Differentialterme in (7.3) und (7.4) durch Differenzenquotienten in Raum und Zeit anzunähern. Die Konzentrationen und Piezometerhöhen werden damit nicht mehr kontinuierlich im Modellgebiet berechnet, sondern nur noch diskret an Gitterpunkten. Diese Gitterpunkte werden auch

Berechnungspunkte oder Knoten genannt, deren räumliche Lage im Gitternetz mit einem Doppelindex  $(i,j)$  definiert wird. Ebenso wird das zeitliche Kontinuum durch diskrete Zeitpunkte ersetzt, für die die neuen Konzentrationen berechnet werden. Der Transportparameter  $\theta_{ij}$  bzw. die Piezometerhöhe  $h_{ij}$  an einem Knoten repräsentiert dabei den jeweils mittleren Wert einer ganzen Zelle. Die räumliche und zeitliche Diskretisierung soll im Folgenden am Beispiel der Strömungsgleichung (7.3) erläutert werden.

## Räumliche Diskretisierung

Je nach der räumlichen Richtung der approximierten Diskretisierungen werden Vorwärts-, Rückwärts- und zentrale Differenzen unterschieden. Bei einer stärkeren Wichtung der in Strömungsrichtung gelegenen Zellen spricht man von *Vorwärtsdifferenzen im Raum*. Die Funktion kann durch Taylorreihenbildung um die Piezometerhöhe  $h$  in positiver Richtung entwickelt werden und man erhält folgende diskrete Approximation:

$$\left. \frac{dh}{dx} \right|_x \cong \frac{h(x + \Delta x) - h(x)}{\Delta x} = \frac{h(x + \Delta x) - h(x)}{\Delta x} + O(\Delta x) \quad (7.5)$$

Der diskrete Term ist somit nur eine Näherungslösung für den differentiellen. Die Differenz beider Seiten der Gleichung (7.5) nennt man Abschneidefehler (oder engl. truncation error) der Ordnung  $n$  und bezeichnet ihn mit  $O\{(\Delta x)^n\}$ .

Werden stromabwärts gerichtete Zellen stärker gewichtet, handelt es sich um *Rückwärtsdifferentiation im Raum* und man erhält folgende Näherung:

$$\left. \frac{dh}{dx} \right|_x \cong \frac{h(x) - h(x - \Delta x)}{\Delta x} = \frac{h(x) - h(x - \Delta x)}{\Delta x} + O(\Delta x) \quad (7.6)$$

Sowohl durch Vorwärts- als auch durch Rückwärtsdifferenzen entstehen damit Fehler 1. Ordnung. Subtrahiert man (7.5) und (7.6) erhält man die *Zentralen Differenzen im Raum*:

$$\left. \frac{dh}{dx} \right|_x \cong \frac{h(x + \Delta x) - h(x - \Delta x)}{2\Delta x} + O\{(\Delta x)^2\} \quad (7.7)$$

Bei der Bildung zentraler Differenzen verbleibt damit ein Fehler 2. Ordnung. Die Approximation der 2. Ableitungen erhält man durch Addieren beider Gleichungen (7.5) und (7.6):

$$\left. \frac{d^2h}{dx^2} \right|_x \cong \frac{h(x + \Delta x) - 2h(x) + h(x - \Delta x)}{(\Delta x)^2} + O\{(\Delta x)^2\} \quad (7.8)$$

Die räumlich diskrete Lösung der stationären Strömungsgleichung (7.3) ist mit  $\Delta x_i = \Delta x$  für alle  $i$  sowie  $\Delta y_j = \Delta y$  für alle  $j$  wie folgt:

$$\frac{S_0}{K} \frac{\Delta h}{\Delta t} = \frac{h_{i+1,j} - 2h_{i,j} + h_{i-1,j}}{(\Delta x)^2} + \frac{h_{i,j+1} - 2h_{i,j} + h_{i,j-1}}{(\Delta y)^2} \quad (7.9)$$

Ist die Strömung stationär - wie in den Untersuchungen der hier vorliegenden Arbeit - entfällt der Speicherterm ( $S_0 \Delta h / \Delta t = 0$ ) und damit die Zeitabhängigkeit. Für den vereinfachten Fall gleicher Gitterweiten in  $x$ - und  $y$ -Richtung, d.h.  $\Delta x = \Delta y$  ist die Piezometerhöhe am Knoten  $i,j$  mit den 4 umgebenden Knotenwerten gekoppelt:

$$\Delta x^2 \frac{S_0}{4K} \frac{\Delta h}{\Delta t} + h_{ij} = \frac{1}{4} (h_{i+1,j} + h_{i-1,j} + h_{i,j+1} + h_{i,j-1}) \quad (7.10)$$

### Zeitliche Diskretisierung

Durch die räumliche Diskretisierung entstehen  $N$  Gleichungen mit  $N$  Knoten und  $N$  Ungekannten, aus denen schrittweise in diskreten Zeitschritten  $dt$  – deren Länge variieren kann - die Konzentrationen für den Zeitpunkt  $t = t + \Delta t$  berechnet werden. Zur vereinfachten Darstellung wird an dieser Stelle für die örtliche Diskretisierung ein Operator  $L$  eingeführt. Die zeitlichen Diskretisierungen der räumlich diskreten Strömungsgleichung (7.9) ist dann:

$$\frac{h(t + \Delta t) - h(t)}{\Delta t} = \kappa \cdot L\{h(t + \Delta t)\} + (1 - \kappa) \cdot L\{h(t)\} \quad (7.11)$$

wobei  $\kappa$  ein Wichtungsfaktor ist, der zwischen 0 und 1 liegt. Ist  $\kappa = 0$  spricht man vom *voll expliziten Verfahren* (Rückwärts-Euler-Verfahren) und für  $\kappa = 1$  vom *voll impliziten Verfahren* (Vorwärts-Euler-Verfahren). Alle Verfahren mit  $\kappa < 1$  sind implizit, wobei es für den Fall, dass man beide Zeitebenen gleich gewichtet, d.h.  $\kappa = 0.5$ , *Crank-Nicolson-Verfahren* genannt wird.

Beim expliziten Verfahren ( $\kappa = 0$ ) werden für die räumlichen Differenzen die Konzentrationen des vergangenen Zeitschrittes verwendet werden und alle Knotengleichungen unabhängig voneinander gelöst. Dieses Verfahren ist zwar einfach zu programmieren und benötigt wenig Speicher- und Rechenaufwand, es wird jedoch bei zu großem Zeitschritt instabil. Die entsprechenden Stabilitätskriterien sind im Abschnitt 7.3 beschrieben.

Aufgrund der überwiegenden Nachteile des expliziten Lösungsverfahrens, werden für numerische Simulationsprogramme fast ausschließlich implizite verwendet. Beim total

impliziten Lösungsverfahren ( $\kappa = 1$ ) errechnet man die räumlichen Differenzen der neuen aus den unbekanntem Konzentrationen des neuen Zeitschrittes. Die einzelnen Knotengleichungen sind damit nicht mehr unabhängig voneinander, sondern müssen als lineares Gleichungssystem betrachtet werden. Dieses kann für die Strömung wie folgt geschrieben werden:

$$A \cdot \mathbf{h}(t+\Delta t) = \mathbf{f}(t) \quad (7.12)$$

- A** Matrix der bekannten Größen (Gitterabstände  $dx, dy; n_e, K$ )  
**h** Vektor der unbekanntem Piezometerhöhe zum Zeitpunkt  $t + \Delta t$   
**f(t)** bekannte Randbedingungen und Quellterme

Bedingt durch den Differenzenquotient (7.10) ist jeder Knotenwert nur mit seinen 4 umgebenen Größen gekoppelt, so dass die anderen Koeffizienten der Matrix A Null ist. Eine solche Matrix nennt sich Band-Matrix, sie ist dünn besetzt. Der Speicherplatzbedarf steigt dabei proportional zur Bandbreite und diese ist wiederum abhängig von der Richtung der Knotennumerierung. In einem rechteckigen Modellgitter bewirkt eine Numerierung in der Richtung der kürzeren Rechteckseite eine kürzere Bandweite und damit einen geringeren Speicherplatzbedarf.

Sowohl im FD- als auch im FE-Verfahren besteht die Bandmatrix der Strömung sowie des Transportes ohne Konvektion aus einer Hauptdiagonale und zwei Nebendiagonalen, die symmetrisch gegenüber der Hauptdiagonalen sind. Demgegenüber führt die „upwind“-Diskretisierung des Transportes zu einem unsymmetrischen Gleichungssystem, die mit entsprechenden Gleichungslösern für unsymmetrische Matrizen berechnet werden müssen und damit einen erhöhten Speicher- und Rechenbedarf erfordert.

Zur Lösung des impliziten Gleichungssystems werden direkte oder iterative Gleichungslöser verwendet.

*Direkte Gleichungslöser.* Beim direkten Verfahren – z.B. Gauß-, Cholesky- oder Crout-Verfahren - wird die Koeffizientenmatrix in die Form einer Dreiecksmatrix gebracht, die anschließend durch Vorwärts- oder Rückwärtsdifferentiation im Raum gelöst wird. Da die Anzahl der Rechenoperationen für das Lösen des Gleichungssystems mit dem direkten Gleichungslöser proportional zu  $N \times B^2$  ist - wobei B der Bandbreite entspricht - ergeben sich bei einer großen Knotenanzahl und Bandbreite eine unwirtschaftlich große Rechenzeit. Demzufolge wird dieses Verfahren vorrangig bei Modellen mit geringer Elementzahl bis zu einigen 10000 [Kinzelbach, 1992] verwendet. Andererseits ist dieses Verfahren sehr genau und bedingungslos stabil.

*Iterative Gleichungslöser.* Bei großen Modellen kommen iterative Lösungsverfahren in Betracht. Folgende Verfahren sind üblich:

*Jacobi-Methode.* Dieses Verfahren verwendet die umgebenden Größen des alten Zeitschrittes und löst damit das Gleichungssystem. Anschließend wird der Iterationsprozess unter Verwendung der neuen Größen gestartet. Die Rechnung für den Zeitschritt  $t + dt$  ist dann beendet, wenn sich die Höhen mit der Iteration nicht mehr wesentlich ändern.

*Gauss-Seidel-Methode.* Diese Methode ist gegenüber der vor genannten eine verbesserte, wobei hier die Werte des alten Zeitschrittes nur noch für die voraus liegenden Elemente verwendet wird, für die zurückliegenden Elemente werden bereits die neu berechneten Werte verwendet.

*ADI- oder IADI-Methode (Iterativ Alternating Direction Implicit).* Bei dieser Methode werden die Größen in einer Zeile oder Spalte mit der impliziten Methode direkt gelöst, die anderen Größen werden explizit berechnet. Dabei geht man zuerst vorwärts durch alle Zeilen und Spalten und anschließend wird die Iteration rückwärts fortgeführt.

*PCG-Verfahren (Preconditioned Conjugate Gradient).* Bei diesem häufig verwendeten Verfahren wird die Koeffizientenmatrix (7.12) iterativ als Minimierungsaufgabe gelöst. Dabei kann das Konvergenzverhalten mittels eines Präkonditionierers beschleunigt werden. Diese Methode ist sehr schnell, konvergiert jedoch nicht immer. Das CG- Verfahren ist auf symmetrische Matrizen beschränkt und kommt deshalb vorrangig für die Lösung der Strömungsgleichung in Betracht. Zur Lösung unsymmetrischer Gleichungsmatrizen wurden spezielle CG-Verfahren entwickelt, wie beispielsweise das GMRES-Verfahren und das ORTHOMIN-Verfahren. Beim *GMRES-Verfahren (Generalized Minimal Residual)* wird das Gleichungssystem über eine Minimierungsprozedur gelöst. Das *ORTHOMIN-Verfahren* ist eine relativ neue Methode zur Lösung unsymmetrische Matrizen. Sein Konvergenzverhalten hängt von dem Verhältnis zwischen minimalem und maximalem Eigenwert der Matrix ab. Beide Verfahren können durch entsprechende Vorkonditionierung beschleunigt werden.

Das Lösen nichtlinearer Probleme, wie beispielsweise nichtlineare Abbau- und Zerfalls- oder Adsorptionsprozesse sowie *dichteabhängigen* Transportprozesse erfordert eine subiterative Lösung des Gleichungssystems. Dafür kommen zwei iterative Verfahren in Frage: Picard-Iterationen und Newton-Verfahren.

*Picard-Iterationen.* Dieses Verfahren ist einfach zu programmieren, der Aufwand für Speicher- und Rechenleistung ist akzeptabel. Es konvergiert jedoch schlecht und wird deshalb nur selten verwendet.

*Newton-Verfahren.* Dieses Verfahren hat im Gegensatz zu anderen Methoden gute Konvergenzeigenschaften. Nachteilig sind jedoch der große numerische Rechenaufwand, die aufwendige Programmierung, die benötigten Parameterableitungen und eine Divergenz im Falle ungünstiger Anfangsnäherungen.

### 7.1.2 Finite-Elemente-Methode (FEM)

FE-Verfahren spielen bei der Simulation verschiedenster Szenarien in Natur und Technik eine immer bedeutendere Rolle, so auch bei der Modellierung von Strömungs- und Transportprozessen im Untergrund. FD-Verfahren sind zwar zuverlässig und einfach programmierbar, jedoch unflexibel bei unregelmäßig räumlicher Aufteilung der Gitternetze und unbeholfen bei der Bearbeitung tensorischer Konzepte wie beispielsweise dem Dispersionstensor [Kinzelbach, 1992]. Für solche Anwendungen wird die Finite-Elemente-Methode verwendet. Während die FD-Methode Konzentrationen an Knoten beschreibt, die einen Mittelwert über die jeweilige Gitterzelle darstellen, wird bei der FE-Methode die Konzentration an jedem Punkt des modellierten Bereiches durch eine Interpolationsfunktion beschrieben. Dies geschieht über eine Beschreibung durch gewichtete Residuen, d.h. eine Variable, hier am Beispiel der Piezometerhöhe  $h$  wird als Linearkombination von Interpolationsfunktionen dargestellt:

$$h(x, y, t) \approx \sum_{i=1}^N h_i(t) \phi_i(x, y) \quad (7.13)$$

wobei  $\phi_i$  die zeitunabhängige Interpolationsfunktion ist, die so genannte Basisfunktion,  $h_i$  die Piezometerhöhe an einem Knoten  $i$  sowie  $N$  die Anzahl der Knoten. Von dem Wert Eins am Knoten  $j$  sinkt die Basisfunktion bis zu Null an allen angrenzenden Knoten. Meist werden quadratische Basisfunktionen verwendet, in dem Programm, das für die vorliegende Arbeit verwendet wurde, sind es bilineare.

Mit der Finite-Elemente-Methode wird eine Differentialgleichung in eine Funktionalgleichung umgewandelt. Am Beispiel der dichteunabhängigen Strömungsgleichung soll dies erklärt werden.

$$S_0 \frac{\partial h}{\partial t} - \bar{\nabla} \cdot (\mathbf{K} \bar{\nabla} h) - Q^* = 0 \quad (7.14)$$

Die differentielle Strömungsgleichung (7.14) kann mithilfe eines Operators  $O(h)$  beschrieben werden:

$$O(h) = S_0 \frac{\partial h}{\partial t} - \bar{\nabla} \cdot (K \bar{\nabla} h) - Q^* = 0 \quad (7.15)$$

Die Parameter  $S_0$  und  $K$  werden dabei elementweise oder zellenweise diskretisiert [Voss, 2003] sowie  $h$  nach (7.13) knotenweise. Damit ist die diskrete Lösung nur eine Näherung und nicht exakt. Es verbleibt ein Residuum  $R$ :

$$\langle\langle O(h) \rangle\rangle = R(x, y, t) \quad (7.16)$$

wobei  $\langle\langle O(h) \rangle\rangle$  das Resultat der approximierten Strömungsgleichung ist. Ziel der Finite-Elemente-Methode ist es, das mittlere Residuum über das gesamte Modellgebiet mit dem Volumen  $V$  zu Null zu minimieren. Dazu verwendet man die Methode der gewichteten Residuen:

$$\int_V \langle\langle O(h) \rangle\rangle \phi_i(x, y) dV = \int_V R(x, y, t) \psi_i(x, y) dV = 0 \quad i = \overline{1, N} \quad (7.17)$$

wobei  $\psi$  eine so genannte Gewichtsfunktion ist. Im Galerkin-Verfahren wird diese Methode vereinfacht, indem als Gewichtsfunktionen für das Residuum die oben genannten Basisfunktionen verwendet wird. Damit steht das Residuum orthogonal auf dem Raum der Funktionen. Während für die Strömungsgleichung im Allgemeinen das Standard-Galerkin-Verfahren verwendet wird, gibt es für die Transportgleichung andere Variationen dieser Methode, die Petrov-Galerkin-Methode oder die Taylor-Galerkin-Methode. Umfassende Zusammenhänge dazu lassen sich u.a. in Schwarz [1991], und Kinzelbach [1992], Jung und Langer [2001] sowie in Voss [1985, 2003] finden.

Ersetzt man nach der Standard-Galerkin-Methode die einzelnen Terme dieser Gleichung (7.29) durch deren gewichtete Residuen entsteht folgende Funktionalgleichung:

$$\int_V \langle\langle S_0 \frac{\partial h}{\partial t} \rangle\rangle \phi_i dV - \int_V \langle\langle \bar{\nabla} \cdot (K \bar{\nabla} h) \rangle\rangle \phi_i dV - \int_V \langle\langle Q^* \rangle\rangle \phi_i dV = 0 \quad i = \overline{1, N} \quad (7.18)$$

Die Terme in den Doppelklammern entsprechen den approximierten diskreten Werten der jeweiligen Terme in (7.29). Zur Vereinfachung des 2. Terms von (7.18) wird das so genannte Green'sches Theorem verwendet [Voss, 2003]:

$$\int_V (\bar{\nabla} \cdot \mathbf{W}) dV = \int_{\Omega(V)} (\mathbf{W} \cdot \mathbf{n}) d\Gamma - \int_V (\mathbf{W} \cdot \bar{\nabla} A) dV \quad (7.19)$$

wobei  $A$  eine skalare,  $\mathbf{W}$  eine vektorielle Größe ist,  $\Omega$  die Berandung und  $\mathbf{n}$  ein Vektor normal zur Berandung. Mit dieser Formel lassen sich alle räumlichen Ableitungen 2. Ordnung durch solche erster Ordnung ersetzen und damit wird aus dem zweiten Term der Gleichung (7.18) folgendes:

$$-\int_V \left[ \nabla \cdot \langle \langle \mathbf{K} \bar{\mathbf{V}} \mathbf{h} \rangle \rangle \right] \phi_1 dV = - \int_{\Omega(\mathbf{V})} \left[ \langle \langle \mathbf{K} \bar{\mathbf{V}} \mathbf{h} \rangle \rangle \cdot \mathbf{n} \right] \phi_1 d\Gamma + \int_{\Omega} \langle \langle \mathbf{K} \bar{\mathbf{V}} \mathbf{h} \rangle \rangle \cdot \bar{\nabla} \phi_1 dV \quad (7.20)$$

Der erste Term der rechten Seite von (7.20) repräsentiert die Zu- oder Abflüsse über die Berandung des entsprechenden Modellgebietes und wird häufig Null. Setzt man (7.20) in (7.18) ein und integriert jeden Term der approximierten diskreten Strömungsgleichung, erhält man für jeden Knoten des Modellgitters folgende Strömungsgleichung:

$$S_i V_i(t) \frac{dh_i}{dt} + \sum_{j=1}^N I_{ij}(t) h_j(t) = Q_i \quad i = \overline{1, N} \quad (7.21)$$

wobei  $I_{ij}$  die integrierte hydraulische Leitfähigkeit ist und  $h_j$  die Piezometerhöhen aller von  $i$  verschiedenen Knoten. Man erhält damit  $N$  integrierte gewichtete Approximationen der Differentialgleichung, die nun unabhängig von räumlichen Koordinaten sind und zeitlich abgeleitet werden müssen.

Die zeitliche Diskretisierung entspricht sinngemäß derer in der FD-Methode, nur dass bei der FE-Modellierung das Gleichungssystem aufgrund seiner Nichtdiagonalform nicht explizit lösbar ist.

Die nach der FE-Methode räumlich integrierte Strömungsgleichung kann nun zeitlich diskret geschrieben werden:

$$S_i V_i \left( \frac{h_i^{n+1} - h_i^n}{\Delta t_{n+1}} \right) + \sum_{j=1}^N I_{ij}^{n+1} h_j^{n+1} = Q_i^* \quad i = \overline{1, N} \quad (7.23)$$

### 7.1.3 Charakteristiken-Verfahren

Das Charakteristiken-Verfahren wurde entwickelt, um die störende numerische Dispersion zu vermindern. Diese Methode löst den konvektiven Teil der Transportgleichung mit der Charakteristikenmethode, den restlichen Teil mit der vorgenannten FE- oder FD-Methode. In einer Variante dieser Methode wird der konvektive Prozess durch die Bewegung der Tracerteilchen mit zugewiesener Anfangskonzentration entlang der Charakteristiken modelliert [Kinzelbach, 1992]. Diese Anfangskonzentration kann durch andere Transportprozesse, beispielsweise der dispersen oder Quellen und Senken verändert werden.

Die Dispersion geschieht in einer Übertragung von Konzentrationen eines Teilchens höherer auf ein Teilchen mit niedrigerer Konzentration. Weitere Varianten dieser Methode arbeiten mit Rückwärtscharakteristiken oder Knotenkonzentrationen [Kinzelbach, 1992]. Gegenüber FD- und FE-Methoden ist das Charakteristiken-Verfahren für große Pecletzahlen besser geeignet, jedoch nicht für extreme Verhältnisse von  $a_L/a_T$ , die häufig in heterogenen porösen Medien bzw. im Feldmaßstab zu finden sind. In der Effizienz der Berechnung nimmt es einen mittleren Platz zwischen einerseits FD- und FE-Verfahren und andererseits dem Random-Walk-Verfahren ein.

### 7.1.4 Particle-Tracking-Verfahren

Das Particle-Tracking-Verfahren, zu dem das Random-Walk-Verfahren gehört, ist ein Verfahren mit beweglichem Koordinatennetz (Verfahren nach Lagrange), das bereits in Abschnitt 3.3.4 vorgestellt wurde. Bei diesem Verfahren bewegen sich Tracerteilchen in zufälligen Bahnen des Strömungsgitters. Jedem Teilchen wird dabei eine feste Konzentration zugewiesen. Die Dispersion wird durch eine Überlagerung von konvektiver und zufälliger Teilchenbewegung erzeugt. Die Anzahl der Tracerteilchen in einer Gitterzelle liefert deren Konzentration [Scheidegger, 1958; de Jong, 1958].

Im Gegensatz zu den FD- und FE-Verfahren ist dieses Verfahren sehr robust, erzeugt keine numerische Dispersion, ist sehr einfach auf 3D-Prozesse übertragbar, der benötigte Speicherplatz ist im Verhältnis zu den anderen genannten Verfahren geringer und es kann problemlos der kombinierte Transport mehrerer Schadstoffe durch Überlagerung der Teilchen simuliert werden. Es ist das einzige Verfahren, dass bei einem rein konvektiven Transport ( $a_L = a_T = 0$ ) sinnvolle Ergebnisse liefert. Nachteilig ist, dass sich bei Simulation höherer Konzentrationen eines Stoffes durch die größere Teilchendichte die Rechenzeit stark vergrößert. Außerdem treten Oszillationen auf und die Sensitivität der Parameter wird durch die zufällige Bewegung der Teilchen überlagert. Die Ergebnisse sind gegenüber denen anderer Methoden weniger präzise, insbesondere bei geringer Teilchendichte.

## 7.2 Stabilität und Konsistenz

*Konsistenz* einer numerischen Methode bedeutet, dass die Differenz zwischen der Differenzialgleichung und ihrer diskreten Approximation mit kleiner werdenden Orts- und Zeitaufösungen ebenfalls kleiner wird. Über eine Taylorreihenentwicklung wird die Konsistenz einer numerischen Methode überprüft [Jung, 2001].

*Stabilität.* Numerische stabil ist ein Verfahren, wenn Differenzialgleichung und Näherungslösung divergieren. Die Untersuchung der Fehlerfortpflanzungen wird Stabilitätsanalyse genannt.

Die *Konvergenz* einer numerischen Lösung ist dann gegeben, wenn der Abbruchfehler zwischen exakter und genäherter Lösung für beliebige Auflösungen gegen Null geht. Praktisch bedeutet dies, dass die Lösung genauer wird, wenn die Abmessungen der diskreten Größen kleiner werden. Gilt die Konvergenz in allen Diskretisierungspunkten, so spricht man von *diskreter Konvergenz*. Dabei gilt [Jung und Langer, 2001]:

$$\text{Konsistenz} + \text{Stabilität} = \text{diskrete Konvergenz.}$$

Konsistenz und Stabilität sind bei ausreichend feiner zeitlicher und räumlicher Diskretisierung – durch Einhaltung des Courant-, Neumann- und des Gitterpeletzahlen-Kriteriums – gewährleistet.

Insbesondere explizite numerische Verfahren führen zu Instabilitäten, wenn bestimmte Kriterien zur Wahl der Zeitschrittlänge nicht erfüllt werden. Folgende Kriterien sind für die Stabilität eines expliziten FE- und ebenso eines FD-Verfahrens sind einzuhalten:

Das *Courant-Kriterium* soll garantieren, dass die zu einem Zeitschritt in einer Zelle enthaltene Konzentration eines Inhaltsstoffes nicht größer werden kann als seine konvektiven Zuflüsse. Für räumlich zentrale Differenzen gilt im zweidimensionalen Modell das so genannte Courant-Friedrich-Lewy-Kriterium, auch Courant-Kriterium genannt:

$$\text{Co}_x = \frac{u_x \cdot \Delta t}{\Delta x} \leq 1 \quad \text{Co}_y = \frac{u_y \cdot \Delta t}{\Delta y} \leq 1 \quad (7.24)$$

Das *Neumann-Kriterium* ist ein unbedingtes Kriterium für ein explizite Verfahren, deren Einhaltung sichert, dass der Konzentrationsgradient innerhalb eines Zeitschrittes durch disperse Massenflüsse allein nicht umgekehrt werden kann:

$$\left( \frac{D_{xx}}{(\Delta x)^2} + \frac{D_{yy}}{(\Delta y)^2} \right) \Delta t \leq 0.5 \quad (7.25)$$

### 7.3 Numerische Dispersion und Oszillationen

Bei der numerischen Lösung der Transportgleichung zeigen sich zwei Arten von Problemen: numerische Dispersion (Bild 7.1) und Oszillationen (7.2). Beide Fehlerarten treten dabei je nach Wahl des Diskretisierungsschemas komplementär zueinander auf.

Numerische Dispersion und Oszillationen entstehen durch fundamentale numerische Inkonsistenzen räumlicher und zeitlicher Approximationen und können mittels Taylorreihen-Entwicklung ermittelt werden. Die klassische Galerkin-Methode ist für eine elliptische Methode optimal geeignet ist, d.h. beispielsweise für eine stationäre Strömungsgleichung. Da die advective Transportgleichung jedoch hyperbolisch ist, führt hier die Verwendung der klassischen Galerkin-Methode in einem zu groben Modellgitter zu oszillatorischen Lösungen. Ein so genanntes *Gitter-Peclet-Kriterium* sollte eingehalten werden:

$$\text{Pe}_x = \frac{u_x \cdot \Delta x}{D_{xx}} \leq 2 \quad \text{Pe}_y = \frac{u_y \cdot \Delta y}{D_{yy}} \leq 2 \quad (7.26)$$

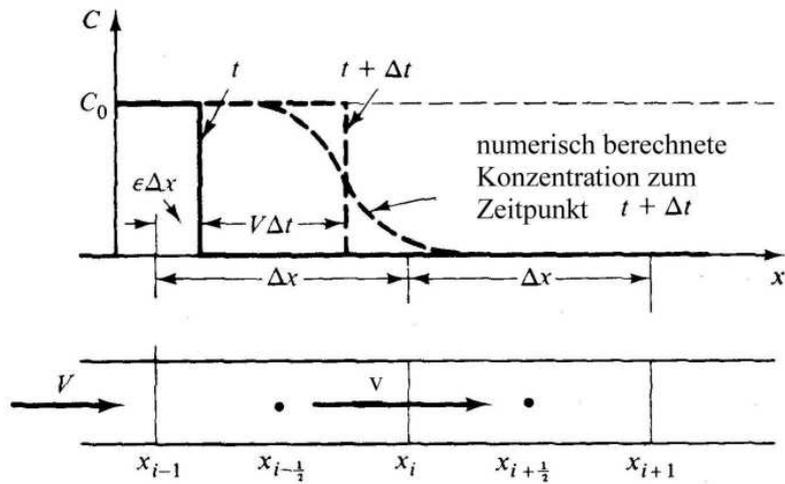
Grundsätzlich sollte auch beim impliziten Lösungsverfahren das Courantkriterium (Abschnitt 7.2) eingehalten werden. Damit werden Oszillationen weitgehend verhindert [Kinzelbach, 1992]. Zur Vermeidung der Oszillationen kann auch das so genannte „upwind“-Verfahren bzw. „upstream“-Wichtung (Rückwärtsdiskretisierung im Raum) verwendet werden. Dieses Verfahren kommt insbesondere dann zur Verwendung, wenn ein Modellgitter sehr grob ist und der disperse Anteil der Transportgleichung sehr gering. Zur Glättung der Lösung wird beim „upwind“-Verfahren jedoch ein künstlicher Dispersionsterm erzeugt, die so genannte *numerische Dispersion*:

$$D_i^N = u_i^2 \frac{\Delta t}{2} \quad (7.27)$$

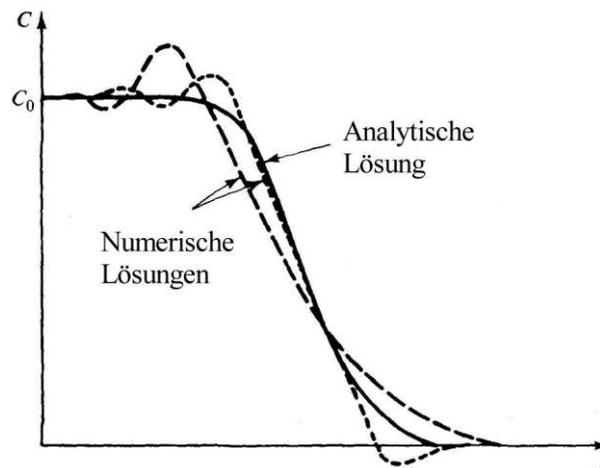
Zum Ausgleich diesen Effektes kann man diesen Wert von der Eingabe-Dispersion entsprechend abziehen [Woods et al., 2003]. Werden die Gitterabstände so gewählt, dass der Anteil der Dispersion gegenüber dem konvektiven Anteil einen bestimmten Wert nicht unterschreitet, kann die numerische Dispersion gegenüber der physikalischen vernachlässigt werden (Peclet-Kriterium).

Im Programm SUTRA wird ein Faktor zur „upstream“-Wichtung UP eingegeben, wobei UP zwischen 0 und 1 liegt. Ist  $UP = 0$ , dann wird die klassische Galerkin-Methode ohne „upstream“-Wichtung verwendet, bei  $UP = 1$  die vollständige „upstream“-Wichtung. Bei  $0 < UP < 1$  liegt die Wichtung entsprechend dazwischen.

An dieser Stelle wird auf einige interessante Diskussionen zu diesem Thema verwiesen [u.a. Koch and Zhang, 1990, 1992; Kinzelbach, 1992, Voss, 1984, 2003].



**Bild 7.1:** Numerische Dispersion einer Konzentrationsfront [nach Bear, 1979]



**Bild 7.2:** Oszillationen in der numerischen Lösung einer Konzentrationsfront im Vergleich zur analytischen Lösung [nach Bear, 1979]

## 7.4 Verifizierung, Kalibrierung und Prognose

### Verifizierung

Ein Modell muss verifiziert werden, d.h. die mathematischen Zusammenhänge eines Programms müssen anhand von ausgewählten Testmodellen - deren analytische Lösungen bereits bekannt sind (so genannte Benchmark-Tests) - geprüft werden. Das in dieser Arbeit verwendete Programm SUTRA wurde von verschiedensten Autoren [u.a. Koch, 1990, 1998; Voss and Koch, 2001, Woods et al., 2003] und vom Verfasser selbst [Voss, 1984, 2003]

bereits umfangreich getestet, und deshalb wird in dieser Arbeit auf ein weiteres Eingehen diesbezüglich verzichtet.

### **Kalibrierung**

Unter Kalibrieren – auch Eichen genannt - eines Modells versteht man die Ausrichtung dieses auf im Feld- oder Laborversuch gemessenen Daten. Die Eichung des Strömungsmodells bildet dabei immer eine Grundlage der Eichung des Transportmodells, wobei letztere aufgrund der zeitlichen Konzentrationsentwicklung und insbesondere bei Dichteabhängigkeit wesentlich komplizierter und nicht immer eindeutig ist. Nicht eindeutig bedeutet, dass verschiedene Parameterkombinationen zu einer identischen Konzentrationsausbreitung führen können.

### **Prognose**

Mit einem verifizierten und kalibrierten numerischen Modell können Prognosen für das Auftreten zukünftige Ereignisse gemacht und mögliche Strömungs- und Transportszenarien simuliert werden.

### **Sensitivitätsanalysen**

Sensitivitätsanalysen testen, wie sich die Variabilität der Eingabeparameter auf die Ergebnisse auswirken und sind damit ein wichtiges Hilfsmittel für die zuvor beschriebene Eichung eines Modells. Die Sensitivität eines Parameters  $S_p$  ist das Verhältnis der Änderungen der Modellergebnisse  $d(AP)$  zu den Änderungen der Eingabeparameter  $d(EP)$  [Koch, 1989]:

$$S_p = \frac{d(AP)}{d(EP)} \quad (7.28)$$

Ist  $S_p$  groß, dann ist die Modellsensitivität bezüglich dieses Parameters groß, während bei kleinem  $S_p$  eine nur geringe Sensitivität besteht und der Einfluss dieses Parameters vernachlässigt werden kann. Daraus kann eine Rangfolge der Parametersensitivität aufgestellt werden.

Obwohl die Sensitivitätsanalyse gegenüber der rein deterministischen Modellierung, die eine einzige Realisation mit nur einer Kombination von Eingabeparametern betrachtet, eine Weiterentwicklung darstellt, die auch Prognosen zulässt, ist deren Anwendung dennoch begrenzt. Die Parametervariationen erfolgen gleichmäßig über das gesamte Gebiet und die heterogene räumliche Struktur des porösen Mediums - die als wichtigste Ursache der Modellunsicherheit bekannt ist - wird nicht berücksichtigt. Dies war der Ausgangspunkt für die Entwicklung der stochastischen Modellierung.

## 7.5 Inverse Modellierung

Bei der Standard-Modellierung werden bekannte Eingabeparameter vorausgesetzt und daraus die Strömungs- und Transportmodellierung durchgeführt. Oft ist es jedoch nicht möglich, alle Modellparameter zu definieren, sei es aus ökonomischen oder auch technischen Gründen. Es verbleiben unbekannte Parameter, die über bereits bekannte zu ermitteln sind.

Bei der inversen Modellierung werden diese Parameter so lange systematisch variiert, bis die Differenz zwischen einer gemessenen Größe  $c_i^g$  und simulierten  $c_i^s$  an den Messstellen minimal wird:

$$\chi^2 = \sum_{i=1}^N \left( \frac{c_i^g - c_i^s}{\sigma_i} \right)^2 \quad (7.29)$$

wobei  $N$  die Anzahl der vorhandenen Messpunkte ist und  $\sigma_i$  [L] die Standard-abweichung der Messung an der Stelle  $i$ .

Das Prinzip der inversen Modellierung wird angewandt, um ein Modell automatisch zu eichen. Aufgrund der Nichteindeutigkeit wird sie jedoch bisher vorrangig zur Eichung von Strömungsmodellen verwendet. Eine automatische Eichung des Transportmodells mittels inverser Modellierung erweist sich aufgrund der vielfältigen Parametereinflüsse als sehr komplex.

Einen allgemeinen Überblick über die Parameteridentifikation bzw. über die inversen Modellierung geben [Yeh, 1986, Sun, 1994] und im speziellen Fall des advektiven Transportes [Koch and Zhang, 1992].

# 8 Numerische Untersuchungen

## 8.1 Strömungs- und Transportmodell SUTRA

Für die numerischen Modellierungen in dieser hier vorliegenden Arbeit wurde das Strömungs- und Transportmodell SUTRA [Voss, 1984, 2003] verwendet. Einerseits ist es weltbekannt, frei erhältlich, umfassend dokumentiert und getestet [u.a. von Koch, 1990, 1998; Voss and Koch, 2001, Woods et al., 2003] und andererseits ist sein Programmcode für individuelle Änderungen offen.

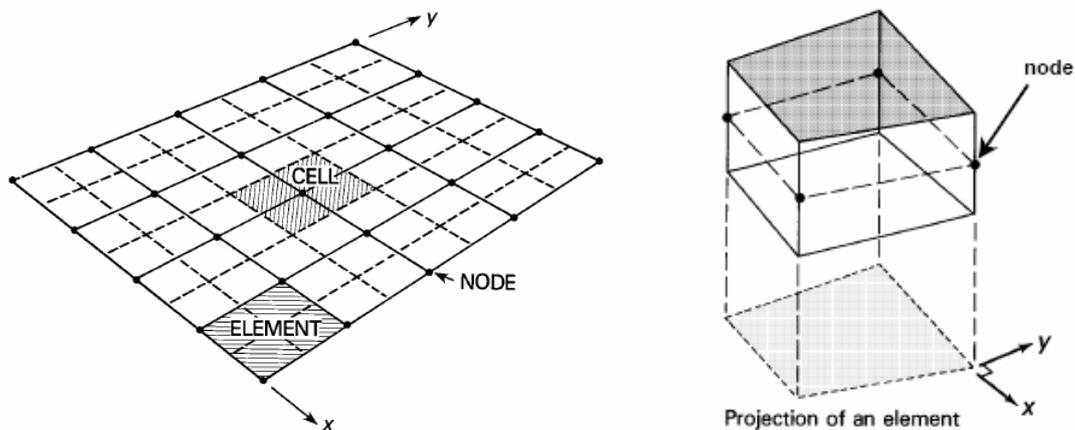
SUTRA (Saturated-Unsaturated-Transport) ist ein dreidimensionales Finite-Elemente-Modell, das folgende Prozesse im Untergrund simulieren kann:

1. die *dichteabhängige* gesättigte oder ungesättigte Grundwasserströmung und
2. den Transport
  - a) eines gelösten Inhaltsstoffes oder
  - b) von thermischer Energie.

Räumlich wird das Modell in Elemente, Zellen und Knoten (Bild 8.1 links) aufgeteilt, wobei das Modellgitter für die zweidimensionale Simulation aus quadrilateralen Elementen mit einer finiten Dicke in der 3. Dimension besteht (Bild 8.1 rechts). Die zeitliche Diskretisierung erfolgt nach der Methode der Differenzenquotienten. Transportparameter wie der Speicherkoeffizient oder die Permeabilität können entweder als Konstante je Element angegeben werden oder als Wert, der knotenweise oder zellenweise bestimmt wird.

Aufgrund der oben genannten Vorteile findet es in der Praxis insbesondere bei der Modellierung *dichteabhängiger* Transportprozesse breite Anwendung. Beispielsweise untersuchten Voss and Koch [2001] verschiedene Pumpeffekte auf das Salzwasser-Upconing im Brandenburger Tiefland und Narayan et al. [2003] auf die Salzwasserintrusion im Burdekin Delta/North Queensland. Hutchings and Tarbox [2003] entwickelten ein Modell zur

Simulation der Salzwasserintrusion in Florida. *Payne et al.*, [2001] untersuchten die *dichteabhängigen* Transport im Küstengebiet Georgias und nutzten SUTRA parallel *Payne et al.*, [2003] zu dem dichteunabhängigen Programm MODFLOW. *Koch* [1990] untersuchte die Anwendbarkeit des Programms SUTRA hinsichtlich seiner Möglichkeiten und Begrenzungen und entwickelte eine neue FE-Technik für die Transportsimulation in einem ungespannten Aquifer [*Koch*, 1992]. Eine weitere Modifikation des SUTRA-Codes schlug *Woods et al.* [2003] vor. Diese berechnet die störende numerische Dispersion und eliminiert sie. Auch in der Modellierung des Wärmetransport findet das Programm Anwendung, beispielsweise simulierten *Westbrook and O'Neill* [2003] den zweidimensionalen durch die Kontinentalverschiebung der pazifischen Platte verursachten Wärmetransport in Kolumbien/Südpanama.



**Bild 8.1:** Links: Definition der Zellen, Elemente und Knoten und rechts: quadrilaterales Element eines zweidimensionalen Finite-Elemente-Gitters im Programm SUTRA [Voss, 2003].

## 8.2 Konfiguration des numerischen Modells

### 8.2.1 Räumliche Diskretisierung

Die Wahl der Gittergröße ist ein Optimierungsprozess. Einerseits müssen die Stabilitätskriterien (7.2) eingehalten werden, andererseits wächst der Rechen- und Speicherbedarf der Simulation mit der Anzahl der Elemente bzw. Knoten. Für das in der Arbeit verwendete vorkonditionierte PCG-Verfahren wächst der Aufwand an arithmetischen Operationen wie  $N^{3/2} \ln \varepsilon^{-1}$ , der Rechenbedarf hat damit die Ordnung  $O(N^{3/2})$  wobei  $N$  die Anzahl der Unbekannten – d.h. die Knoten- oder Elementezahl – und  $\varepsilon$  das Abbruchkriterium

für die Iterationen ist. Der Speicherplatzbedarf für ein PCG-Verfahren wächst linear mit der Anzahl der Unbekannten bzw. hat die Ordnung  $O(N^1)$ .

Mit Berücksichtigung der oben genannten Grenzen wurde die Wahl des Modelgitters für diese Arbeit optimiert. Aus den Gitterpecletzahlen (7.35) lässt sich eine Maximalgittergröße berechnen:

$$dx \leq \frac{2D_x}{u_x} \quad dy \leq \frac{2D_y}{u_y} \quad (8.2)$$

wobei die Dispersionskoeffizienten  $D_{ij}$  für den allgemeinen Fall beliebiger Strömungsrichtung nach Bear [1979] aus Gleichung (3.3) wie folgt berechnet werden:

$$D_{xx} = \frac{\alpha_T u_y^2 + \alpha_L u_x^2}{|u|} + D_0 \quad D_{yy} = \frac{\alpha_T u_x^2 + \alpha_L u_y^2}{|u|} + D_0 \quad (8.3)$$

Nach Welty et al. [2003] werden mit  $a_L$  und  $a_T$  die Gesamtdispersionslängen berücksichtigt. Diese sind in einem heterogenen Medium – aufgrund des zusätzlichen makrodispersen Anteils größer als die Eingabeparameter der korngerüstbedingten Dispersivität inklusive der Diffusion. Für die kleinstmögliche Dispersion - die korngerüstbedingte - ergäbe sich bei Annahme eines Geschwindigkeitsverhältnisses von  $u_y/u_x = 1 \cdot 10^{-3}$  eine erforderliche Gittergrößen von  $dx \leq 4 \cdot 10^{-2}$  m und  $dy \leq 4 \cdot 10^{-1}$  m. Mit Berücksichtigung eines Sicherheitsfaktors wurde ein Gitternetz von  $dx = 2,5 \cdot 10^{-2}$  m und  $dy = 1,25 \cdot 10^{-2}$  m und damit ein Gesamtgitternetz von 38 416 (392 x 98) Elementen gewählt. Die sich daraus ergebenden Pecletzahlen von  $Pe_x = 1.25$  bzw.  $Pe_y = 0.06$  erfüllen das oben genannte Pecletkriterium.

Würde man zur besseren Auflösung die Gittergrößen  $dx$  und  $dy$  halbieren, ergäbe sich eine vierfach größere Elementanzahl und damit eine um das 8fache erhöhte Rechenzeit gegenüber dem gewählten Modell. Die durchschnittliche Rechenzeit für das gewählte PCG-Verfahren mit  $NE = 38416$  lag für eine dichteunabhängige Modellierung bei  $t \sim 10$  min. Durch Halbierung des Modellgitters würde sich diese auf  $t \sim 80$  min erhöhen. Hinsichtlich der praktischen Durchführung von bis zu 600 Monte-Carlo-Simulationen musste dies deshalb verworfen werden. Es kommt hinzu, dass eine *dichteabhängige* Modellierung aufgrund der Koppelung des Gleichungssystems eine Erhöhung der Rechenzeit gegenüber der eines Tracermodells benötigt. Bei den hier durchgeführten Simulationen lag diese je nach Szenario, d.h. in Abhängigkeit von Konzentration, Randbedingungen, Eigenschaften des porösen Mediums sowie numerischer Parameter (z.B. Zeitschritt  $\Delta t$ ) zwischen 3 und 6 Stunden.

## 8.2.2 Zeitliche Diskretisierung

Die Wahl der Zeitschrittgröße ist im Wesentlichen abhängig von der Gittergröße, dem angesetzten Strömungsgradienten und dem Dichtegradienten. Zur Vermeidung von Oszillationen muss auch für die in dieser Arbeit verwendeten impliziten Lösungsverfahren das Courant-Kriterium eingehalten werden. Es ergab für eine Strömungsgeschwindigkeit von  $u = 1 \text{ m/d}$  folgende maximale Zeitschritte:

$$\Delta t_x \leq \frac{\Delta x}{u_x} = 2160\text{s} \quad \text{bzw.} \quad (8.11)$$

$$\Delta t_y \leq \frac{\Delta y}{u_y} = 1080\text{s} \quad (8.12)$$

Für die numerischen Simulationen wurde ein Zeitschritt von  $\Delta t = 600 \text{ s}$  bei  $u = 1 \text{ m/d}$  ausgewählt, die bei höheren Geschwindigkeiten entsprechend umgekehrt proportional dazu verringert wurde.

## 8.2.3 Numerische Fehler

Für den ungünstigsten Fall mit einer Strömungsgeschwindigkeit von  $u = 8 \text{ m/d}$  ergab sich folgende numerische Dispersion in horizontaler Richtung:

$$D_x^N = u_x^2 \frac{\Delta t}{2} = 3,22 \cdot 10^{-7} \frac{\text{m}^2}{\text{s}} \quad \text{bzw.} \quad (8.3)$$

$$A_x^N = \frac{D_x^N}{|u|} = \frac{u_x^2}{|u|} \frac{\Delta t}{2} = 3,47 \cdot 10^{-3} \text{ m} \approx 3,5\text{mm} \quad (8.4)$$

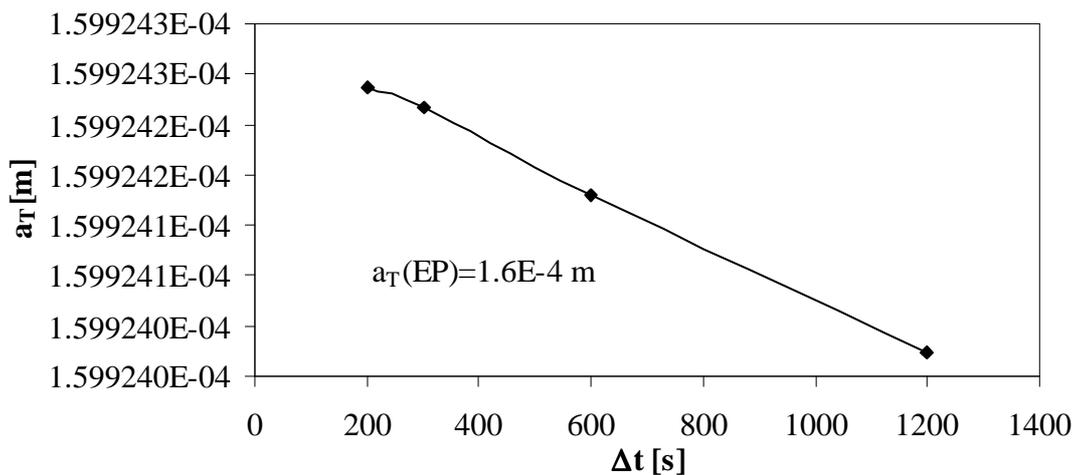
Da in den Untersuchungen der vorliegenden Arbeit nur die transversale Dispersion im Gleichgewichtszustand betrachtet wird, d.h. wenn  $t \rightarrow \infty$ , wird die numerische Dispersion in Strömungsrichtung uninteressiert. Die numerische Dispersion normal zu dieser Richtung ist durch das günstige Zusammenfallen von Koordinatensystem und Strömungsrichtung in den meisten Fällen vernachlässigbar gering. Numerischen Tests an den drei Sandpackungen bestätigten dies. Für den ungünstigsten Falles einer 0,9%igen Strömungsgeschwindigkeit in vertikaler Richtung lässt sich die numerische Dispersion für die Sandpackung 2 wie folgt berechnen:

$$D_y^N = v_y^2 \frac{\Delta t}{2} = 2,60 \cdot 10^{-11} \frac{\text{m}^2}{\text{s}} \quad \text{bzw.} \quad (8.5)$$

$$A_y^N = \frac{D_y^N}{|u|} = \frac{u_y^2}{|u|} \frac{\Delta t}{2} = 3,12 \cdot 10^{-5} \text{ m} \approx 0.03 \text{ mm} \quad (8.6)$$

Für die 2. Sandpackung ergibt sich für  $u = 8 \text{ m/d}$  eine Dispersionslänge von  $A_T \approx 6,5 \cdot 10^{-4} \text{ m}$ . Die numerische Dispersion beträgt damit nur ca. 5 % der Gesamtdispersion in transversaler Richtung und ist mit nur 0.03 mm sehr klein gegenüber möglichen Mess- und Berechnungsfehlern.

Nach Woods [2003] kann die numerische Dispersion durch Variieren der Zeitschrittlänge ermittelt werden. Testrechnungen mit verschiedenen Zeitschritten ergaben auch hier nur eine vernachlässigbar geringe transversale numerische Dispersion (Bild 8.2). Sie ist gegenüber der lokalen korngößenbedingten Dispersion um zwei Größenordnungen kleiner (0.5 bis 1 % der korngerüstbedingten Dispersion). Fällt die Richtung der Strömung mit der horizontalen Achse des Koordinatensystems zusammen, kann demzufolge die numerische Dispersion in transversaler Richtung vernachlässigt werden.



**Bild 8.2:** Numerisch berechnete transversale Dispersion  $a_T$  in Abhängigkeit von der Zeitschrittgröße für eine Simulation mit  $u = 1 \text{ m/d}$  in einem homogenen Medium ( $K_G = 1.5 \text{ m}^2/\text{s}$ ).

#### 8.2.4 Hydraulische Randbedingungen

Die Strömungsrandbedingungen werden durch die Vorgabe eines Gradienten der Piezometerhöhen in x-Richtung bestimmt (Randbedingung der 1. Art). Dies geschieht durch Dirichlet- Randbedingungen an den Modellrändern des Ein- und Auslaufes. An den Grenzen zwischen dichtem und Tracerfluid korrigiert man die Piezometerhöhe wie bereits in Abschnitt 6.1.4 besprochen. Das Setzen einer festen Druckrandbedingung am Auslauf des Modells hat sich jedoch als schwierig erwiesen. Einerseits ist ein konkreter Druckrand erforderlich, damit

die Strömungsgeschwindigkeit stationär und über die Höhe des Tankes gleich bleibt. Andererseits hat der im Auslauf ankommende Fluss abhängig von den Bedingungen damit örtlich und zeitlich unterschiedliche Konzentration, die sich wiederum in Schwankungen der Strömungsgeschwindigkeiten äußert. Es werden im Folgenden 3 Möglichkeiten vorgestellt und verglichen, die zugleich 3 Grenzvarianten sind, zwischen denen die numerischen Ergebnisse liegen.

**Randbedingung BC 0.** Die Randbedingung des Auslaufbereiches entspricht der Süßwasser-Druckverteilung:

$$p(z_{\text{OUT}}) = \rho(c_{\text{Süß}}) \cdot g \cdot z_{\text{OUT}} \quad (8.7)$$

**Randbedingung BC 1.** Die Randbedingung des Auslaufbereiches entspricht der Mischwasser-Druckverteilung:

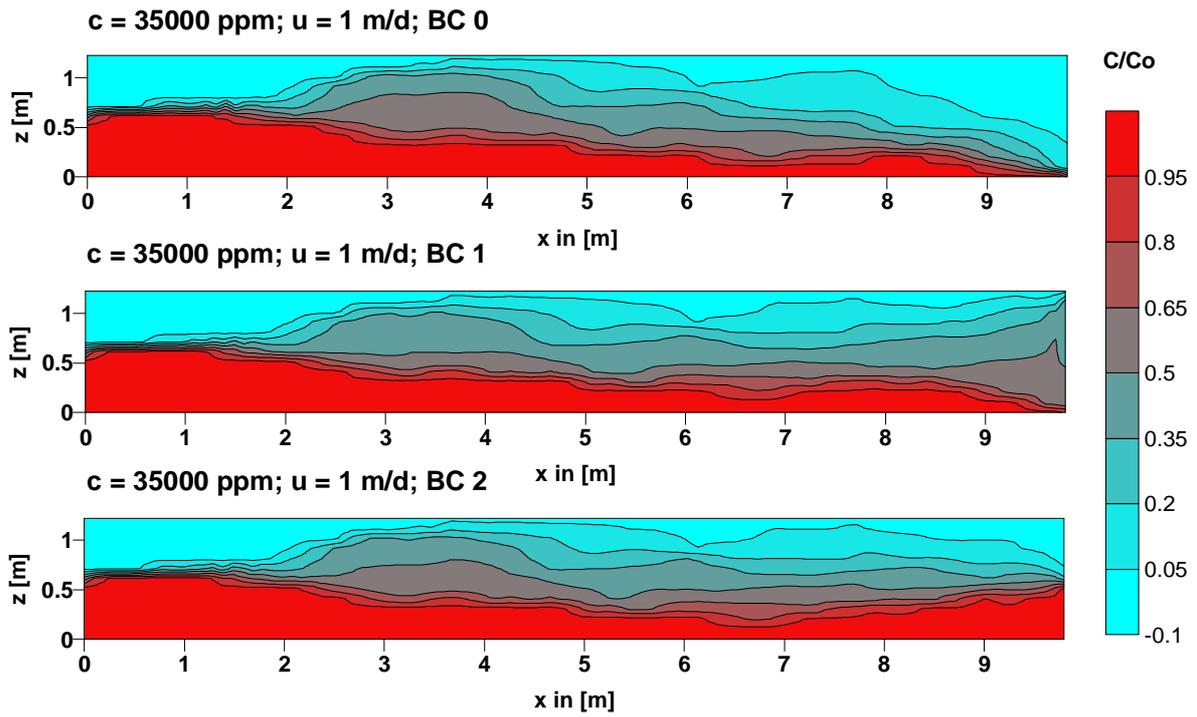
$$p(z_{\text{OUT}}) = \rho(c_{\text{mix}}) \cdot g \cdot z_{\text{OUT}} \quad \text{mit } c_{\text{mix}} \approx 0,5c_0 \quad (8.8)$$

**Randbedingung BC 2.** Die Randbedingung des Auslaufbereiches entspricht in der unteren Hälfte der Salzwasser- und in der oberen Hälfte der Süßwasser- Druckverteilung:

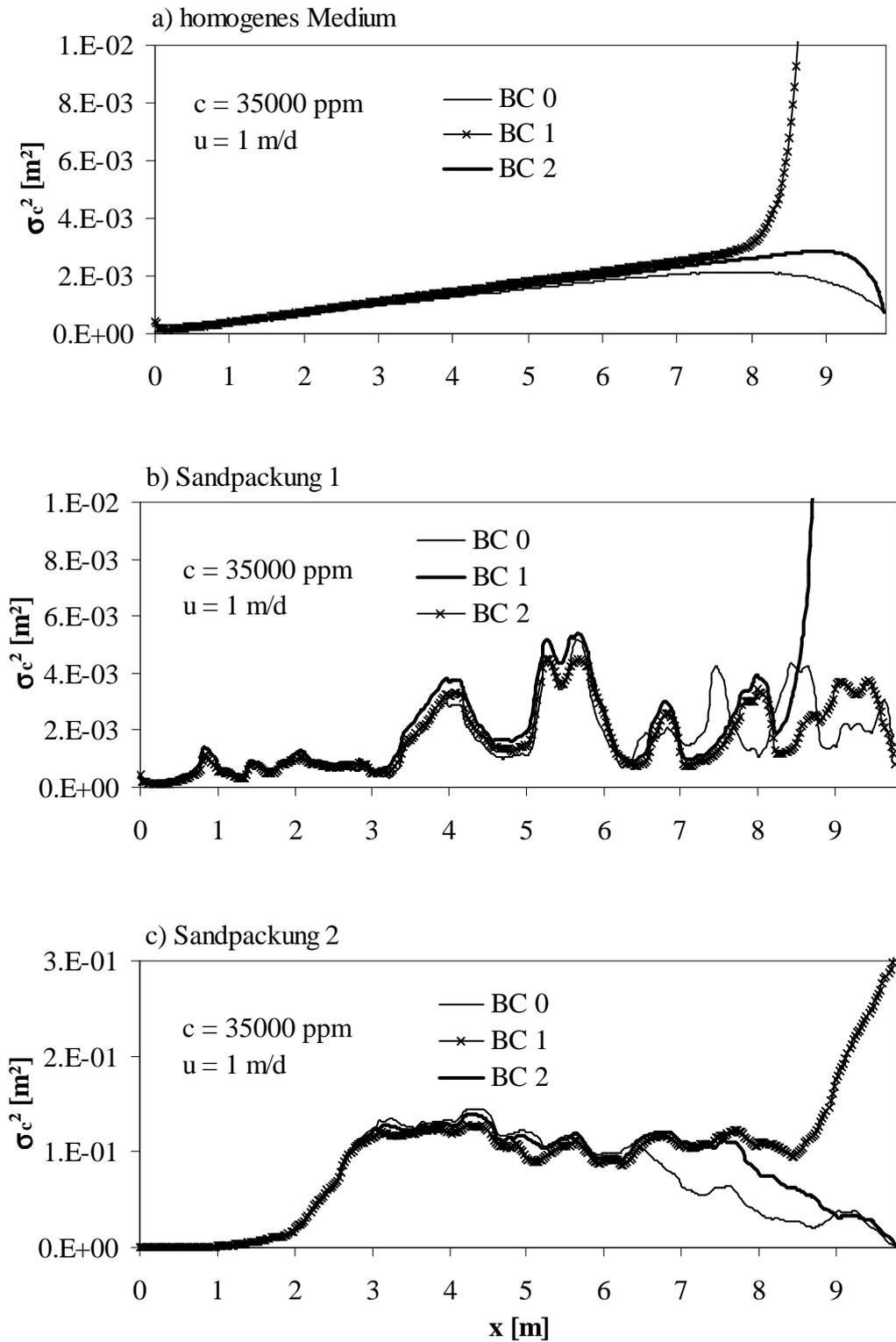
$$p(z_{\text{OUT}}) = \rho(c_{\text{Salz}}) \cdot g \cdot z_{\text{OUT}} \quad \text{für } 0 \leq z \leq 0,5z_{\text{max}} \quad (8.9)$$

$$p(z_{\text{OUT}}) = \rho(c_{\text{Süß}}) \cdot g \cdot z_{\text{OUT}} \quad \text{für } 0,5z_{\text{max}} \leq z \leq z_{\text{max}} \quad (8.10)$$

wobei  $z_{\text{max}} = 1.225$  m die maximale Tankhöhe und  $z_{\text{OUT}}$  die  $z$ -Koordinate am Auslauf des Tankes ist (beginnend an der oberen Tankkante mit  $z = 0$ ). Bild 8.2 zeigt die Konzentrationsausbreitungen einer Stoffstromes von  $c = 35000$  ppm bei  $u = 1$  m/d im stationären Endzustand in Abhängigkeit von den Druckrandbedingungen im Auslaufbehälter. Erkennbar wird, dass sich die Konzentrationsfahne nur im hinteren Bereich des Tankes wesentlich unterscheidet. Bis ca. 6 m von der Einströmkante ist dieser Einfluss minimal. Während es mit BC 0 und 2 zu einer Abminderung der Vermischungsbreite kommt, vergrößert sie sich bei BC 1. Bei BC 0 senkt sich die Stofffahne außerdem ab, bei BC 2 steigt sie am Ende des Tankes auf. Vergleicht man die Varianzen der normierten Konzentrationsausbreitung dieses Stoffstromes in einem homogenen und in einem heterogenen porösen Medium der Sandpackung 2 (Bild 8.3) können die oben genannten Aussagen bestätigt werden. Der Einfluss der unterschiedlichen Druckrandbedingungen im Auslauf ist nur im hinteren Tankbereich relevant und während für BC 0 und BC 1 die Varianzen absinken, wachsen diese bei BC 1. In den experimentellen Untersuchungen zu dieser hier vorliegenden Arbeit wurde die Variante BC 1 gewählt. Ein eingebauter Mixer stellte sicher, dass die Konzentration im Auslaufbehälter kontinuierlich gemischt wurde (Abschnitt 6.1.4).



**Bild 8.3:** Einfluss der Druckrandbedingungen im Auslauf am Beispiel der Sandpackung 2.



**Bild 8.4:** Einfluss der Druckrandbedingungen im Auslauf einer Simulation von  $c = 35000 \text{ ppm}$ ,  $u = 1 \text{ m/d}$  für a) ein homogenes Medium mit  $KG = 1.5 \text{ m}^2/\text{s}$ , b) die Sandpackung 1 und c) die Sandpackung 2.

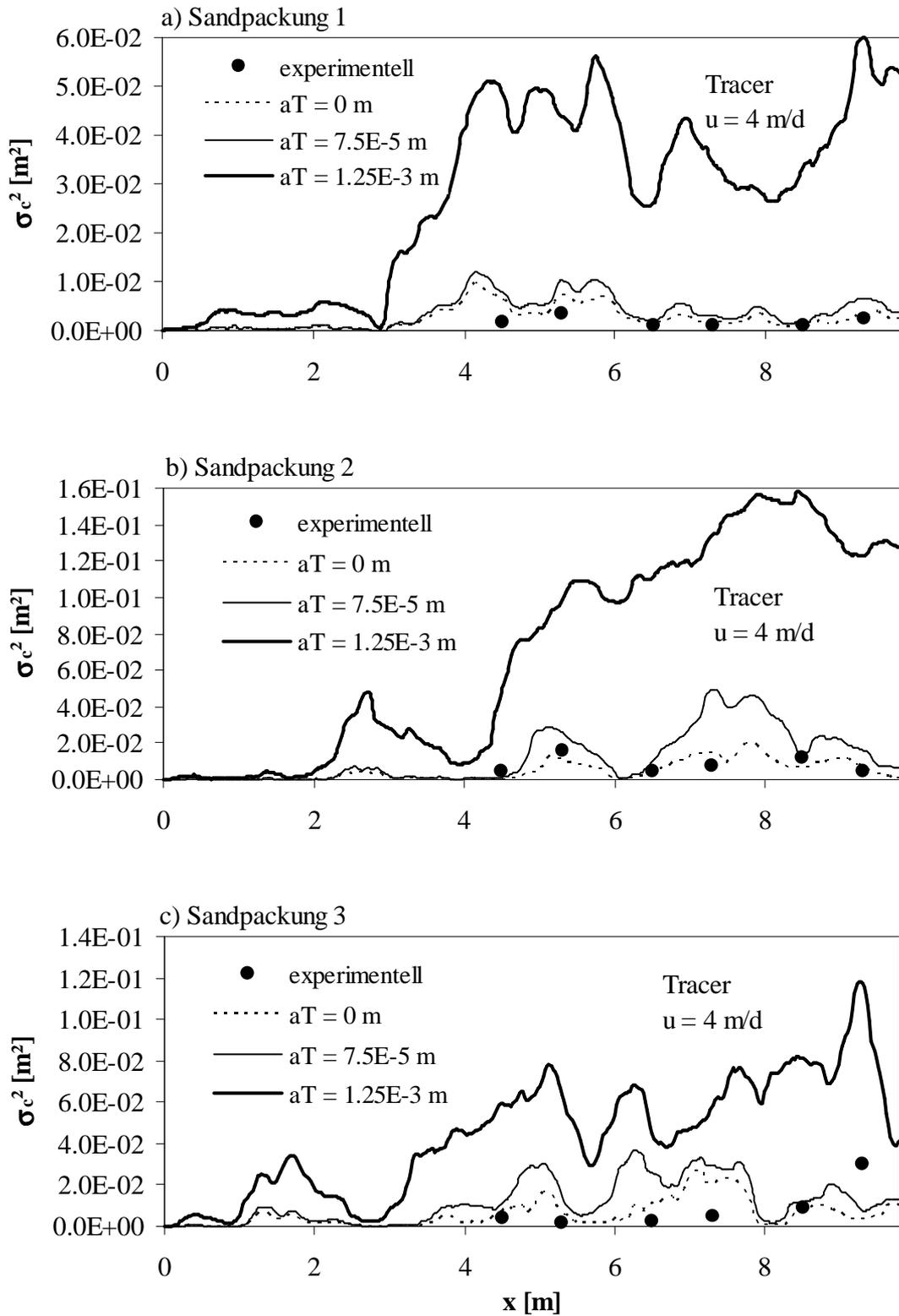
## 8.3 Kalibrierung

### 8.3.1 Anpassung des numerischen Modells an das Experiment

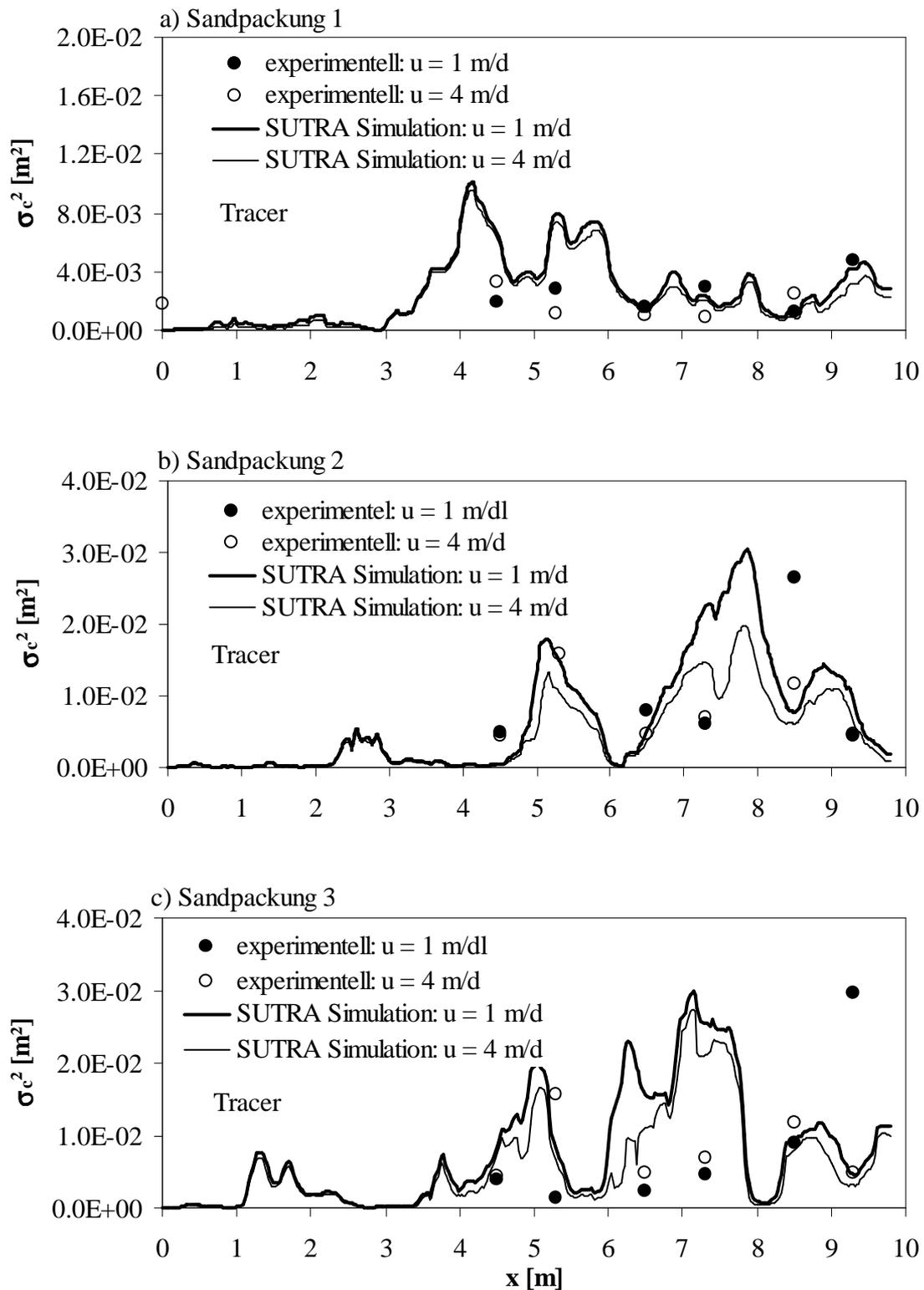
Nachdem die Stabilität und Konvergenz des Modells mit der gewählten räumlichen und zeitlichen Diskretisierung getestet wurde, konnte es kalibriert werden. Dies geschah über eine Anpassung der simulierten an die gemessenen stationären Piezometerhöhen und Durchflussraten an den beiden Modellrändern (Ein- und Auslauf). Auf dieser Grundlage wurde das geeichte Strömungsmodell anschließend hinsichtlich der Transportprozesse an das experimentelle Modell angepasst werden. Dazu wurden mittels „try and error“-Methode die Eingabeparameter für die Transportparameter (korngerüstbedingten Dispersionen  $a_L$ ,  $a_T$ , Diffusion) und numerische Parameter (Abbruchkriterien für die Iterationen, Zeitschrittlänge) so lange variiert, bis die Unterschiede zwischen simulierten und gemessenen Dispersivitäten minimal waren.

### 8.3.2 Dichteunabhängige Experimente

Die Eichung des Transportmodells gestaltete sich als äußerst komplex. Simulationen mit konstanter Dichte ergaben nur eine über die Tanklänge  $x$  angenäherte Übereinstimmung. Bild 8.5 zeigt die räumlichen Varianzen mit verschiedenen Eingabewerten für die korngerüstbedingte Dispersivität  $a_T$ . Es ist sichtbar, dass bei sehr geringen  $a_T$  eine gute Übereinstimmung gibt. Bild 8.6 zeigt die optimale Anpassung der simulierten transversale Makrodispersivitäten  $A_T$  an die experimentellen für einen Tracertransport mit  $u = 1$  m/d und  $u = 4$  m/d für die Sandpackungen 1 bis 3. Es ist zu erkennen, dass in einigen Teilbereichen die simulierten transversalen Makrodispersivitäten  $A_T$  deutlich größer als die gemessenen sind. Ursache dafür sind vermutlich systematische Fehler, die durch eine unterschiedliche Verdichtung der Sandblöcke entstehen, durch die wiederum Änderungen in der Durchlässigkeitsverteilung und Strömungsrichtung bewirkt werden. Andererseits kann es durch nicht exakt eingehaltene Piezometerhöhen zu unterschiedlichen Geschwindigkeiten in den beiden Tankbereichen führen und damit zu einem verändertem Absink- und Ausbreitungsverhalten. Die durch unterschiedliche Geschwindigkeiten bedingten Unterschiede in den Varianzen sind für dichteunabhängige Berechnungen sehr gering. Für kleinere Strömungsgeschwindigkeit  $u = 1$  m/d sind die Varianzen stets größer oder gleich gegenüber denen bei  $u = 4$  m/d (Bild 8.6). Für alle Versuche (Bild 8.6) zeigten die numerischen Ergebnisse gegenüber den experimentellen stets stärkere Amplituden der örtlichen Varianzfluktuationen. Die durch die Heterogenität des Mediums verursachten örtlichen Variationen der Konzentrationsausbreitung, die auch in den experimentellen Resultaten zu beobachten sind, werden durch numerische Fehler offenbar noch verstärkt, obwohl die für die Stabilität relevanten Peclet- und Courantkriterien eingehalten wurden.



**Bild 8.5:** Numerisch berechnete transversale Varianzen  $\sigma^2$  im Vergleich mit den experimentellen für verschiedene Eingabewerte für  $a_T$  für a) die Sandpackung 1, b) die Sandpackung 2 und c) Sandpackung 3 im Tracerfall und  $u = 4 \text{ m/d}$ .



**Bild 8.6:** Numerisch berechnete Varianzen der normierten Konzentrationsausbreitung im Vergleich mit den experimentellen Werten für  $u = 1$  m/d und  $u = 4$  m/d für a) die Sandpackung 1, b) die Sandpackung 2 und c) die Sandpackung 3 im Tracerfall.

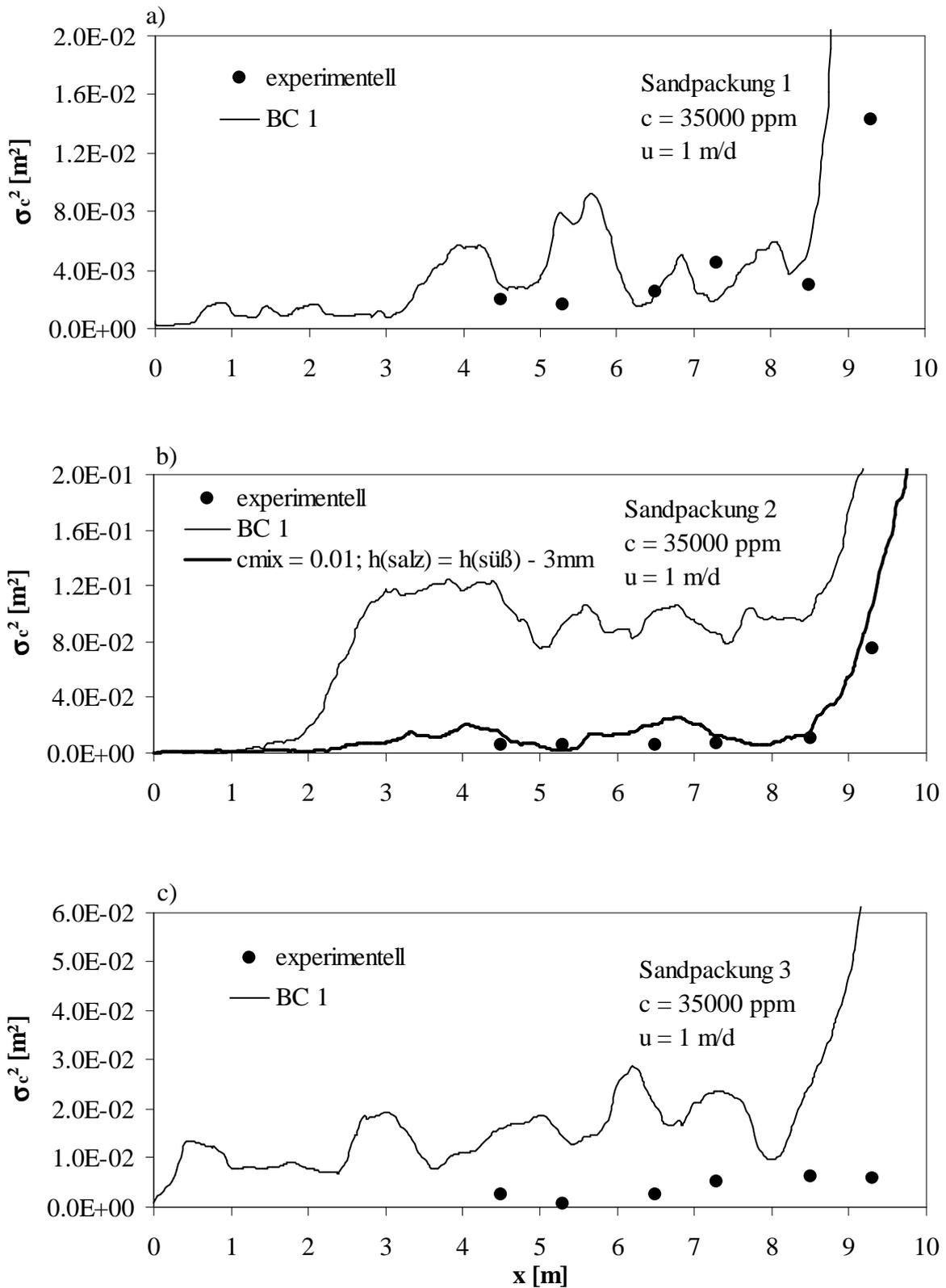
### 8.3.3 Dichteabhängige Experimente

Noch deutlicher wird die Schwierigkeit der Transporteichung, wenn bei höherer Konzentration Strömungs- und Transportgleichung gekoppelt sind. Bild 8.7 zeigt die optimale Anpassung der simulierten an die experimentellen räumlichen Varianzen der Konzentrationsausbreitung für einen Tracertransport eines Inhaltsstoffes mit einer Konzentration  $c = 35000$  ppm für die Sandpackungen 1 bis 3. und  $u = 1$  m/d, Bild 8.8 für  $u = 4$  m/d.

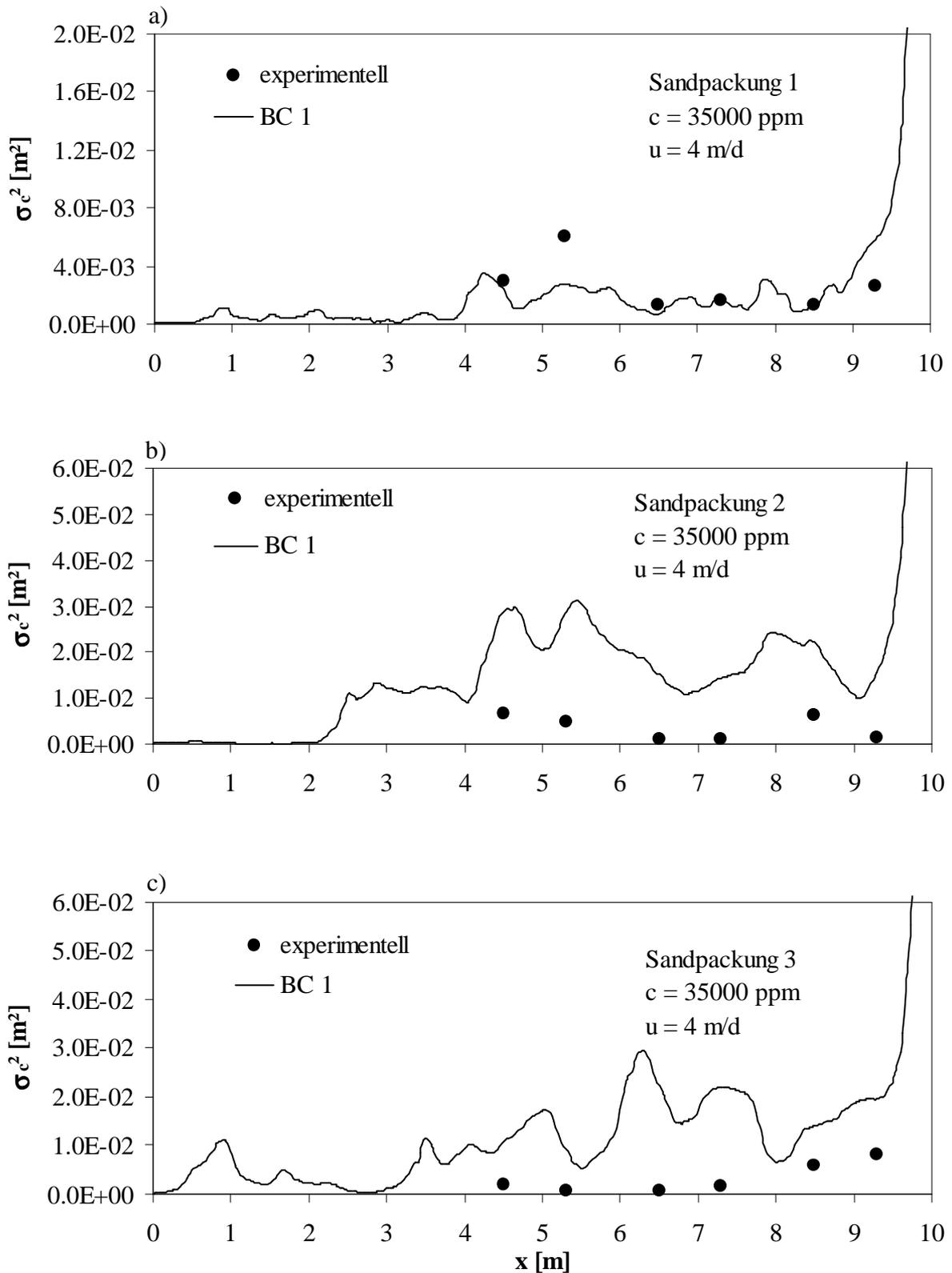
Während für die 1. Sandpackung auch hier eine gute Übereinstimmung sichtbar wird, sowohl für  $u = 1$  m/d als auch für  $u = 4$  m/d, sind für die Sandpackungen 2 und 3 stets höhere simulierte transversale Makrodispersivitäten sichtbar. So führte für die 2. Sandpackung mit  $c = 35000$  ppm und  $u = 1$  m/d eine schon geringfügige Piezometerverringering im unteren Tankbereich von nur 3 mm (entspricht ca. 10 % der SOLL-Piezometerhöhe) zu einer starken Verringerung der Varianz der normierten Konzentrationsausbreitung um ca. 90 % (Bild 8.7b).

Dies kann folgendermaßen erklärt werden: Ist die tatsächliche Piezometerhöhe im Salzeinlaufbehälter geringer als theoretisch vorgesehen, wird die Strömungsgeschwindigkeit - mit der die Salzfahne transportiert wird - geringer. Die Stofffahne sinkt ab und erreicht damit im Auslaufbehälter nicht mehr - wie vorgesehen - die Hälfte des gesamten Fluidvolumens. Dadurch sinken die Konzentration und proportional dazu der Druck im Auslaufbehälter und damit letztendlich die Strömungsgeschwindigkeit des Versuches. Ist die Strömungsgeschwindigkeit gering - wie bei den in dieser Arbeit durchgeführten Versuchen mit  $u = 1$  m/d - kommt es deshalb zu einem extremen Absinken der Salzwasserfahne und schließlich damit auch der Dispersivität.

Die numerischen Untersuchungen zeigten, dass die Modellunsicherheit im *dichteabhängigen* Modell damit primär an der Unsicherheit in den Randbedingungen lag. Praktisch war es jedoch nicht möglich, die vorgegebenen Piezometerhöhen über den gesamten Zeitraum eines Versuches von bis zu 3 Wochen ununterbrochen millimetergenau aufrechtzuerhalten. Andererseits ist nicht bekannt, wie sehr sich bereits geringfügige zeitliche Fluktuationen der Strömungsgeschwindigkeit auf das gesamte Transportgeschehen auswirken.



**Bild 8.7:** Numerisch berechnete Varianzen der normierten Konzentrationsausbreitung im Vergleich mit den experimentellen Werten für  $c = 35000 \text{ ppm}$  und  $u = 1 \text{ m/d}$  für a) die Sandpackung 1 und b) die Sandpackung 2.



**Bild 8.8:** Numerisch berechnete Varianzen der normierten Konzentrationsausbreitung im Vergleich mit den experimentellen Werten für  $c = 35000$  ppm und  $u = 8$  m/d für die Sandpackung 3.

## 8.4 Sensitivitätsanalysen

Im folgenden Abschnitt wird die Sensitivität der relevanten Parameter untersucht, die die stationäre räumliche Konzentrationsverteilung beeinflussen. Ausgangspunkt ist dabei eine Konzentrationsverteilung mit festgelegten Parametern, der Zustand  $Z_0$  mit den zugehörigen Parameterwerten  $P_i\{Z_0\}$  (Tabelle 8.1).

Parameter $P_i$	$u$ [m/d]	$n_e$	$a_L$ [m]	$a_T$ [m]	$K$ [m <sup>2</sup> ]	$c$ [ppm]	$F$
$P_i\{Z_0\}$	1	0.38	2.00E-02	1.00E-04	1.55E-10	0	700

**Tabelle 8.1:** Parameter  $P_i$  im Zustand  $Z_0$

Der Parameter  $F$  ist dabei der Dichtefaktor, der im Programm SUTRA den linearen Anstieg der Dichte mit der Konzentration beschreibt. Es wird jeweils ein Parameter um einen Betrag  $dP_i$  gestört und die Differenz der sich daraus ergebenden transversalen Makrodispersivität gegenüber dem Ausgangszustand  $Z_0$  berechnet [Johannsen *et al.*, 2004]:

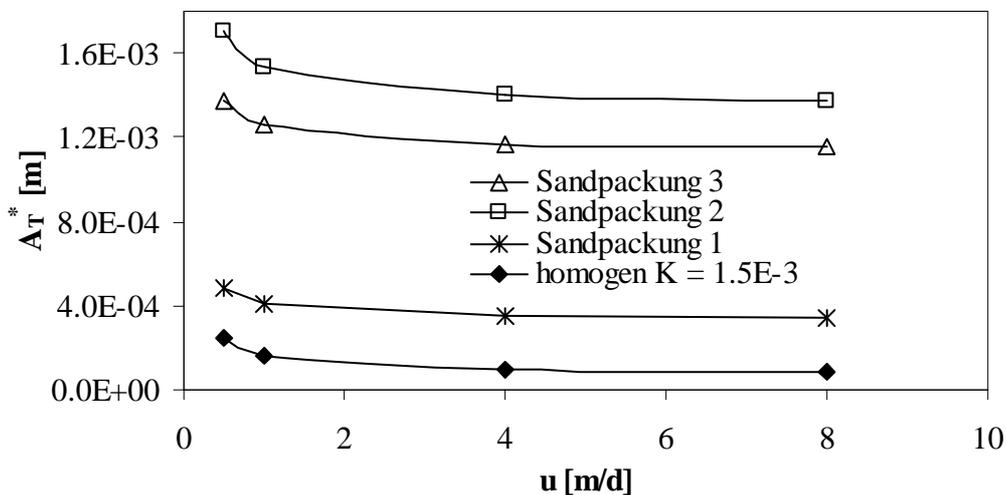
$$S_i = \frac{\partial A_T}{\partial P_i} = \frac{P_i}{A_T(P_i)} \frac{A_T(P_i + dP_i) - A_T(P_i)}{dP_i} \quad (8.15)$$

wobei  $P_i \in \{u, n_e, K, p_{BC}, c, \rho_{1/2}, \mu_{1/2}, F, d_m, a_T, a_L, D_0, \lambda_x, \lambda_y, \sigma^2\}$ . Zur besseren Anschaulichkeit wird der Differenzenquotient (8.15) normiert. Dimensionsanalysen (Abschnitt 3.4.1) haben jedoch bereits gezeigt, dass es zwischen einigen Parametern physikalische Zusammenhänge gibt. So sind beispielsweise die Porosität  $n_e$  über das Darcy-Gesetz direkt mit der Strömungsgeschwindigkeit  $u$  verbunden und umgekehrt proportional zu letzterer, Zustandsgrößen (Dichte, Dichtefaktor, Viskosität) können äquivalent über die Konzentration beschrieben werden und zwischen Permeabilität und mittlerem Korndurchmesser eines porösen Mediums besteht ein funktionaler Zusammenhang. Wie später noch beschrieben, ist die homogene Veränderung des Druckes im gesamten Modell über das Darcy-Gesetz proportional zur Geschwindigkeit und muss demzufolge nicht separat analysiert werden. Relevant ist jedoch die Sensitivitätsanalyse hinsichtlich örtlicher Druckvariationen. Somit kann die Anzahl der zu untersuchenden Parameter auf folgende reduziert werden:  $P_i \{u, p_{BC}, c, \mu, a_T, a_L, \lambda_x, \lambda_y, \sigma_{lnk}^2\}$ .

### 8.4.1 Variation der Strömungsgeschwindigkeit

Für den Fall einer dichteunabhängigen Modellierung hat in einem reinen Dispersionsmodell nach der Definition für den Dispersionskoeffizienten  $D_T = D_0 + a_T \cdot u$  die Strömungsgeschwindigkeit  $u$  keinen Einfluss auf die stationäre Konzentrationsverteilung, sie staucht oder streckt sie lediglich auf der Zeitskala [Thiele, 1985]. Dichteunabhängige Untersuchungen des Autors haben dies bestätigt. Eine Verringerung der Strömungsgeschwindigkeit bewirkt zwar eine dazu umgekehrt proportionale Gesamtdispersivität im stationären Gleichgewichtszustand, diese hat jedoch ihre Ursache allein in den unterschiedlichen Diffusionsanteilen an der hydrodynamischen Dispersivität (Bild 8.9). Bei kleiner molekular Pecletzahl  $Pe$  bzw. kleiner Strömungsgeschwindigkeit  $u$  steigt die Diffusion gegenüber der mechanischen Dispersion und führt damit zu einer größeren Aufweitung der Salzwasserfahne gegenüber einem Transport mit geringerer Strömungsgeschwindigkeit. Somit ist es möglich, die molekulare Diffusion  $D_0$  unmittelbar aus den Differenzen der dichteunabhängigen stationären räumlichen Konzentrationsausbreitungen – über die Gesamtdispersivitäten  $A_{T,i}^*$  mit  $A_{T,i}^* = D_0/u_i + a_T$  und konstantem  $a_T$  - bei unterschiedlichen Strömungsgeschwindigkeiten  $u_1$  und  $u_2$  zu berechnen:

$$D_0 = \frac{(A_{T,2}^* - A_{T,1}^*)u_1u_2}{u_1 - u_2} \quad (8.16)$$



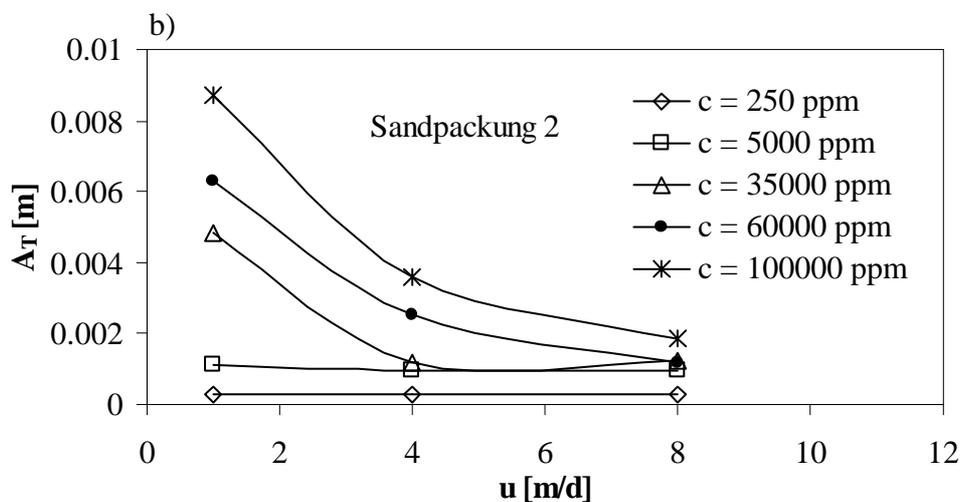
**Bild 8.9:** Numerisch berechnete transversale Dispersivität  $A_T^*$  in Abhängigkeit von der Abstandsgeschwindigkeit  $u$  Zeitschrittgröße für eine dichteunabhängige Simulation mit in einem homogenen Medium ( $K_G = 1.5 \text{ m}^2/\text{s}$ ) und die Sandpackungen 1 bis 3.

*Dichteabhängige* Modellierungen ergaben ebenfalls eine sinkende Gesamtdispersivität  $A_{T,i}^*$  proportional zur Strömungsgeschwindigkeit  $u$  (Bild 8.10). Hier kann jedoch die molekulare

Diffusion nicht wie für den dichteunabhängigen Fall unmittelbar aus den Konzentrationsverteilungen bei unterschiedlichen Geschwindigkeiten berechnet werden, denn mit sinkender Strömungsgeschwindigkeit wird der Einfluss der Druckrandbedingungen stärker. Bei einer Randbedingung BC 1 – wie in diesem Fall verwendet – steigt die Gesamtdispersivität  $A_{T,i}^*$  mit sinkender Strömungsgeschwindigkeit und steigender Konzentration.

Die Sensitivität der transversalen Makrodispersivität  $A_T$  hinsichtlich der Strömungsgeschwindigkeit  $u$  steigt mit:

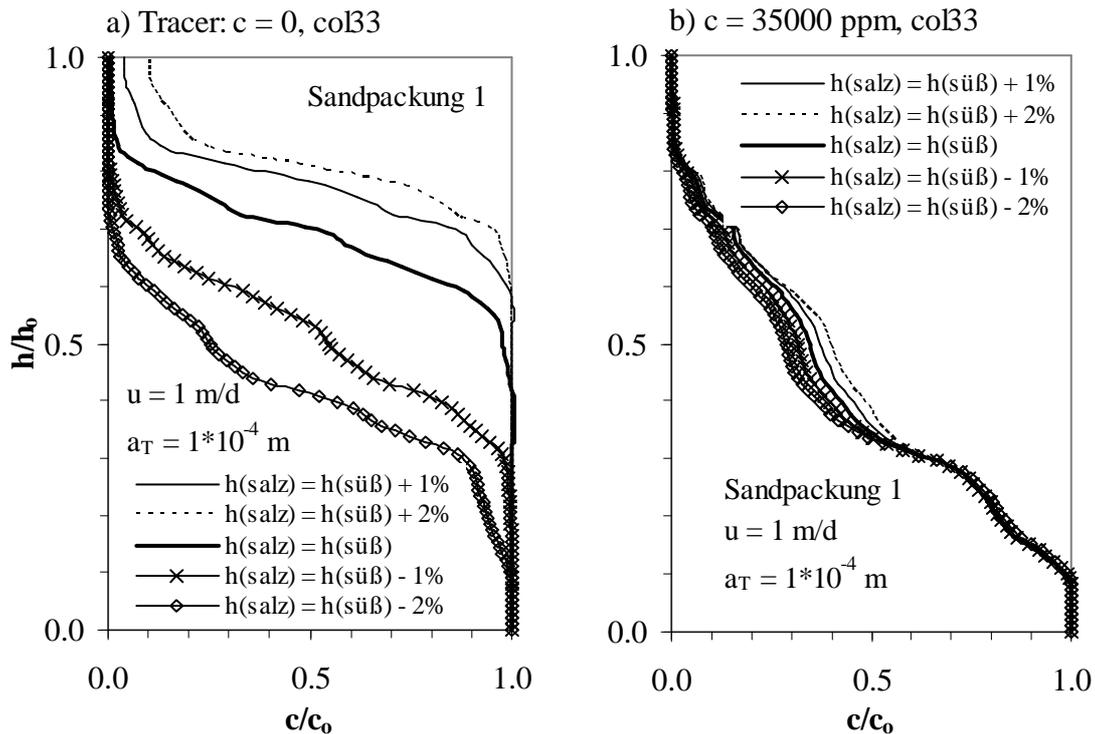
- sinkender Strömungsgeschwindigkeit  $u$ .



**Bild 8.10:** Numerisch berechnete transversale Dispersivität  $A_T^*$  in Abhängigkeit von der Abstandsgeschwindigkeit  $u$  Zeitschrittgröße für dichteabhängige Simulationen von  $c = 250$  ppm bis  $c = 100000$  ppm für die Sandpackung 2.

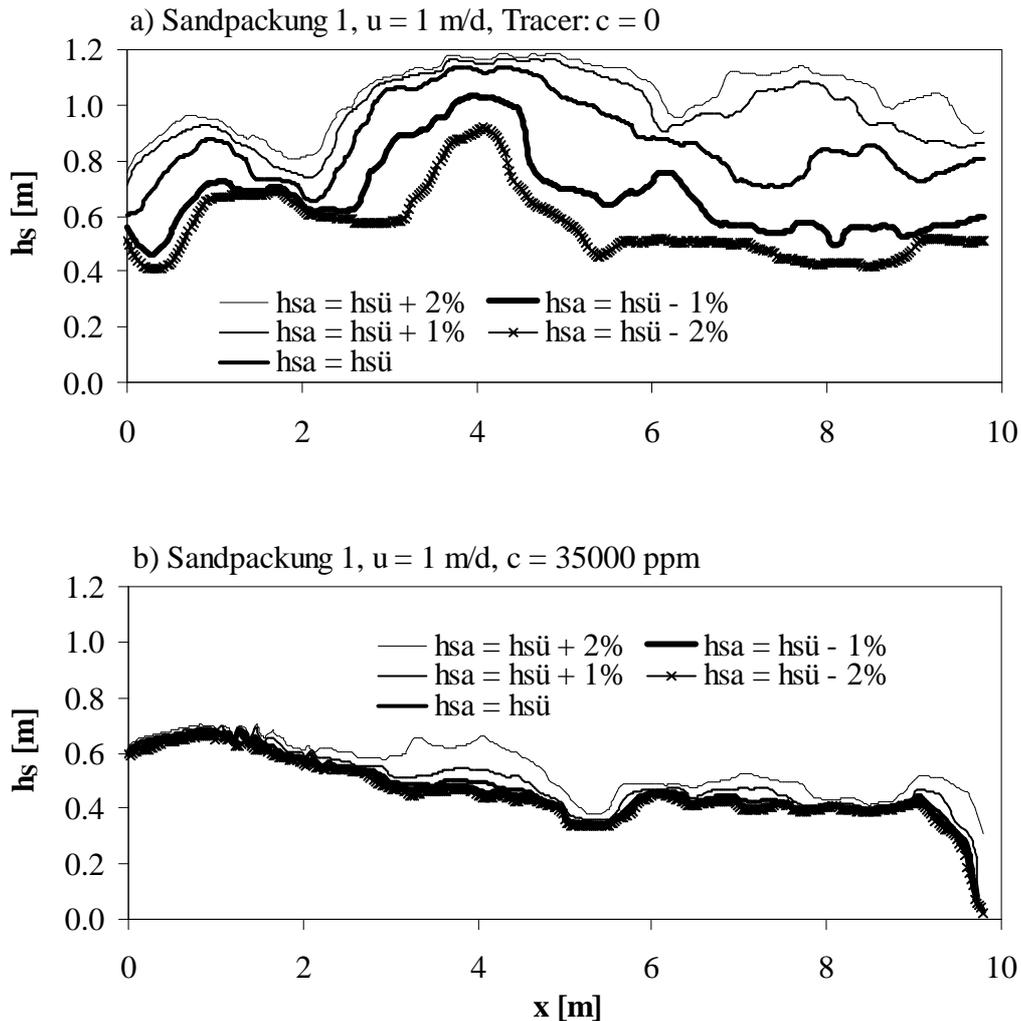
## 8.4.2 Lokale Druckvariationen

Der Druckgradient ist ein maßgebender Faktor im Strömungsprozess, und wie vom Autor festgestellt wurde, auch eine sehr sensitive Größe im Stofftransportverhalten. Eine Veränderung des Druckgradienten über den gesamten Strömungsbereich entspricht einer Änderung der Strömungsgeschwindigkeit und im Falle einer dichteunabhängigen Strömung damit keiner Veränderung der transversalen Makrodispersion im stationären Gleichgewichtszustand. Wird jedoch der Druck nur örtlich verändert, beispielsweise durch unterschiedliche Piezometerhöhen in den Einströmbereichen, so kann dies zu unterschiedlichen Strömungsgeschwindigkeiten und -richtungen und zu einem Aufsteigen oder Absinken der Salzwasserfahne gegenüber einem entsprechenden Vergleichszustand führen [Koch and Starke, 2003].



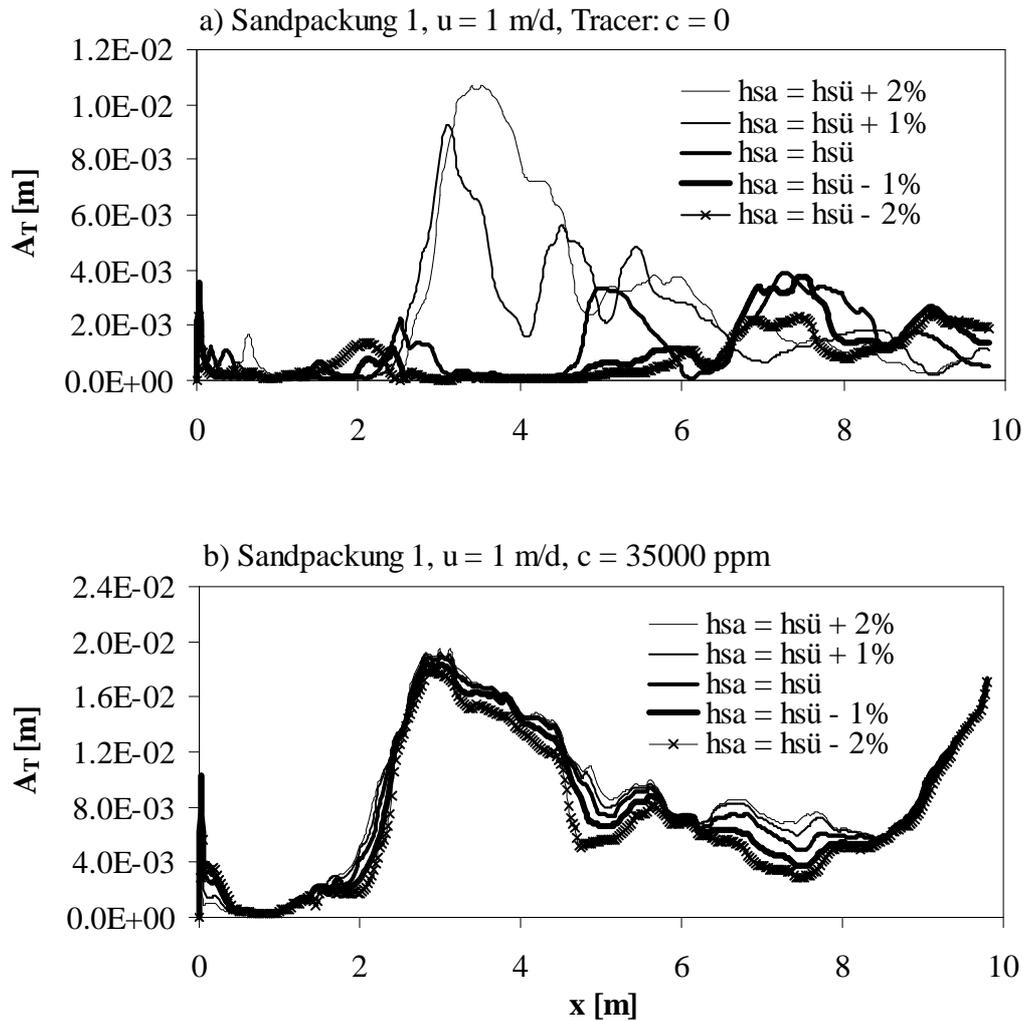
**Bild 8.11:** SUTRA- modellierter Einfluss minimalen Variierens der Piezometerhöhen  $h$  in den Einlaufbehältern des Salz-  $h(\text{süß})$  und Süßwassers  $h(\text{salz})$  auf die normierten Konzentrationsverteilung im stationären Endzustand der Sandpackung 1 für  $u = 1 \text{ m/d}$  an der Messebene col33 mit BC 1 und a)  $c = 0$  sowie b)  $c = 35\,000 \text{ ppm}$ .

In Bild 8.11 ist der Einfluss von minimalen Veränderungen der Piezometerhöhen im Einlaufbehälter des Salzwassers auf die Lage der normierten Konzentrationsverteilungen für ein Experiment a) mit Tracerkonzentration und b) mit einer Konzentration von  $c = 35\,000 \text{ ppm}$  an einer ausgewählten Messebene col33 ( $x = 6.5 \text{ m}$ ) dargestellt. Wir erkennen eine starke Sensitivität hinsichtlich der Lage der Konzentrationskurve bei schon geringfügiger Druckveränderung im Einlaufbehälter für Versuche ohne Berücksichtigung der Konzentration. Demgegenüber verändert sich die Konzentrationsausbreitung (Höhe des Fahnenschwerpunktes und Dispersivität) bei einer Salzwasserkonzentration von  $c = 35\,000 \text{ ppm}$ , die der Meereswasserkonzentration entspricht, weniger. In einer vergleichbaren Ausgangssituation sind die Piezometerhöhen im Süß- und Salzwasser-Behälter gleich:  $h_{\text{salz}} = h_{\text{süß}}$ . So führt eine Erhöhung der Piezometerhöhe im Salzwasser-Einlaufbehälter um 1 % gegenüber der Ausgangssituation zu einem Aufsteigen der Höhe des Fahnenschwerpunktes  $h_S$  um 11,9 %, die transversale Dispersivität verringert sich dabei um 50,5 %, wenn die Konzentration einer Tracerlösung entspricht ( $c = 0$ ). Bei einer Salzwasserkonzentration von  $c = 35\,000 \text{ ppm}$  führt oben genannte 1%ige Vergrößerung der Piezometerhöhen nur zu 3,7%igem Aufsteigen von  $h_S$  und  $A_T$  vergrößert sich um 11,7 %.



**Bild 8.12:** SUTRA- modellierter Einfluss minimalen Variierens der Piezometerhöhen in den Einlaufbehältern des Salz- und Süßwassers auf die Höhe des Fahnenschwerpunktes  $h_s$  im stationären Endzustand der Sandpackung 1 für  $u = 1$  m/d und a)  $c = 0$  und b)  $c = 35\ 000$  ppm.

In Bild 8.12 ist die Höhe des Fahnenschwerpunktes  $h_s$ , in Bild 8.13 die Dispersivitäten der oben genannten Versuche über die gesamte Tanklänge  $x$  dargestellt. Es zeigt sich auch hier ein stärkeres Aufsteigen sowie größere Dispersivitäten mit steigendem Druck im Salz-Einlaufbehälter, wobei dieser Effekt bei größerer Konzentration geringer wird. Die Drucksensitivität sinkt demnach mit steigender Konzentration. Dies scheint im Widerspruch mit den zuvor beschriebenen Kalibration des *dichteabhängigen* Transportes zu sein, bei dem eine hohe Sensibilität hinsichtlich der Druckunsicherheit an den Randbedingungen festgestellt wurde. Zu beachten ist jedoch, dass hier nur die Piezometerhöhen im Einlaufbehälter variiert wurden, wohingegen sich bei der Kalibration auch die Randbedingung im Auslauf änderte.



**Bild 8.13:** SUTRA-modellierter Einfluss minimalen Variierens der Piezometerhöhen in den Einlaufbehältern des Salz- und Süßwassers auf die Konzentrationsverläufe im stationären Endzustand der Sandpackung 1 für  $u = 1$  m/d und a)  $c = 0$  und b)  $c = 35\,000$  ppm.

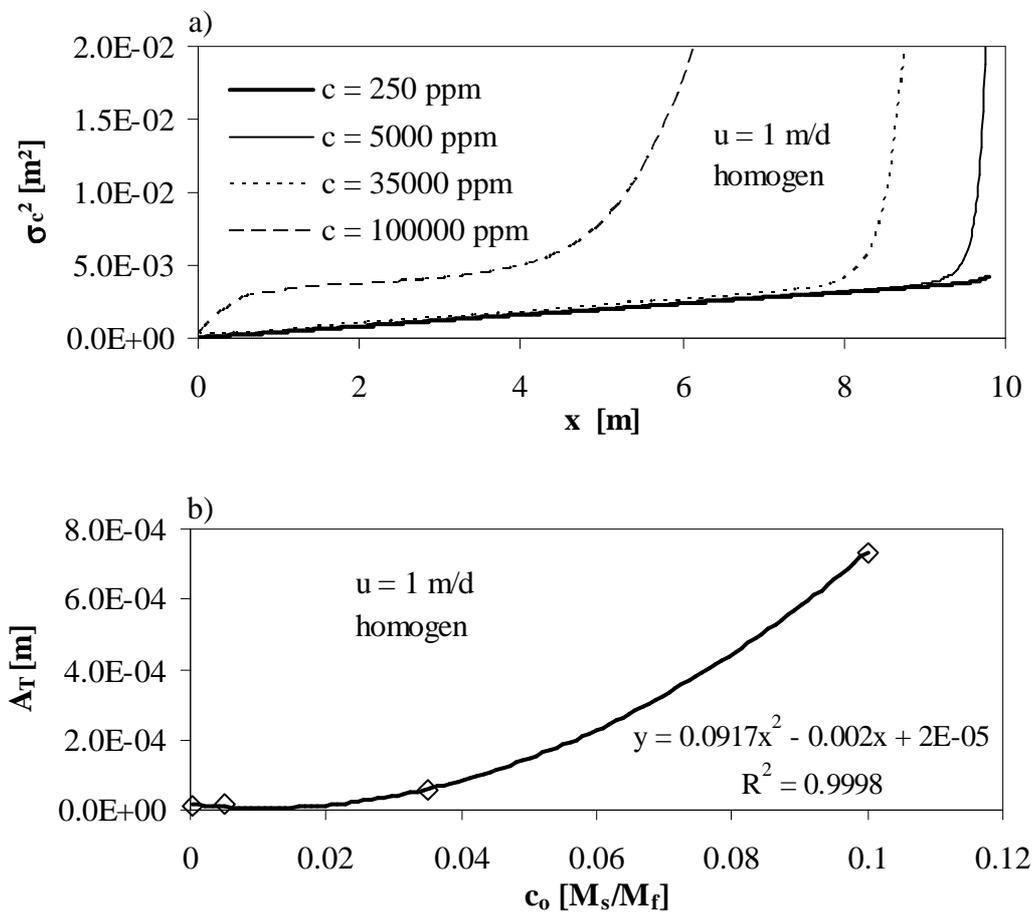
Die Sensitivität der transversalen Makrodispersivität  $A_T$  hinsichtlich lokaler Druckvariationen am Druckrand des Einlaufbehälters steigt mit:

- sinkender Konzentration  $c_o$  im Salz-Einlaufbehälter aber
- steigender Konzentration  $c$  im Auslaufbehälter sowie
- sinkender Strömungsgeschwindigkeit  $u$ .

### 8.4.3 Variabilität der Konzentration

#### Homogenes Medium

Numerische Untersuchungen mit höherer Fluidkonzentration führte in einem homogenen Medium zu einer vergrößerten Dispersion gegenüber der dichteunabhängigen (Bild 8.14a). Die transversale Makrodispersion  $A_T$  wächst dabei nichtlinear mit steigender Konzentration  $c$  (Bild 8.14b), die Sensitivität der Konzentration erreicht Werte bis zu 0.155 bei einer Konzentration von 100000 ppm gegenüber einem Tracer mit  $c = 0$  ppm. Dies widerspricht den derzeitigen wissenschaftlichen Erkenntnissen, die für eine stabile Strömung ein Absinken der Dispersivität mit steigender Dichtedifferenz zeigen [u.a. *Spitz*, 1985, *Thiele*, 1997].



**Bild 8.14:** a) Varianz der normierten Konzentrationsverteilung  $\sigma^2$  und b) transversale Makrodispersionslänge  $A_T$  in Abhängigkeit von der Konzentration  $c$  mit  $u = 1$  m/d in einem homogenen Medium mit einer Randbedingung BC 1.

## Heterogenes Medium

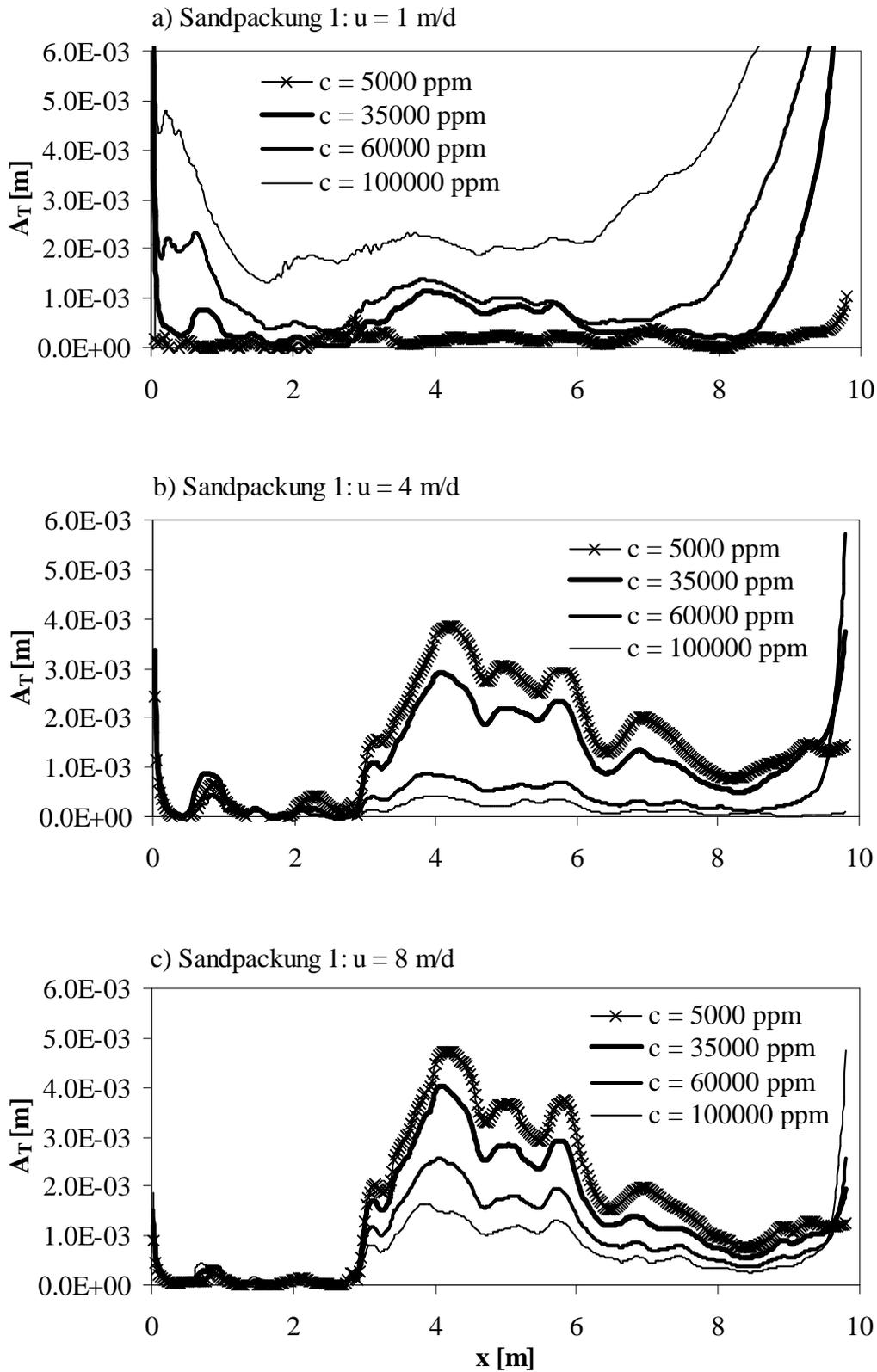
Die Sensitivität der Makrodispersion hinsichtlich der Fluidkonzentration im heterogenen Medium wird anhand der numerischen Ergebnisse an den Sandpackungen untersucht. Bild 8.15 zeigt die transversalen Makrodispersitäten  $A_T$  unterschiedlicher Konzentrationen und Geschwindigkeiten über die Tanklänge  $x$  mit  $A_T(x) = 0.5 \cdot \sigma^2/x$  für die Sandpackung 1, Bild 8.15 für die 2., Anlage 12 für die 3. Sandpackung. Sichtbar ist ein Absinken der Salzfahne sowie eine Vergrößerung der Dispersivität mit höherer Fluidkonzentration.

Nach anfänglich geringer Vermischung, kommt es ab ca. 3 m für die 1. und nach ca. 2 m für die 2. Sandpackung zu einer starken Vergrößerung von  $A_T$  (Bild 8.15 und 8.16). Diese Zunahme von  $A_T$  sinkt für die 1. Sandpackung mit zunehmendem  $c$ , für die 2. Sandpackung mit abnehmendem  $c$ . Bei beiden Sandpackungen führt eine geringe Strömungsgeschwindigkeit  $u$ , bedingt durch den dominierenden Einfluss der Randbedingungen zu einem verstärkten Ansteigen der Dispersivität mit steigender Konzentration, insbesondere in den Randbereichen. Nach einem Maximum sinkt  $A_T$  in beiden Sandpackungen wieder ab. Dies korreliert mit den Erkenntnissen von *Neuman and Zhang* [1990], dass die transversale Dispersivität für  $\sigma^2 \ll 1$  im präasymptotischen Bereich bis zu einem Maximalwert ansteigt, um danach bis zu  $A_T = 0$  im Fick'schen Bereich abzusinken. Erkennbar ist jedoch kein eindeutiges asymptotisches Verhalten. Mit der vorhandenen Tanklänge ist für die gewählten stochastischen Eigenschaften somit noch kein ergodischer Zustand erreicht. In der Sandpackung 3 steigt  $A_T$  bereits unmittelbar nach dem Tankeinlauf und sinkt ebenfalls mit zunehmender Fließlänge ab (Anlage 12).

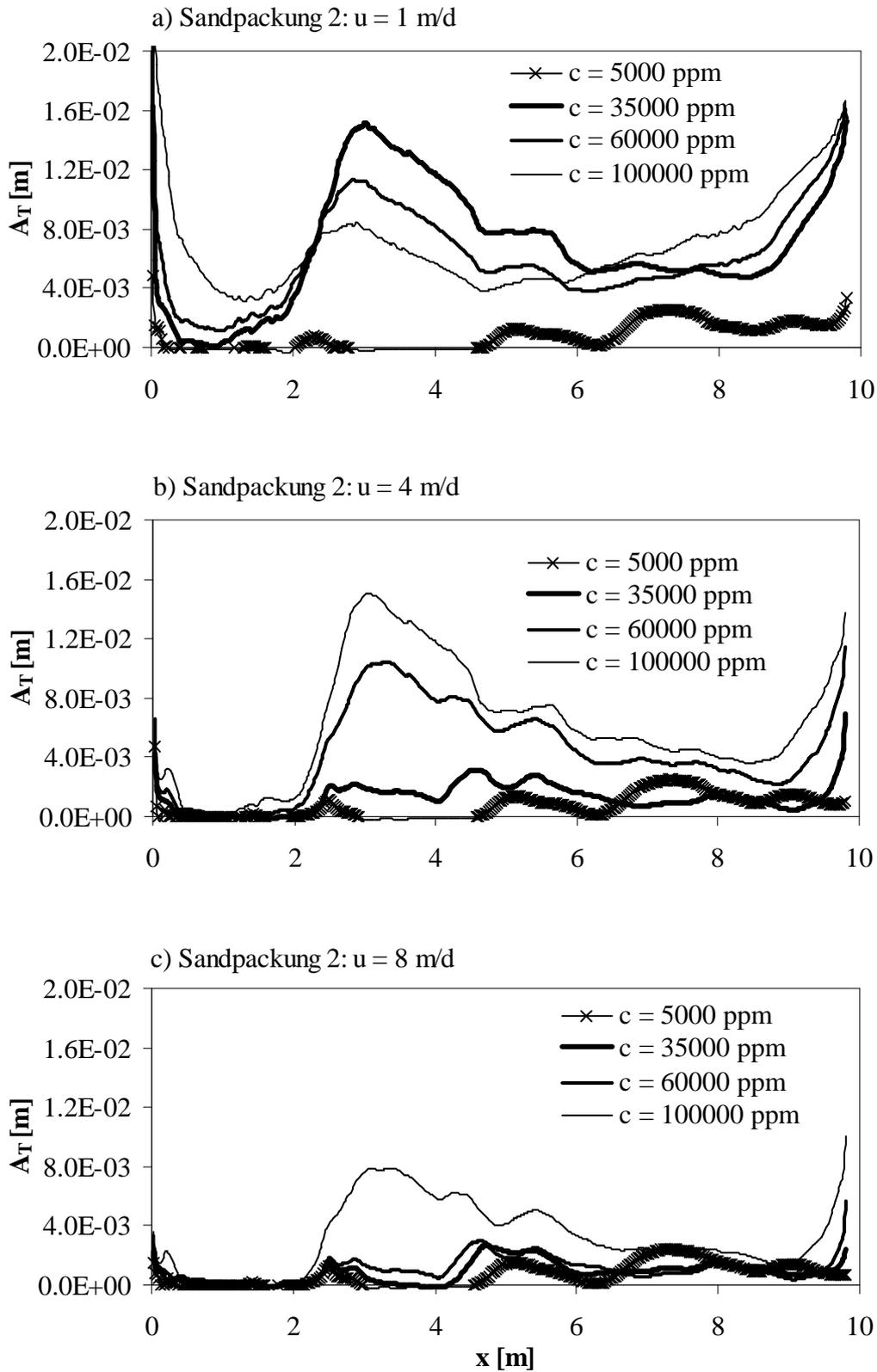
Die Sensitivität von  $A_T$  durch Konzentrationsvariabilität steigt dabei gegenüber einer Tracersituation von  $c = 0$  ppm bis zu einer Konzentration von 5000 ppm stark an (0.56 für Sandpackung 1 bis 0.025 für Sandpackung 3), und sinkt für eine Geschwindigkeit von  $u = 8$  m/d für die Sandpackung 1 danach bis zu einer Konzentration von ca.  $c = 60000$  ppm wieder ab (Bild 8.17). Für die Sandpackungen 2 und 3 und geringere Geschwindigkeiten steigt diese wieder an. Bei geringen Geschwindigkeiten dominiert die Diffusion, mit großen Korrelationslängen - wie im Fall der Sandpackung 2 - vergrößert sich die Fließlänge bis zum Erreichen asymptotischer Verhältnisse.

*Die Sensitivität der transversalen Makrodispersivität  $A_T$  gegenüber der Konzentration steigt mit:*

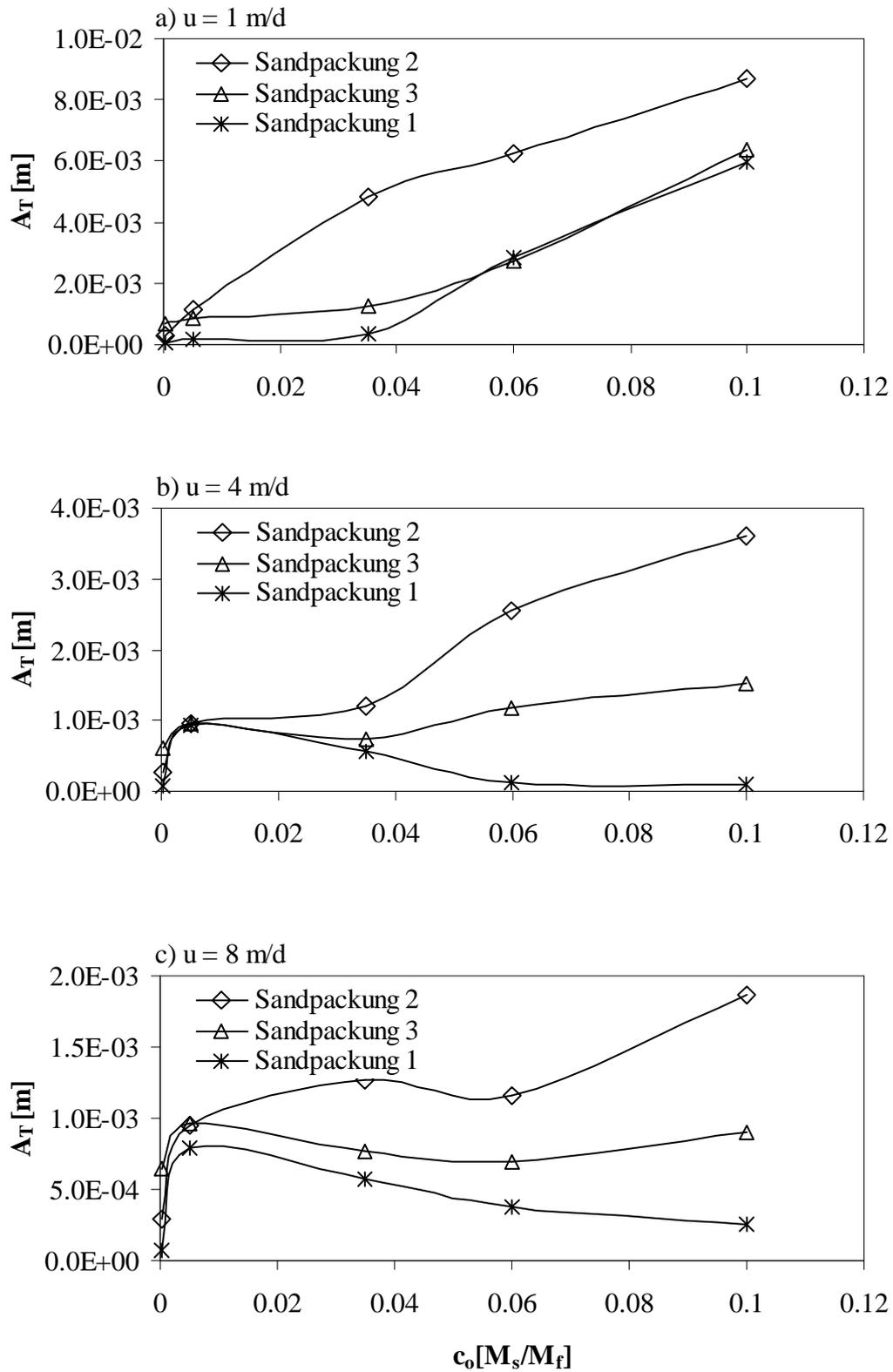
- sinkender Heterogenität (Varianz  $\sigma^2$ , Korrelationslänge  $\lambda$ ) und
- sinkender Strömungsgeschwindigkeit  $u$ .



**Bild 8.15:** SUTRA-simulierte transversale Makrodispersivität in Abhängigkeit von der Fließlänge  $x$  für die Sandpackung 1 und a)  $u = 1$  m/d; b)  $u = 4$  m/d und c)  $u = 8$  m/d.



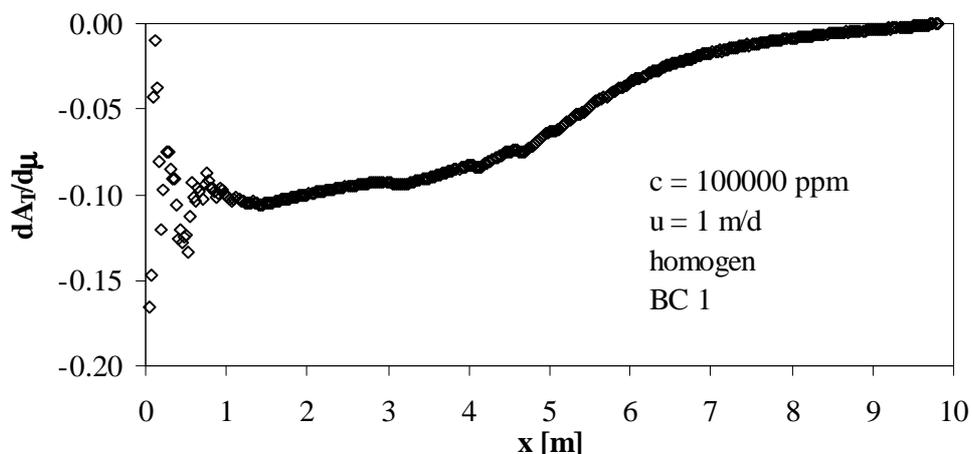
**Bild 8.16:** SUTRA-simulierte transversale Makrodispersivität in Abhängigkeit von der Fließlänge  $x$  für die Sandpackung 2 und a)  $u = 1$  m/d; b)  $u = 4$  m/d und c)  $u = 8$  m/d.



**Bild 8.17:** Transversale Makrodispersivität  $A_T$  in Abhängigkeit von der Fluidkonzentration  $c_0$  für a)  $u = 1$  m/d, b)  $u = 4$  m/d und c)  $u = 8$  m/d für die Sandpackungen 1 bis 3 an der Stelle  $x = 8.5$  m von der Einströmkante.

### 8.4.4 Variabilität der Viskosität

Die Viskosität beschreibt die Zähigkeit von Flüssigkeiten und Schmelzen, aber auch von Suspensionen. Sie ist definiert durch den Reibungswiderstand, den eine Flüssigkeit einer Deformation durch eine Druck- oder Schubspannung entgegensetzt. In den letzten Jahren wurde eine Vielzahl von numerischen Studien zu *dichteabhängigen* Strömungs- und Transportprozessen im Untergrund durchgeführt. Die Mehrzahl der Autoren berücksichtigt mit der Oberbeck-Boussinesq-Approximation zwar eine mit der Konzentration des Fluids steigende Dichte, vernachlässigt jedoch eine entsprechende Viskositätsvariabilität, d.h. die Viskosität bleibt konstant. Nach *Welty and Gelhar* [1991] dominieren bei kleinen Strömungsgeschwindigkeiten Dichteänderungen, bei großen Strömungsgeschwindigkeiten Änderungen in der Viskosität. Untersuchungen von *Ophori* [1997] haben gezeigt, dass dies bei höheren Fluidkonzentrationen zu einer nicht konsistenten Auftriebsphysik führt. Eine Konstanz der Viskosität bewirkt nach dem Darcy-Gesetz (2.8) vergrößerte vertikale und horizontale Strömungsgeschwindigkeiten, d.h. es fließt mehr Wasser in den porösen Körper, im Vergleich dazu, wenn die Viskosität mit der Konzentration steigt. Der Dichteeffekt wird damit überschätzt und es kommt zu einem verstärkten Absinken der Salzwasserfahne. Dieser Effekt ist nach *Ophori* [1997] schon bei einer Meerwasser-Salzkonzentration von  $c = 35000$  ppm vorhanden. Numerische Untersuchungen mit dem Tankmodell ergaben folgendes: die transversale Makrodispersivität war mit der Annahme konstanter Viskosität geringfügig größer ist im Vergleich dazu, wenn die Viskosität sich mit steigender Fluidkonzentration erhöht. Bei einer Salzkonzentration von 100000 ppm kann diese um bis zu -0.2 % erhöhen, wobei die Abweichung mit zunehmendem Abstand vom Einströmrand geringer wird (Bild 8.18). Die zuvor genannte Abweichung ist bei einer dem Meerwasser äquivalenten Salzkonzentration praktisch nicht vorhanden und steigt mit einer Vergrößerung von  $c$ .

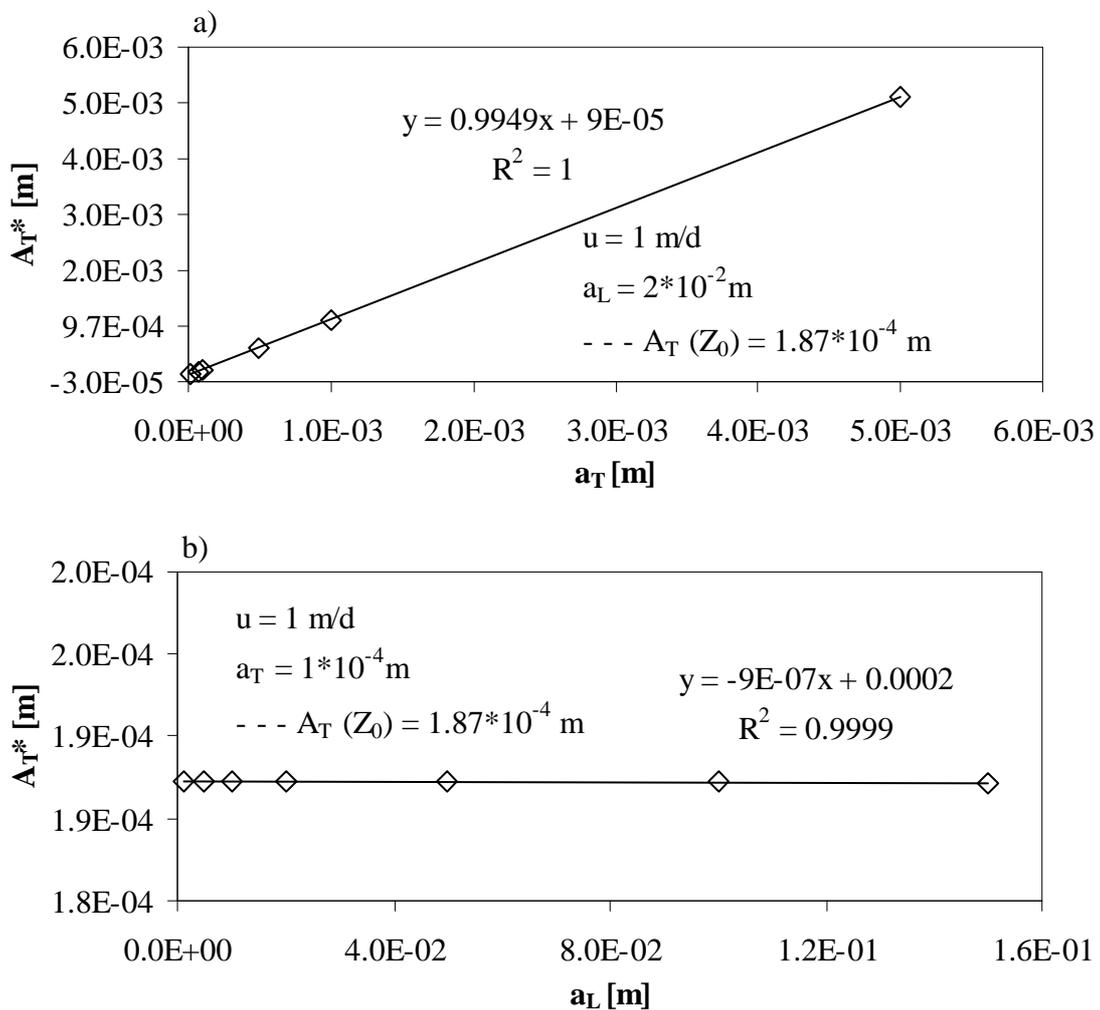


**Bild 8.18:** Einfluss der Variabilität der dynamischen Viskosität auf die transversale Makrodispersivität  $A_T$  gegenüber der numerischen Modellierung mit konstanter Viskosität für  $c = 100000$  ppm  $u = 1$  m/d im homogenen Medium.

### 8.4.5 Variation der korngerüstbedingten Dispersivitäten

#### Homogenes Medium

In einem homogenen kalibrierten numerischen Modell müsste die aus der Konzentrationsverteilung berechnete Dispersivität  $A_T^*$  dem Eingabewert für die korngerüstbedingte Dispersivität entsprechen, die Makrodispersion, die ihre Ursache in der Heterogenität hat, bleibt jedoch Null. Dichteunabhängige numerische Untersuchungen mit variablen Eingabewerten für  $a_L$  und  $a_T$  ergaben eine gute Übereinstimmung, die Fehler sind vernachlässigbar gering (Bild 8.19).

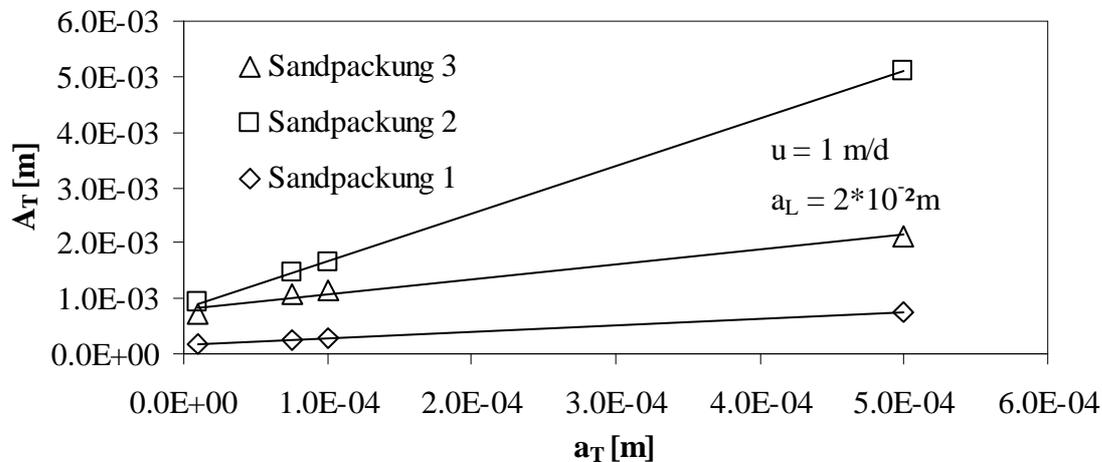


**Bild 8.19:** Dichteunabhängige transversale Makrodispersivität  $A_T^* = D_0/u + \alpha_T + A_T$  in Abhängigkeit von der korngerüstbedingten Dispersionslänge a)  $a_T$  und b)  $a_L$  für  $u = 1 \text{ m/d}$  in einem homogenen Medium mit  $K_G = 1.5 \cdot 10^{-3} \text{ m/s}$ .

## Heterogenes poröses Medium

Sensitivitätsuntersuchungen im heterogenen Medium ergaben folgendes (Bild 8.20 und Bild 8.21): Die transversale Makrodispersion  $A_T$  steigt sowohl mit höherer longitudinaler als auch mit höherer transversaler korngerüstbedingter Dispersionslänge, wobei der Einfluss der transversalen korngerüstbedingten Dispersionslänge  $a_T$  auf das Vermischungsverhalten gegenüber dem der longitudinalen dominiert. Erhöht man in einer Simulationen mit der 1. Sandpackung  $a_L$  um 1 % ergibt sich eine Erhöhung von  $A_T$  um 0.14 %, für  $a_T$  um 0.44 %.

Die Sensitivität der transversalen Makrodispersivität  $A_T$  auf korngerüstbedingten Dispersivitäten  $a_T$  und  $a_L$  im heterogenen Medium sinkt mit steigender Heterogenität, die Konzentrationsausbreitung wird mehr und mehr von der Makrodispersivität bestimmt und die korngerüstbedingten Dispersivitäten können schließlich bei sehr großer Heterogenität vernachlässigt werden. Dies entspricht auch den Erkenntnissen von *Neuman et. al.* [1987]. Nach *Tompson and Gelhar* [1990] sind die korngerüstbedingten Dispersivitäten generell un sensitiv auf die Entwicklung des 2. Momentes (Varianz  $\sigma_c^2$ ). Der Einfluss der Strömungsgeschwindigkeit  $u$  ist wiederum vernachlässigbar (Bild 8.21b).

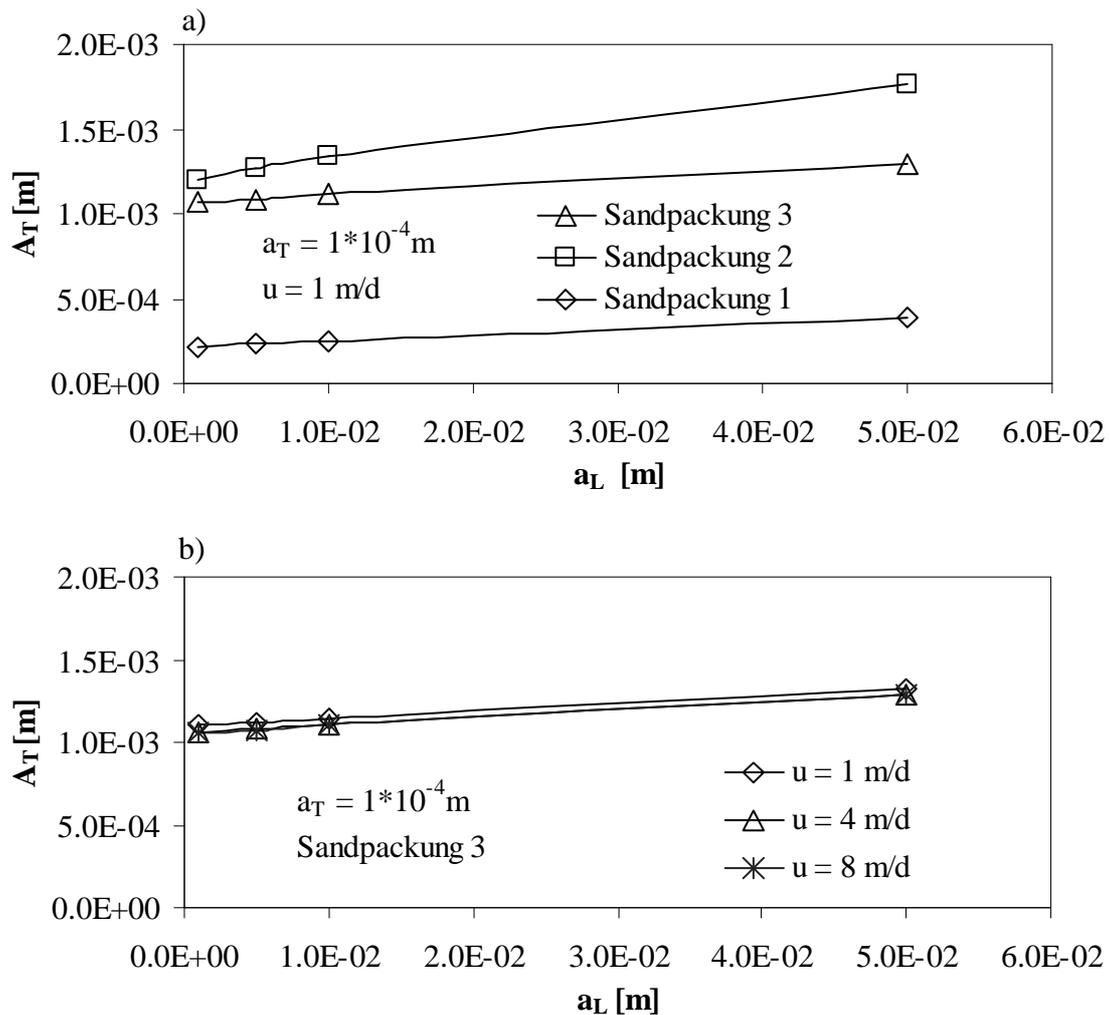


**Bild 8.20:** Dichteunabhängige transversale Makrodispersionslänge  $A_T$  in Abhängigkeit von der korngerüstbedingten Dispersionslänge  $a_T$  für die Sandpackungen 1 bis 3 und  $u = 1$  m/d.

Die Sensitivität der transversalen Makrodispersivität  $A_T$  hinsichtlich der korngerüstbedingten Dispersivitäten  $\alpha_L$  und  $\alpha_T$  steigt mit:

- sinkender Heterogenität des porösen Mediums (Varianz  $\sigma^2$ , Korrelation  $\lambda$ ).

Die transversale korngerüstbedingte Dispersivität  $\alpha_T$  hat dabei einen stärkeren Einfluss auf  $A_T$  als die longitudinale  $\alpha_L$ .



**Bild 8.21:** Dichteunabhängige transversale Makrodispersionslänge  $A_T$  in Abhängigkeit von der korngerüstbedingten Dispersionslänge a)  $a_L$ , b)  $a_T$  für die Sandpackungen 1 bis 3 und  $u = 1$  m/d und c)  $a_L$  für unterschiedliche Strömungsgeschwindigkeiten  $u$  für die 3. Sandpackung.

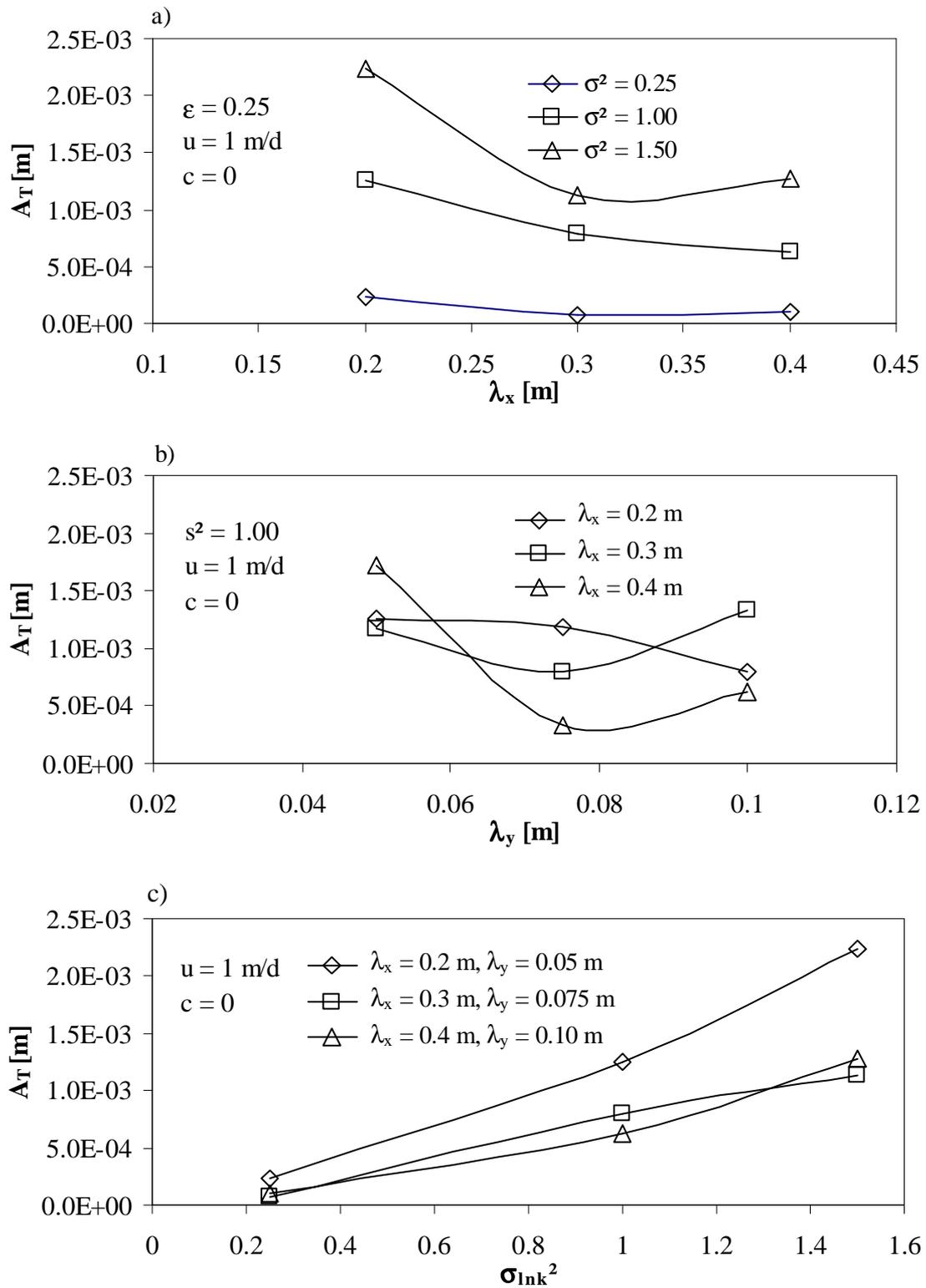
### 8.4.6 Variation der Heterogenität

Um die Sensitivität der Makrodispersion hinsichtlich der Heterogenität eines porösen Mediums zu untersuchen, wurden dichteunabhängige Simulationen mit variierenden Varianzen  $\sigma^2$  und Korrelationslängen  $\lambda_x$  und  $\lambda_y$  durchgeführt. Aus den in Bild 8.22 dargestellten Sensitivitäten ist ersichtlich, dass von den stochastischen Eigenschaften die Varianz am stärksten die Dispersivität beeinflusst. Eine Änderung der Varianz um 1 % bewirkt eine proportionale Veränderung der Makrodispersivität bis zu 3 % (Tabelle 8.2). Demgegenüber bewirkt die Korrelationen  $\lambda_x$  umgekehrt proportionale Veränderungen der Makrodispersivität mit geringerer Sensitivität. Für die Sensitivität der Korrelationslänge  $\lambda_y$  kann keine Aussage gemacht werden, denn es zeigt sich kein eindeutiger Trend. Bild 8.23

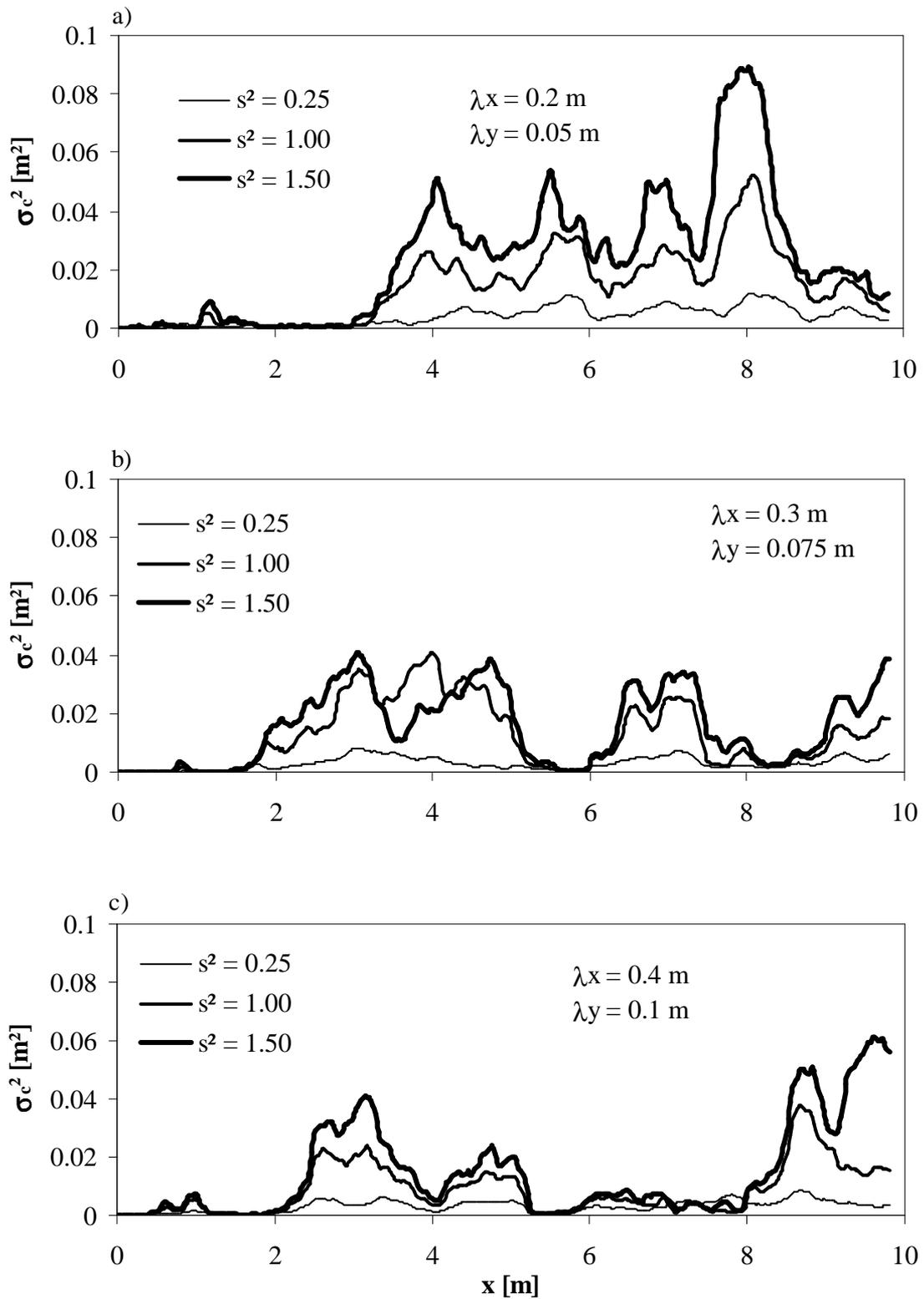
zeigt die Varianzen der räumlichen Konzentrationsausbreitung  $\sigma^2$  in Abhängigkeit von der Fließlänge  $x$  für unterschiedliche Varianzen  $\sigma^2$  und Korrelationslängen  $\lambda_x$  und  $\lambda_y$ . Daraus ist qualitativ ersichtlich, dass die Schwankungsbreite der Varianzen proportional zur Korrelationslänge  $\lambda_x$  steigt, die Schwankungshöhe proportional zur Varianz der lognormalen Permeabilitätsverteilung.

*Zusammenfassend kann für die Sensitivitätsanalyse hinsichtlich der Varianz  $\sigma^2$  und der Korrelation  $\lambda$  der lognormalen Permeabilitätsverteilung folgendes gesagt werden:*

- *Die Sensitivität der transversalen Makrodispersivität  $A_T$  auf die Varianz steigt mit sinkender Korrelation  $\lambda_x$  sowie*
- *auf die Korrelation steigt sie mit steigender Varianz  $\sigma^2$ .*



**Bild 8.22:** Dichteunabhängige transversale Makrodispersionslänge  $A_T$  in Abhängigkeit von a) der Korrelationslängen  $\lambda_x$ , b) Korrelationslängen  $\lambda_y$  und c) der Varianz  $\sigma^2$  der lognormalen Permeabilitätsverteilung für eine Strömungsgeschwindigkeit von  $u = 1 \text{ m/d}$ .



**Bild 8.23:** Varianzen der räumlichen Konzentrationsausbreitung  $\sigma^2$  in Abhängigkeit von der Fließlänge  $x$  für unterschiedliche Varianzen  $\sigma^2$  und Korrelationslängen  $\lambda_x$  und  $\lambda_y$  der lognormalen Permeabilitätsverteilung.

### 8.4.7 Sensitivitätsmatrix

Die Sensitivitäten der zuvor beschriebenen Parameter sind zusammenfassend in Tabelle 8.2 dargestellt. Folgendes wird ersichtlich:

#### Homogenes poröses Medium

In einem homogenen porösen Medium beeinflusst die Druckverteilung und damit die Strömungsgeschwindigkeit sowie die Richtung der Grundwasserströmung die räumliche Ausbreitung der Konzentration am stärksten. Während eine Variation des mittleren Druckgradienten bzw. der mittleren Geschwindigkeit nur den Anteil der Diffusion an der Gesamtausbreitung einer Salzwasserfahne verändert - die eigentliche Dispersivität wird jedoch nicht beeinflusst - kann es durch örtliche oder zeitliche Druckunsicherheiten zu einer veränderten Strömungsrichtung und damit einem veränderten Ausbreitungsverhalten des Stoffes kommen. Daraus ergibt sich, dass das präzise Einhalten korrekter Randbedingungen in experimentellen und numerischen Untersuchungen unbedingt zu beachten ist.

Eine weitere sensitive Größe ist die Konzentration des Fluids. Wird diese erhöht, steigt auch die transversale Vermischungsbreite an. Dies ist jedoch im Widerspruch zu den experimentellen und analytischen Ergebnissen, die ein Absinken der transversalen Dispersivität mit steigendem Dichtegradienten voraussagen. Allerdings wird die Vermischung in einem homogenen Medium nur durch die molekulare Diffusion und die korngerüstbedingte Dispersion bestimmt, deren Werte beide von der Konzentration unabhängig sind. Die Ursache dieser Diskrepanz liegt vermutlich in einer proportional zur Konzentration steigenden numerischen Dispersion. Andererseits wurden die hier diskutierten numerischen Simulationen mit dem SUTRA-Code durchgeführt, das für den dispersen Transport das lineare Fick'sche Gesetz benutzt. Für höhere Konzentrationen sind - wie im Abschnitt 5 bereits diskutiert - die Stoffströme mit  $\mathbf{j}' = -\rho D \cdot \bar{\nabla} c (1 - \varepsilon_c \rho D \cdot \bar{\nabla} c)$  jedoch nichtlinear und würden demzufolge geringere Dispersivitäten ergeben.

#### Heterogenes poröses Medium

Im heterogenen Medium wird die Makrodispersion - wie erwartet - am stärksten durch die Art der Verteilung der Permeabilitäten beeinflusst, wobei die Varianz  $\sigma^2$  ihrer lognormalen Verteilung die stärkste Sensitivität aufweist, gefolgt von der transversalen Korrelation  $\lambda_y$ . Die korngerüstbedingten Dispersivitäten haben demgegenüber einen nur geringen Einfluss. Die Sensitivität der longitudinalen und transversalen korngerüstbedingten Dispersivität sinkt mit steigender Heterogenität des Aquifers, wobei  $a_L$  insgesamt nur bis zu 30 % des Einflusses von

$a_T$  hat. Mit zunehmender Heterogenität der porösen Mediums können somit die longitudinalen und transversalen korngerüstbedingten Dispersivitäten vernachlässigt werden.

In einem Aquifer mit nur geringem Heterogenitätsgrad steigt die Dichte- bzw. Konzentrationssensitivität gegenüber einem homogenen Medium für geringe Konzentrationen bis 5000 ppm um das 30fache von 0.018 auf 0.565 an, sie sinkt jedoch mit steigender Konzentration und Heterogenität und ist in einem stark heterogenen Medium wie die Sandpackung 3 für hohe Konzentrationen von 100000 ppm mit 0.001 praktisch nicht mehr vorhanden. Andererseits sinkt der heterogenitätsbedingte Einfluss mit steigender Konzentration.

*Zusammenfassend kann für die Sensitivität  $dA_T/dP_i$  folgende Rangfolge aufgestellt werden, wobei die größte Sensitivität zuerst steht:*

*1) Homogenes Medium*

- $dp, c, a_T, a_L;$

*2) Heterogenes Medium:*

- $\sigma_{ink}^2, \lambda_y, \lambda_x, dp, a_T, a_L, c.$

Die Aussagekraft der Sensitivitätsanalyse ist jedoch nur bedingt, da sich die Untersuchungen nur auf jeweils eine einzige Realisation bezogen und die ergodischen Bedingungen innerhalb der durchströmten Tanklänge offenbar noch nicht erfüllt sind. Genauere Aussagen dazu können deshalb die im Kapitel 9 dokumentierten Monte-Carlo-Simulationen geben.

$P_i$	$u$ [m/d]	poröses Medium	$c$ [mg/l]	$dA_T/dP_i$
c	1 m/d	homogen	5000	0.018
			35000	0.029
			100000	0.155
	8 m/d	Sandpackung 1 H = 0.05	5000	0.565
			35000	0.055
			100000	0.007
		Sandpackung 2 H = 1.4	5000	0.119
			35000	0.024
			100000	0.014
		Sandpackung 3 H = 1.45	5000	0.025
			35000	0.001
			100000	0.001
$a_L$	1 m/d	Sandpackung 1	0	0.144
		Sandpackung 2	0	0.068
		Sandpackung 3	0	0.037
$a_T$	1 m/d	Sandpackung 1	0	0.444
		Sandpackung 2	0	0.528
		Sandpackung 3	0	0.213
$\sigma_{\text{Ink}}^2$	1 m/d	$\lambda_x = 0.2 \text{ m}, \lambda_y = 0.05 \text{ m}$	0	1.711
		$\lambda_x = 0.3 \text{ m}, \lambda_y = 0.075 \text{ m}$	0	3.099
		$\lambda_x = 0.4 \text{ m}, \lambda_y = 0.10 \text{ m}$	0	2.490
$\lambda_x$	1 m/d	$\sigma_{\text{Ink}}^2 = 0.25$	0	-0.995
		$\sigma_{\text{Ink}}^2 = 1.00$	0	-0.123
		$\sigma_{\text{Ink}}^2 = 1.50$	0	-0.049
$\lambda_y$	1 m/d	$\sigma_{\text{Ink}}^2 = 0.25$	0	-1.576
		$\sigma_{\text{Ink}}^2 = 1.00$	0	-0.108
		$\sigma_{\text{Ink}}^2 = 1.50$	0	-0.299

Tabelle 8.2: Prozentuale Parametersensitivität des numerischen Modells

# 9 Monte-Carlo-Simulationen

## 9.1 Dichteunabhängige Monte-Carlo-Simulationen

Um den Einfluss der Eigenschaften des porösen Mediums und der Fluidichte auf die Makrodispersivität stochastisch zu untersuchen, wurden Monte-Carlo-Simulationen mit dem bereits in Abschnitt 6.2 vorgestellten Turning-Band-Zufallsgenerator [*Journal*, 1974, *Mantoglou and Wilson*, 1982; *Tompson*, 1989; *Sun and Koch*, 1998] durchgeführt.

Es wurden Simulationen mit einer großen Anzahl von zufälligen Modellrealisationen gleicher stochastischer Verteilung der lognormalverteilten Permeabilität (Mittelwert, Varianz, Korrelationslängen) durchgeführt und daraus der Erwartungswert und die Varianz der räumliche Konzentrationsverteilung bestimmt. Die Anzahl der Realisationen ist dabei unbekannt und dann erreicht, wenn der Mittelwert der Dispersivität asymptotisch einen konkreten Wert erreicht bzw. die Varianz seiner Abweichungen Null wird. Je nach vorgegebenen stochastischen Eigenschaften kann diese jedoch sehr hoch werden. *Bellin* [1992] erwähnt ca. 1500 Realisationen für eine dreidimensionale dichteunabhängige Modellierung. In dieser Arbeit konnte festgestellt werden, dass in diesem Modell die Mittelwerte für eine zweidimensionale dichteunabhängige Simulation für geringe Varianz der Permeabilitätsverteilung bereits nach ca. 50 Realisationen konvergierten (Bild 9.1). Höhere Varianzen erfordern eine proportional dazu steigende Anzahl der Realisationen, die bei einer Varianz von  $s^2 = 1.5$  und Korrelationslängen von  $\lambda_x = 0.4\text{m}$  und  $\lambda_y = 0.1\text{ m}$  bei ca. 200 lagen.

Bild 9.2 zeigt die Varianzen von jeweils 60 ausgewählte Realisationen mit den stochastischen Eigenschaften analog der Sandpackungen 1 bis 3 für einen Tracerversuch mit  $u = 1\text{ m/d}$ . Zum Vergleich dazu wurden die jeweiligen Erwartungswerte der Varianzen und die Varianzen der Sandpackungen als eine mögliche Realisation dargestellt. Wir erkennen, dass sowohl die gemessene Konzentrationskurve als auch die simulierte der Sandpackungen 1 und 2 mehr oder weniger im jeweiligen stochastischen Konzentrationsband liegen, die vorhandenen

Sandpackungen sind somit akzeptable Repräsentanten der jeweiligen stochastischen Klasse. Deutlich wird auch, dass die Bandbreite der möglichen Ergebnisse für die 2. und 3. gegenüber der 1. Sandpackung aufgrund der stärkeren Heterogenität größer ist.

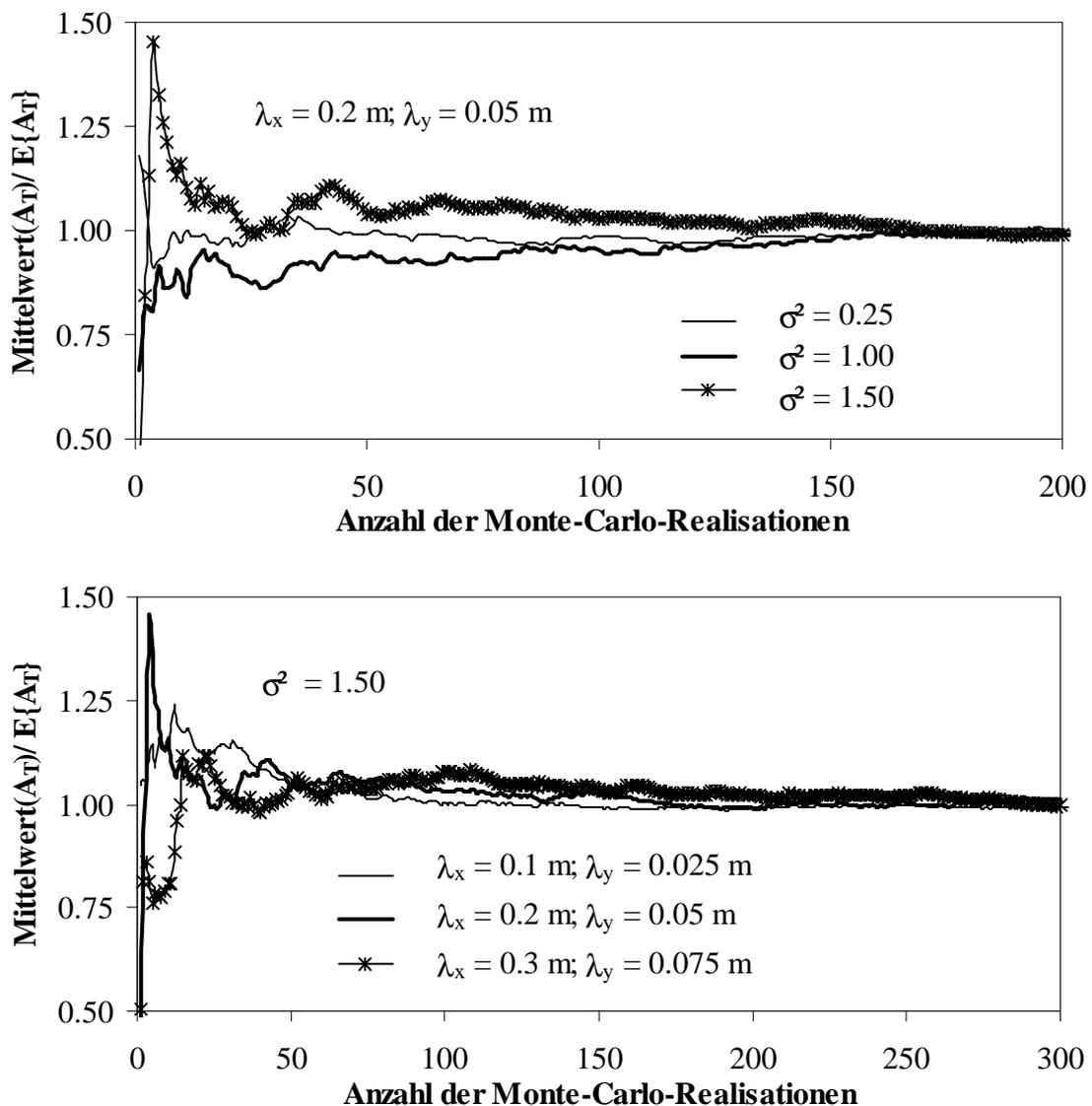
In Bild 9.3 wurden für alle ausgewählte stochastische Klassen (Varianz  $\sigma^2$ , Korrelationslängen  $\lambda_x$  und  $\lambda_y$ ) die Erwartungswerte der Makrodispersionslänge  $A_T$  aus jeweils 100 Monte-Carlo-Realisationen für die Sandpackung 1, sowie 400 für die 2. und 3. Sandpackung in Abhängigkeit von der Strömungsgeschwindigkeit  $u$  für den Tracerfall (dichteunabhängig) aufgetragen. Auf den ersten Blick ist erkennbar, dass sich die Makrodispersivität einer stochastischen Klasse geringfügig mit zunehmender Strömungsgeschwindigkeit verringert und einem asymptotischen Wert annähert. Dies bestätigt, wie bereits in vorherigen Abschnitten diskutiert, dass der Geschwindigkeitseinfluss auf die Dispersivität eines Tracertransportes nur im Bereich geringer molekularer Pecletzahlen vorhanden ist und mit zunehmendem Wert vernachlässigbar ist. Dies stimmt auch mit den Erkenntnissen von Thiele [1997] überein, die besagen, dass im reinen Dispersionsmodell ( $Pe > 200$ ) die Strömungsgeschwindigkeit  $u$  im stationären Gleichgewichtszustand ( $t \rightarrow \infty$ ) keinen Einfluss auf die Form einer Konzentrationskurve hat. Demgegenüber haben die stochastischen Eigenschaften (Varianz  $\sigma^2$  und Korrelationslängen  $\lambda$ ) des porösen Mediums einen erheblich größeren Einfluss auf die Makrodispersionslänge. Dominierenden Einfluss hat dabei die Varianz, deren Vergrößerung ein nahezu linear ansteigendes  $A_T$  zur Folge hat (Bild 9.4c), wobei dieser Anstieg umgekehrt proportional zur Korrelationslänge  $\lambda_x$  wächst (Bild 9.4a). Bild 8.12 zeigt den Erwartungswert der transversalen Makrodispersivität  $A_T$  in Abhängigkeit von der Korrelation und der Varianz der Permeabilitätsverteilung. Daraus lässt sich folgendes schlussfolgern:

*Der Erwartungswert der dichteunabhängigen transversalen Makrodispersivität  $E\{A_T\}$  steigt mit:*

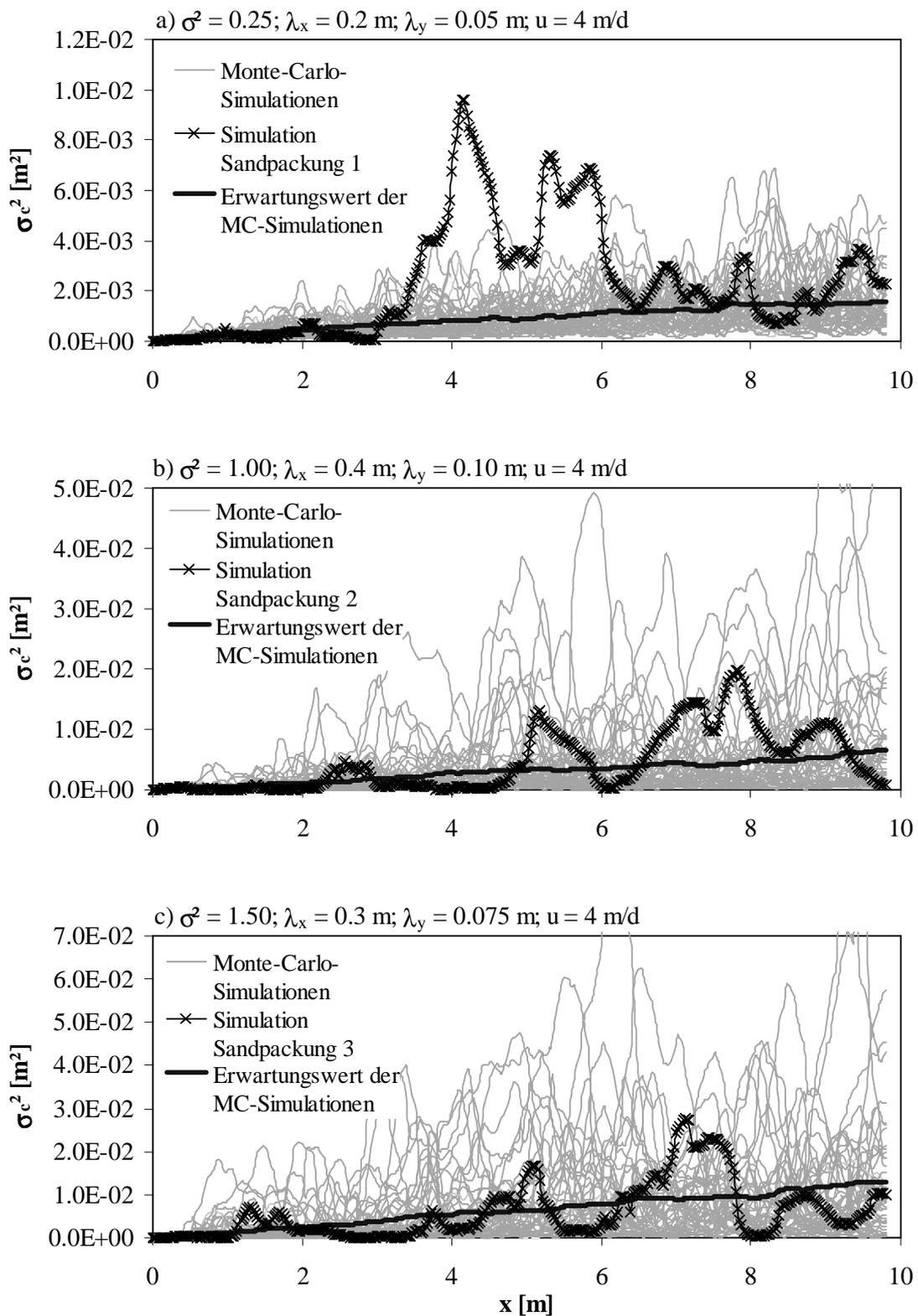
- *steigender Varianz der Permeabilitätsverteilung sowie*
- *sinkender longitudinaler Korrelationslänge  $\lambda_x$*
- *steigender transversaler Korrelationslänge  $\lambda_y$*

Eine Vergrößerung von  $\lambda_y$  führt zum Anstieg dieser bis zu einem asymptotischen Wert, bei dem  $\lambda_y$  keinen Einfluss auf  $A_T$  mehr hat (Bild 9.4b). Verwischt wird dies allerdings durch die Tatsache, dass einerseits für ein  $\lambda_y < 0.05$  m die Korrelationsbedingung von  $\lambda_y \geq 4 \cdot dy = 0.05$  m nicht eingehalten werden und andererseits bei großem  $\lambda_x$  innerhalb des Modelltanks vermutlich noch keine Ergodizität erreicht wird. Bild 9.5 zeigt die aus den Monte-Carlo-Simulationen ermittelten Erwartungswerte der Makrodispersion inklusive deren Standardabweichungen im Vergleich mit den jeweiligen experimentellen und numerisch

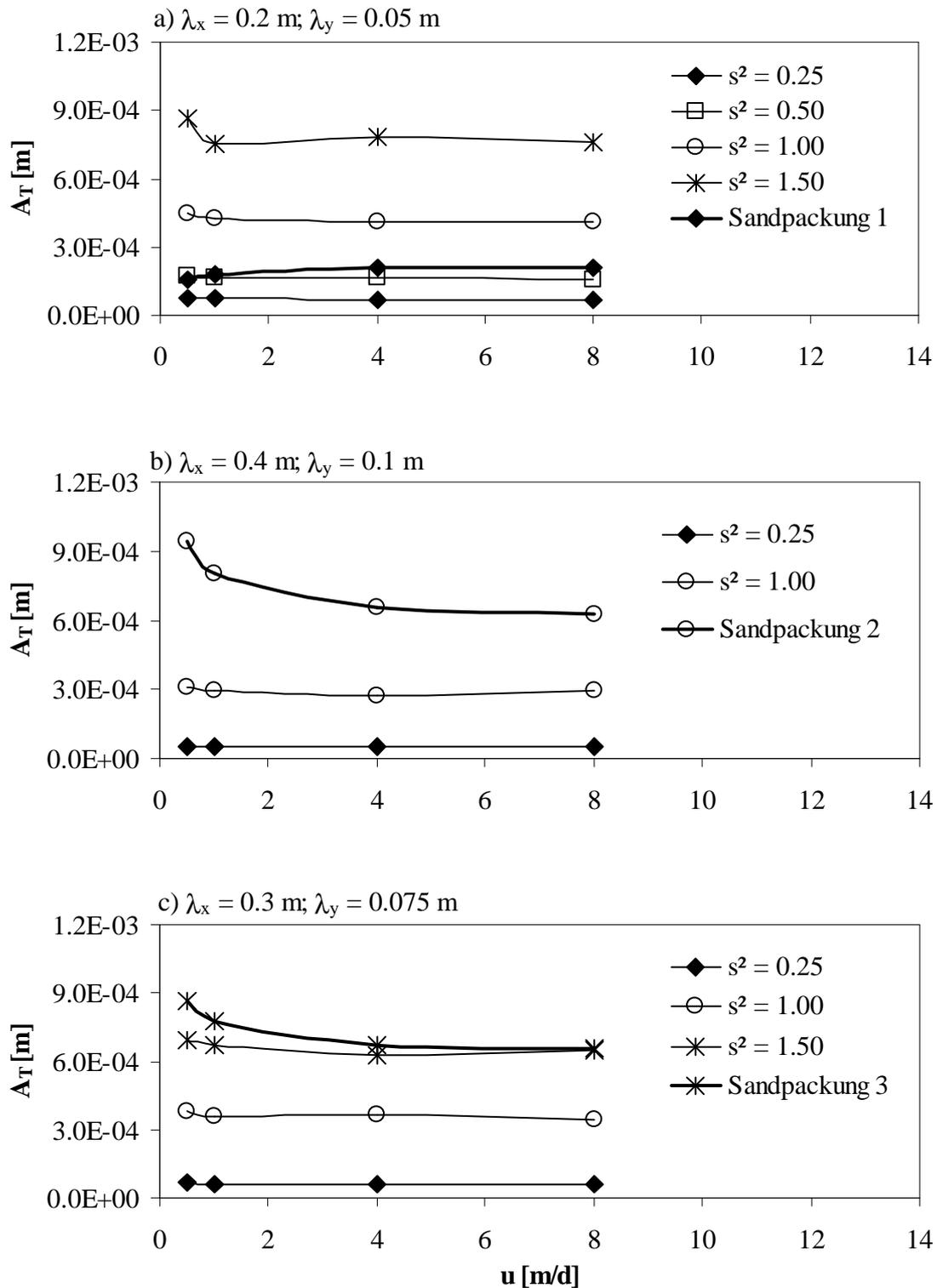
deterministischen Lösungen für die Sandpackung 1 bis 3. Während für die 3. Sandpackung der Erwartungswert mit der deterministischen und experimentellen nahezu übereinstimmt, gibt es für die 1. und 2. Sandpackung insbesondere im Bereich kleiner Strömungsgeschwindigkeiten Abweichungen. Die experimentellen und numerisch deterministischen Werte sind dabei bis zu  $dA_T \approx 0.2$  mm für die 1. Sandpackung und bis  $dA_T \approx 0.6$  mm höher als die jeweiligen Erwartungswerte. Dies deutet darauf hin, dass einerseits die Sandpackungen 1 und 2 im Randbereich der möglichen Repräsentationen der jeweiligen stochastischen Klasse liegen. Demgegenüber repräsentiert die Sandpackung 3 den Mittelwert. Andererseits sind die relativen Fehler bei der Berechnung der Vermischungsbreite bei kleiner Heterogenität größer (Sandpackung 1 und 2).



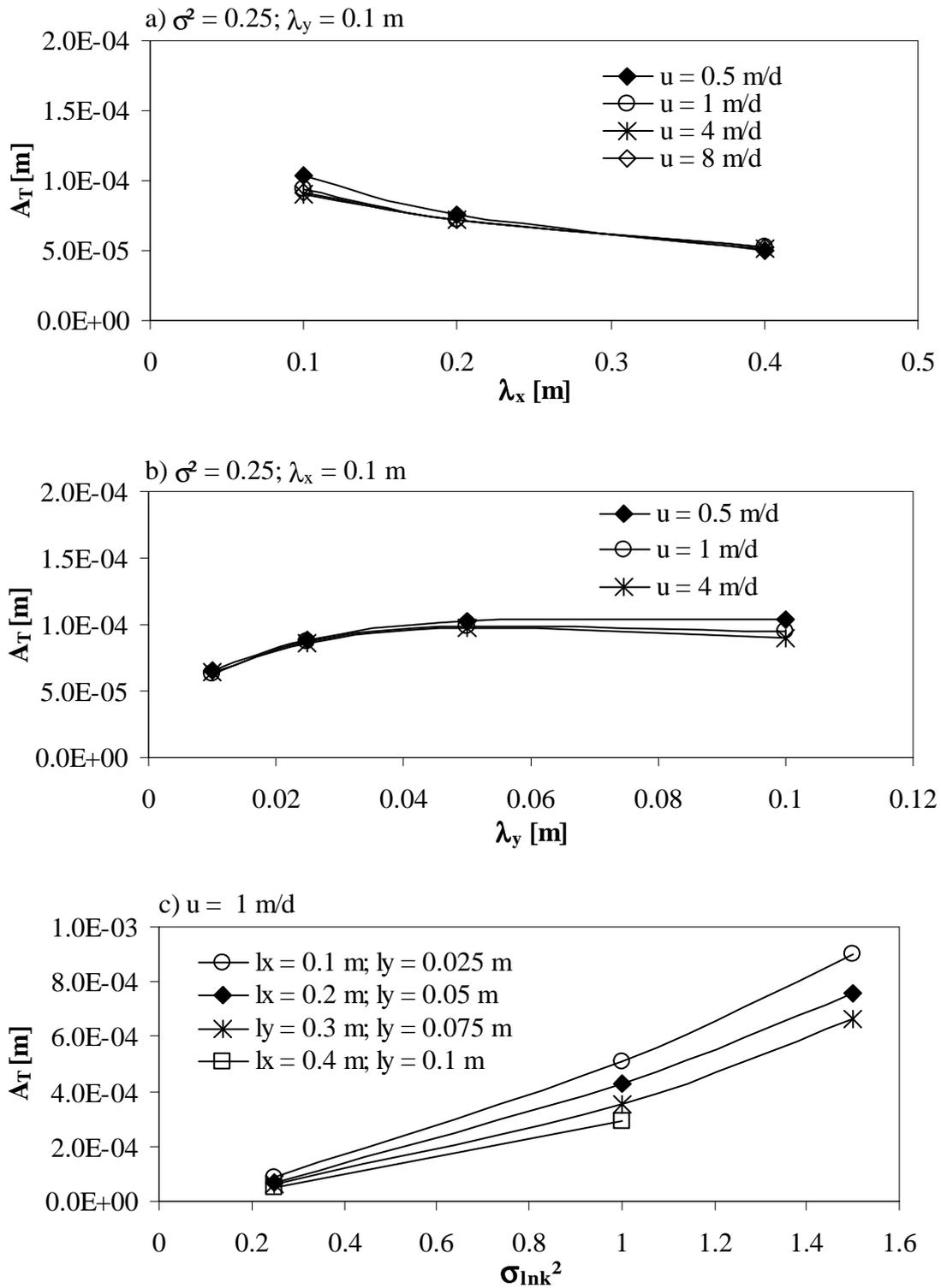
**Bild 9.1:** Normierter Erwartungswert der transversalen Makrodispersivität  $A_T$  in Abhängigkeit von der Anzahl der Monte-Carlo-Simulationen für unterschiedliche Varianzen und Korrelationen der lognormalen Permeabilitätsverteilung.



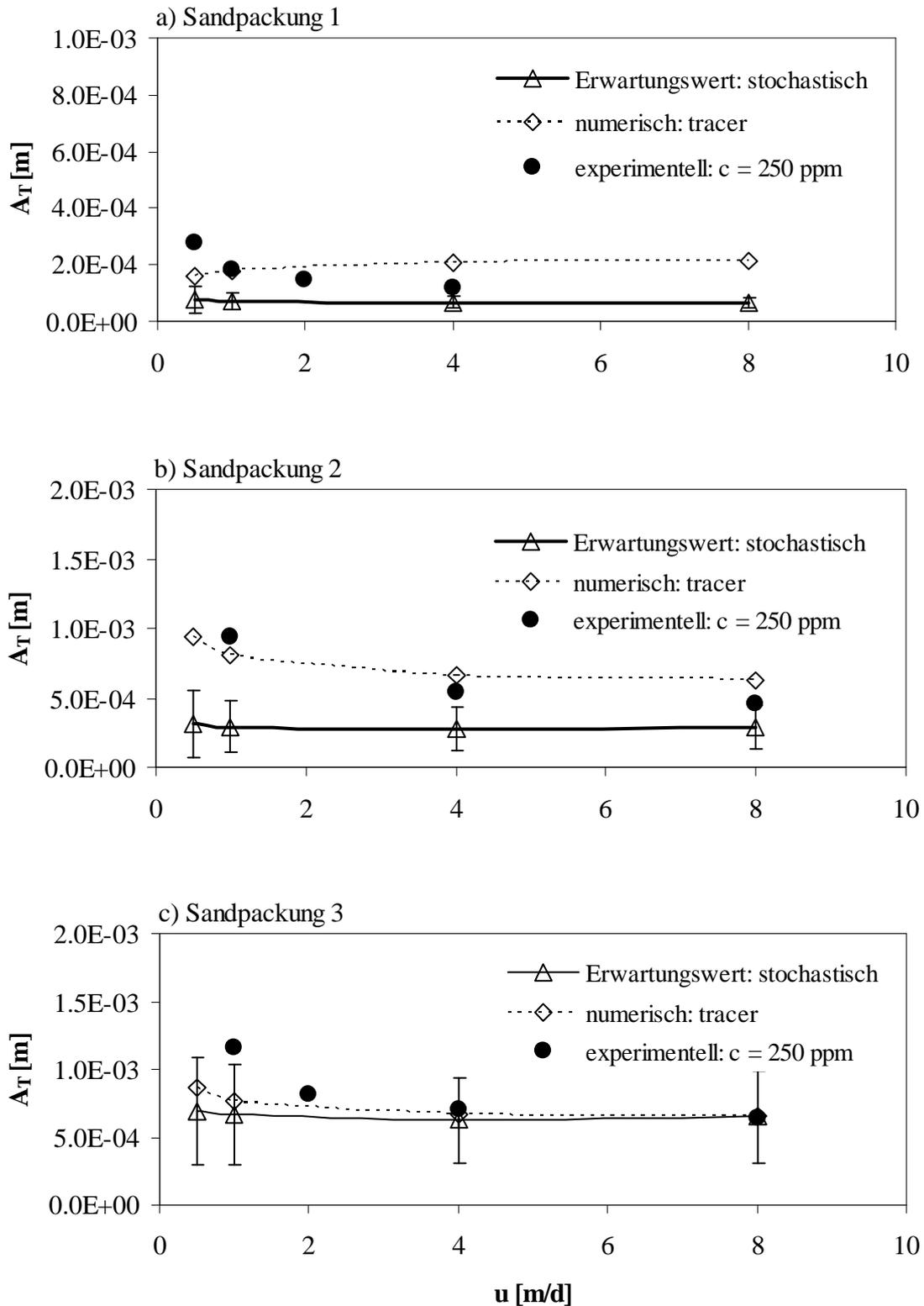
**Bild 9.2:** Varianzen der transversalen Konzentrationsausbreitung  $\sigma^2$  [m<sup>2</sup>] von 60 Monte-Carlo Realisationen im stationären Gleichgewichtszustand inklusive deren Erwartungswert und der jeweilige ausgewählte Realisation für a) die Sandpackung 1 und b) die Sandpackung 2 bei einer dichteunabhängigen Strömung mit  $u = 1$  m/d.



**Bild 9.3:** Erwartungswert der Makrodispersion im Tracerfall in Abhängigkeit von der Strömungsgeschwindigkeit  $u$  und den stochastischen Eigenschaften.



**Bild 9.4:** Erwartungswert der Makrodispersion  $A_T$  im Tracerfall in Abhängigkeit von der Varianz  $\sigma^2$  der lognormalen Permeabilitätsverteilung für verschiedene Strömungs-geschwindigkeiten  $u$  und stochastische Eigenschaften.



**Bild 9.5:** Erwartungswert der Makrodispersion inklusive der Standardabweichung in Abhängigkeit von der Strömungsgeschwindigkeit  $u$  im Vergleich zu den experimentellen und numerisch deterministischen Lösungen für die Sandpackung a) 1, b) 2 und c) 3 im Tracerfall(dichteunabhängig).

## 9.2 Dichteabhängige Monte-Carlo-Simulationen

Die Anzahl der notwendigen Monte-Carlo-Realisationen mit variabler Konzentration reduzierte sich aufgrund der stabilisierenden Effekte der Dichte. So stellte die Autorin fest, dass die transversale Makrodispersivität  $A_T$  bereits nach ca. 20 bis 30 zufälligen Simulationen konvergierte, wobei die Anzahl der nötigen MC-Simulationen analog einer dichteunabhängigen Simulation mit höherem Heterogenitätsgrad stieg (Bild 9.6).

Bild 9.7 und Bild 9.8 zeigen die Varianzen von jeweils 20 Realisationen mit den stochastischen Eigenschaften analog der Sandpackungen 1 bis 3 für einen *dichteabhängigen* Versuch mit  $c = 35000$  ppm für  $u = 1$  m/d (Bild 9.7) und  $u = 4$  m/d (Bild 9.8). Auch hier zeigt der Vergleich mit den jeweiligen Erwartungswerte der Varianzen und den Varianzen der Sandpackungen dass die Sandpackungen mögliche Realisation darstellen.

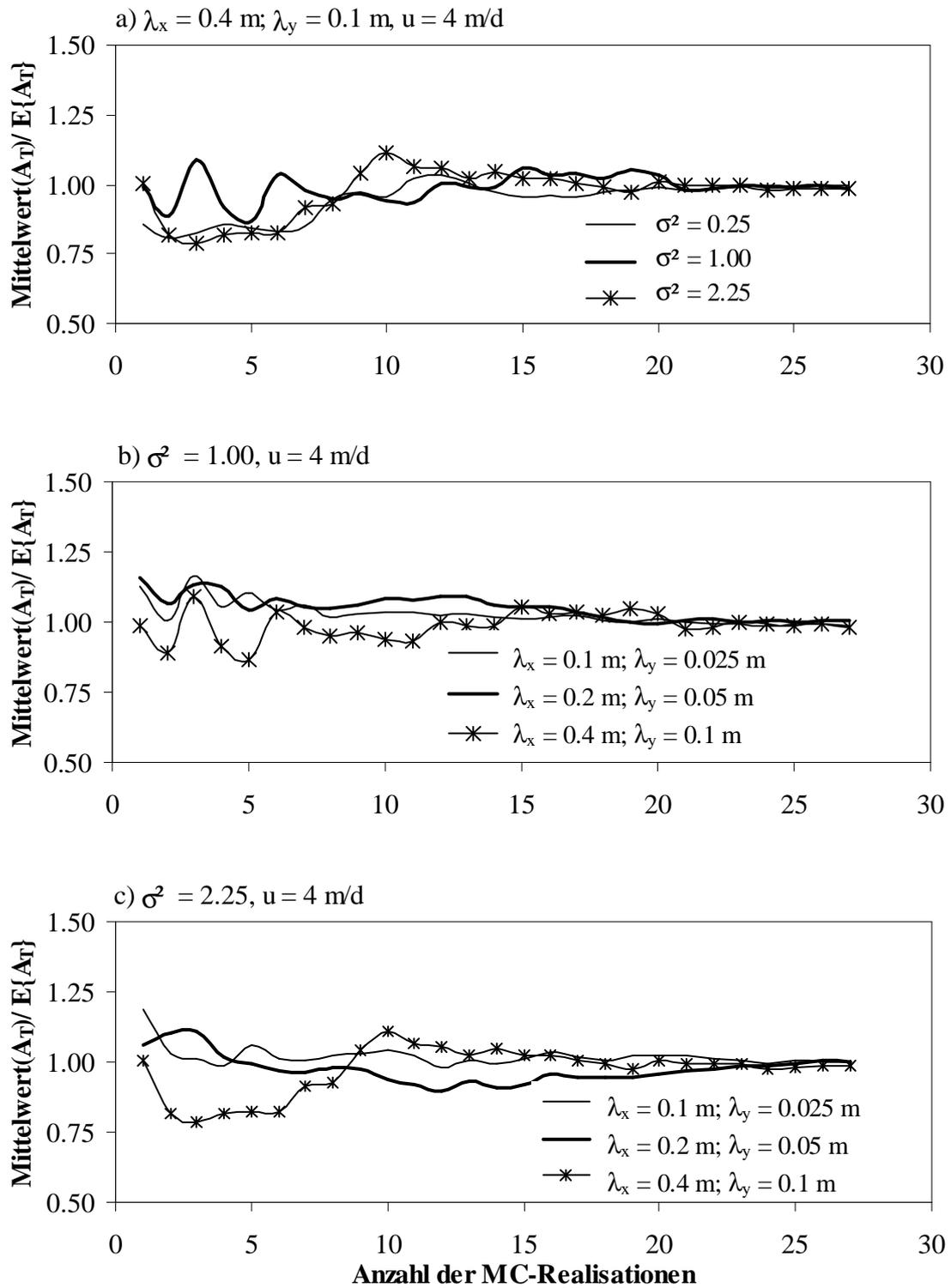
Bild 9.9 zeigt die Erwartungswerte der Varianzen der normierten Konzentrationsausbreitung von 30 Monte-Carlo-Simulationen einiger ausgewählter stochastischer Klassen in Abhängigkeit von der Fließlänge. Der Anstieg dieser Kurven, der die Dispersivität  $A_T$  mit  $A_T = 0.5 \cdot d\sigma^2/dx$  beschreibt, ist dabei für steigende Konzentrationen für Varianzen von 0.25 und 1.00 nicht wie erwartet sichtbar abgesenkt. Erst bei einer Varianz von  $s^2 = 2.25$  ist diese Absenkung von  $A_T$  mit steigender Konzentration  $c$  sichtbar. Ursache dafür ist die für eine so geringe Varianz von  $s^2 = 0.25$  bereits ohne Dichteabhängigkeit sehr geringe transversale Makrodispersivität in Größenordnungen von  $A_T \approx 0.05$  mm. Eine weitere Verringerung ist somit praktisch nicht exakt simulier- und messbar und für praktische Anwendungen auch nicht relevant. Gleiches gilt abgeschwächt für Simulationen für Varianzen von 1.00 mit einer Dispersivität im Tracerfall von  $A_T \approx 0.5$  mm.

Bild 9.10 zeigt die Erwartungswerte der stochastischen Modellierung für Varianzen der Permeabilitätsverteilungen von 0.25; 1.00 und 2.25 in Abhängigkeit von der Salzkonzentration, jeweils mit unterschiedlichen Korrelationslängen. Man erkennt - wie bereits in der Sensitivitätsanalyse beobachtet - ein starkes Ansteigen von  $A_T$  gegenüber der Tracersituation für Konzentrationen bis ca.  $c = 5000$  ppm. Steigt die Konzentration über diesen Bereich hinaus, nehmen die stabilisierenden Effekte zu und die transversale Makrodispersivität sinkt geringfügig.

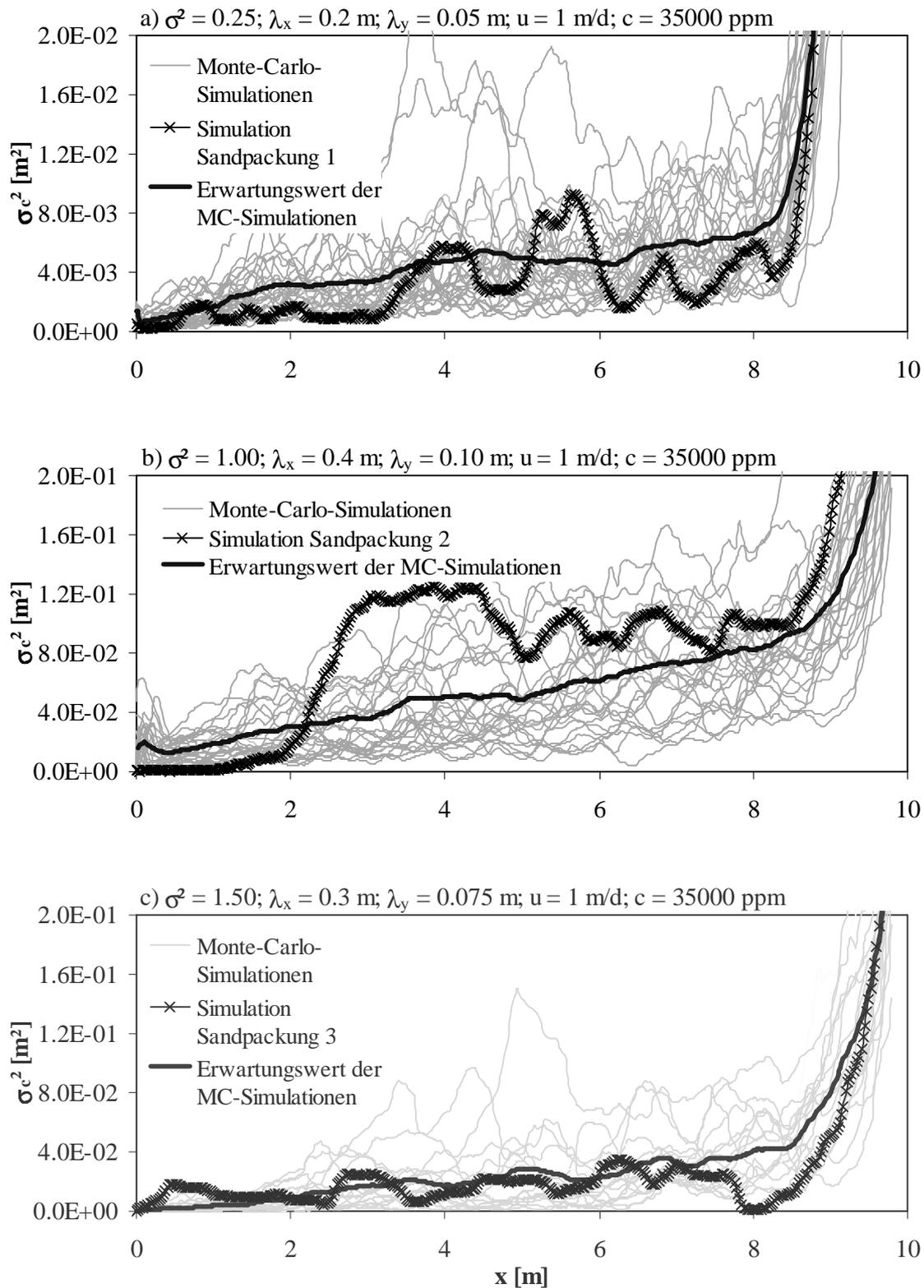
*Der Erwartungswert der transversalen Makrodispersivität  $A_T$  steigt mit:*

- *sinkender Salzwasser-Konzentration  $c_o$ ,*
- *sinkender Strömungsgeschwindigkeit  $u$  sowie*
- *steigender Varianz  $\sigma_{nk}^2$  und steigender Korrelation  $\lambda$ .*

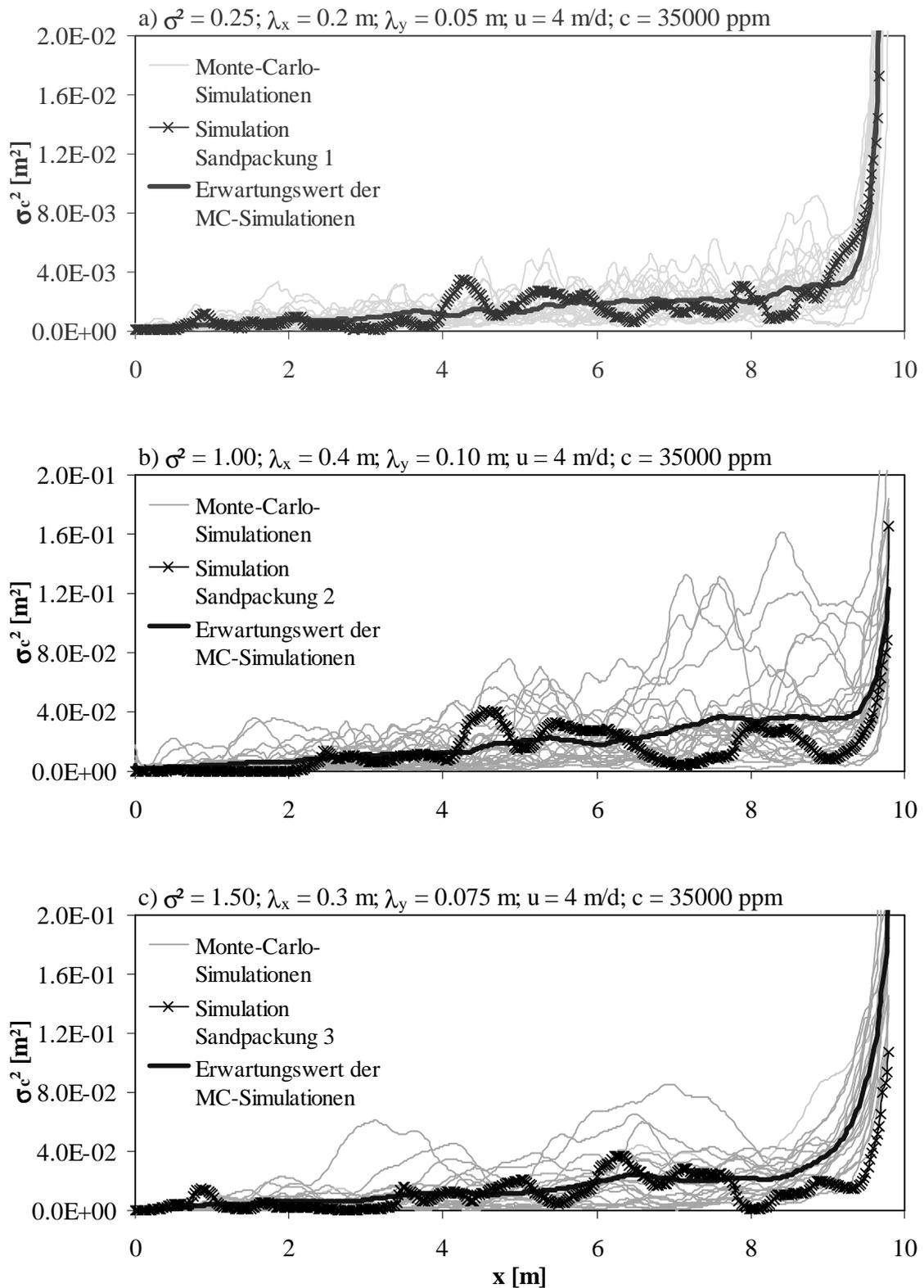
Bild 9.12 vergleicht die stochastischen Erwartungswerte der transversalen Makrodispersivität  $A_T$  inklusive der Standardabweichungen mit den gemessenen und simulierten Werten für die jeweilige Sandpackung. Auch hier ist für die 3. Sandpackung eine gute Übereinstimmung der numerischen mit den experimentellen zu erkennen, während für die Sandpackung 2 die numerischen Werte für Konzentrationen ab  $c = 35000$  ppm über den gemessenen Werten, für die 1. Sandpackung und große Konzentrationen unter den gemessenen Werten liegen. Mit einer Korrelation von  $\lambda_x = 0.4$  m (Sandpackung 2) ist offenbar innerhalb der Tanklänge  $L$  mit  $L = 24.5 \cdot \lambda_x$  noch kein ergodischer Zustand erreicht. Für die Sandpackung 1 mit einer Korrelation von  $\lambda_x = 0.2$  m ist wiederum die Bedingung nicht gegeben, dass innerhalb einer Korrelation mehrere verschiedene Werte liegen.



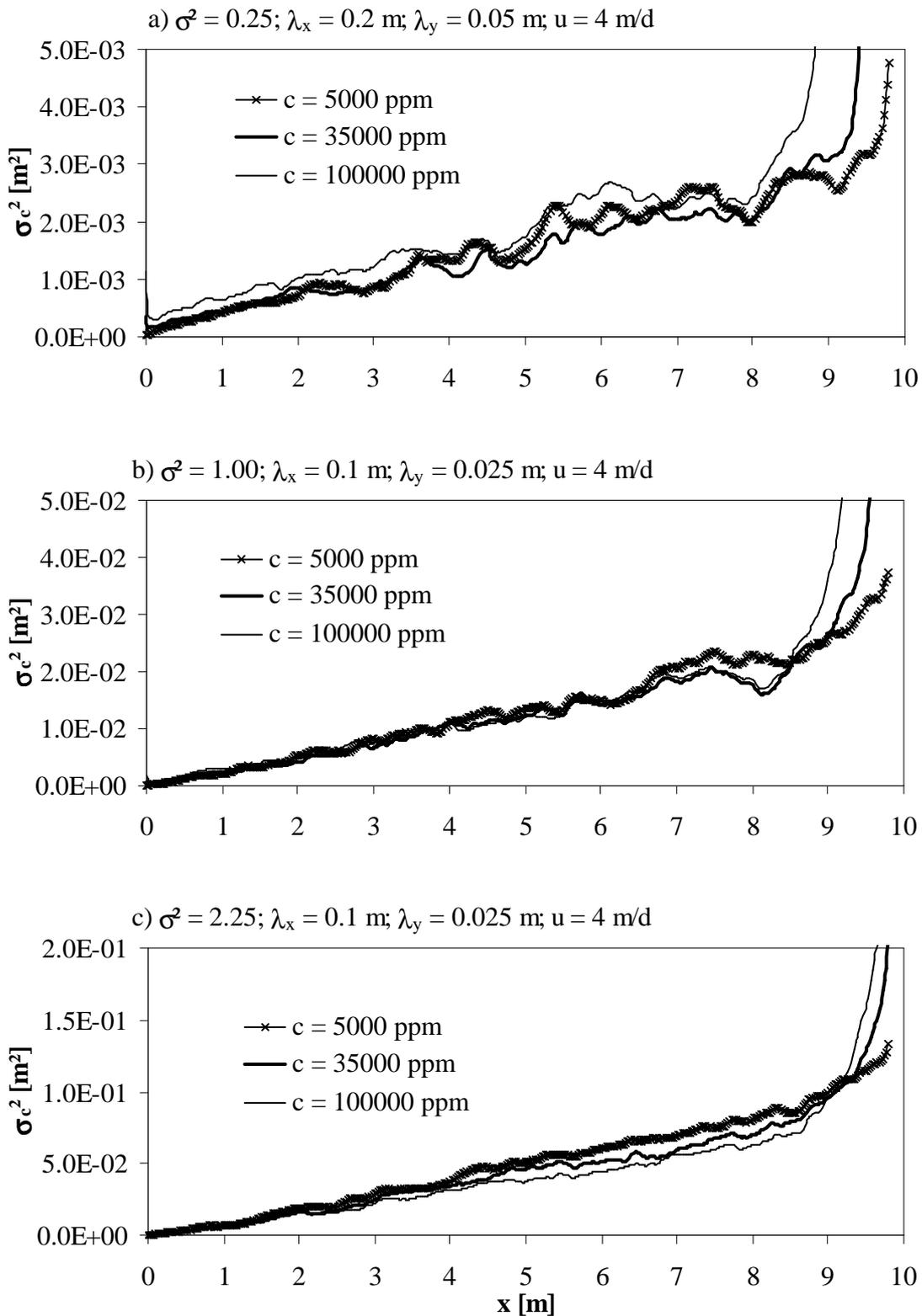
**Bild 9.6:** Normierter Erwartungswert der transversalen Makrodispersivität  $A_T$  in Abhängigkeit von der Anzahl der Monte-Carlo-Simulationen.



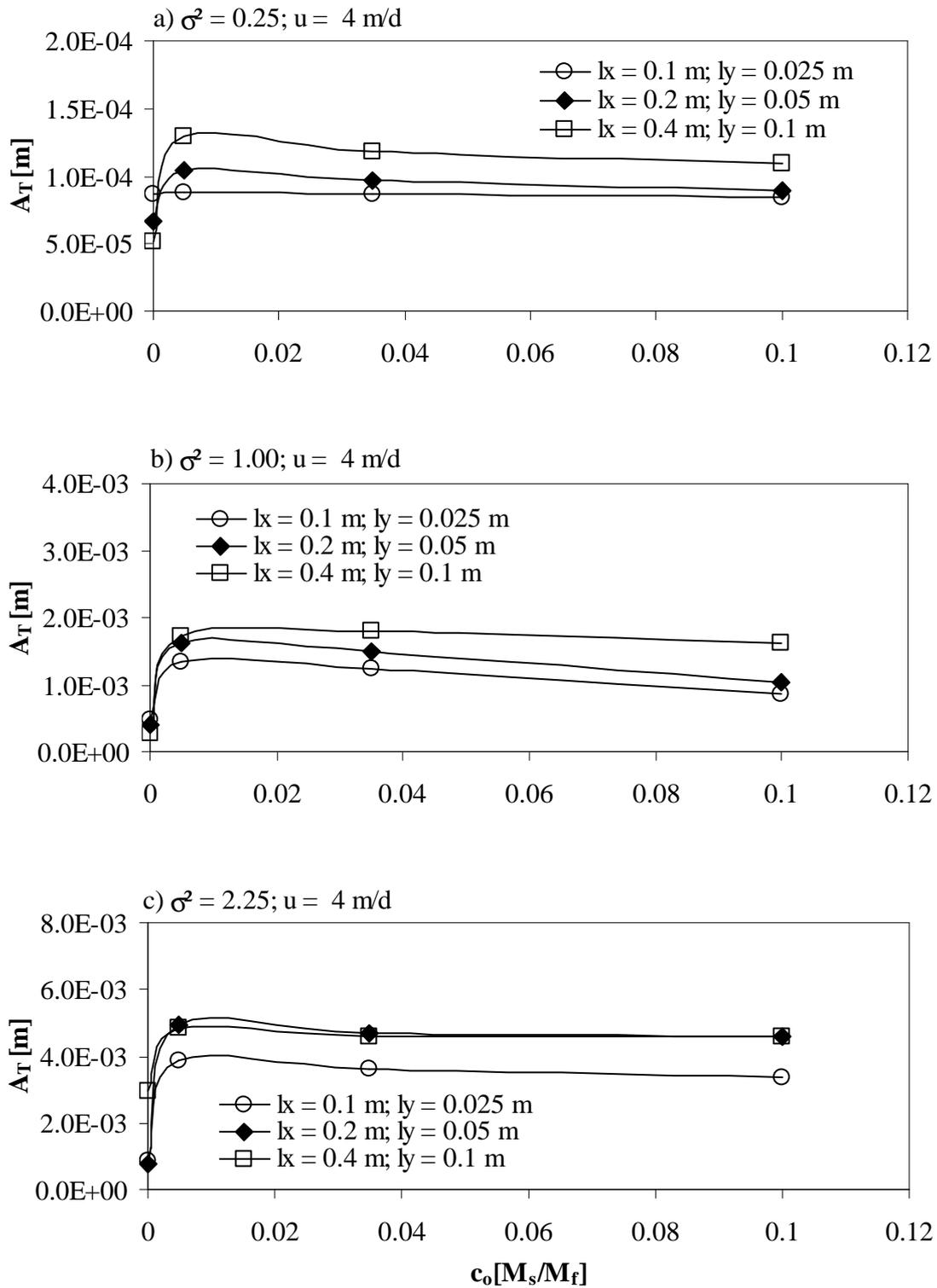
**Bild 9.7:** Varianzen der stationären transversalen Konzentrationsausbreitung  $\sigma^2$  [m<sup>2</sup>] von 30 Monte-Carlo Realisationen inklusive deren Erwartungswert und der jeweiligen ausgewählten Realisation für a) die Sandpackung 1 und b) die Sandpackung 2 bei einer dichteabhängigen Strömung mit  $c = 35000$  ppm und  $u = 1$  m/d.



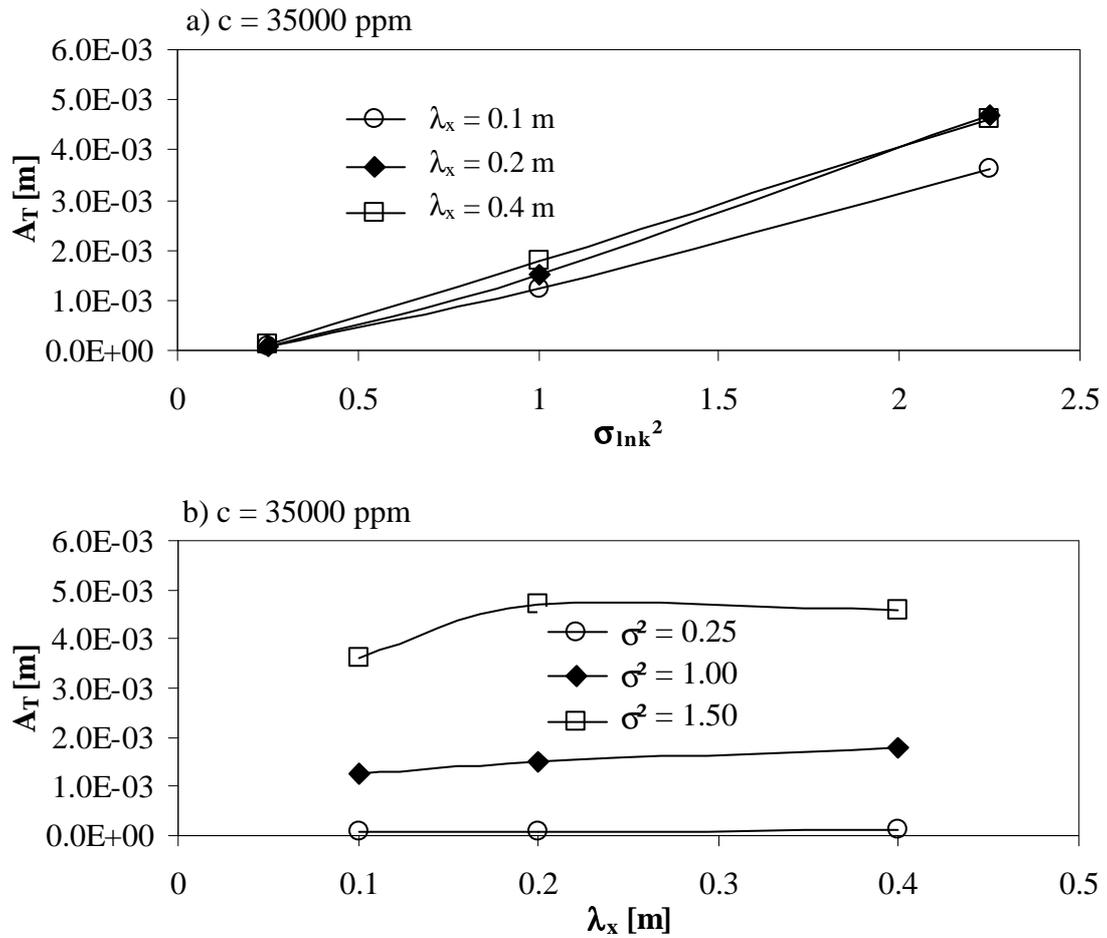
**Bild 9.8:** Varianzen der stationären transversalen Konzentrationsausbreitung  $\sigma^2$  [m<sup>2</sup>] von 30 Monte-Carlo Realisationen inklusive deren Erwartungswert und der jeweiligen ausgewählten Realisation für a) die Sandpackung 1 und b) die Sandpackung 2 bei einer dichteabhängigen Strömung mit  $c = 35000$  ppm und  $u = 4$  m/d.



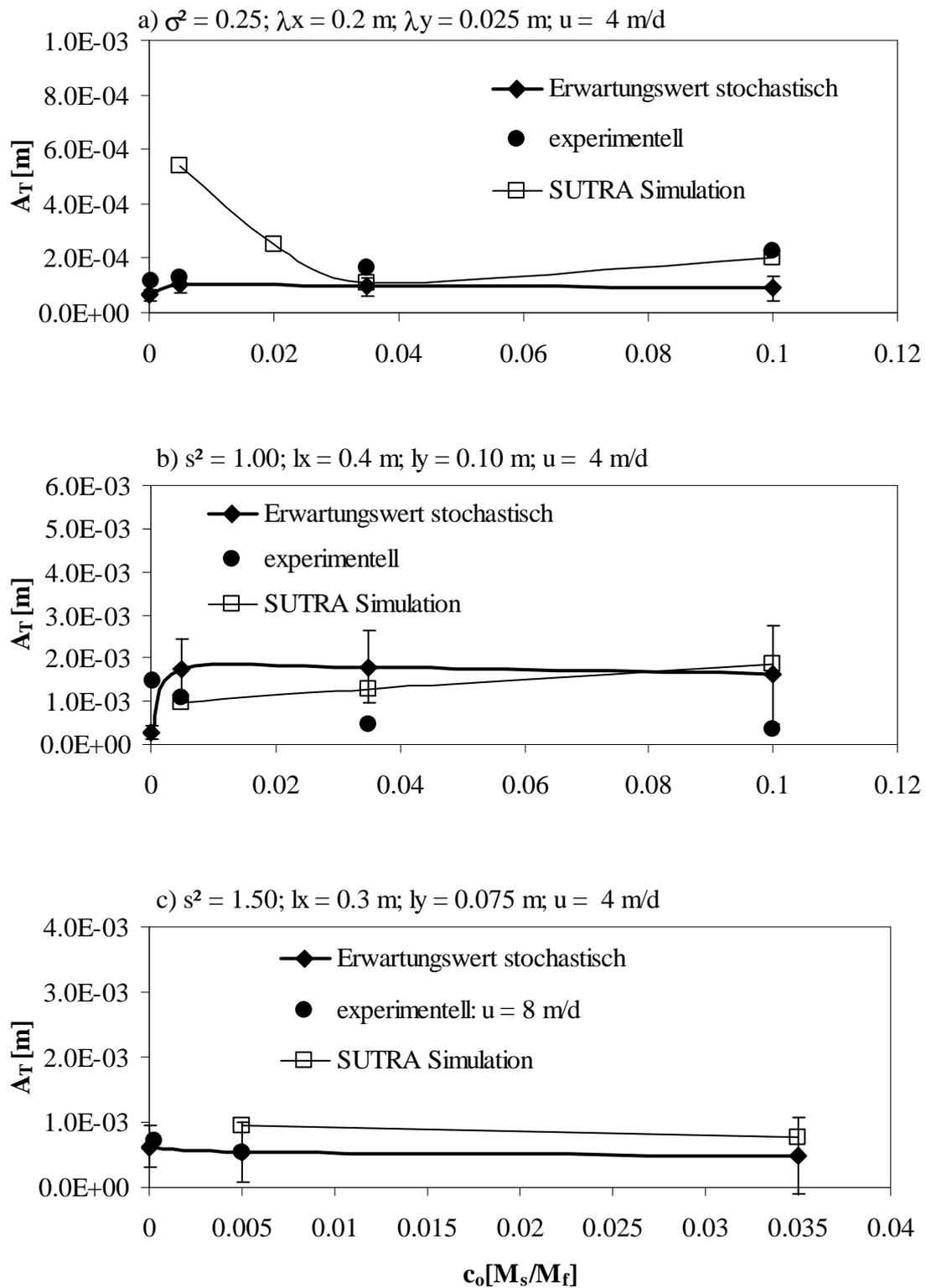
**Bild 9.8:** Erwartungswerte der Varianzen aus der Monte-Carlo-Simulation unterschiedlicher Konzentrationsgradienten und stochastischen Verteilungen der Permeabilitäten.



**Bild 9.9:** Erwartungswert der Makrodispersion  $A_T$  in Abhängigkeit von der Konzentration  $c$  für unterschiedliche Korrelationslängen  $\lambda$  und Varianzen a)  $\sigma^2 = 0.25$ , b)  $1.00$ , c)  $2.25$  mit  $u = 4 \text{ m/d}$ .



**Bild 9.10:** Erwartungswert der Makrodispersion  $A_T$  in Abhängigkeit von der Konzentration  $c$  für unterschiedliche Korrelationslängen  $\lambda$  und Varianzen a)  $\sigma^2 = 0.25$ , b) 1.00, c) 2.25 mit  $u = 4$  m/d.



**Bild 9.11:** Erwartungswert der Makrodispersion  $A_T$  inklusiver der Standardabweichung in Abhängigkeit von der Konzentration  $c$  für  $u = 4$  m/d im Vergleich zu den experimentellen und numerischen Lösungen für die Sandpackungen a) 1, b) 2 und c) 3.

### 9.3 Diskussion und Vergleich mit dem analytischen Modell

Die Erwartungswerte der dichteunabhängigen und *dichteabhängigen* transversale Makrodispersivitäten  $A_T$  aus den vor beschriebenen Monte-Carlo-Simulationen wurden einer Regressionsanalyse analog Abschnitt 6.4.4 unterzogen. Tabelle 8.3 zeigt die Ergebnisse dieser Regression: die Regressionskoeffizienten inklusive der jeweiligen Standardabweichungen  $s$  und Irrtumswahrscheinlichkeiten  $p$  der Hypothese. Es ergibt sich folgendes:

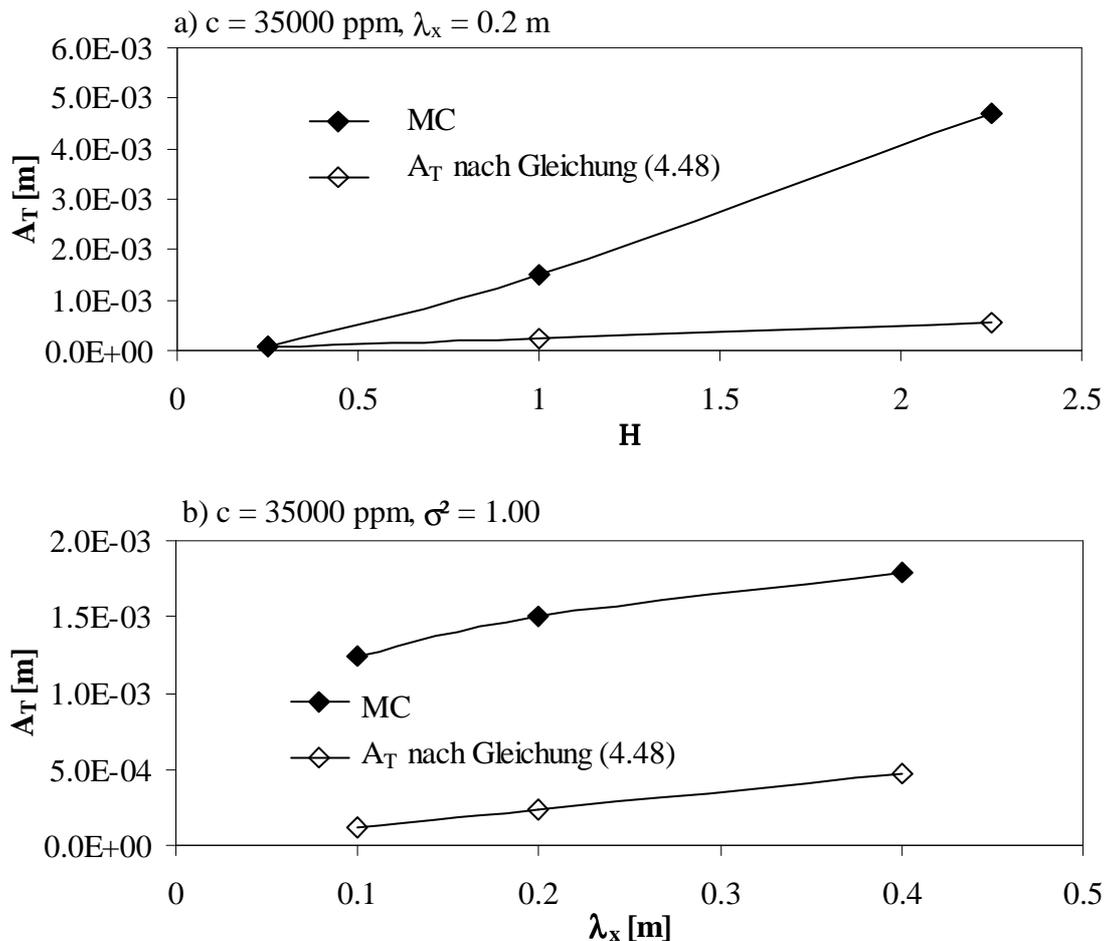
Mit nur geringer Irrtumswahrscheinlichkeit von  $p = 3.6 \cdot 10^{-16}$  stimmt der Erwartungswert der dichteunabhängigen MC-Simulationen mit der aus der Perturbationsmethode hergeleiteten Formel (4.43) überein. Die Verlässlichkeit des Regressionsergebnisses sank analog der experimentellen Analyse, sobald der Strömungsfaktor nach Gleichung (4.23) als von der Heterogenität abhängig angenommen wird. Somit kann der Strömungsfaktor  $\gamma_1$  als konstant angenommen werden:  $\gamma_1 = 1$ , und es ergibt sich für den vertikalen hydraulischen Gradienten mit  $|J_3| = 0.117 \cdot J_1$  ein nur geringfügig größerer Anstieg gegenüber dem experimentellen Ergebnis.

Die Monte-Carlo-Simulationen *dichteabhängiger* Transportprozesse mit  $\gamma_1 = \text{konstant}$  zeigen mit einer Irrtumswahrscheinlichkeit  $p = 6.7 \cdot 10^{-7}$  für den Koeffizienten  $b_1$  eine gute Übereinstimmung. Demgegenüber kann für den 2. Koeffizienten  $b_2$  mit  $p = 0.9$  keine zufrieden stellende Regression berechnet werden. Unter Annahme eines heterogenitätsabhängigen Strömungsfaktors  $\gamma_1$  (4.25) verringert sich die Irrtumswahrscheinlichkeit für  $b_2$  auf  $p = 0.001$ . Demnach ist für *dichteabhängige* Simulationen der Strömungsfaktor  $\gamma_1$  abhängig von der Permeabilitätsverteilung. Mit einer Irrtumswahrscheinlichkeit von  $p = 0.06$  können somit auch die Erwartungswerte aus den *dichteabhängigen* Monte-Carlo-Simulationen mit der stochastischen Formel erklärt werden. Der Faktor  $\Gamma_3$  ist hier jedoch - anders als für experimentelle Ergebnisse - negativ.

$\gamma_1$	$b_1$	$\sigma_{b1}$	$p$	$b_2$	$\sigma_{b2}$	$p$	$J_3/J_1$	$\Gamma_3$
Tracer								
1	0.0137	1.2E-03	3.6E-16				0.1169	
$f(\sigma^2)$	0.0189	1.8E-03	1.1E-14				0.1374	
dichteabh.								
1	0.0489	7.7E-03	6.6E-07	0.0018	1.4E-02	9.0E-01	0.2211	3.7E-02
$f(c, \sigma^2)$	0.0809	4.1E-01	6.2E-02	-1.4729	4.1E-01	1.3E-03	0.2844	-1.8E+01

**Tabelle 8.3:** Regressionsfaktoren  $b_1$  und  $b_2$  inklusive deren Standardabweichungen  $s$  und Irrtumswahrscheinlichkeiten  $p$  für die multiple lineare Regressionsanalyse der aus den Monte-Carlo-Simulationen ermittelten transversalen Makrodispersionen  $A_T$ .

Beim Vergleich der Erwartungswert der Makrodispersion  $A_T$  aus dem MC-Simulationen in Abhängigkeit von der Varianz für  $\lambda_x = 0.2$  m und der Korrelationslänge  $\lambda_x$  für  $\sigma^2 = 1.00$  und  $c = 35000$  ppm mit denen der analytischen Lösungen aus der Gleichung (4.48) zeigt sich eine zur Varianz proportionale Abweichung der Ergebnisse. Dabei sind die Erwartungswerte der MC-Simulationen stets höher als die analytischen. Verursacht wird dies vermutlich durch eine proportional zur Dichte und Heterogenität steigende numerische Dispersion.



**Bild 9.12:** Erwartungswert der Makrodispersion  $A_T$  in Abhängigkeit von a) der Varianz für  $\lambda_x = 0.2$  m und b) der Korrelationslänge  $\lambda_x$  für  $\sigma^2 = 1.00$  für  $c = 35000$  ppm im Vergleich zu den analytischen Lösungen für  $A_T$  aus der Gleichung (4.48).

*Zusammenfassend lässt sich aus den experimentellen und numerischen Ergebnissen folgendes aussagen:*

- Sowohl experimentelle als auch numerische Untersuchungen mit der Monte-Carlo-Methode ergaben sowohl für dichteunabhängige Simulationen und experimentelle für

die dichteabhängige eine sehr gute Übereinstimmung der transversalen Makrodispersion mit der aus der Störungsmethode hergeleiteten Formel. Somit kann für Dichteunabhängigkeit  $A_T$  in einem heterogenen porösen Medium mit dieser Formel beschrieben werden:

$$A_{33} = \frac{\sigma_f^2 \lambda_1}{\gamma_3^2} \frac{\xi(2\xi+1)}{2(\xi+1)^2} \left\{ 1 - \frac{(\xi+1)^2}{2(1-\xi^2)(2\xi+1)} \Gamma_3 \bar{x} G_3 \right\} \quad (8.17)$$

Bedingt können auch für den dichteabhängigen Simulationen die Erwartungswerte der transversalen Makrodispersivität mit der stochastischen Formel erklärt werden. Hier sollten jedoch zu Absicherung des Regressionsergebnisses Monte-Carlo-Simulationen an weiteren Permeabilitätsverteilungen und mit weiteren Konzentrationsvariationen durchgeführt werden.

- Der Strömungsfaktor  $\gamma_1$  ist für den hier untersuchten zweidimensionalen Modellaquifer für dichteunabhängige Simulationen heterogenitätsunabhängig und somit  $\gamma_1 = 1$ . Demzufolge entspricht der transversale Strömungsfaktor in diesem Fall dem Verhältnis der hydraulischen Gradienten mit  $\gamma_3 = J_1/J_3$ . Für dichteabhängige Prozesse ist dieser jedoch abhängig von der Heterogenität des Untergrundes und dem Konzentrationsgradienten zweier Fluide mit:

$$\gamma_1 = \left\{ 1 + \frac{\sigma_f^2}{6} + \sigma_f^2 \frac{\alpha_T}{\lambda} \left[ \frac{b_f^2}{4} - b_1 \right] \right\} \quad \text{mit} \quad b_1 = \frac{\beta G_1 \lambda^2}{\gamma \alpha_T} \quad (8.18)$$

# 10 Zusammenfassung und Ausblick

## 10.1 Zusammenfassung der Ergebnisse

In der vorliegenden Arbeit wurde die *dichteabhängige* transversale Dispersion von Wasserinhaltsstoffen in gesättigten heterogenen porösen Medien untersucht. Die Untersuchungen koppelten dabei – wie bisher nur selten angewendet - ein analytisches, sowohl mit dem experimentellen als auch dem numerischen Modell.

Dichteströmungen stellen eine besondere Herausforderung für jeden Modellierer dar, denn die Differentialgleichungen zu ihrer mathematischen Beschreibung sind nichtlinear und gekoppelt. Experimentelle Untersuchungen im Labor- und Feldmaßstab haben gezeigt, dass auch der Aufbau und die Heterogenität des Untergrundes einen entscheidenden Einfluss auf den Transport eines Inhaltsstoffes haben. Das Zusammenspiel dieser Prozesse ist äußerst komplex und hat bisher nicht die breite wissenschaftliche Aufmerksamkeit erhalten, die dafür nötig wäre. Während für die longitudinale Dispersion  $D_L$  bereits eine Vielzahl sowohl experimenteller als auch numerischer Ergebnisse und analytischer Lösungen vorliegt, existierten bisher kaum Erkenntnisse über das Verhalten der transversalen Dispersion.

Es wurden experimentelle Untersuchungen stabiler Dichteströmungen an einem Tankmodell an drei unterschiedlichen repräsentativen stochastischen Modellaquiferen durchgeführt. Dazu durchströmten Fluidpaare kontrastierender Dichte den mit Quarzsand einer vorgegebenen stochastischen Verteilung der Permeabilitäten gepackten Tank und die stationäre räumliche Konzentrationsausbreitung der sich ausbreitenden Salzwasserfahne wurde anhand der Leitfähigkeit gemessen. Parallel dazu wurde mit dem Finite-Elemente-Programm SUTRA ein numerisches Modell aufgestellt. Mit dem verifizierten und kalibrierten numerischen Modell wurden Sensitivitätsanalysen, deterministische Prognosen für mögliche Transportszenarien sowie stochastische Monte-Carlo-Simulationen durchgeführt. Die experimentellen und numerischen Ergebnisse wurden miteinander verglichen und damit existierende analytische Modellansätze verifiziert.

Zusammenfassend lassen sich aus den experimentellen und numerischen Untersuchungen folgende Aussagen für die Strömungs- und Transport-prozesse in einem stabil geschichtetem Fluid machen:

[1] Aus dem von *Welty et al.* [2003] mittels Störungstheorie entwickelten dichteabhängigen Makrodispersionstensor konnte die stochastische Formel für die transversale Makrodispersion entwickelt werden. Es zeigte sich, dass die transversale Makrodispersivität proportional zur Varianz, Korrelation und Anisotropie der lognormalen Permeabilitätsverteilung des Untergrundes ist.

[2] Die Höhe des Fahnenschwerpunktes sinkt mit steigender Konzentrationsdifferenz  $dc$ , sinkender Strömungsgeschwindigkeit  $u$  und steigendem Nichtähnlichkeitsfaktor  $\zeta$ . Die Varianz  $\sigma^2$  der räumlichen Konzentrationsausbreitung nähert sich mit steigendem Abstand  $x$  von der Einströmkante wellenförmig einem effektiven Wert an, aus der die effektiven Makrodispersion berechnet werden kann. Innerhalb des Tankes konnte dabei für keinen Versuch ein asymptotischer schwankungsfreier Zustand festgestellt werden. Die Transportprozesse in dem untersuchten Modell befanden sich noch nicht im ergodischen Zustand. Die Schwankungen der räumlichen Varianzen stiegen dabei mit sinkendem Konzentrationsgradienten  $dc/dx$ , sinkender Strömungsgeschwindigkeit  $u$  sowie steigender Varianz  $\sigma^2$  und Korrelation  $\lambda$ . Die Wellenlänge  $\lambda$  dieser Schwankungen steigt mit zunehmender Heterogenität, ist jedoch unabhängig vom Konzentrations- bzw. Dichtegradienten.

[3] Im homogenen als auch im heterogenen porösen Medium sinkt die effektive transversale Makrodispersionslänge  $A_T$  mit zunehmender Strömungsgeschwindigkeit  $u$  exponential ab und nähert sich einem geschwindigkeitsunabhängigen effektiven Wert an, der nur noch von der Dichte und der Heterogenität (Varianz der lognormalen Permeabilitätsverteilung sowie Korrelationslängen in  $x$ - und  $y$ -Richtungen) bestimmt wird. Diese Verminderung von  $A_T$  entspricht dem abnehmenden Anteil der Diffusion an der Gesamtdispersivität.

[4] Die transversale Makrodispersivität  $A_T$  steigt umgekehrt proportional zur Dichte- bzw. Konzentrationsdifferenz, jedoch proportional zur Varianz und Korrelation der Permeabilitätsverteilung. Bei einer Konzentrationsdifferenz von  $c = 100000$  ppm wird das Transportgeschehen einzig durch die Dichte bestimmt. Die Heterogenität des Aquifers hat in diesem Fall keinen Einfluss mehr.

[5] Innerhalb der stochastischen Klasse hat die longitudinale im Unterschied zur transversalen Korrelationslänge und der Varianz einen umgekehrt proportionalen Einfluss auf die Makrodispersionslänge: steigt die Korrelation in horizontaler bzw. in der

Hauptströmungsrichtung an, führt das zu einem Absinken der transversalen Makrodispersion  $A_T$ .

[6] Bei großen molekularen Pecletzahlen  $Pe = D_T/D_0$  ist die Diffusion, bei großer Heterogenität des porösen Mediums die korngerüstbedingte Dispersion vernachlässigbar. Sind Heterogenität und Pecletzahl jedoch gering – wie zum Teil in dieser vorliegenden Arbeit – muss jedoch die Diffusion sowie die korngerüstbedingte Dispersion für die Berechnung berücksichtigt werden.

[7] Sensitivitätsanalysen zeigen, wie stark die Variation einzelner Größen das Fließ- und Transportverhalten im Untergrund beeinflussen kann. In einem homogenen porösen Medium beeinflusst die Druckverteilung und damit die Strömungsgeschwindigkeit sowie die Richtung der Grundwasserströmung die räumliche Ausbreitung der Konzentration am stärksten. Eine weitere sensitive Größe ist die Konzentration des Fluids, wohingegen die korngerüstbedingte Dispersivitäten eine nur geringe Sensitivität haben. In einem heterogenen Medium wird die Makrodispersion – wie erwartet – am stärksten durch die Art der Verteilung der Permeabilitäten beeinflusst, wobei die Varianz  $\sigma^2$  ihrer lognormalen Verteilung die stärkste Sensitivität aufweist, gefolgt von der transversalen Korrelation  $\lambda_y$  und der longitudinalen Korrelation  $\lambda_x$ . Die Konzentrationsdifferenz hat demgegenüber auf die transversale Makrodispersivität  $A_T$  einen nur geringfügigen Einfluss, die korngerüstbedingte Dispersivitäten sind auf  $A_T$  unsensitiv.

[8] Die Druckverteilung an den Modellrändern ist in diesem Modell eine sehr sensitive Größe. Schon geringfügige Abweichungen der experimentellen gegenüber den theoretisch festgelegten Druckrandbedingungen bewirken große Veränderungen im Strömungs- und Transportverhalten der Systems. Die korrekte Berücksichtigung und Beibehaltung von korrekten Druckrandbedingungen ist damit für eine exakte Simulation realer Vorgänge unumgänglich.

[9] Monte-Carlo-Simulationen vollziehen die stochastischen Prozesse der Störungstheorie mittels zufälliger numerischer Realisationen gleicher statistischer Eigenschaften nach. Es wurden Simulationen mit einer großen Anzahl von zufälligen Modellrealisationen gleicher stochastischer Verteilung der lognormalen Permeabilität (Mittelwert, Varianz, Korrelationslängen) durchgeführt und daraus der jeweilige Erwartungswert und die Varianz der räumliche Konzentrationsverteilung bestimmt. Dabei konnte festgestellt werden, dass die Mittelwerte für eine zweidimensionale dichteunabhängige Simulation für geringe Varianz und Korrelation der Permeabilitätsverteilung bereits nach 50, für *dichteabhängige* bereits nach ca. 20 Realisationen konvergierten, wobei die Anzahl der notwendigen Realisationen mit steigender Varianz und Korrelation des Modells stiegen. Der Erwartungswert der dichteunabhängigen transversalen Makrodispersivität  $E\{A_T\}$  steigt proportional zur Varianz

$\sigma^2$  und transversaler Korrelationslänge  $\lambda_y$ , jedoch sinkender longitudinaler Korrelationslänge  $\lambda_x$  der Durchlässigkeitsverteilung. Für den *dichteabhängigen* Fall steigt der Erwartungswert der transversalen Makrodispersivität  $E\{A_T\}$  umgekehrt proportional zur Konzentration  $c_0$  und proportional zur Korrelation  $\lambda$  und Varianz  $\sigma^2$ .

[10] Sowohl experimentelle als auch numerische Untersuchungen mit der Monte-Carlo-Methode ergaben eine Übereinstimmung mit der aus der Störungstheorie hergeleiteten Formel. Damit bewiesen die Ergebnisse dieser Arbeit für den Fall, dass wie in dieser Arbeit die Strömungsrichtung mit der Richtung der Bettung zusammenfällt, der Eigenwert der Querdispersion von Null verschieden und eine Funktion der stochastischen Eigenschaften des heterogenen porösen Mediums ist. Die stochastische Theorie von *Gelhar and Axness* [1983] konnte verifiziert werden.

[11] Regressionsanalysen mit experimentell und numerisch ermittelten transversalen Makrodispersivitäten  $A_T$  zeigten, dass der Strömungsfaktor  $\gamma_1$  für den Fall vernachlässigbarer Dichtekontraste wie in der Theorie von *Neuman* [1987] für ein zweidimensionales Modell als von der Heterogenität unabhängig gesehen werden kann und einzig durch das Verhältnis der hydraulischen Gradienten wie folgt bedingt ist:  $\gamma_3 = J_3/J_1$ .

[12] Anhand existierender stochastischer und thermodynamischer Ansätze konnte gezeigt werden, dass das Fick'sche Gesetz selbst mit hohen Konzentrationsgradienten weiterhin gültig bleibt und lediglich durch einen zusätzlichen Term im Sinne einer Taylorreihenentwicklung hinsichtlich des Stoffstromes generalisiert werden muss. Die in dieser Arbeit durchgeführten experimentellen Untersuchungen und Monte-Carlo-Simulationen von Transportvorgängen hoher Dichtegradienten haben gezeigt, dass das Fick'sche Gesetz, das den dispersen Stoffstrom eines gelösten Wasserinhaltsstoffes beschreibt, in der bekannten linearen Form für Konzentrationen bis ca.  $c = 100000$  ppm gültig ist. Die Diskrepanzen der numerisch deterministischen von den analytischen Ergebnissen sind auf präasymptotische Prozesse im deterministischen Modell zurückzuführen, die höheren Erwartungswerte der MC-Simulationen durch eine proportional zur Dichte und Heterogenität steigende numerische Dispersion.

## 10.2 Ausblick auf zukünftige Forschungen

Die Erforschung der Dispersionsprozesse ist noch längst nicht abgeschlossen. Innovativ wäre es, einerseits ein allgemeingültiges Modell zu entwickeln, das die Komplexität der Dispersionsprozesse in allen räumlichen und zeitlichen Skalen einschließt und andererseits für die Praxis anwendbare einfache Formeln prognostiziert. Dabei bieten sich weitere experimentelle und numerische Untersuchungen an:

- Möglich und erforderlich sind Experimente mit variablen korngerüstbedingten Dispersivitäten  $a_L$  und  $a_T$  bzw. dem mittleren Korndurchmesser  $d_m$  sowie Versuche an homogenen Medien, um den Dichteinfluss unabhängig von der Heterogenität zu untersuchen. Andererseits sollte damit verifiziert werden, ob die transversale Makrodispersivität nach *Welty et al.* [2003] unabhängig von den korngerüstbedingten Dispersivitäten oder nach *Zhang and Wheatcraft* [1996] von diesen Werten abhängig ist.
- Aus der hohen Drucksensitivität an den Rändern des Modells ergibt sich die Notwendigkeit der kontinuierlichen Aufnahme der Drucksituation mittels Drucksonden, die mit entsprechenden Datenloggern verbunden werden.
- Um das Transportgeschehen lückenlos über den gesamten Tankbereich zu erfassen und damit systematische Fehler zu vermindern, ist es sinnvoll, die räumliche und zeitliche Konzentrationsentwicklung eines Wasserinhaltsstoffes anhand photometrischer, digitaler Verfahren aufzunehmen.

Die hier dokumentierten Experimente liefern eine Verifikationsmöglichkeit, wie sie bisher kaum für die Untersuchung der transversalen Dispersivität in einem heterogenen porösen Medium zur Verfügung stand. Es bleibt jedoch zu prüfen, inwieweit der stochastische Ansatz die realen Prozesse am besten beschreiben kann. Ist doch die Annahme der Stationarität und der räumlichen Periodizität in der stochastischen Theorie eine Begrenzung und nicht immer in natürlichen Vorgängen anzutreffen. Mögliche alternative Beschreibungen wären beispielsweise die fraktale Methode oder die Upscaling-Methode. Umfassende Analysen geologischer Daten hinsichtlich der Permeabilitätsverteilungen sind dazu notwendig.

## LITERATURVERZEICHNIS

- Aris, R., On the dispersion of a solute in a fluid flowing through a tube, *Proc. Roy. Soc. London, Ser. A*, 235, 67-77, 1956.
- Ababou, R., and L. W. Gelhar, Self-similar randomness and spectral conditioning: Analysis of scale effects in subsurface hydrology, in *Dynamics of Fluids in Hierarchical Porous Media*, edited by J. H. Cushman, chap. XIV, pp. 393–428, Academic, San Diego, Calif., 1990.
- Adams, E. E. and L. W. Gelhar, Field Study of Dispersion in a Heterogeneous Aquifer, 2. Spatial Moments Analysis, *Water Resour. Res.*, 28(12), 3293-3307, 1992.
- Ahrens, S., R. Bierbüsse, und R. Przybyla, Planung, Bemessung und Bau eines Modelltanks zur Durchführung von Strömungsversuchen im porösen Medium, Projektarbeit am Fachbereich Bauingenieurwesen, Universität Kassel, 1999.
- Bandemer, H., und A. Bellmann, Statistische Versuchsplanung, Teubner Leipzig, 1988.
- Bayer-Raich, M., J. Jarsjö, R. Liedl, T. Ptak, and G. Teutsch, Average contaminant concentration and mass flow in aquifers from time-dependent pumping well data: Analytical framework, *Water Resour. Res.*, 40, W08303, 2004.
- Bear, J., Dynamics of Fluids in Porous media, Elsevier Sci., New York, 1972.
- Bear, J., *Hydraulics of Groundwater*, McGraw-Hill, New York, p. 569, 1979.
- Bear, J., and Y. Bachmat, A generalized theory of hydrodynamic dispersion in porous media, Symposium of Haifa, March 19-26, 1967, International Association of Scientific Hydrology, Publication No. 72, 7-16, 1967.
- Bear, J., and Y. Bachmat, Introduction to Modeling of Transport Phenomena in Porous Media, *Kluwer Academic Publishers*, Dordrecht, p. 553, 1991.
- Beims, U., Planung, Durchführung und Auswertung von Gütepumpversuchen, *Zeitschrift für angewandte Geologie*, 29(10), 484-492, 1983.
- Bellin, A., P. Saladin and A. Rinaldo, Simulation of Dispersion in Heterogeneous Porous Formations Statistics, First-Order Theories, Convergence of Computations, *Water Resour. Res.*, 28(9), 2211-2227, 1992.
- Boggs, J.M., and E. E. Adams, Field Study of Dispersion in a Heterogeneous Aquifer, 1. Investigation of Adsorption and Sampling Bias, *Water Resour. Res.*, 28(12), 3325-3336, 1992.
- Boggs, J. M., S. C. Young, L. M. Beard, L. W. Gelhar, K. R. Rehfeldt, and E. E. Adams, Field Study of Dispersion in a Heterogeneous Aquifer, 1. Overview and Site Description, *Water Resour. Res.*, 28(12), 3281-3291, 1992.
- Chen, C.-S., Analytical and approximate solutions to radial dispersion from an injection well to a geological unit with simultaneous diffusion into adjacent strata, *Water Resour. Res.*, 21(8), 1069-1076, 1985.
- Cirpka, O. A., and S. Attinger, Effective dispersion in heterogeneous media under random transient flow conditions, *Water Resour. Res.*, 39(9), 1257, 2003.
- Cushman, J. H. and T. R. Ginn, On Dispersion in Fractal Porous Media, *Water Resour. Res.*, 29(10), 3513-3515, 1993.
- Dagan, G., Stochastic Modeling of Groundwater Flow by Unconditional and Conditional Probabilities, 2. The Solute Transport, *Water Resour. Res.*, 18(4), 835-848, 1982.
- Dagan, G., Solute transport in heterogeneous porous formations, *J. Fluid Mech.*, 145, 151-177, 1984.
- Dagan, G., Statistical Theory of Groundwater Flow and Transport: Pore to Laboratory, Laboratory to Formation, and Formation to Regional Scale, *Water Resour. Res.*, 22(9), 120S-134S, 1986.
- Dagan, G., Theory of solute transport by groundwater, *Ann. Rev. Fluid Mech.*, 19, 183-215, 1987.
- Dagan, G., Time-Dependent Macrodispersion for Solute Transport in Anisotropic Heterogeneous Aquifers, *Water Resour. Res.*, 24(9), 1491-1500, 1988.
- Dagan, G., Flow and Transport in Porous Formations; *Springer-Verlag*, Berlin-Heidelberg-New York, 465 S., 1989.
- Dagan, G., Transport in Heterogeneous Porous Formations: Spatial Moments, Ergodicity, and Effective Dispersion, *Water Resour. Res.*, 26(6), 1281-1290, 1990.
- Dagan, G., D. G. Zeitoun, Seawater-freshwater interface in a stratified aquifer of random permeability distribution, *J. Contam. Hydrol.*, 29, 185-203, 1998.

- Dagan, G., and A. Fiori, The influence of pore-scale dispersion on concentration statistical moments in transport through heterogeneous aquifers, *Water Resour. Res.*, 33, 1595–1606, 1997.
- Deng, F.-W., J. H. Cushman, and J. W. Delleur, A fast Fourier transform stochastic analysis of the contaminant transport process, *Water Resour. Res.*, 29, 3241–3247, 1993.
- Deutsch, C., and A. Journel, *GSLIB: Geostatistical Software Library and Users Guide*, Oxford University Press, 1992.
- Drew, D. A., and S. L. Passman, *Theory of Multicomponent Fluids*, Applied mathematical Sciences, 135, Springer, New York, 1999.
- Edwards, D., M. Shapiro, and H. Brenner, Dispersion and reaction in a twodimensional model porous medium, *Phys. Fluids A*, 5, 837–848, 1993.
- Fiori, A., On the influence of local dispersion in solute transport through formations with evolving scales of heterogeneity, *Water Resour. Res.*, 37(2), 235-242, 2001.
- Fiori, A., and G. Dagan, Concentration fluctuations in transport by groundwater: Comparison between theory and field experiments, *Water Resour. Res.*, 35(1), 105-112, 1999.
- Fiori, A., I. Jankovic, and G. Dagan, Flow and transport through two-dimensional isotropic media of binary conductivity distribution. Part 1: Numerical methodology and semi-analytical solutions, *Stoch. Environ. Res. And Risk Ass.*, 17, 370-383, 2003.
- Fiori, A., I. Jankovic, and G. Dagan, Flow and transport in highly heterogeneous formations: 2. Semianalytical results for isotropic media, *Water Resour. Res.*, 39(9), WR001719, 2003.
- Freeze, R. A., A stochastic-conceptual analysis of one-dimensional groundwater flow in nonuniform homogeneous media, *Water Resour. Res.*, 11, 725-741, 1975.
- Freeze, R. A., and J. A. Cherry, *Groundwater*, 604 pp., Prentice-Hall, Englewood Cliffs, N. J., 1979.
- Freyberg, D.L., A Natural Gradient Experiment on Solute Transport in a Sand Aquifer, 2. Spatial Moments and Advection and Dispersion of Nonreactive Tracers, *Water Resour. Res.*, 22(13), 2031-2046, 1986.
- Garabedian, S. P., D. R. LeBlanc, L. W. Gelhar and M. A. Celia, Large-Scale Natural Gradient Tracer Test in Sand and Gravel, Cape Cod, Massachusetts, 2. Analysis of Spatial Moments for a Nonreactive Tracer, *Water Resour. Res.*, 27(5), 911-924, 1991.
- Gelhar, L. W., *Stochastic Subsurface Hydrology*, Prentice-Hall, New Jersey, p. 385, 1993.
- Gelhar, L. W., *Stochastic Subsurface Hydrology, From Theory to Applications*, *Water Resour. Res.*, 22(9), 135S-145S, 1986.
- Gelhar, L. W., and C. L. Axness, Three-Dimensional Stochastic Analysis of Macrodispersion in Aquifers, *Water Resour. Res.*, 19(1), 161-180, 1983.
- Gelhar, L. W., A. L. Gutjahr and R. L. Naff, Stochastic Analysis of Macrodispersion in a Stratified Aquifer, *Water Resour. Res.*, 15(6), 1387-1397, 1979.
- Gelhar, L. W., C. Welty and K. R. Rehfeldt, A Critical Review of Data on Field-Scale Dispersion in Aquifers, *Water Resour. Res.*, 28(7), 1955-1974, 1992.
- Gelhar, L. W., C. Welty and K. R. Rehfeldt, A Critical Review of Data on Field-Scale Dispersion in Aquifers, *Water Resour. Res.*, 28(7), 1955-1974, 1992.
- Graham, W. D., and D. B. McLaughlin, A Stochastic Model of Solute Transport in Groundwater: Application to the Borden, Ontario, Tracer Test, *Water Resour. Res.*, 27(6), 1345-1359, 1991.
- Güven, O., and F. J. Molz, Deterministic and stochastic analyses of dispersion in an unbounded stratified porous medium, *Water Resour. Res.*, 22, 156-164, 1986.
- Hassanizadeh, S. M., Derivation of basic equations of mass transport in porous media, Part 1. Macroscopic balance laws, *Water Resour. Res.*, 9, 196-206, 1986.
- Hassanizadeh, S. M., Derivation of basic equations of mass transport in porous media, Part 2. Generalized Darcy's and Fick's laws, *Water Resour. Res.*, 9, 207-222, 1986.
- Hassanizadeh, S. M. and W. G. Gray, General conservation equations for multi phase systems: 1. Averaging procedure, *Water Resour. Res.*, 2, 131-144, 1979.
- Hassanizadeh, S. M. and W. G. Gray, General conservation equations for multi phase systems: 2. Mass, energy and entropy equations, *Water Resour. Res.*, 2, 191-203, 1979.
- Hassanizadeh, S. M. and W. G. Gray, General conservation equations for multi phase systems: 3. Constitutive theory for porous media, *Water Resour. Res.*, 3, 25-40, 1980.

- Hassanizadeh, S. M. and W. G. Gray, High velocity flow in porous media, *Transport in Porous Media*, 2, 521-531, 1986.
- Hassanizadeh, S. M. and T. Leijnse, On the Modeling of Brine Transport in Porous Media, *Water Resour. Res.*, 24(3), 321-330, 1988.
- Hassanizadeh, S. M. and W. G. Gray, Mechanics and thermodynamics of multiphase flow in porous media including interphase boundaries, *Adv. Water Resour.*, 13(4), 169-186, 1990.
- Hassanizadeh, S. M. and T. Leijnse, A Non-linear theory of high-concentration-gradient dispersion in porous media, *Adv. Water Resour.*, 18, 203-215, 1995.
- Hayworth, J. S., O. Güven, and J. H. Dane, Near-field three-dimensional behaviour of dense aqueous phase contaminant plumes in homogeneous porous media, for submission to *Water Resour. Res.*, department of Civil Engineering, Auburn University, Alabama, 1993.
- Hess, K. M., S. H. Wolf and M. A. Celia, Large-Scale Natural Gradient Tracer Test in Sand and Gravel, Cape Cod, Massachusetts, 3. Hydraulic Conductivity Variability and Calculated Macrodispersivities, *Water Resour. Res.*, 28(8), 2011-2027, 1992.
- Holzbecher, E. O., Modeling Density-Driven Flow in Porous Media. Springer-Verlag, Berlin Heidelberg, p. 286., 1998.
- Holzbecher, E. O., Modellierung dynamischer Prozesse in der Hydrologie. Springer Verlag Berlin Heidelberg, 211 S., 1996.
- Hutchings, W. C., and D. L. Tarbox, A model of seawater intrusion in surficial and confined aquifers of northeast florida, *The Second International Conference on Saltwater Intrusion and Coastal Aquifers - Monitoring, Modeling, and Management*. Mérida, Yucatán, México, March 30 - April 2, 2003
- Istok, J. D., and M. D. Humphrey, Laboratory investigation of buoyancy-induced flow (plume sinking) during two-well tracer tests, *Ground Water*, 33, 597-604.
- Jaekel, U., and H. Vereecken, Renormalization group analysis of macrodispersion in a directed random flow, *Water Resour. Res.*, 33, 2287-2299, 1997.
- Jensen, K. H., K. Bitsch and P. L. Bjerg, Large-Scale Dispersion Experiments in a Sandy Aquifer in Denmark: Observed Tracer Movements and Numerical Analyses, *Water Resour. Res.*, 29(3), 673-696, 1993.
- Jiao, C., Miscible Displacements in Porous Media with Variation of Fluid Density and Viskosity, Dissertation, Universität Karlsruhe, 180 S., 2001.
- Jobson, estimation of dispersion and first-order rate coefficients by numerical routing, *Water Resour. Res.*, 23(1), 169-180, 1987.
- Johannsen, K., R. Held, W. Kinzelbach, and S. Oswald, Numerical simulation of three-dimensional saltwater-freshwater fingering instabilities observed in a porous medium, submitted to: *Advances in Water Resources*, 2004.
- Josselin de Jong, G. de, Longitudinal and transverse diffusion in granular deposits, *Trans. Am. Geophys. Union*, 39, 67-74, 1958.
- Jung, M., and U. Langer, Methode der finiten Elemente für Ingenieure, Eine Einführung in die numerischen Grundlagen und Computersimulation, B.G. Teubner Stuttgart Leipzig Wiesbaden, 378 S., 2001.
- Kabala, Z. J., and G. Sposito, A stochastic model of reactive solute transport with time-varying velocity in a heterogeneous aquifer, *Water Resour. Res.*, 27, 341- 350, 1991.
- Kemblowski, M. W., and C.-M. Chang, Infiltration in soils with fractal permeability distribution, *Ground Water*, 1993.
- Kemblowski, M. W., and J.-C. Wen, Contaminant Spreading in Stratified Soils With Fractal Permeability Distribution, *Water Resour. Res.*, 29(2), 419-425, 1993.
- Kinzelbach, W., Numerische Methoden zur Modellierung des Transports von Schadstoffen im Grundwasser, R. Oldenburg Verlag München Wien, 317 S., 1992.
- Koch, M., Aspects of the modeling of groundwater flow, Supercomputer Computations Research Institute and Department of Geology, Florida State University, Tallahassee, 1989.
- Koch, M. and G. Zhang, Numerical simulations of groundwater flow and solute transport by means of the SUTRA-model, Technical Report for the Florida Department of Environmental Protection, Tallahassee, Florida, pp.115, 1990.
- Koch, M., Numerical simulation of finger instabilities in density and viscosity dependent miscible solute transport, In: *Computational Methods in Water Resources IX*, T.F. Russel, et al. (eds), 155--162, Comput. Mech. Public. Southampton, UK., 1992.

- Koch, M., The dynamics of density driven finger instabilities in stochastically heterogeneous porous media, In: Computational Methods in Water Resources X, A. Peters et al. (eds.), Vol. 1, pp. 481 - 488, Kluwer Academic Publishers, Dordrecht, 1994.
- Koch, M., and B. Starke, Experimental and numerical investigation of macrodispersion of density-dependent flow and transport in stochastically heterogeneous media, In: Proceedings of International Groundwater Symposium 2002, Lawrence Berkeley National Laboratory, Berkeley, CA, March 25-28, 2002.
- Koch, M., and B. Starke, Experimental and numerical investigation of macrodispersion of density-dependent flow and transport in stochastically heterogeneous media: Effects of boundary conditions and at high concentration, In: Proceedings of Second International Conference on Saltwater Intrusion and Coastal Aquifers, Mérida, Yucatán, México, March 30 - April, 2, 2003.
- Sun, H. and M. Koch, Fractal calculation of surface area of porous media, *Stochastic Hydrology and Hydraulics*, 12, pp. 83-96, 1998.
- Koch, M., and G. Zhang, Numerical simulation of the effects of variable density in a contaminant plume, *Groundwater*, 5, 731-742, 1992.
- Koch, M., A finite element technique for modeling contaminant transport in an unconfined aquifer: Application to aquifer remediation, *Technical Report for the Florida Department of Environmental Protection*, Tallahassee, Florida, 1992.
- Koch, M., Modeling the dynamics of finger instabilities in porous media: Evidence for fractal and nonlinear system behavior, In: Advances in Hydrosience & Engineering, Vol. I, Part B, Wang, Sam S.Y. (ed.), pp. 1763 - 1774, The University of Mississippi, Oxford, MS, 1993.
- Koch, M. and G. Zhang, Forward and inverse modeling of the advection diffusion equation in the presence of sharp fronts, In: *Computational Issues in Geoscience*, Fitzgibbon, W.E. and M.F. Wheeler (eds.), Society for Industrial and Applied Mathematics (SIAM), Philadelphia, PA, 154 - 184, 1992.
- Koch, M., and G. Zhang, G., Numerical modelling and management of saltwater seepage from coastal brackish canals in southeast Florida, In: Environmental Coastal Regions, C.A. Brebbia, (ed.), pp. 395-404, WIT Press, Southampton, 1998.
- Kretz, V., P. Berest, J. P. Hulin and D. Salin, An experimental study of the effects of density and viscosity contrasts on macrodispersion in porous media, *Water Resour. Res.*, 39(2), 1032, 2003.
- Landmann, A. J., High-Concentration-Gradient Dispersion in Heterogeneous Porous Media, in Ingham D.G. (ed), Current Issues on Heat and Mass Transfer in Porous Media, Proc. NATO- ASI, Ovidius Univ. Press., Neptun- Olimp, Romania, 2003.
- Landmann, A. J., Towards a physically based Theory of High-Concentration-Gradient Dispersion in Porous Media Heterogeneous porous media, in Ingham D.G. (ed), Current Issues on Heat and Mass Transfer in Porous Media, Proc. NATO- ASI, Ovidius Univ. Press., Neptun- Olimp, Romania, 2003.
- LeBlanc, D. R. et al., Large-Scale Natural Gradient Tracer Test in Sand and Gravel, Cape Cod, Massachusetts, 1. Experimental Design and Observed Tracer Movement, *Water Resour. Res.*, 27(5), 895-910, 1991.
- Luckner, L., Maßstabsprobleme der hydrodynamischen Dispersion, Abstracts, 27, Internationaler Geologenkongress Moskau, Verlag Nauka, Moskau, 456-457, 1984.
- Mackay, D. M., G. Bianchi-Mosquera, A. A. Kopania, H. Kianjah, and K. W. Thorbjarnarson, A forced-gradient experiment on solute transport in the Borden aquifer 1. Experimental methods and moment analyses of results, *Water Resour. Res.*, 30(2), 369-383, 1994.
- Mantoglou and J. L. Wilson, The turning bands method for simulation of random fields using line generation by a spectral method, *Water Resour. Res.* 18, 1379-1394, 1982.
- Mercado, A., The spreading of injected water in a permeability stratified aquifer, *Symposium of Haifa, Artificial Recharge and Management of Aquifers*, IASH Pub. 72, 23-36, 1967.
- Marsily, G. de, Quantitative Hydrogeology; Academic Press, San Diego, p. 440, 1987.
- Matheron, G. and G. de Marsily, Is Transport in Porous Media Always Diffusive? A Counterexample, *Water Resour. Res.*, 16(5), 901-917, 1980.
- Minkowyz, W. J., P. Cheng, and R. N. Hirschberg, Non-similar boundary-layer analysis of mixed convection about a horizontal heated surface in a fluid-saturated porous medium, *Int. Comm. Heat Mass Transfer*, 11, 127-141.
- Moser, H., Einfluß der Salzkonzentration auf die hydrodynamische Dispersion im porösen Medium. Mitteilungen des Institutes für Wasserbau u. Wasserwirtschaft, TU Berlin, -II, 95 S., 1987.
- Naff, R. L., D. F. Haley and E. A. Sudicky, High-resolution Monte Carlo simulation of flow and conservative transport in heterogeneous porous media, 1. Methodology and flow results, *Water Resour. Res.*, 34(4), 663-677, 1998.

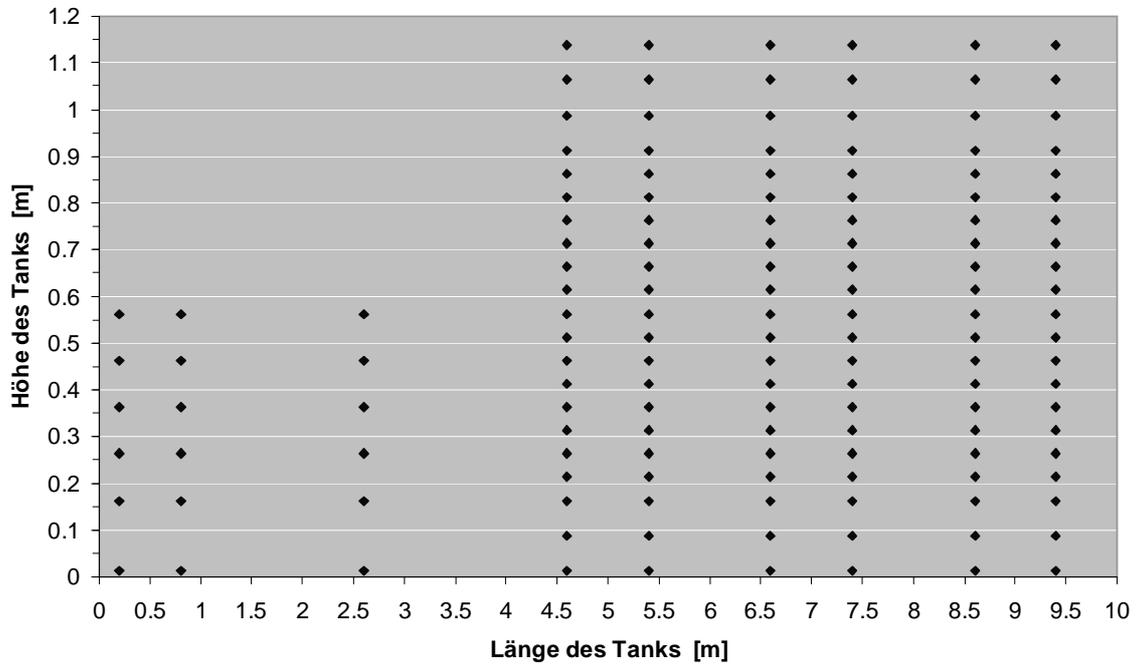
- Naff, R. L., D. F. Haley and E. A. Sudicky, High-resolution Monte Carlo simulation of flow and conservative transport in heterogeneous porous media, 1. Transport results, *Water Resour. Res.*, 34(4), 679-697, 1998.
- Narayan, K. A., C. Schleeberger, p. B. Charlesworth, and K. L. Bristow, Effects of Groundwater Pumping on Saltwater Intrusion in the Lower Burdekin Delta, North Queensland. In Post, D. A. (ed.) *MODSIM 2003 International Congress on Modelling and Simulation*. Volume 2, pp 212-217. Modelling and Simulation Society of Australia and New Zealand, 2003.
- Neuman, S. P., Eulerian-Lagrangian theory of transport in space-time nonstationary velocity fields: Exact nonlocal formalism by conditional moments and weak approximation, *Water Resour. Res.*, 29, 633-645, 1993.
- Neuman, S. P., C. L. Winter, and C. M. Newman, Stochastic theory of field-scale Fickian dispersion in anisotropic porous media, *Water Resour. Res.*, 23(3), 453-466, 1987.
- Neuman, S. P., On advective transport in fractal permeability and velocity fields, *Water Resour. Res.*, 31(6), 1455-1460, 1995.
- Neuman, S. P., Y.-K. Zhang, A Quasi-Linear Theory of Non-Fickian and Fickian Subsurface Dispersion, 1. Theoretical Analysis With Application to Isotropic Media, *Water Resour. Res.*, 26(5), 887-902, 1990.
- Oostrom, M., J. H. Dane, O. Gueven and J. S. Hayworth, Experimental Investigation of dense Solute Plumes in an Unconfined Aquifer Model, *Water Resour. Res.*, 28(9), 2315-2326, 1992.
- Oostrom, M., J. S. Hayworth, J. H. Dane and O. Gueven, Behavior of Dense Aqueous Phase Leachate Plumes in Homogeneous Porous Media, *Water Resour. Res.*, 28(8), 2123-2134, 1992.
- Opheys, S., Numerische Untersuchungen zur Dispersion in anisotrop heterogenen, porösen Medien. Mitteilungen des Lehrstuhles und Institutes für Wasserbau und Wasserwirtschaft, B 113, TH Aachen, Verlag Mainz, 168 S., 1997.
- Ophori, D. U., The significance of viscosity in density-dependent flow of groundwater, *Journal of Hydrology*, 204, 261-270, 1998.
- Oswald, S., Dichteströmungen in porösen Medien, Dreidimensionale Experimente und Modellierung, Schriftenreihe des Instituts für Hydromechanik und Wasserwirtschaft, Eidgenössische Technische Hochschule Zürich, 2, 1999.
- Payne, D. F., A.M. Provost, C. I. Voss, and J. S. Clarke, Mechanisms of saltwater contamination of ground water in coastal Georgia, U.S.A.: Preliminary results of variable-density transport Modeling, First International Conference on Saltwater Intrusion and Coastal Aquifers—Monitoring, Modeling, and Management. Essaouira, Morocco, 2001.
- Payne, Dorothy F., Provost, Alden M, Voss, Clifford I., Parallel development of modflow and SUTRA models in coastal Georgia, U.S.A.: An approach to study regional groundwater flow and local saltwater intrusion, The Second International Conference on Saltwater Intrusion and Coastal Aquifers Monitoring, Modeling, and Management. Mérida, Yucatán, México, 2003.
- Pfannkuch, O., Contribution a l'étude des déplacements de fluides miscible dans un milieu poreux, *Revue de l'Institute Francais du Petrole*, 18, 215-270.
- Pickens, J. F., and G. E. Grisak, Modeling of scale-dependent dispersion in hydrogeologic systems, *Water Resour. Res.*, 17(6), 1701-1711, 1981.
- Plumb, O. A., and S. Whitaker, Dispersion in Heterogeneous Porous Media, I. Local Volume Averaging and Large Scale Averaging, *Water Resour. Res.*, 24(6), 913-926, 1988.
- Rajaram, H., and L. W. Gelhar, Three-Dimensional Spatial Moments Analysis of Borden Tracer Test, *Water Resour. Res.*, 27(6), 1239-1251, 1991.
- Rajaram, H., and L. W. Gelhar, Plume scale-dependent dispersion in heterogeneous aquifer: 2. Eulerian analysis and three-dimensional aquifers, *Water Resour. Res.*, 29(9), 3261-3276, 1993.
- Rehfeldt, K. R., L. W. Gelhar, J. B. Southard, and A. M. Dasinger, Estimates of macrodispersivity based on analyses of hydraulic conductivity variability at the MADE site, *Rep. EN-6405*, Elec. Power Res. Inst., Palo Alto, Calif., 1989.
- Field Study of Dispersion in a Heterogeneous Aquifer, 3. Geostatistical Analysis of Hydraulic Conductivity, *Water Resour. Res.*, 28(12), 3309-3324, 1992.
- Rehfeldt, K. R., J. M. Boggs and L. W. Gelhar, Field Study of Dispersion in a Heterogeneous Aquifer, 3. Geostatistical Analysis of Hydraulic Conductivity, *Water Resour. Res.*, 28(12), 3309-3324, 1992.

- Rehfeldt, K. R., and L. W. Gelhar, Stochastic Analysis of Dispersion in Unsteady Flow in Heterogeneous Aquifers, *Water Resour. Res.*, 28(8), 2085-2099, 1992.
- Rinnert, B., Hydrodynamische Dispersion in porösen Medien: Einfluß von Dichteunterschieden auf die Vertikalvermischung in horizontaler Strömung. Mitteilungen des Instituts für Wasserbau, Heft 52, Universität Stuttgart, 161 S., 1983.
- Saffman, P. G., Dispersion due to molecular diffusion and macroscopic mixing in flow through a network of capillaries, *J. Fluid Mech.*, 7, 194-208, 1960.
- Schäfer, W., Modellierung der Grundwasserströmung, Vorlesungsskript, Interdisziplinäres Zentrum für Wissenschaftliches Rechnen, Universität Heidelberg, 2004.
- Schäfer, W., Modellierung des Stofftransportes im Grundwasser, Vorlesungsskript, Interdisziplinäres Zentrum für Wissenschaftliches Rechnen, Universität Heidelberg, 2004.
- Schäfer, G., Einfluss von Schichtenstrukturen und lokalen Einlagerungen auf die Längsdispersion in Porengrundwasserleitern, Institut für Wasserbau, Universität Stuttgart, 1990.
- Scheidegger, A. E., Typical solutions of the differential equations of statistical theories of flow through porous media, *Trans. Amer. Geophys. Union*, 39, 929-932, 1958.
- Scheidegger, A. E., *The Physics of Flow Through Porous Media*, Univ. of Toronto Press, Toronto, 1960.
- Scheidegger, A. E., General Theory of dispersion in porous media, *Journal of Geophysical Research*, 66 (10), 3273-3278, 1961.
- Schincariol, R. A., E. E. Herderick, E.E. and F. W. Schwartz, On the application of image analysis to determine concentration distributions in laboratory experiments, *J. Contam. Hydrol.*, 12, 197-215, 1993.
- Schincariol, R. A., and F. W. Schwartz, An Experimental Investigation of Variable Density Flow and Mixing in Homogeneous and Heterogeneous Media, *Water Resour. Res.*, 26(10), 2317-2329, 1990.
- Schincariol, R. A., F. W. Schwartz and C. A. Mendoza, On the generation of Instabilities in Variable Density Flow, *Water Resour. Res.*, 30(4), 913-927, 1994.
- Schincariol, R. A., F. W. Schwartz and C. A. Mendoza, Instabilities in variable density flows: Stability and sensitivity analyses for homogeneous and heterogeneous media, *Water Resour. Res.*, 33(1), 31-41, 1997.
- Smith, L. and F. W. Schwartz, Mass transport, 1, Stochastic analysis of macrodispersion, *Water Resour. Res.* 16, 303-313, 1980.
- Schotting, R. J., H. Moser and S. M. Hassanizadeh, High-concentration-gradient dispersion in porous media: experiments, analysis and approximations, *Advances in Water Resour.*, 22(7), 666-680, 1999.
- Schwarz, H. R., Methode der finiten Elemente, Teubner, Stuttgart, 1991.
- Schwarze, H., U. Jaekel, and H. Vereecken, Estimation of Makrodispersion by Different Approximation Methods for Flow and transport in Randomly Hetrogeneous Media, media, *Transp. Porous Media*, 4, 549-565, 1989.
- Spitz, K., Dispersion in porösen Medien: Einfluß von Inhomogenitäten und Dichteunterschieden. Mitteilungen des Institutes für Wasserbau, Heft 60, Universität Stuttgart, 131 S., 1995.
- Sposito, G., W. A. Jury, and V. K. Gupta, Fundamental Problems in the Stochastic convection-Dispersion Model of solute Transport in Aquifers and Field Soils, *Water Resour. Res.*, 22(1), 77-88, 1986.
- Sposito, G., and D. A. Barry, On the Dagan Model of Solute Transport in Groundwater: Foundational Aspects, *Water Resour. Res.*, 23(10), 1867-1875, 1987.
- Sudicky, E. A., natural gradient experiment on solute transport in a sand aquifer: Spatial variability of hydraulic conductivity and its role in the dispersion process, *Water Resour. Res.*, 22(13), 2069-2082, 1986.
- Sun, N.-Z., *Inverse Problems in Groundwater Modeling*. Springer, Heidelberg, pp364, 1994.
- Sun, H. and M.Koch, Fractal calculation of surface area of porous media , *Stochastic Hydrology and Hydraulics* , 12, pp. 83-96, 1998.
- Taylor, G., Conditions under which dispersion of a solute in a stream of solvent can be used to measure molecular diffusion, *Proc. Roy. Soc. Ser. A* 225, S 473-477.
- Thiele, M., Zur hydrodispersen Vermischung von Süß- und Salzwasser in geschichteten Grundwasserleitern. Reprint P-Mech-01/86, Institut für Mechanik der AdW, Karl-Marx-Stadt, 43 S., 1986.
- Thiele, M., Gravity Affected Lateral Dispersion and Diffusion in a Stationary Horizontal Porous Medium Shear Flow, *Transport in Pourous Media*, 26, Kluwer Academic Publishers, Dordrecht, p. 553, 1997.
- Tompson, A. F. B., T. R. Ababou and L. W. Gelhar, Implementation of the three- dimensional turning bands random field generator, *Water Resour. Res.*, 25, 2227-2243, 1989.

- Tompson, A. F. B., and L. W. Gelhar, numerical simulation of solute transport in three-dimensional, randomly heterogeneous porous media, *Water Resour. Res.*, 26(10), 2541-2562, 1990.
- Ursino, N., T. Gimmi and H. Fühler, Combined effects of heterogeneity, anisotropy, and saturation on steady state flow and transport: A laboratory sand tank experiment, *Water Resour. Res.*, 37(2), 201-208, 2001.
- Voss, A. and M. Koch, Numerical simulations of topography-induced saltwater upconing in the state of Brandenburg, Germany, *Physics and Chemistry of the Earth (B)*, 26, 353-359, 2001.
- Voss, C. I., and W. R. Souza, Variable Density Flow and Solute Transport Simulation of Regional Aquifers Containing a Narrow Freshwater-Saltwater Transition Zone, *Water Resour. Res.*, 23(10), 1851-1866, 1987.
- Voss, C. I., A finite-element simulation model for saturated-unsaturated, fluid-density-dependent ground-water flow with energy transport or chemically-reactive single-species solute transport, *U.S. Geol. Surv. Water Resour. Invest.*, 84-4369, 1984.
- Voss, C. I., and A. M. Provost, Three-Dimensional Simulation of Variable-Density Flow and Seawater Intrusion Using the USGS SUTRA Code and SUTRASuite, First International Conference on Saltwater Intrusion and Coastal Aquifers—Monitoring, Modeling, and Management. Essaouira, Morocco, 2001.
- Voss, C. I., A Model for Saturated-Unsaturated Variable-Density Ground-Water Flow with Solute or Energy Transport, *U.S. Geol. Surv. Water Resour. Invest.*, 02-4231, 2003.
- Waldhoff, A., and T. Wunschik, Durchführung und Auswertung von Strömungsexperimenten saliner Tracer in einem Modelltank zur Bestimmung transversaler Dispersionskoeffizienten in einem stochastischen Modellaquifer, Projektarbeit, Universität Kassel, Fachbereich Bauingenieurwesen, 27 S., 2000.
- Watson, S. J., and D. A. Barry, Numerical Analysis of Stable Brine Displacements for Evaluation of Density-Dependent Flow Theory, *Phys. Chem. Earth.*, 26(4), 325-331, 2001.
- Watson, S. J., D. A. Barry, R. J. Schotting and S. M. Hassanizadeh, Validation of classical density-dependent solute transport theory for stable, high-concentration-gradient brine displacements in coarse and medium sands, *Advances in Water Resour.*, 25, 611-635, 2002.
- Welty, C., L. W. Gelhar and M. A. Celia, Stochastic analysis of the effects of density and viscosity variability on macrodispersion in heterogeneous porous media, Massachusetts Institute of Technology, No. 321, pp. 344, 1989.
- Welty, C., and L. W. Gelhar, Stochastic Analysis of the Effects of Fluid Density and Viskosity Variability on Macrodispersion in Heterogeneous Porous Media, *Water Resour. Res.*, 27(8), 2061-2075, 1991.
- Welty, C., and L. W. Gelhar, Simulation of large-scale transport of variable density and viscosity fluids using a stochastic mean model, *Water Resour. Res.*, 28(3), 815- 827, 1992.
- Welty, C., and T. H. Illangasekare, Establishing a Porous Media Observational Facility at the University of Kassel, Proposal to National Science Foundation, 1997.
- Welty, C., A. C. Kane and L. J. Kauffman, Stochastic analysis of transverse dispersion in density- coupled transport in aquifers, *Water Resour. Res.*, 39(6), 1150, 2003.
- Westbrook, G. K., and P.S. O'Neill, Fluid outflow from the accretionary wedge of the pacific continental margin of Columbia and southern panama modeled from the variation in heat flow, *Geophysical Research Abstracts*, Vol. 5, 09196, 2003.
- Wheatcraft, S. W., and J. H. Cushman, Hierarchical approaches to transport in heterogeneous porous media, U.S. Natl. Rep. Int. Union Geod. Geophys. 1987–1990, Rev. Geophys., 29, 263–269, 1991.
- Wheatcraft, S. W., and S. W. Tyler, An Explanation of Scale-Dependent Dispersivity in Heterogeneous Aquifers Using Concepts of Fractal Geometry, *Water Resour. Res.*, 24(4), 566-578, 1988.
- Whitaker, S., *The Method of Volume averaging*, Kluwer Academic Publishers, Dordrecht, 1999.
- Wood, B. D., A connection between the Lagrangian stochastic-convective and cumulant expansion methods, *Adv. Water Resour.*, 22, 319– 332, 1998.
- Wood, B. D., and M. L. Kavvas, Ensemble-averaged equations for reactive transport in porous media under unsteady flow conditions, *Water Resour. Res.*, 35, 2053– 2068, 1999. (Correction, *Water Resour. Res.*, 35, 2887, 1999.)
- Wood, B. D., F. Cherblanc, M. Quintard, and S. Whitaker, Volume averaging for determining the effective dispersion tensor: Closure using periodic unit cells an comparision with ensemble, *Water Resour. Res.*, 39(8), 1210, 2003.
- Woodbury, A. D., and E. A. Sudicky, The Geostatistical Characteristics of Borden Aquifer, *Water Resour. Res.*, 27(4), 533-546, 1991.

- Woods, J. A., M. D. Teubner, C. T. Simmons and K. A. Narayan, Numerical error in groundwater flow and solute transport simulation, *Water Resour. Res.*, 39(6), 1158, 2003.
- Yeh, W.W.-G., Review of parameter identification procedures in groundwater hydrology: the inverse problem. *Water Resour. Res.*, 22(2), 95–108, 1986.
- Zang, Y.-K., and B.-M. Seo, Stochastic analysis and Monte Carlo simulations of nonergodic solute transport in three-dimensional heterogeneous and statistically anisotropic aquifers, *Water Resour. Res.*, 40(5), W05103, 2004.
- Zhan, H., and S. W. Wheatcraft, Macrodispersivity tensor for nonreactive solute transport in isotropic and anisotropic fractal porous media: Analytical solution, *Water Resour. Res.*, 32(12), 3461-3474, 1996.
- Zhang, D., *Stochastic Methods for Flow in Porous Media*, Academic Press San Diego, 350 S, 2002.
- Zhang, Y.-K., and S. P. Neuman, A Quasi-Linear Theory of Non-Fickian Subsurface Dispersion, 2. Application to Anisotropic Media and the Borden Site, *Water Resour. Res.*, 26(5), 903-913, 1990.
- Zhang, D., and S. P. Neuman, Eulerian-Lagrangian analysis of transport conditioned on hydraulic data, 1, Analytical-numerical approach, *Water Resour. Res.*, 31(1), 39–51, 1995a.
- Zhang, D., and S. P. Neuman, Eulerian-Lagrangian analysis of transport conditioned on hydraulic data, 2, Effects of log transmissivity and hydraulic head measurements, *Water Resour. Res.*, 31(1), 53–63, 1995b.
- Zhang, D., and S. P. Neuman, Eulerian-Lagrangian analysis of transport conditioned on hydraulic data, 3, Spatial moments, travel time distribution, mass flow rate, and cumulative release across a compliance surface, *Water Resour. Res.*, 31(1), 65–75, 1995c.
- Zhang, D., and S. P. Neuman, Eulerian-Lagrangian analysis of transport conditioned on hydraulic data, 4, Uncertain initial plume state and non-Gaussian velocity, *Water Resour. Res.*, 31(1), 77–88, 1995d.
- Zhang, D., and S. P. Neuman, Effect of local dispersion on solute transport in randomly heterogeneous media, *Water Resour. Res.*, 32(9), 2715-2723, 1996.

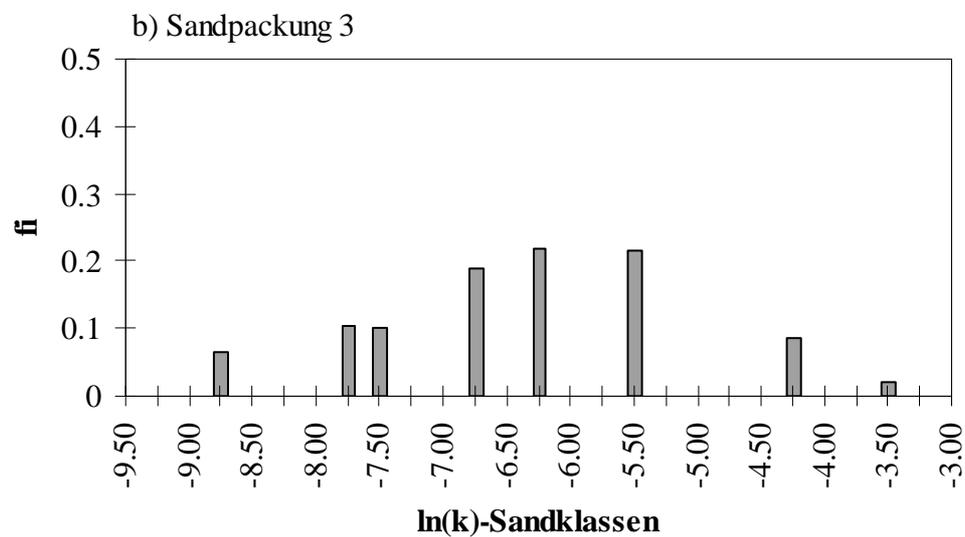
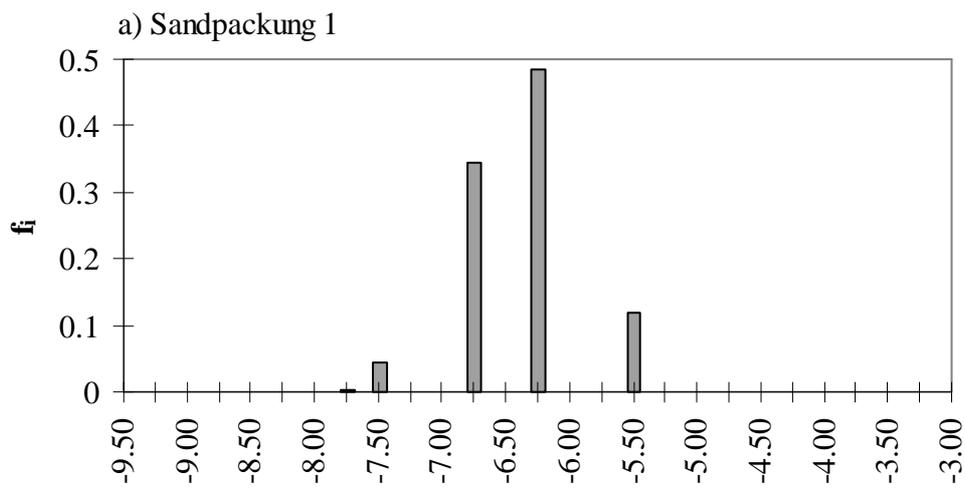
# ANLAGEN



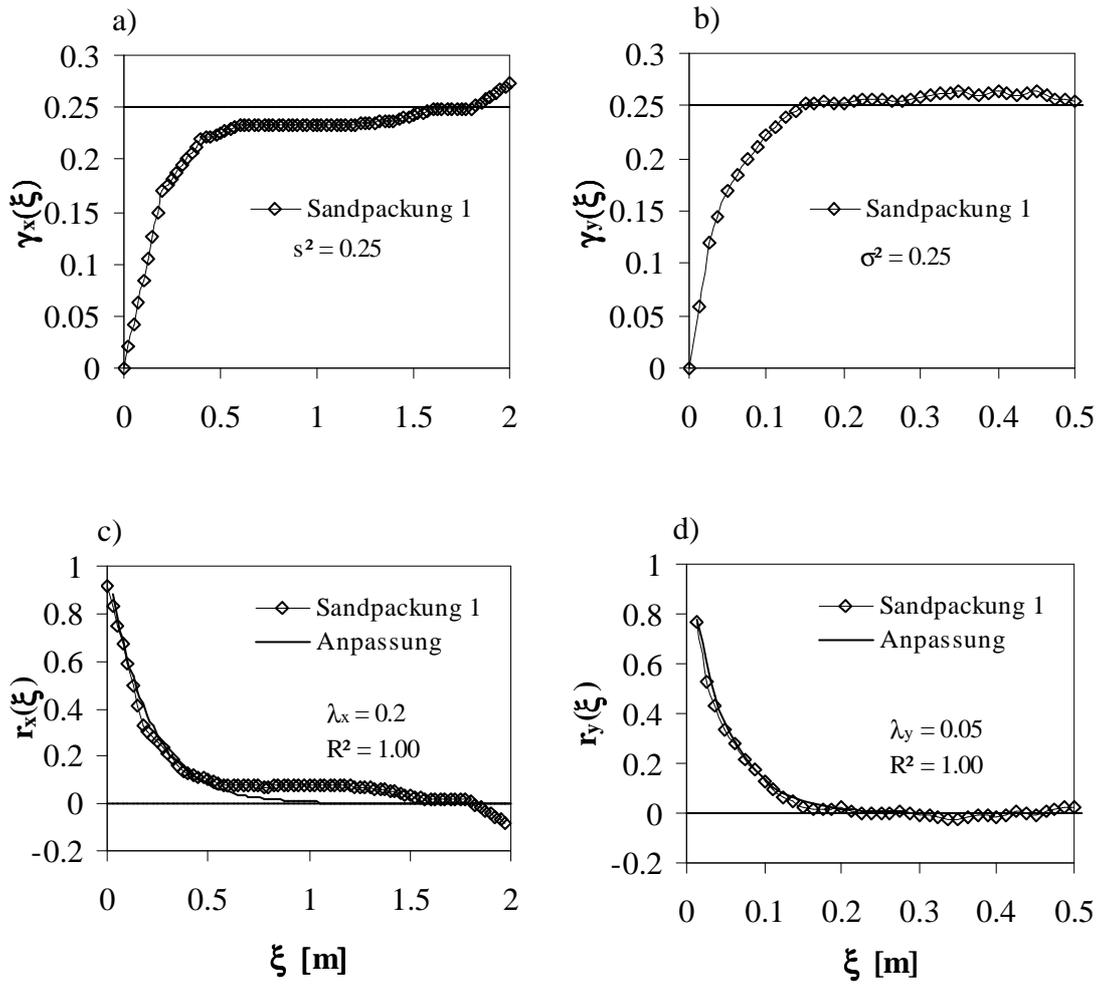
**Anlage 1:** Lage der Messpunkte im Koordinatennetz des Versuchstanks.

Messebene 1;4;13 y [m]	Messebene 23 bis 47 y [m]	Messebene	x [m]
0.4875	1.0875	4	0.8
0.3875	1.0125	13	2.6
0.2875	0.9375	23	4.5
0.1875	0.8875	27	5.3
0.0375	0.8375	33	6.5
	0.7875	37	7.4
	0.7375	43	8.5
	0.6875	47	9.3
	0.6375		
	0.5875		
	0.5375		
	0.4875		
	0.4375		
	0.3875		
	0.3375		
	0.2875		
	0.2375		
	0.1875		
	0.1125		
	0.0375		

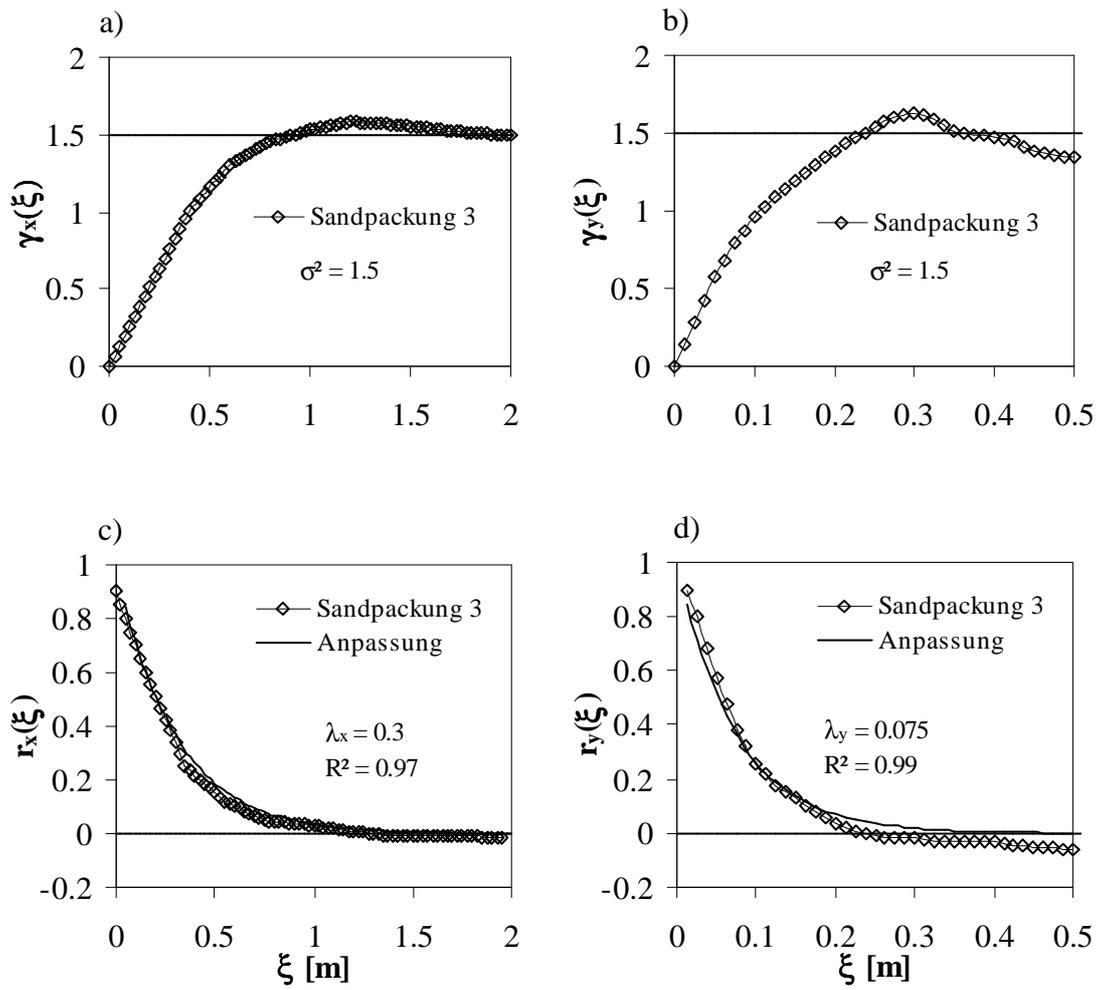
**Anlage 2:** Koordinaten x und y aller Messpunkte in m.



**Anlage 3:** Histogramme der ausgewählten Sandpackungen 1 bis 3.

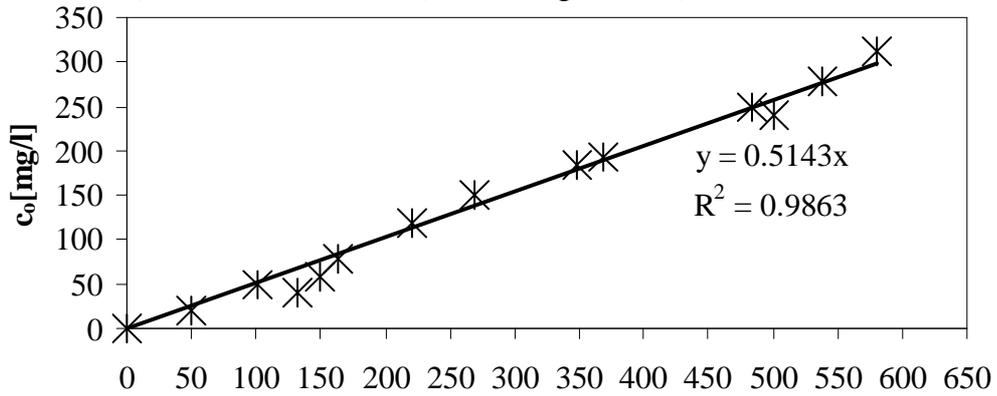


**Anlage 4:** Variogramm  $\gamma(\xi)$  in a) x-Richtung und b) y-Richtung sowie Korrelogramm  $r(\xi)$  in c) x-Richtung und d) y-Richtung für die Sandpackung 1.

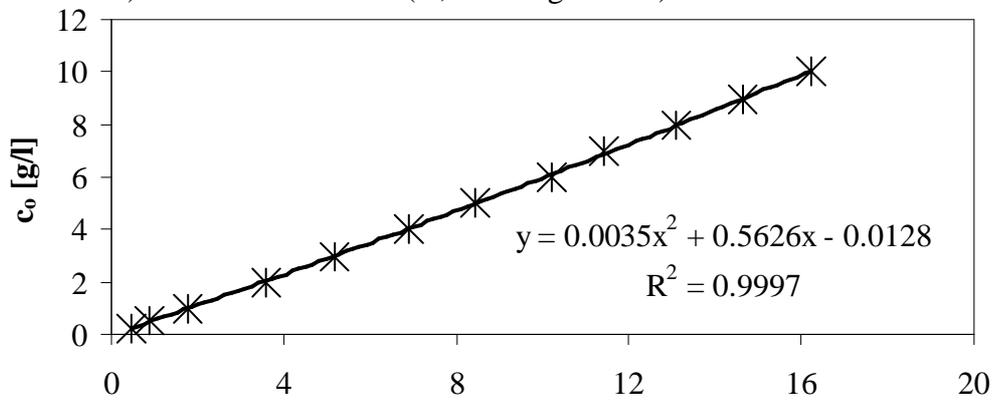


**Anlage 5:** Variogramm  $\gamma(\xi)$  in a) x-Richtung und b) y-Richtung sowie Korrelogramm  $r(\xi)$  in c) x-Richtung und d) y-Richtung für die Sandpackung 3.

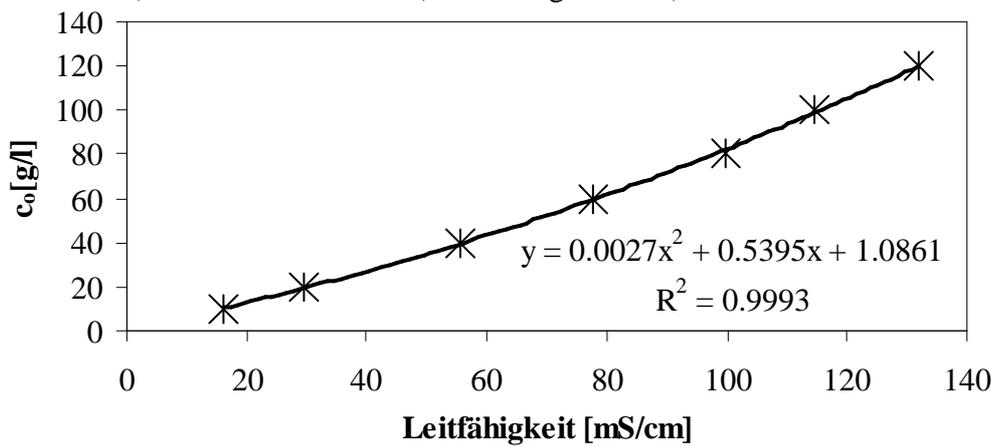
a) Eichkurve: LF 3000 ( 0 - 300 mg/L NaCl)



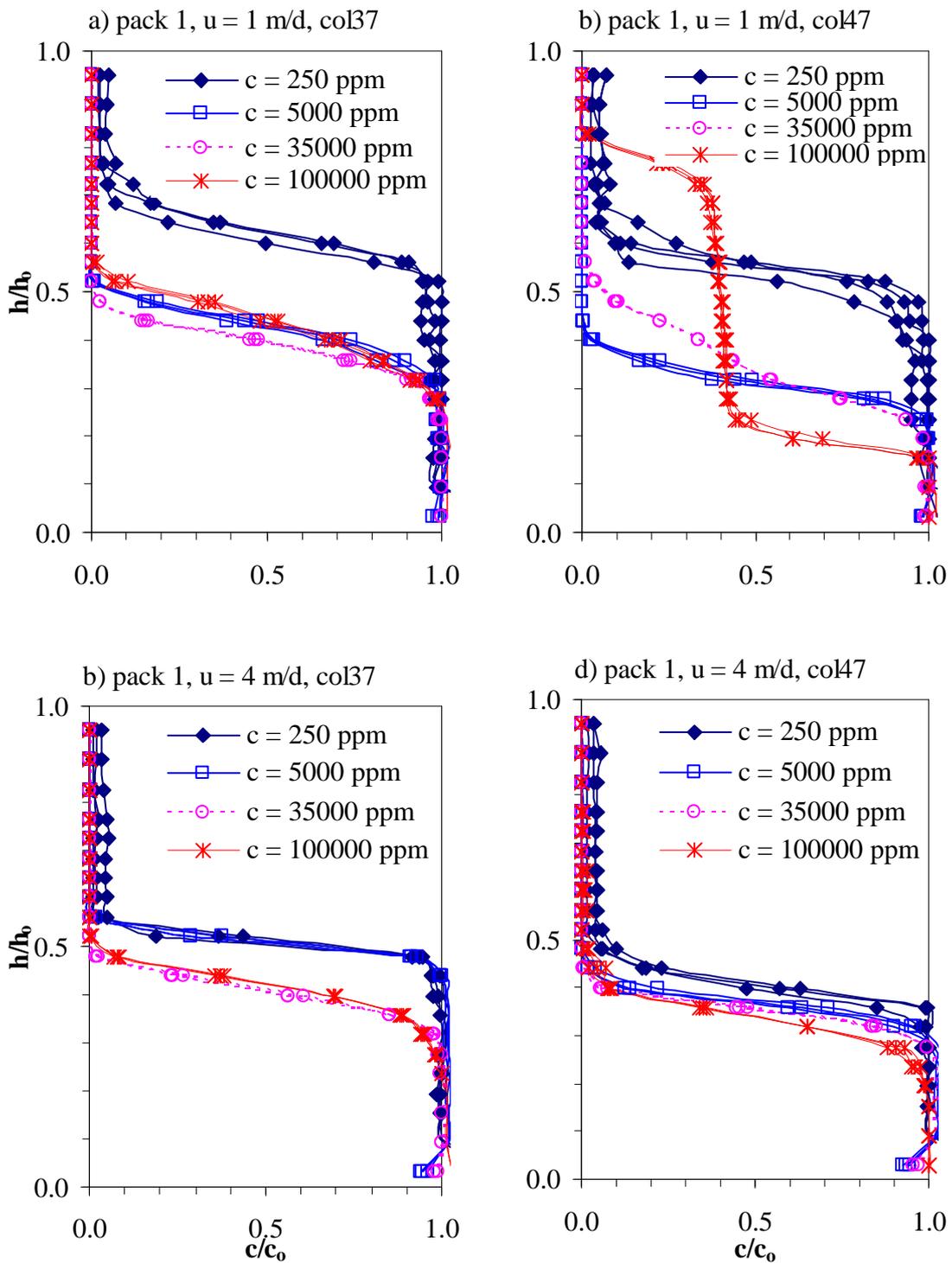
b) Eichkurve: LF 3000 ( 0,25 - 10 g/l NaCl)



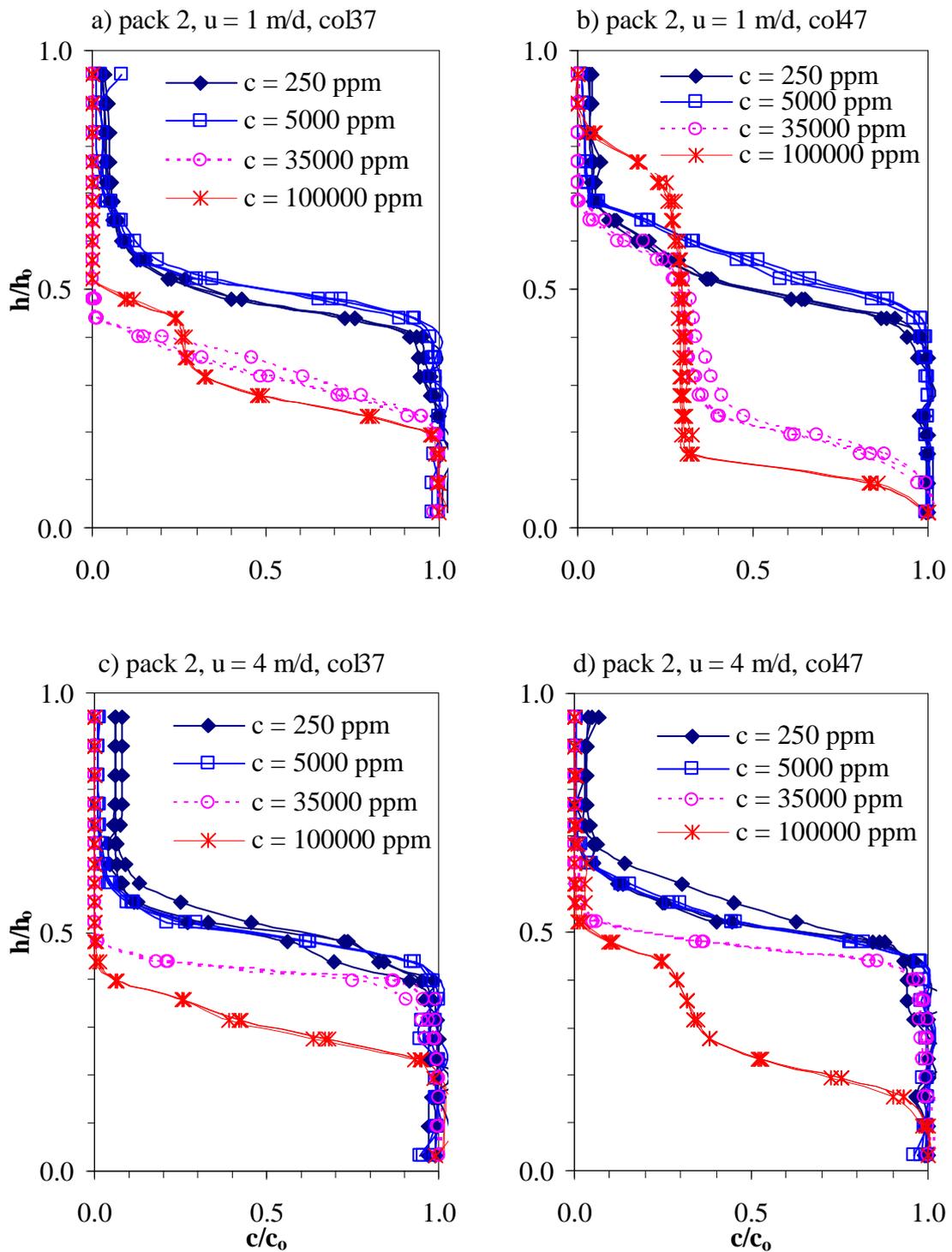
c) Eichkurve: LF 3000 ( 10 - 120 g/L NaCl)



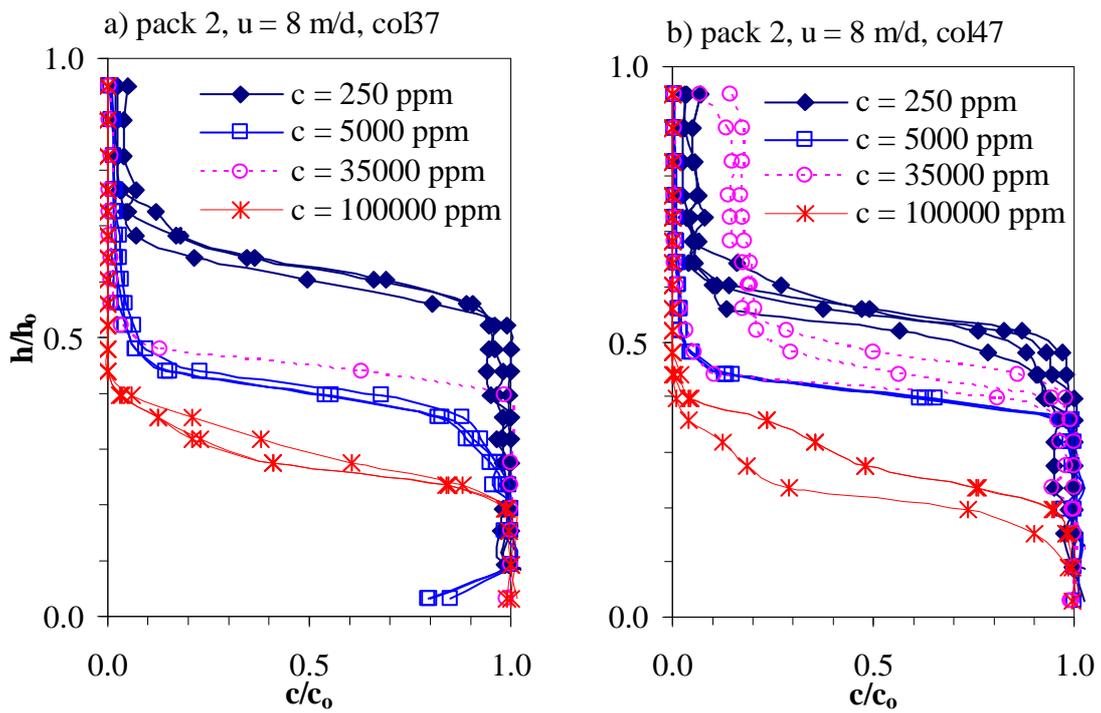
**Anlage 6:** Abhängigkeit der Konzentration  $c_0$  von der Leitfähigkeit für das Leitfähigkeitsmessgerät LF 3000.



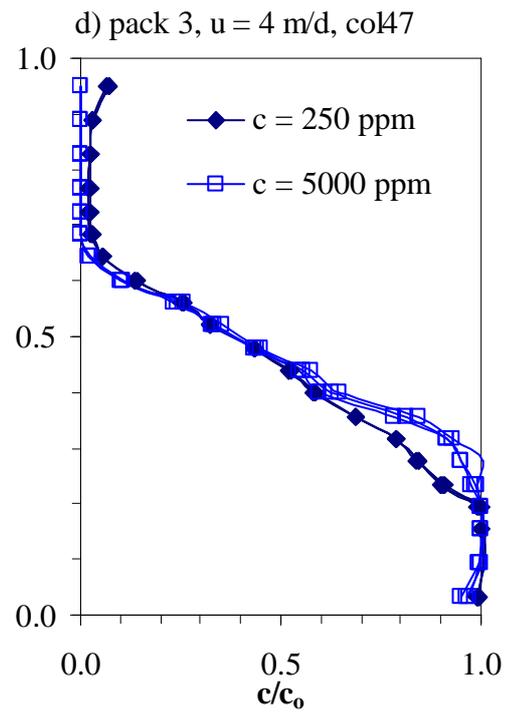
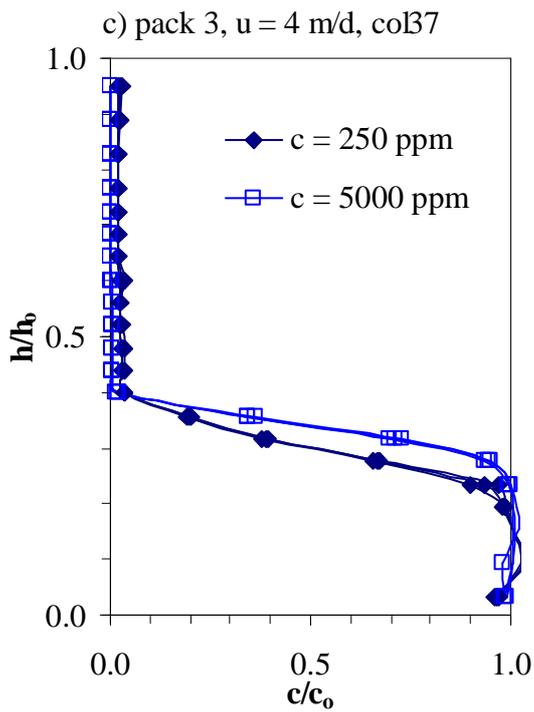
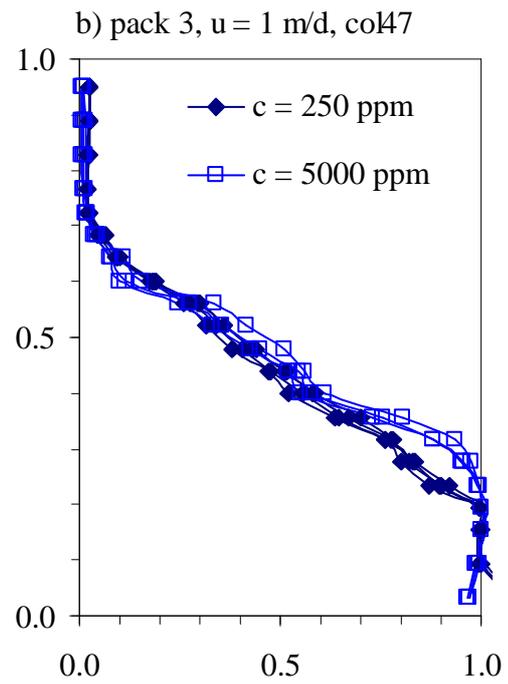
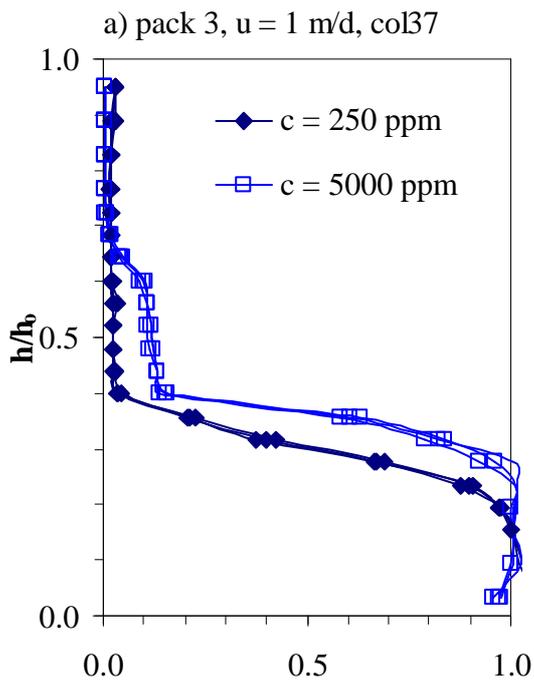
**Anlage 7:** Experimentelle normierte Konzentrationsverteilung  $c/c_0$  über die relative Höhe des Tankes  $h/h_0$  an den Messebenen 37 und 47 für die Sandpackung 1 und a), b)  $u = 1$  m/d und c), d)  $u = 4$  m/d.



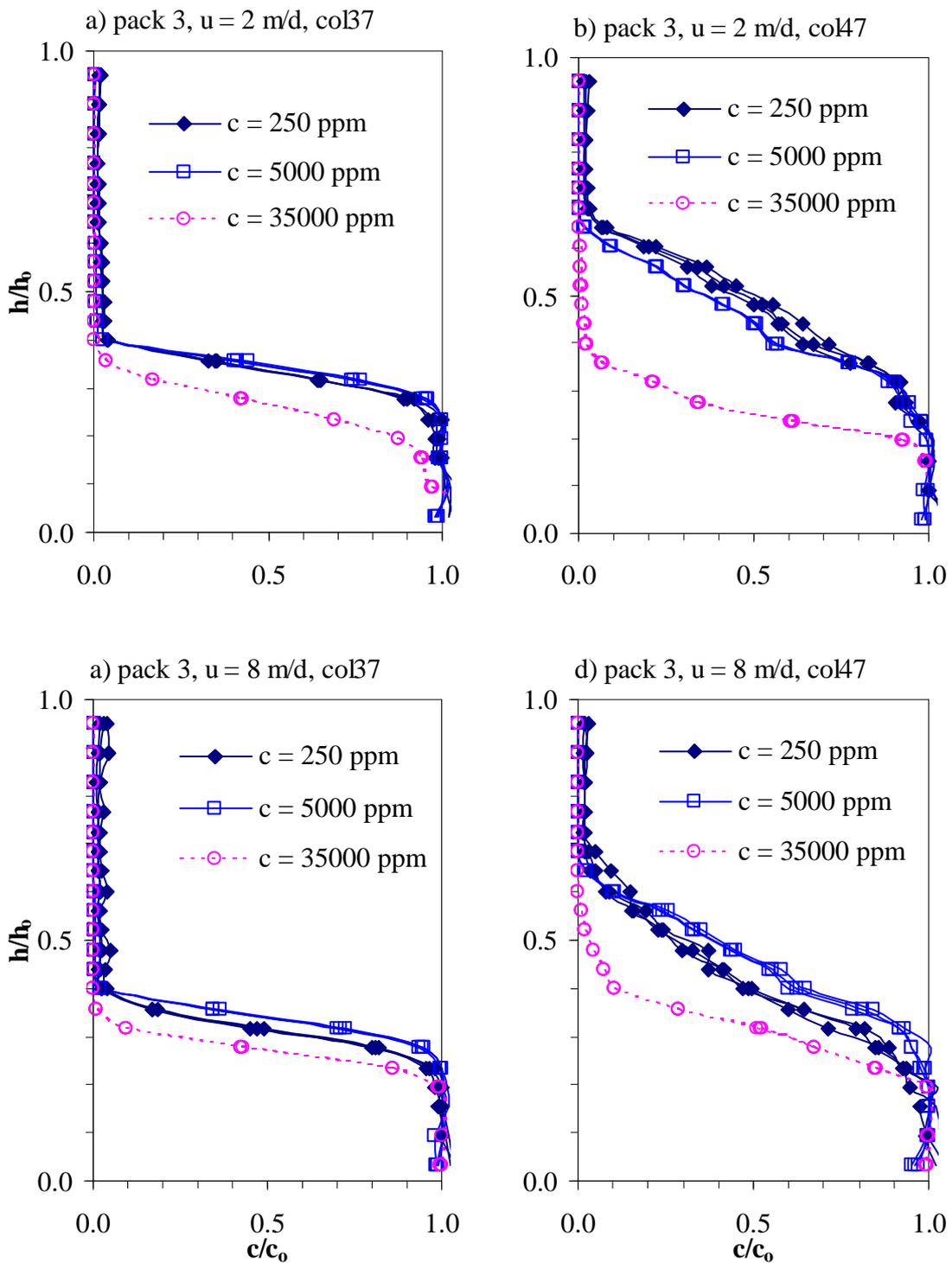
**Anlage 8:** Experimentelle normierte Konzentrationsverteilung  $c/c_0$  über die relative Höhe des Tankes  $h/h_0$  an den Messebenen 37 und 47 für die Sandpackung 2 und a), b)  $u = 1$  m/d und c), d)  $u = 4$  m/d.



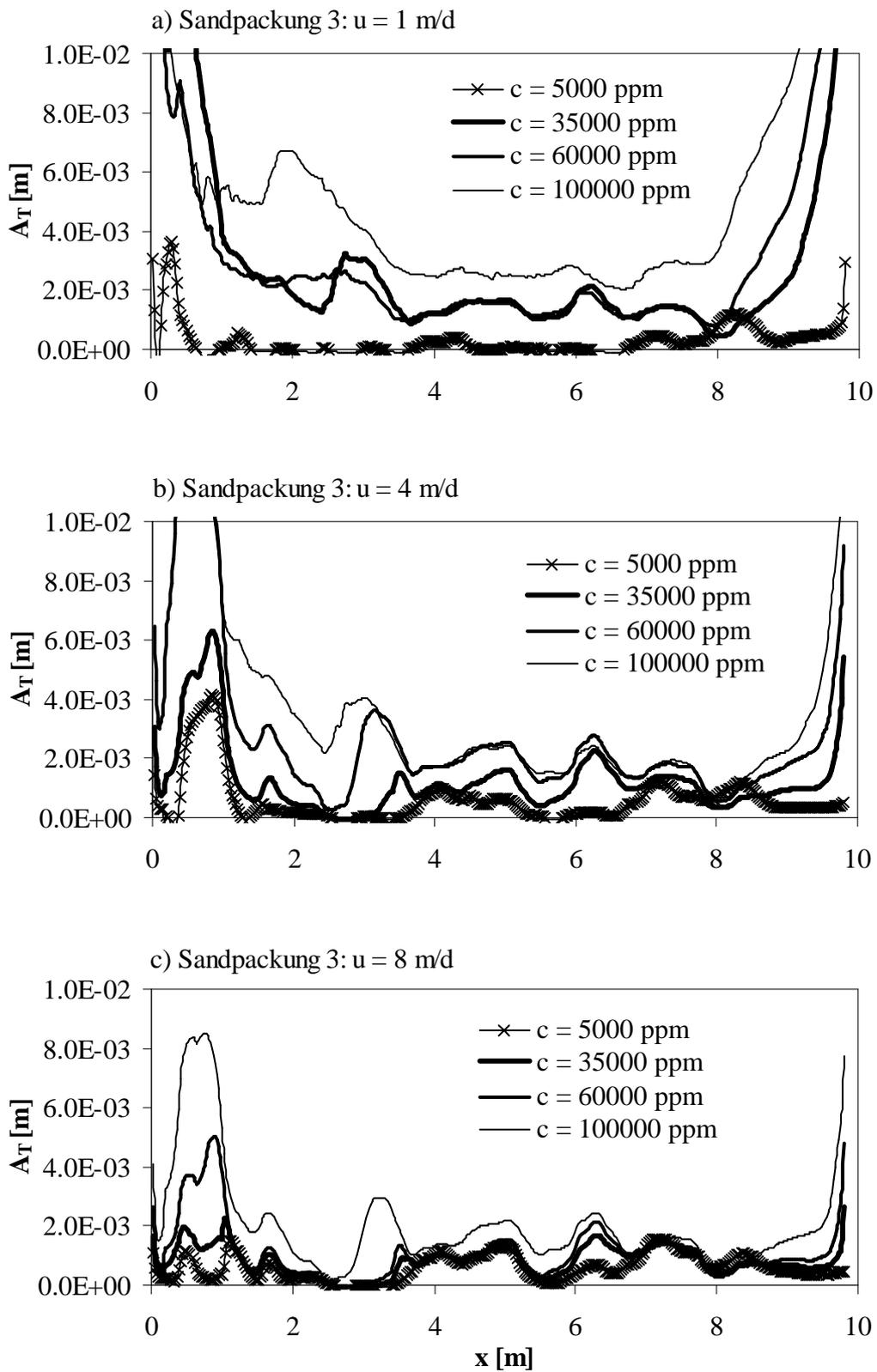
**Anlage 9:** Experimentelle normierte Konzentrationsverteilung  $c/c_0$  über die relative Höhe des Tankes  $h/h_0$  an den Messebenen 37 und 47 für die Sandpackung 2 und a), b)  $u = 8$  m/d.



**Anlage 10:** Experimentelle normierte Konzentrationsverteilung  $c/c_0$  über die relative Höhe des Tanks  $h/h_0$  an den Messebenen 37 und 47 für die Sandpackung 3 und a), b)  $u = 1$  m/d und c), d)  $u = 4$  m/d.



**Anlage 11:** Experimentelle normierte Konzentrationsverteilung  $c/c_0$  über die relative Höhe des Tanks  $h/h_0$  an den Messebenen 37 und 47 für die Sandpackung 3 und a), b)  $u = 2$  m/d und c), d)  $u = 8$  m/d.



**Anlage 12:** SUTRA-simulierte transversale Makrodispersivität in Abhängigkeit von der Fließlänge  $x$  für die Sandpackung 1 und a)  $u = 1$  m/d; b)  $u = 4$  m/d und c)  $u = 8$  m/d. die Sandpackung 1 und a)  $u = 1$  m/d; b)  $u = 4$  m/d und c)  $u = 8$  m/d.

Hiermit versichere ich, dass ich die vorliegende Dissertation selbständig und ohne unerlaubte Hilfe angefertigt und andere als die in der Dissertation angegebenen Hilfsmittel nicht benutzt habe. Alle Stellen, die wörtlich oder sinngemäß aus veröffentlichten und unveröffentlichten Schriften entnommen sind, habe ich als solche kenntlich gemacht. Kein Teil dieser Arbeit ist in einem anderen Promotions- oder Habilitationsverfahren verwendet worden.