Modul 12 Stoffhaushalt und Stofftransport

Teil 2 Advektions-Dispersions-Modell und numerische Behandlung

11. Allgemeine Transportgleichung – Herleitung und Eigenschaften

Prof. Dr. Ralph Watzel

Regierungspräsidium Freiburg
Landesamt für Geologie, Rohstoffe und Bergbau
Albertstraße 5
79104 Freiburg im Breisgau
ralph.watzel@rpf.bwl.de

Numerische Lösungen

Die verwendeten Schemata und Abbildungen folgen im wesentlichen folgenden Lehrbüchern:

KINZELBACH, W. (1992): Numerische Methoden zur Modellierung des Transports von Schadstoffen im Grundwasser, Oldenbourg Verlag, München, 343 S.

KINZELBACH, W. & RAUSCH, R. (1995): Grundwassermodellierung – Eine Einführung mit Übungen, Borntraeger, Berlin, Stuttgart, 283 S.

RAUSCH, R., SCHÄFER, W. & WAGNER, CH. (2002): Einführung in die Transportmodellierung im Grundwasser, Borntraeger, Berlin, Stuttgart, 183 S.

Allgemeine Transportgleichung

Basiert auf dem Kontinuitätsgesetz und den Gleichungen für die Stoff(massen)-Flüsse der einzelnen Transport-phänomene.

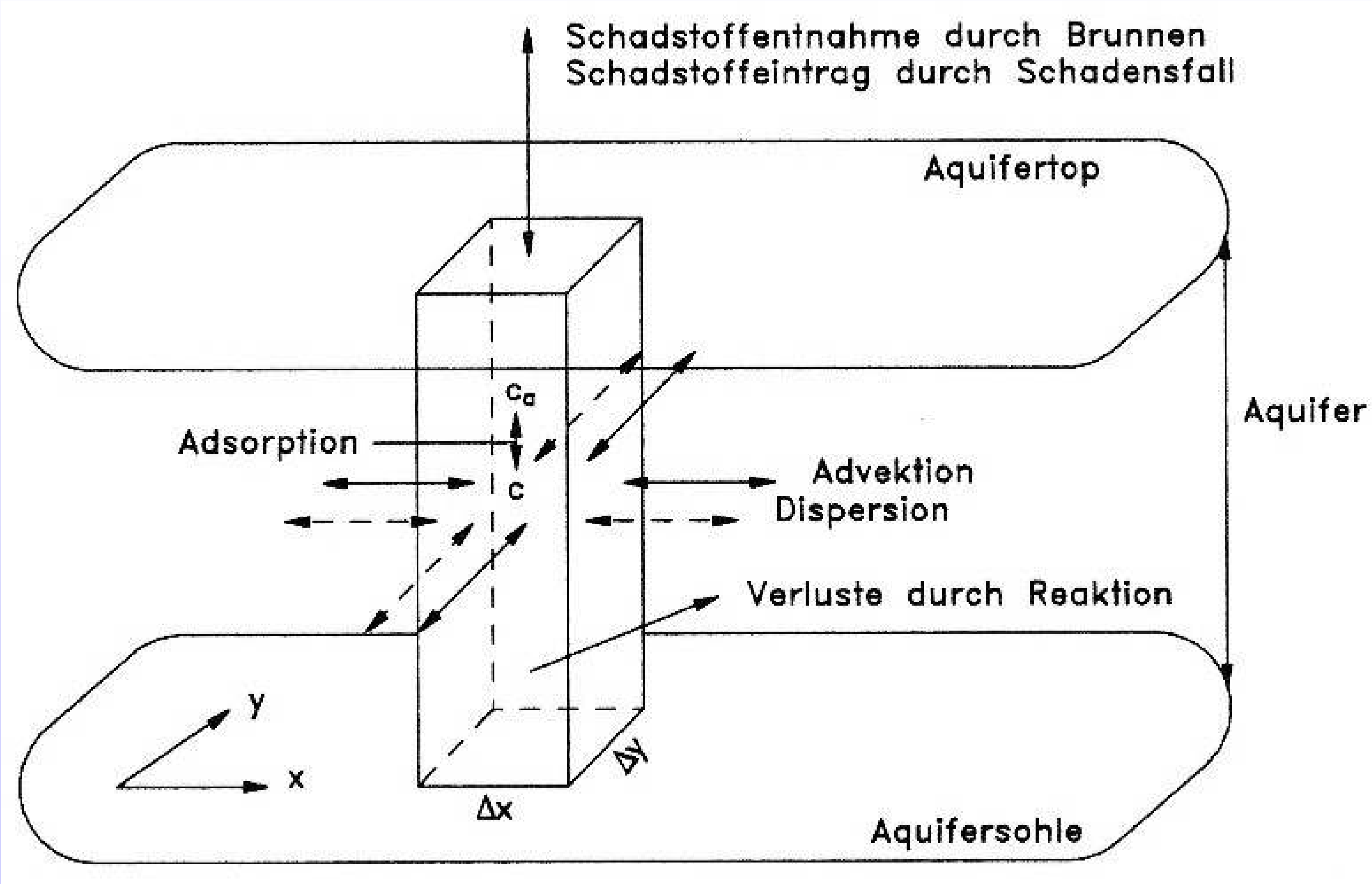
Kontinuitätsgesetz

Advektion	Adsorption
Hydrodynamische Dispersion	Reaktion/Abbau

Die allgemeine Transportgleichung ist eine Bilanz-gleichung für ein betrachtetes Volumen Aquifer.

Allgemeine Transportgleichung

Bilanz der Massenflüsse analog Strömung



Allgemeine Transportgleichung

Bilanz der Massenflüsse analog Strömung

Änderung der gelösten Masse im Kontrollvolumen =

Nettoeintrag durch Advektion

\+ Nettoeintrag durch hydrodynamische Dispersion

\+ Nettoeintrag aus Stoffquellen

\- Nettoaustrag durch Adsorption

\- Verluste durch Abbau (Reaktionen)

Allgemeine Transportgleichung

Bilanz der Massenflüsse analog der Strömung

$$\underbrace{R \cdot \partial c/\partial t}_{\text{Speicherung}} = \underbrace{- \nabla J_{adv}}_{\text{Advektion}} + \underbrace{\nabla J_{diff}}_{\text{Diffusion}} + \underbrace{\nabla J_{disp}}_{\text{Dispersion}} \underbrace{- q}_{\text{Quellen}} + \underbrace{R\lambda c}_{\text{Retardation+Reaktion}}$$

Allgemeine Transportgleichung

Nach einsetzen der einzelnen Terme und unter Annahme zahlreicher Bedingungen:

$$\underbrace{R \cdot \partial c/\partial t}_{\text{Speicherung}} = \underbrace{-v_a \cdot \nabla c}_{\text{Advektion}} + \underbrace{\nabla(D^H \cdot \nabla c)}_{\text{Diffusion+Disperison}} \underbrace{- q}_{\text{Quellen}} \underbrace{- \lambda R c}_{\text{Retardation+Reaktion}}$$

Allgemeine Transportgleichung

$$\underbrace{\frac{\partial}{\partial x_i}\left(D_{ij}\frac{\partial c}{\partial x_j}\right)}_{\text{Dispersion}} - \underbrace{v_i\frac{\partial c}{\partial x_i}}_{\text{Advektion}} - \underbrace{R\lambda c}_{\text{Retardation+Reaktion}} = \underbrace{R\frac{\partial c}{\partial t}}_{\text{Speicherung}}$$

Allgemeine Transportgleichung

Für nicht-reaktive, nicht-adsorbiere, gelöste Stoffe vereinfacht sich die Gleichung zu der allgemeinen Advektions-Dispersions-Gleichung

$$\underbrace{\partial c/\partial t}_{\text{Speicherung}} = \underbrace{-v_a \cdot \nabla c}_{\text{Advektion}} + \underbrace{\nabla(D^H \cdot \nabla c)}_{\text{Diffusion+Disperison}} \underbrace{- q}_{\text{Quellen}}$$

Allgemeine Transportgleichung

Gemischte partielle Differentialgleichung aus Ableitungen 1. Ordnung (hyperbolisch – Lagrange-Verfahren) und Ableitungen 2. Ordnung (parabolisch – Euler-Verfahren)

$$\partial c/\partial t = \underbrace{-v_a \cdot \nabla c}_{\text{1 Ableitung: Advektionsterm}} + \underbrace{\nabla(D^H \cdot \nabla c)}_{\text{2 Ableitungen: Dispersionsterm}} - q$$

Merkmale der Transportgleichung

Der rein dispersive (parabolische) Teil stellt eine sog. Diffusionsgleichung dar. Sie beschreibt Konzentrationsänderungen, die sich von einem Punkt in alle Richtungen ausbreiten.

$$\underbrace{\partial c/\partial t}_{\text{Speicherung}} = \underbrace{\nabla(D^{H} \cdot \nabla c)}_{\text{Diffusion+Disperison}} - \underbrace{q}_{\text{Quellen}}$$

Allgemeine Transportgleichung

Der <u>rein advektive</u> Teil ist eine hyperbolische Gleichung. Sie beschreibt Konzentrationsänderungen, die sich nur entlang charakteristischer Linien ausbreiten.

$$\underbrace{\partial c/\partial t}_{\text{Speicherung}} = \underbrace{- v_a \cdot \nabla c}_{\text{Advektion}} \underbrace{- q}_{\text{Quellen}}$$

Allgemeine Transportgleichung

Die Schwierigkeit bei der numerischen Lösung der Transport-gleichung liegt darin, ein Verfahren zu finden, das beiden Typen der Differentialgleichung gerecht wird.

PECLET-Zahl ist eine Maßzahl für das Verhältnis von advektivem zu dispersivem Transport.

$$P_e = L \cdot v_a \,/\, D_L$$

Advektion hat die Geschwindigkeit v_a, Dispersion hat die „Geschwindigkeit“ $D \cdot \partial c/\partial x \approx D \cdot \Delta c/L$.

Für Pe = ∞ reine Advektion, für Pe = 0 reine Dispersion.

Analytische Lösungen

Die ein-, zwei- und dreidimensionale Transportgleichung läßt sich bei einfachen Strömungsverhältnissen (Parallelströmung) für kontinuierlichen und für pulsartigen Schadstoffeintrag analytisch lösen.

Sie sind im Rahmen der Gefährdungsabschätzung für die überschlägige Berechnung der Schadstoffausbreitung von Bedeutung. Eventuelle Veränderungen des Strömungsfeldes müssen vernachlässigbar sein.

Analytische Lösungen sind in ihrer Anwendbarkeit stark eingeschränkt. Sie lassen sich im Wesentlichen nur für einige Spezialfälle angeben, insbesondere Anfangskonzentration = 0!

Analytische Lösungen

Pulsartige Injektion, 1D entlang einer Stromlinie:

$$c(x,t) = \frac{M}{2b \cdot m \cdot n \cdot R\sqrt{\pi \cdot D_L t}} \exp(-\frac{(x-u \cdot t)^2}{4D_L \cdot t}$$

permanente Injektion, 1D entlang einer Stromlinie:

$$c(x,t) = \frac{c_0}{2}\left[erfc(\frac{x-u \cdot t}{2\sqrt{D_L t}}) + \exp\left(\frac{u \cdot x}{D_L}\right) erfc\left(\frac{x+u \cdot t}{2\sqrt{D_L t}}\right)\right]$$

Analytische Lösungen

pulsartige Injektion, 2D-horizontal:

$$c(x,y,t)=\frac{\Delta M}{4\,\pi\,b\,n_e\,t\,(D_L\,D_H)^{1/2}}\exp\left(-\frac{(x-v_a\,t)^2}{4\,D_L\,t}-\frac{y^2}{4\,D_H\,t}\right)\exp(-\lambda\,t)$$

permanente Injektion, 2D-horizontal:

$$c(x,y,t)=\frac{E}{4\;b\,n_e\;(\pi\,D_H\;v_a)^{1/2}}\exp\left(-\frac{(x-r\,\gamma)\,v_a}{2\,D_L}\right)\frac{1}{(r\,\gamma)^{1/2}}\,erfc\left(\frac{r-v_a\,t\,\gamma}{2(D_L\,t)^{1/2}}\right)$$

mit:

$$\gamma=\sqrt{1+\frac{4\lambda\,D_L}{v_a^2}}$$

$$r=\sqrt{x^2+\frac{D_L}{D_H}\,y^2}$$

Analytische Lösungen

Vor der Anwendung analytischer Lösungen ist strengstens zu prüfen, für welche Anfangs- und Randbedigungen die Lösung entwickelt wurde und ob diese im konkreten Anwendungsfall tatsächlich gegeben sind!

- Dimension des Problems
- hydrauliche Randbedingungen und Aquifereigenschaften, Aquifergeometrien
- Konzentrationssituation in Quelle und Aquifer

Für beliebige Anfangs- und Randbedingungen sowie für heterogene und anisotrope Strömungsfelder muss die Transportgleichung numerisch gelöst werden.