

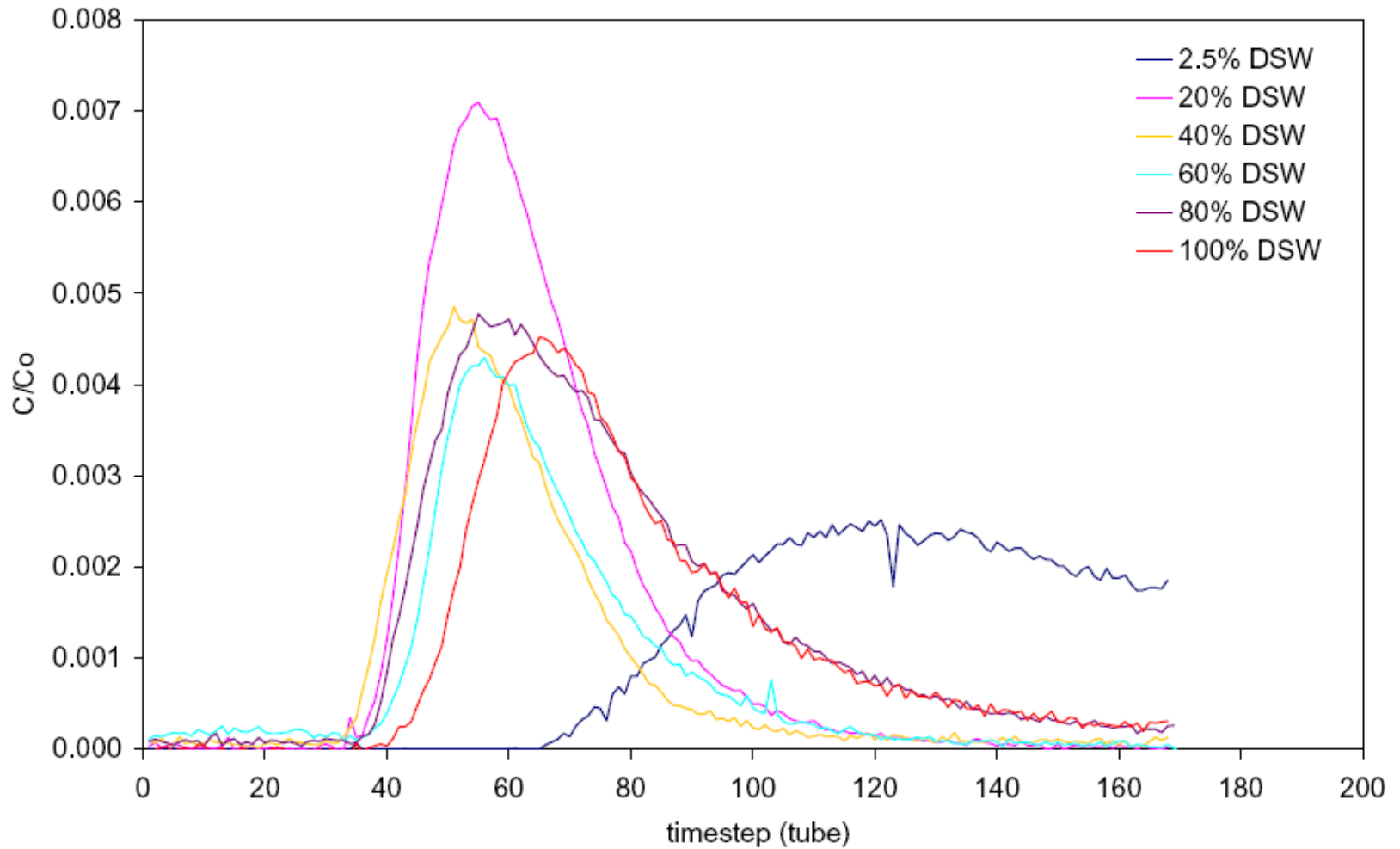
# Stofftransport und Transportmodelle

*Prof. Dr. C. Külls*

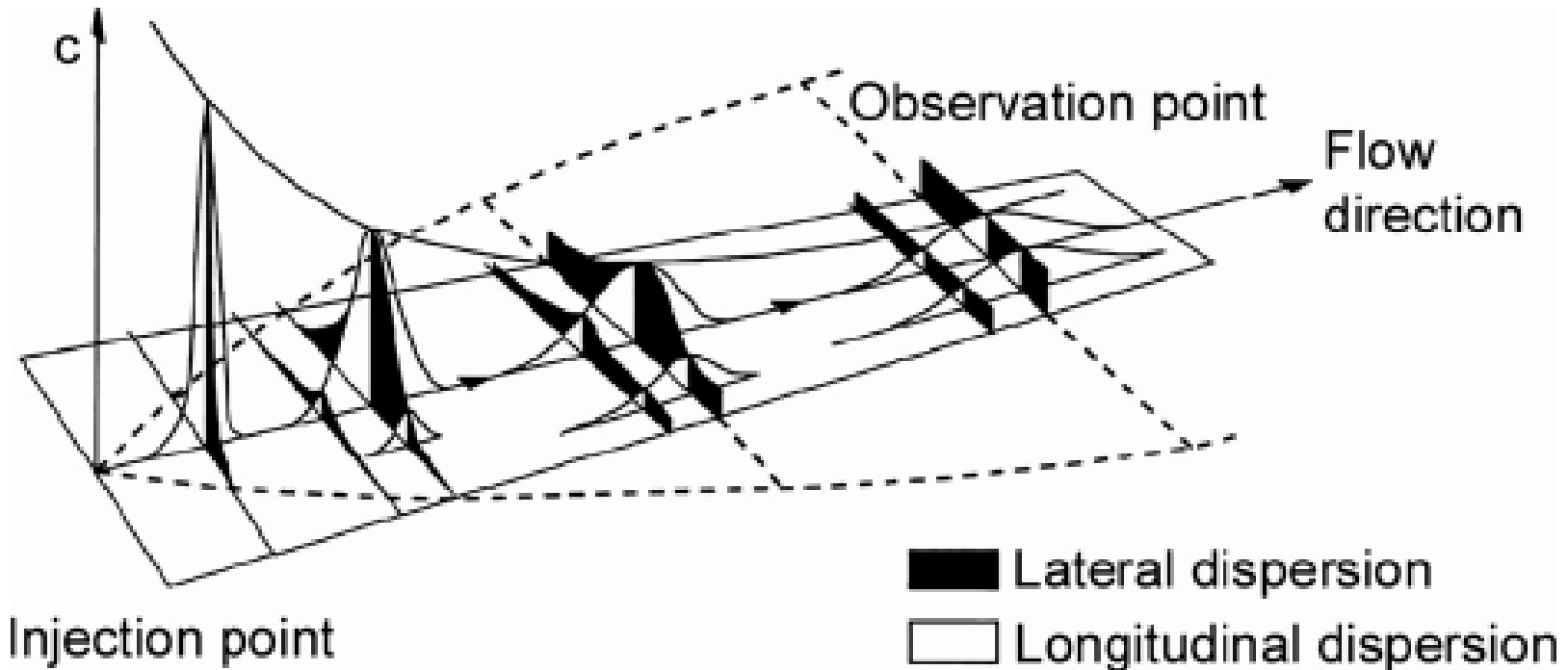
# Stofftransport und Transportmodelle

- Konzeptmodelle:
  - Kompartimentmodelle
  - Anwendung
  - Grenzen
- Physikalische Modelle
  - *Transportgleichung*
  - *Lösungen:*
    - *Analytisch*
    - *Numerisch*





# Grundlagen des physikalischen Stofftransportes



- Tracer verteilt sich entlang und quer zur Fließrichtung
- Es entstehen Gauß-Kurven-förmige Verteilungen im Raum

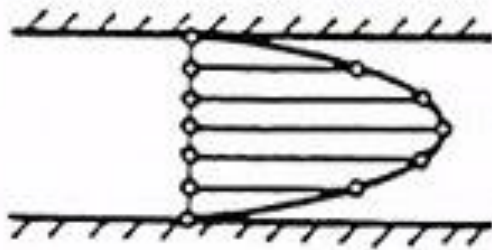
# Transportgleichung

Als Dispersion wird das Auseinanderziehen einer Schadstoffwolke bei ihrem Transport durch den Untergrund bezeichnet.

Bei diesem Prozess sinkt zwar die Konzentration des eingetragenen Stoffes zunehmend durch eine Ausbreitung der Wolke in Breite und Länge, es wird aber ein immer größerer Teil des Grundwasserleiters erfasst und kontaminiert.



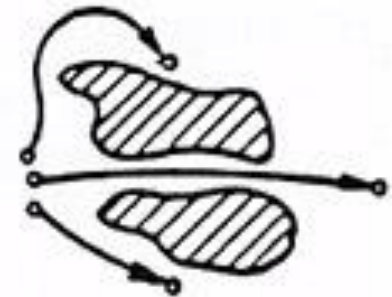
- a) unterschiedliche Geschwindigkeitsverteilung im Porenquerschnitt,
- b) unterschiedliche Porengröße,
- c) unterschiedlicher Weg der Migranten.



a)



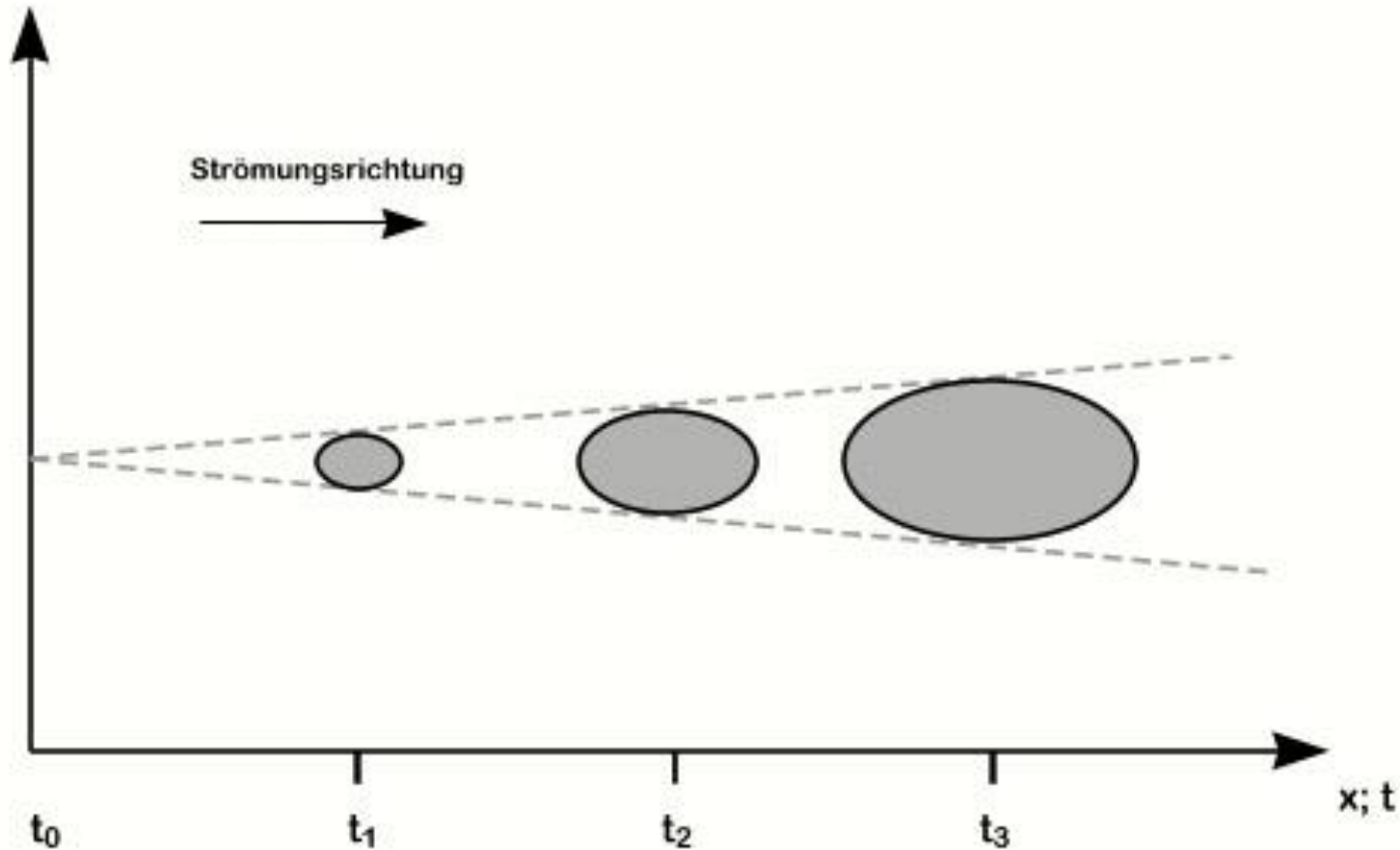
b)



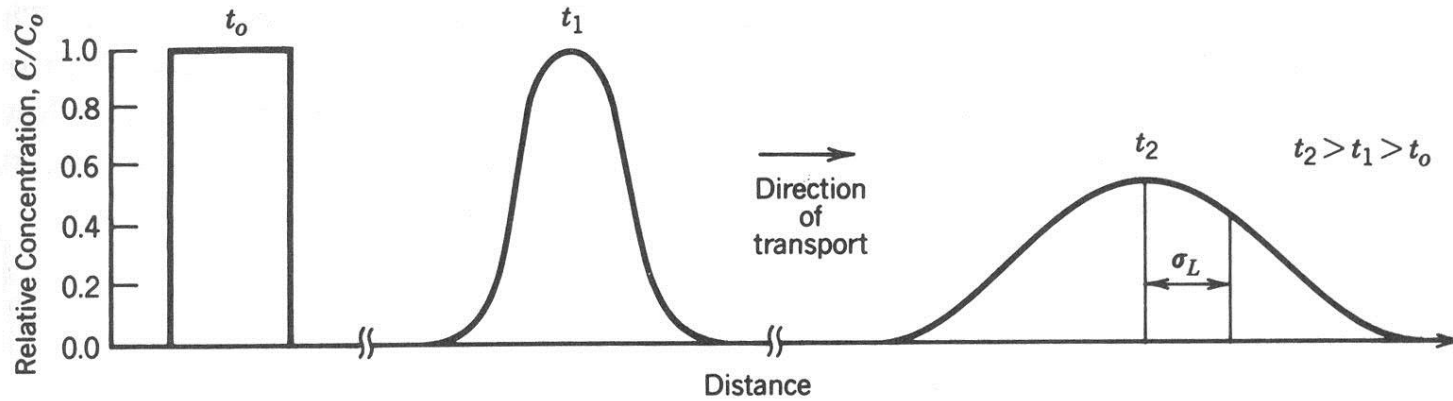
c)

Quelle: Sächsisches Landesamt für Umwelt und Geologie

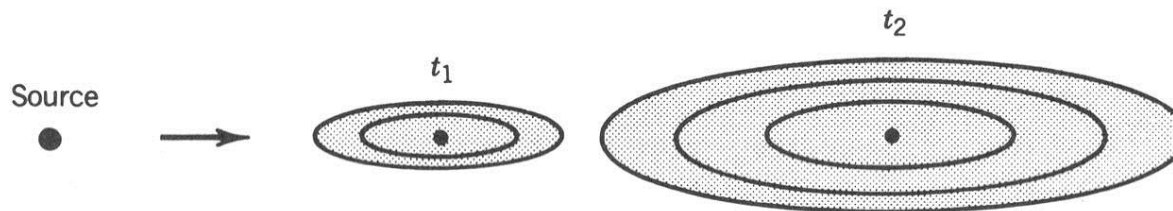
# Wirkungen der hydrodynamischen Dispersion



Quelle: Sächsisches Landesamt für Umwelt und Geologie



(a)



(b)

**Figure 10.7**

Variation in concentration of a tracer spreading in (a) one or (b) two dimensions in a constant velocity flow system.

- Der Dispersionskoeffizient  $D$  ( $\text{m}^2/\text{s}$ ) beschreibt die Abweichung eines Migranten bei dessen Weg durch den Untergrund von dem aus der Migrationsgeschwindigkeit ermittelten statistischen Mittelwert des betreffenden Stoffes. Der Dispersionskoeffizient ergibt sich zu

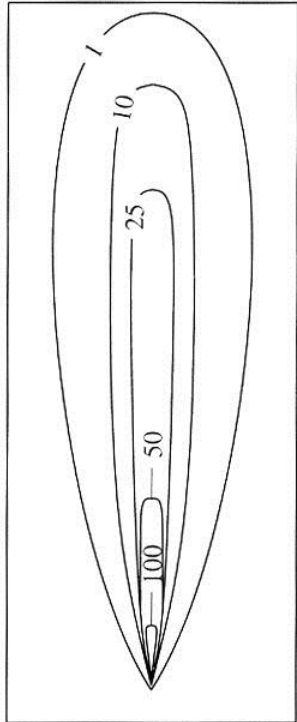
$$D = \delta * v_a$$

Die in der Gleichung enthaltene Dispersivität  $\delta$  ist eine maßstabsabhängige Größe und beschreibt die charakteristische Speicherheterogenität des Untergrundes. Dabei wird zwischen

- Labormaßstab
- Feldmaßstab und
- Regionalmaßstab

unterschieden. Da in der Praxis nur in seltenen Fällen Naturexperimente durchgeführt werden und sich Ergebnisse aus einem Maßstab nicht auf einen anderen Maßstab übertragen lassen, kann zur Bestimmung von die Graphik in nachfolgender Abbildung genutzt werden.

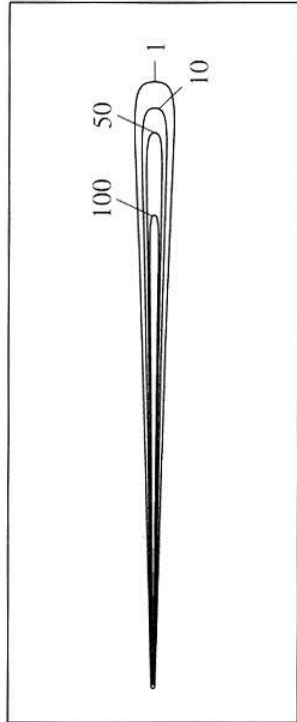
- Die transversale Dispersion beträgt in der Regel das 0,1- bis 0,2-fache der longitudinalen Dispersion. Die Wirkungen der hydrodynamischen Dispersion auf die Ausbreitung eines Wasserinhaltsstoffes zeigt folgende Abbildung
- Die hydrodynamische Dispersion kann aus Säulenversuchen im Labor, aus Gütepumpversuchen und Tracertests im Feld oder auch aus graphischen Zusammenstellungen und Literaturwerken gewonnen werden.



Flow

$$\begin{aligned} \alpha_L &= 3 \text{ m} & \alpha_T &= 1 \text{ m} \\ T &= 0.0363 \text{ m}^2/\text{sec} \\ Q &= 0.165 \text{ m}^3/\text{sec} \\ t &= 0.01 \text{ yr} \end{aligned}$$

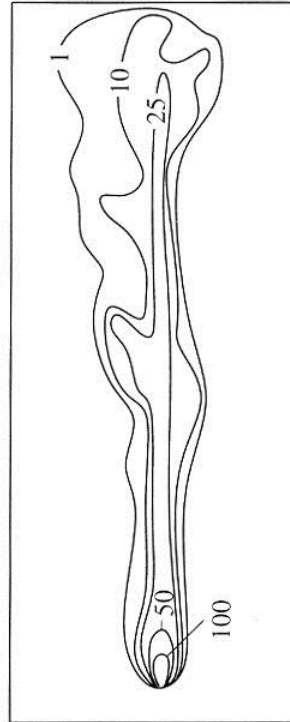
(a)



Flow

$$\begin{aligned} \alpha_L &= 0.0003 \text{ m} & \alpha_T &= 0.00009 \text{ m} \\ T &= 0.0363 \text{ m}^2/\text{sec} \\ Q &= 0.165 \text{ m}^3/\text{sec} \\ t &= 0.01 \text{ yr} \end{aligned}$$

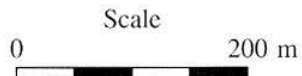
(b)

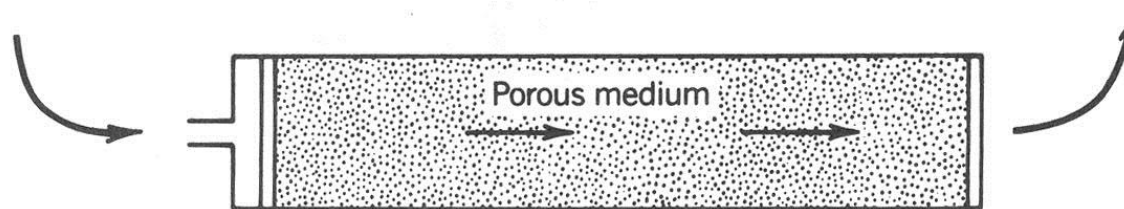
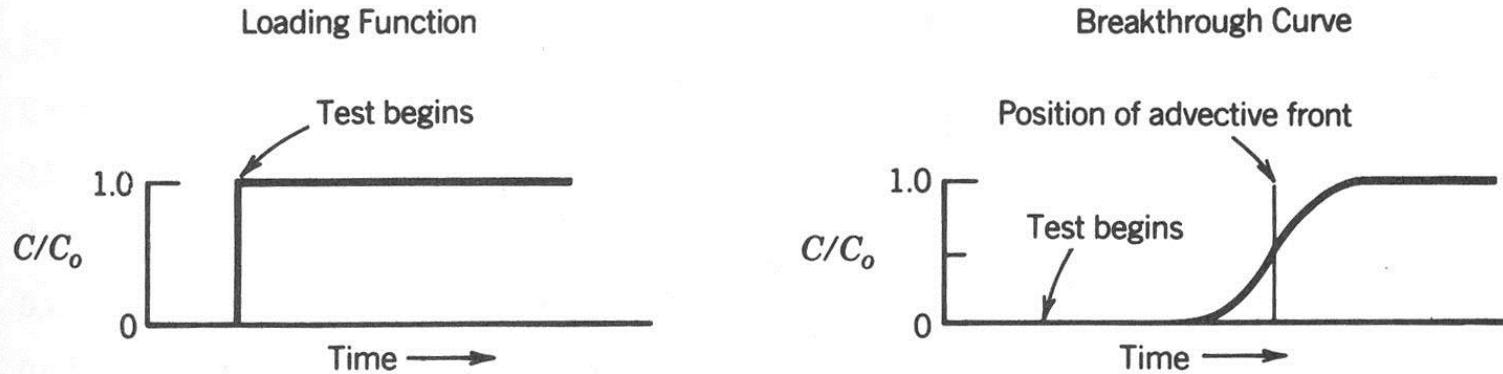


Flow

$$\begin{aligned} \alpha_L &= 0.0003 \text{ m} & \alpha_T &= 0.00009 \text{ m} \\ T_1 &= 0.223 \text{ m}^2/\text{sec} & T_2 &= 0.0223 \text{ m}^2/\text{sec} \\ Q &= 0.165 \text{ m}^3/\text{sec} \\ t &= 0.01 \text{ yr} \end{aligned}$$

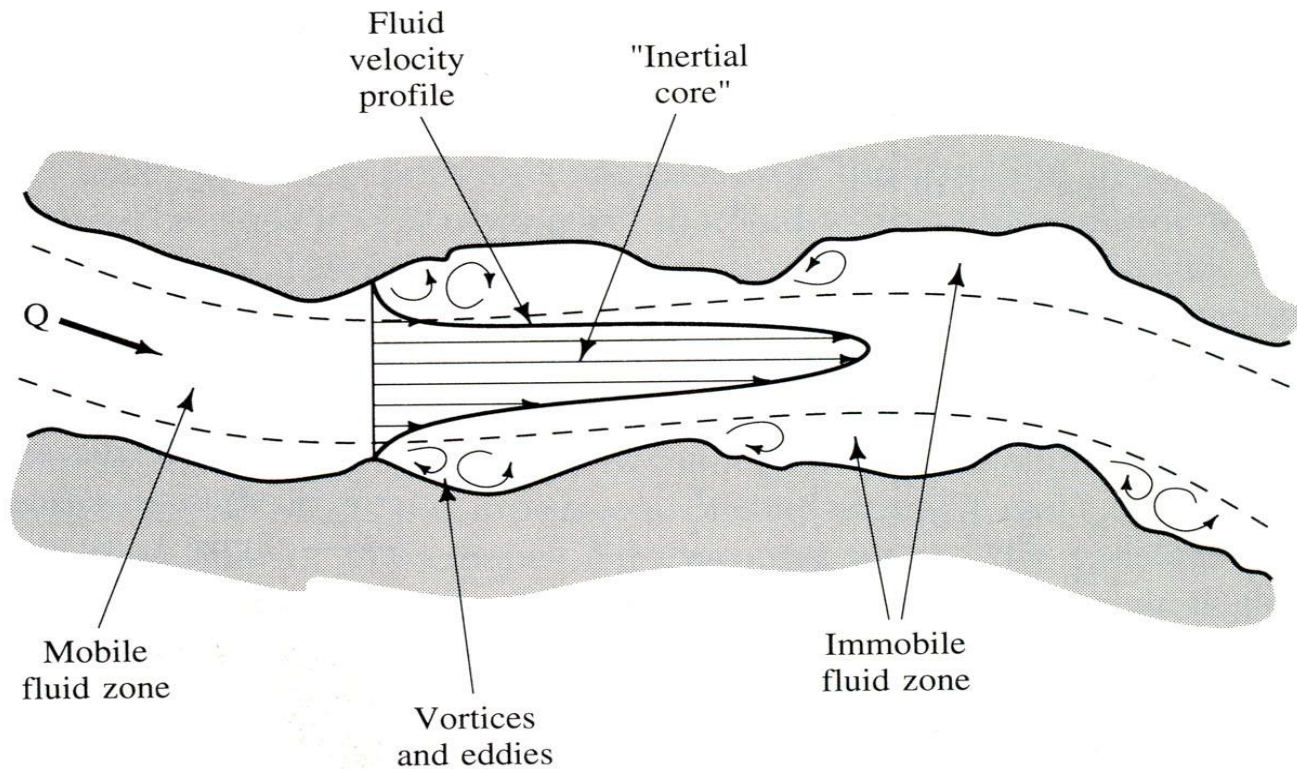
(c)





(a)

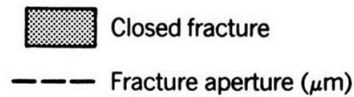
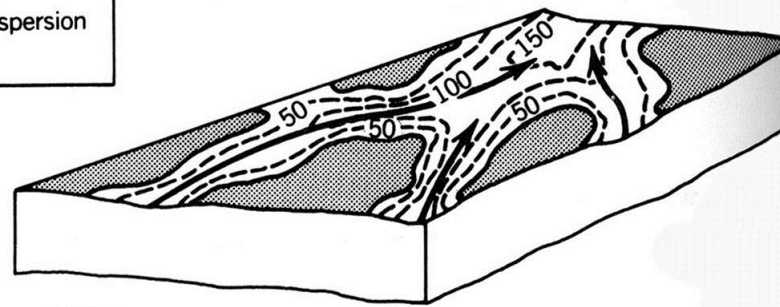
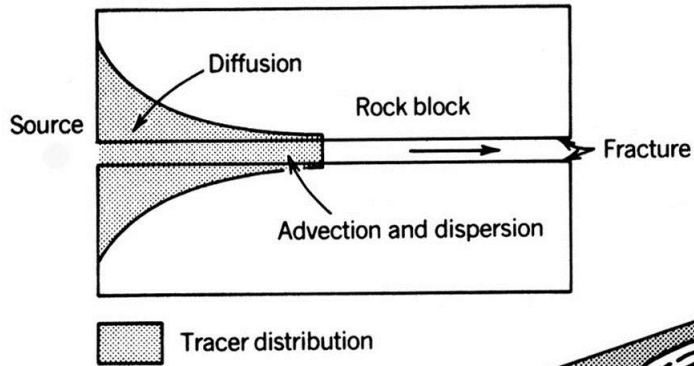
Experimental apparatus to illustrate dispersion in a column. The test begins with a continuous input of tracer  $C/C_0 = 1$  at the inflow end. The relative concentration versus time function at the outflow characterizes dispersion in the column.



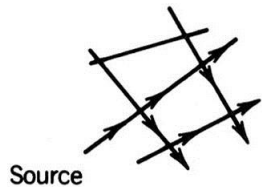
Zones of mobile and immobile water in a fracture. Source: K. G. Raven, K. S. Novakowski, and P. A. Lapcevic, *Water Resources Research* 24, no. 12 (1988):2019–32. Published by the American Geophysical Union.



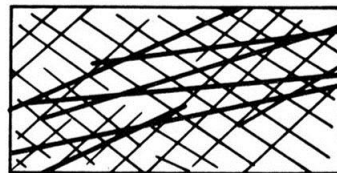
(a) Diffusion into the Matrix



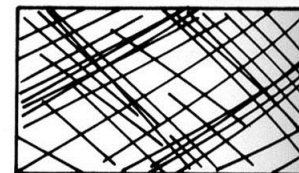
(b) Variability in Velocity due to Fracture Roughness



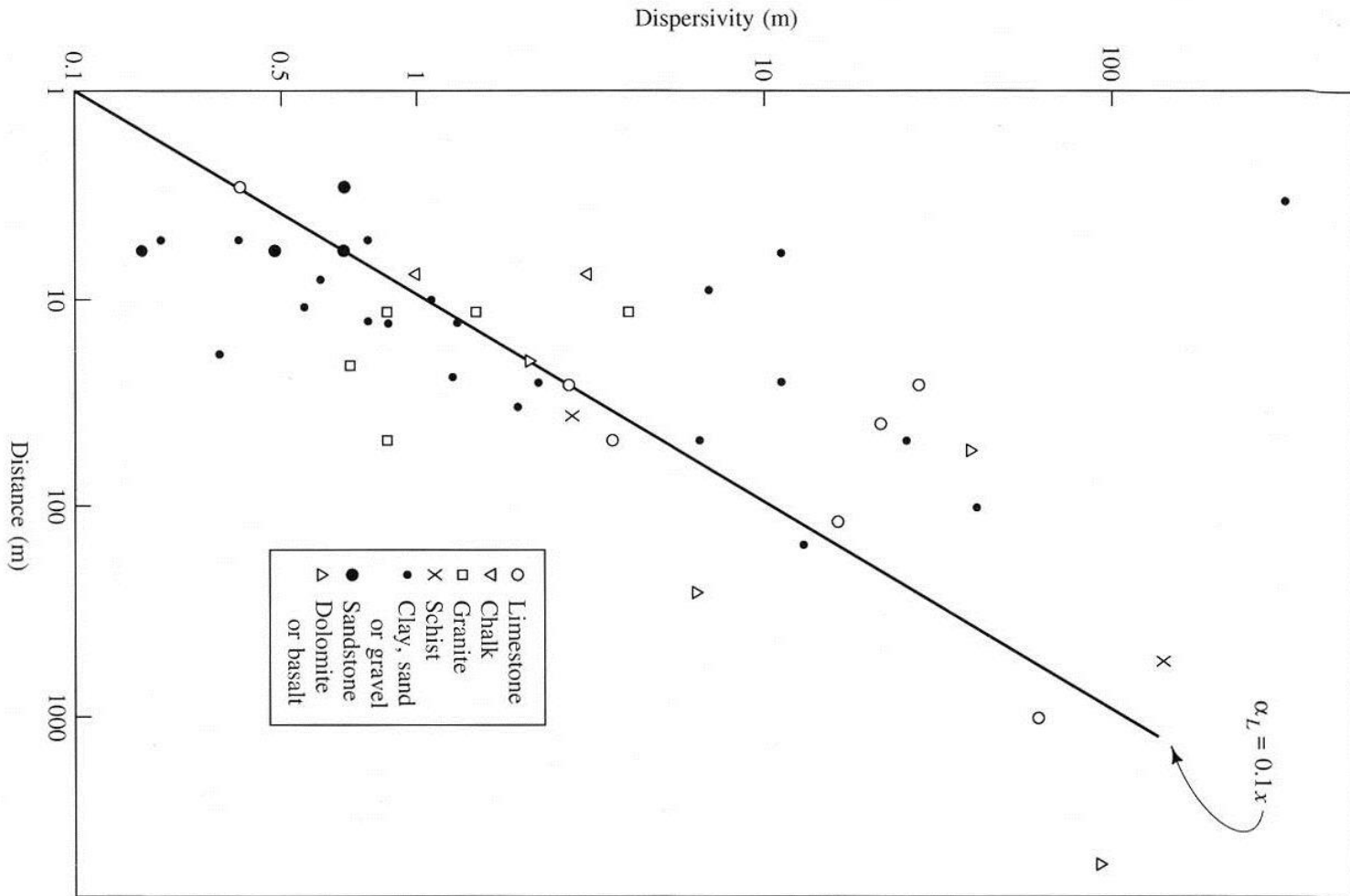
(c) Mixing at Fracture Intersections

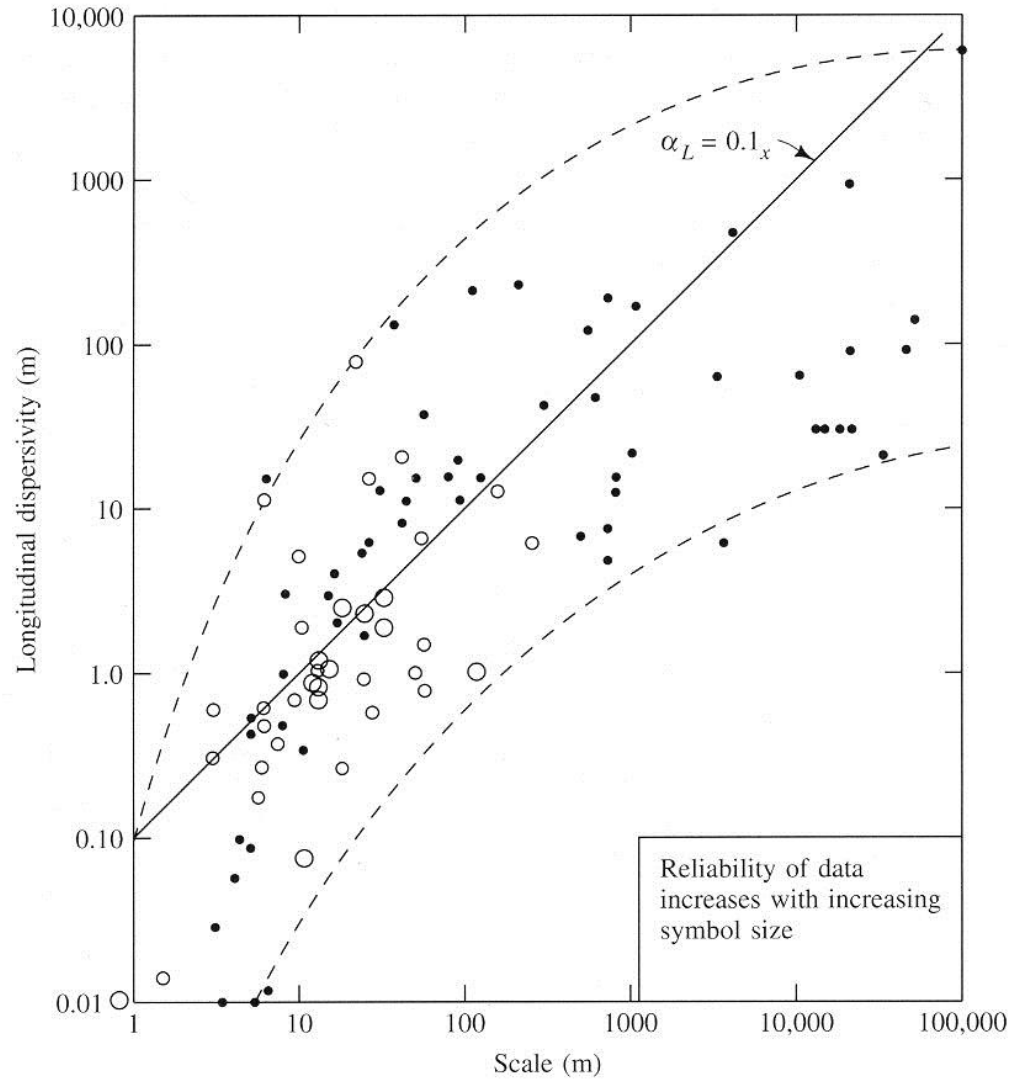


(d) Variability in Velocity due to Differing Scales of Fracturing



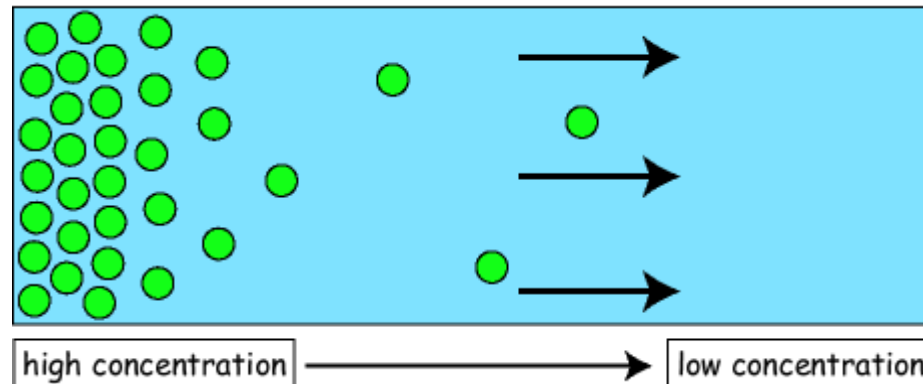
(e) Variability in Velocity due to Variable Fracture Density





Unter Diffusion versteht man den physikalischen Ausgleichsprozeß, in dessen Verlauf Moleküle, Atome und Ionen infolge ihrer molekularen Wärmebewegung (Brown'sche Molekularbewegung) von Orten höherer zu solchen niedriger Konzentration gelangen.

Sie stellt einen von den Wasserbewegungen unabhängigen Bewegungsmechanismus dar. Die Masse der durch eine gedachte Einheitsfläche hindurch diffundierenden Moleküle, Atome und Ionen ist proportional zu deren Konzentrationsgefälle



$$f_{diff}^* = -d_0 \cdot i_c \quad \text{mit} \quad i_c = \frac{\partial c}{\partial x} \quad [\text{Gl. 6.2}]$$

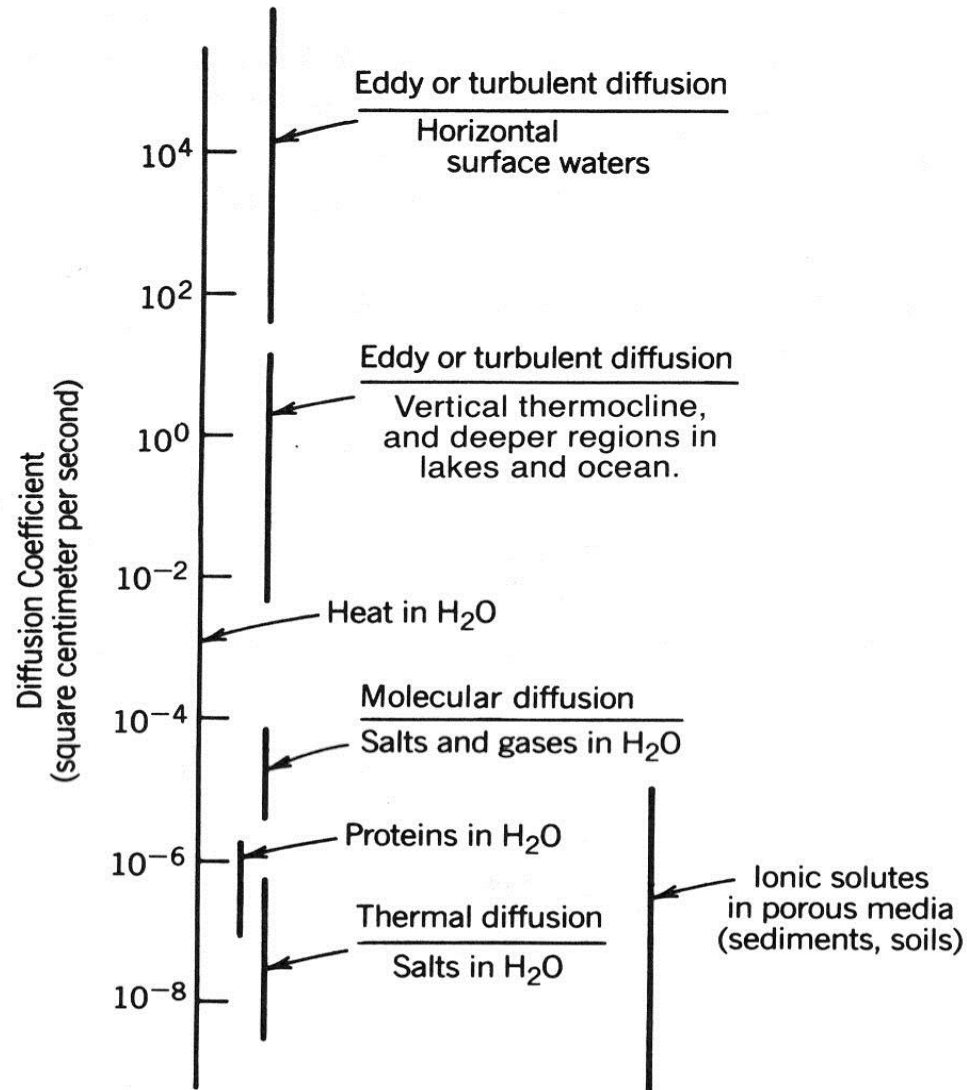
$f_{diff}^*$  Diffusiver Massenfluß im freien Wasservolumen [ $\text{kg}/(\text{m}^2\text{s})$ ]

$d_0$  Diffusionskoeffizient im freien Wasservolumen [ $\text{m}^2/\text{s}$ ]

$i_c$  Konzentrationsgradient [ $\text{kg}/\text{m}^4$ ]

$c$  Konzentration des wassergelösten Inhaltsstoffes [ $\text{kg}/\text{m}^3$ ]

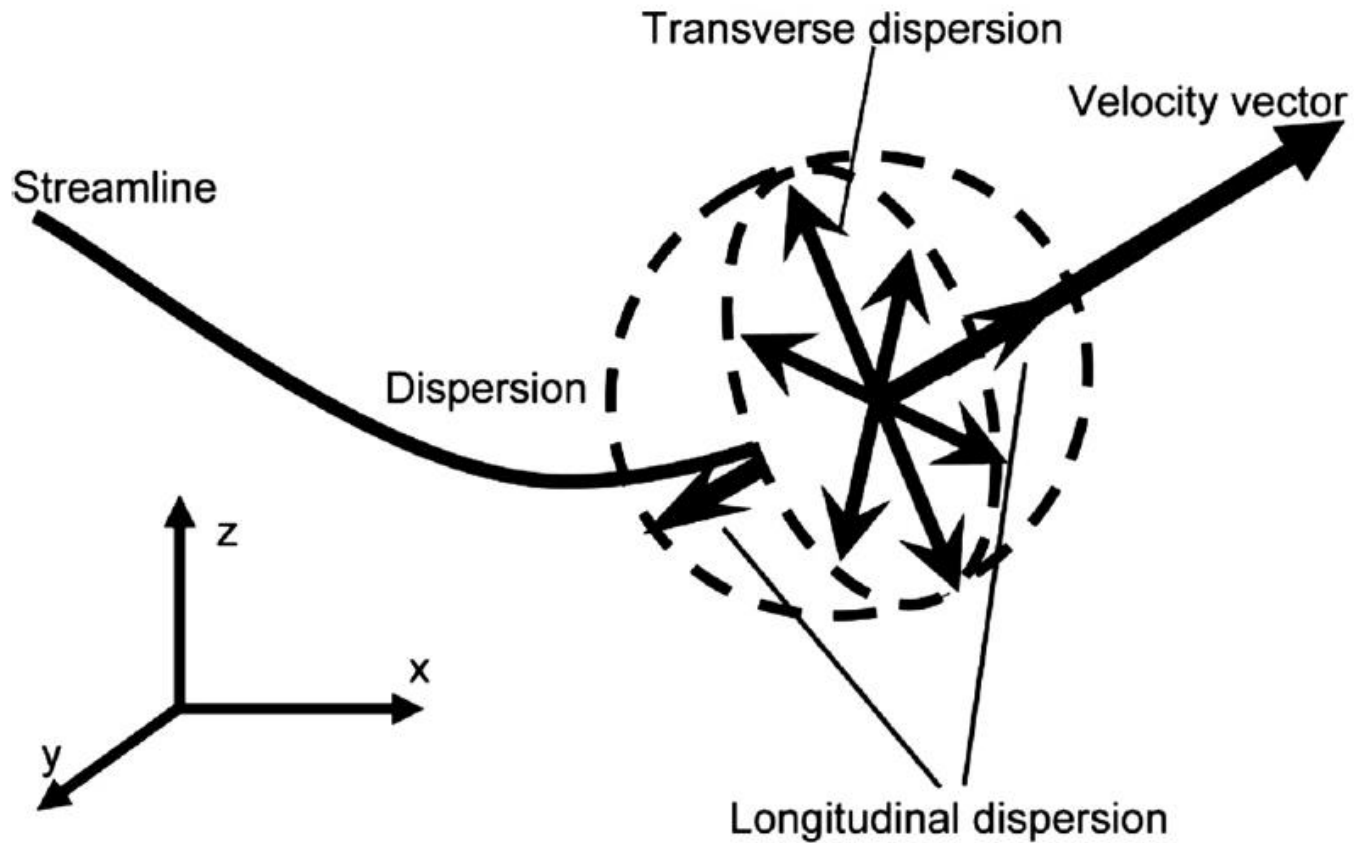
$x$  Abstand zwischen 2 Konzentrationsmeßpunkten [ $\text{m}$ ]



$$\begin{aligned} & \frac{\partial}{\partial x} \left( D_{xx} \frac{\partial C}{\partial x} + D_{xy} \frac{\partial C}{\partial y} + D_{xz} \frac{\partial C}{\partial z} - v_x C \right) \\ & + \frac{\partial}{\partial y} \left( D_{yx} \frac{\partial C}{\partial x} + D_{yy} \frac{\partial C}{\partial y} + D_{yz} \frac{\partial C}{\partial z} - v_y C \right) \\ & + \frac{\partial}{\partial z} \left( D_{zx} \frac{\partial C}{\partial x} + D_{zy} \frac{\partial C}{\partial y} + D_{zz} \frac{\partial C}{\partial z} - v_z C \right) = \frac{\partial C}{\partial t} \end{aligned}$$

- $D_{ij}$  ist der Dispersionskoeffizient
- $C$  die Konzentration
- $v_i$  die Fließgeschwindigkeit

$x, y, z$  stehen für die Richtungen  
 $t$  ist die Zeit





$$D_L = \alpha_L v$$

$$D_T = \alpha_T v$$

$$v = \sqrt{v_x^2 + v_y^2 + v_z^2}$$

- D ist der Dispersionskoeffizient
- $\alpha$  ist die Dispersivität
- v ist die Fließgeschwindigkeit

$$D_{xx} = D_L \left( \frac{v_x^2}{v^2} \right) + D_T \left( \frac{v_y^2}{v^2} \right) + D_T \left( \frac{v_z^2}{v^2} \right) + \frac{D_m}{\tau}$$

$$D_{yy} = D_T \left( \frac{v_x^2}{v^2} \right) + D_L \left( \frac{v_y^2}{v^2} \right) + D_T \left( \frac{v_z^2}{v^2} \right) + \frac{D_m}{\tau}$$

$$D_{zz} = D_T \left( \frac{v_x^2}{v^2} \right) + D_T \left( \frac{v_y^2}{v^2} \right) + D_L \left( \frac{v_z^2}{v^2} \right) + \frac{D_m}{\tau}$$

$$D_{xy} = D_{yx} = (D_L - D_T) \left( \frac{v_x v_y}{v^2} \right)$$

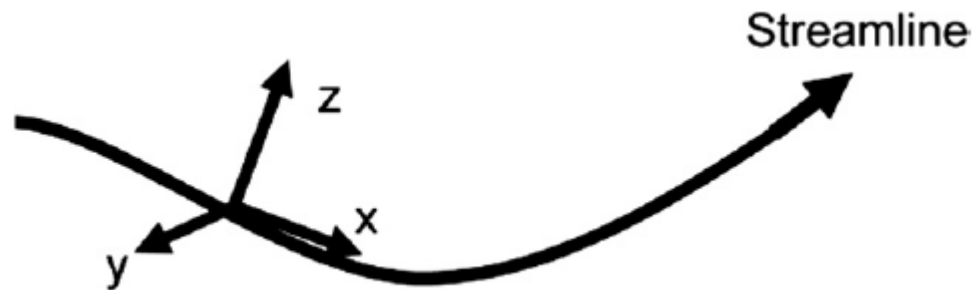
$$D_{xz} = D_{zx} = (D_L - D_T) \left( \frac{v_x v_z}{v^2} \right)$$

$$D_{zy} = D_{yz} = (D_L - D_T) \left( \frac{v_z v_y}{v^2} \right)$$

- T ist die Tortuosität
- D\_ steht für den Dispersionskoeffizienten
- L, T stehen für Lateral und Transversal

# 3D

$$D_{xx} \frac{\partial^2 C}{\partial x^2} + D_{yy} \frac{\partial^2 C}{\partial y^2} + D_{zz} \frac{\partial^2 C}{\partial z^2} - v \frac{\partial C}{\partial x} = \frac{\partial C}{\partial t}$$

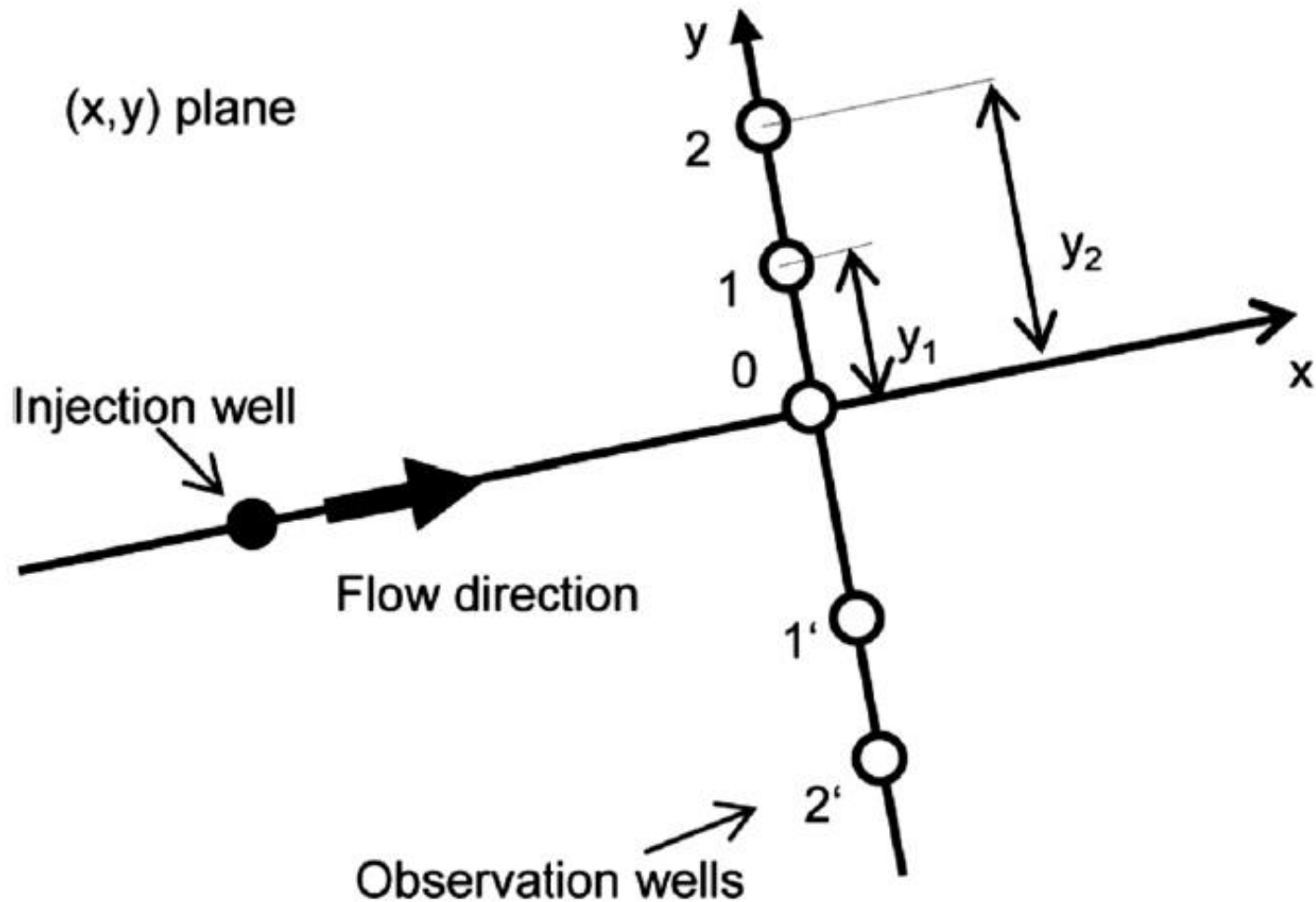


- 3D Transport-Gleichung
- Translationsteil ( $v$ ) und Dispersionsteil

$$D_{xx} = D_L + \frac{D_m}{\tau}$$
$$D_{yy} = D_T + \frac{D_m}{\tau}$$
$$D_{zz} = D_T + \frac{D_m}{\tau}$$

- Wenn  $v < 0.1$  m/Tag dann vereinfacht sich die Gleichung:
  - $D_L = D_{xx}$
  - $D_T = D_{yy} = D_{zz}$

# 2D



wenn

$$\frac{\partial C}{\partial z} = 0$$

Dann gilt:

$$D_L \frac{\partial^2 C}{\partial x^2} + D_T \frac{\partial^2 C}{\partial y^2} - v \frac{\partial C}{\partial x} = \frac{\partial C}{\partial t}$$

- Das ist die 2D-Transportgleichung
- Eine Differentialgleichung, sie enthält einen Dispersionsteil und einen Transportteil



$$C(x = 0, y = 0, t) = \frac{M}{nH} \delta(t) \delta(x) \delta(y)$$

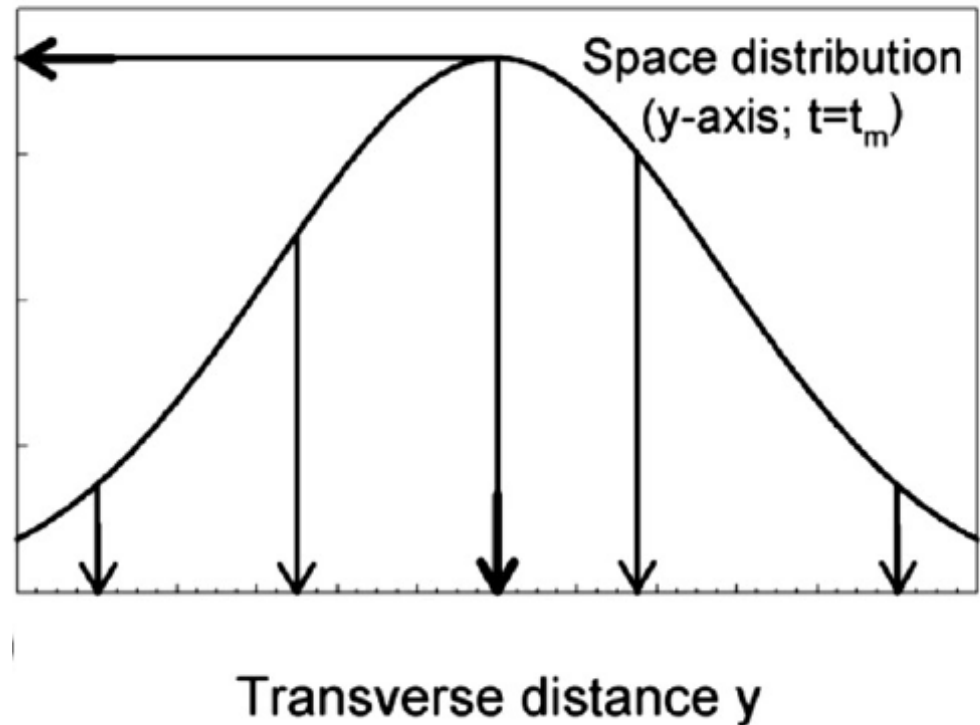
$$C(x, y, t = 0) = 0$$

$$\lim_{(x, y) \rightarrow \infty} C(x, y, t) = 0$$

- *M ist gleich Masse (g)*
- *,n' ist die Porosität*
- *H ist die Mächtigkeit*

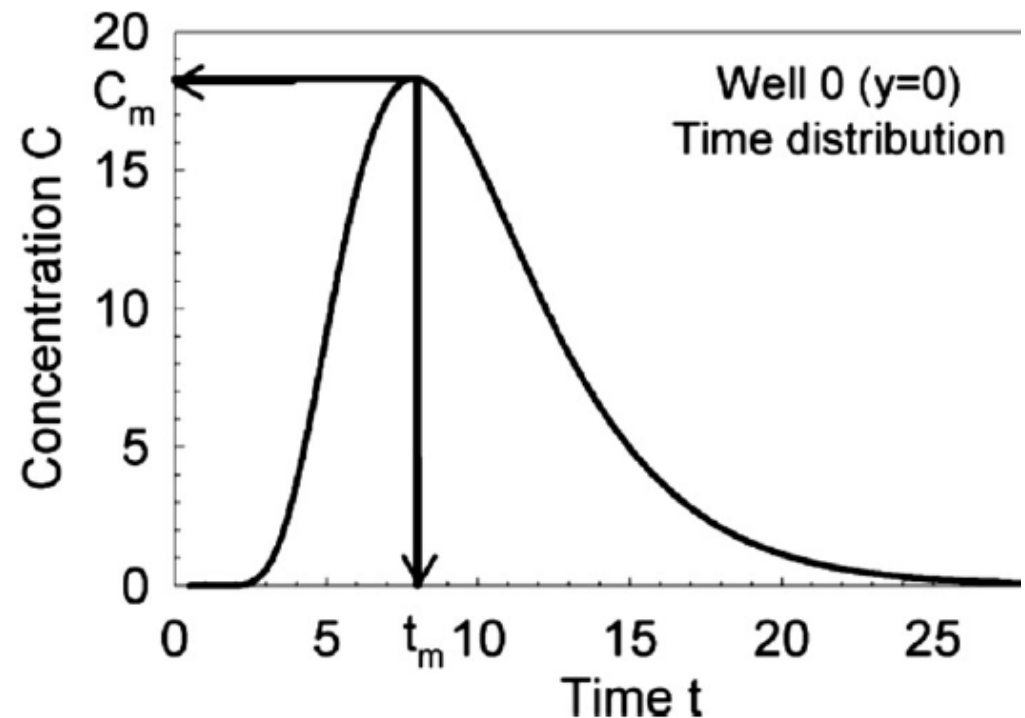
$$C(x, y, t) = \frac{M}{nH} \frac{x}{4\pi vt^2 \sqrt{D_L D_T}} \exp \left[ -\frac{(x - vt)^2}{4D_L t} - \frac{y^2}{4D_T t} \right]$$

- *M ist gleich Masse (g)*
- *n ist die Porosität*
- *H ist die Mächtigkeit*
- *D<sub>L</sub> ist die longitudinale, D<sub>T</sub> ist die transversale Dispersion*



$$C(t) = C_m \left( \frac{t_m}{t} \right)^2 \exp \left[ -\frac{(x - vt)^2}{4D_L t} + \frac{(x - vt_m)^2}{4D_L t_m} \right]$$

- tm ist mittlere Verweilzeit*



$$C(y) = C_m \exp \left[ -\frac{y^2}{4D_T t_m} \right]$$

- $Y$  ist die Querrichtung
- $D_T$  ist der transversale Dispersionskoeffizient
- $t_m$  ist die mittlere Verweil-Zeit

# 1D



- Einspeisung in sehr kurzer Zeit
- Dirac-Stoß

wenn

$$\frac{\partial C}{\partial y} = \frac{\partial C}{\partial z} = 0$$

Dann gilt:

$$D_L \frac{\partial^2 C}{\partial x^2} - v \frac{\partial C}{\partial x} = \frac{\partial C}{\partial t}$$

- 1D Gleichung, keine Änderung in y und in z-Richtung
- Säulen, Flussbetten

$$C(x = 0, t) = \frac{M}{Q} \delta(t)$$

$$C(x, t = 0) = 0$$

$$\lim_{x \rightarrow \infty} C(x, t) = 0$$

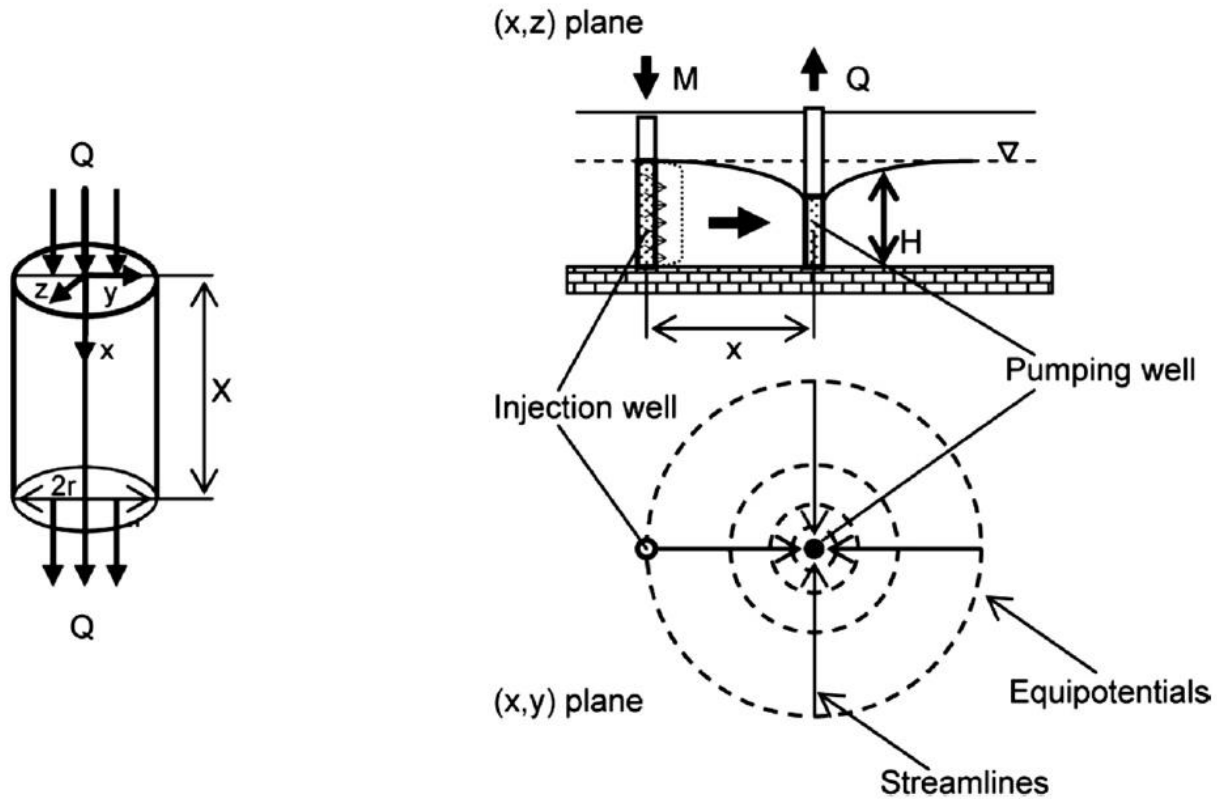
$$x \rightarrow \infty$$

- Oft Vereinfachung auf 1D
- Momentane Einspeisung
- Keine Vorbelastung



$$C(x, t) = \frac{M}{Q} \frac{x}{\sqrt{4\pi D_L t^3}} \exp \left[ -\frac{(x - vt)^2}{4D_L t} \right]$$

- Das ist die Grundgleichung des Transportes in 1D
- C hängt von M von  $1/Q$  von  $D_L^{-1/2}$  und  $1/t^{3/2}$  ab und nimmt exponentiell mit  $x^2$  ab



- Anwendbar auf Säulen, lange Flüsse und auch auf radiale Flüsse

$$t_0 = \frac{x}{v}$$

$$t_0 = \frac{V}{Q}$$

- Verweilzeit ist proportional zum Volumen und
- umgekehrt proportional zum Abfluss

$$P_D = \frac{D_L}{vx} = \frac{\alpha_L}{x}$$

- Dispersionskoeffizient pro Geschwindigkeit
- Dispersivität pro Länge  $x$
- Dispersionsparameter entspricht genau dem bereits eingeführten  $\alpha/x$

$$C(t) = \frac{M}{Q t_0} \frac{1}{\sqrt{4\pi P_D (t/t_0)^3}} \exp \left[ -\frac{(1 - t/t_0)^2}{4P_D t/t_0} \right]$$

- Zeit wird als Vielfaches der Verweilzeit angegeben
- Dispersion wird pro Länge normiert

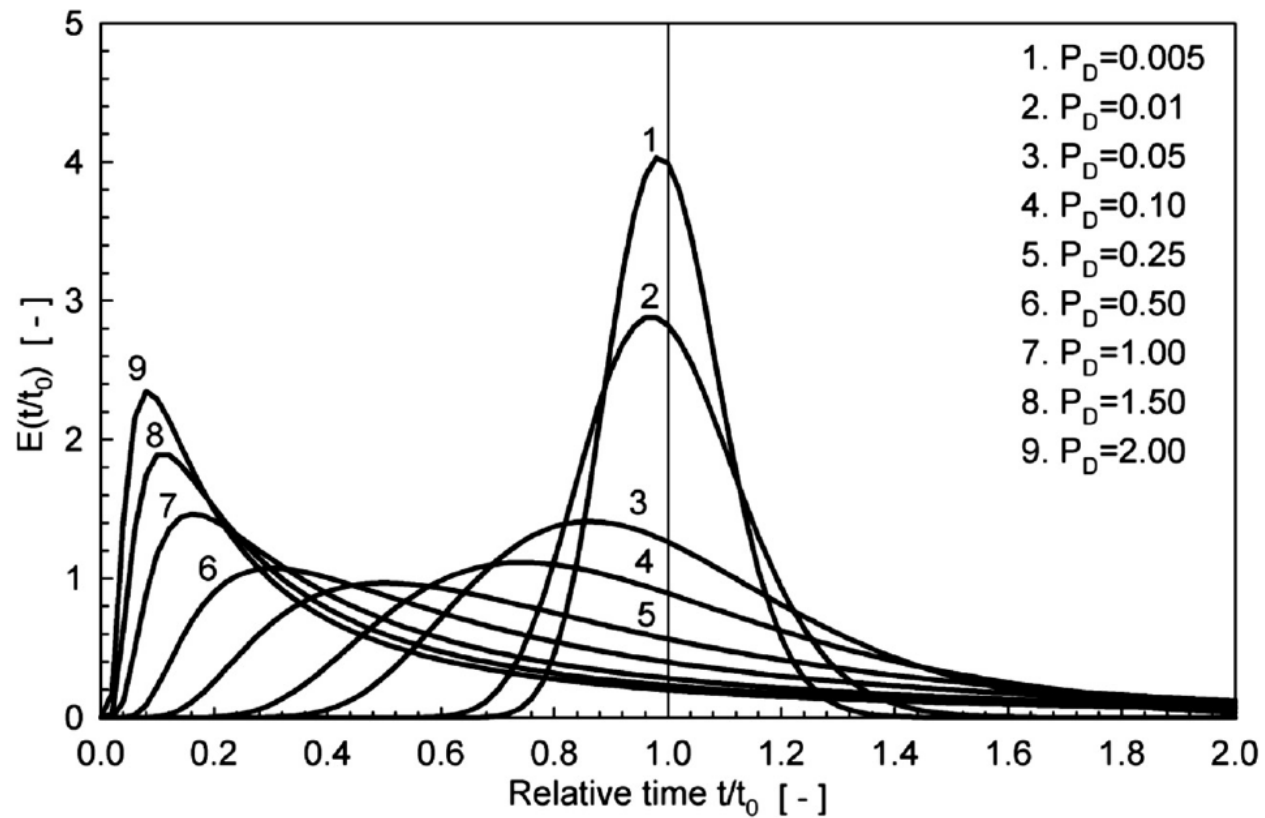
$$n = \frac{Q t_0}{\pi r^2 x}$$

$$n = \frac{Q t_0}{\pi x^2 H}$$

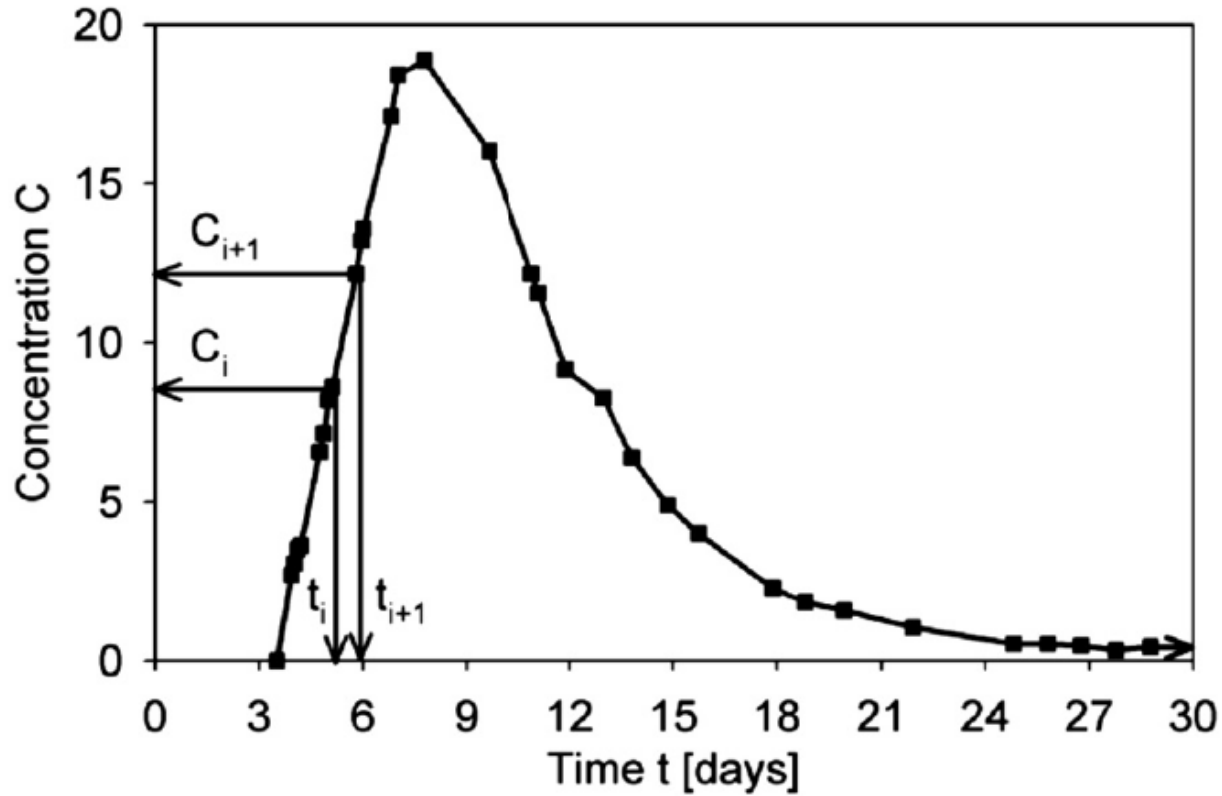
- Lösung je nach Randbedingungen
- Gilt für Brunnen mit radialem Zufluss – Parameter wie in Skizze oben

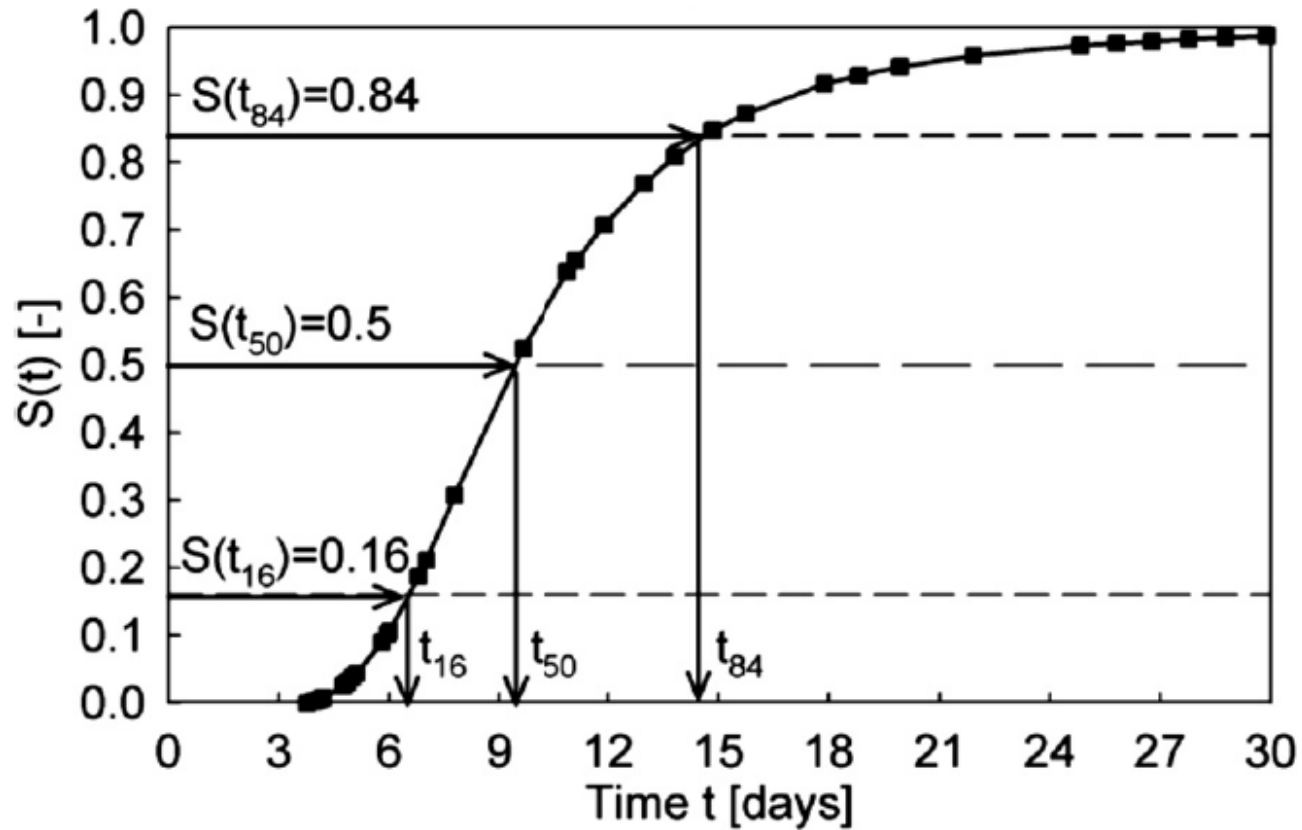
$$E(t/t_0) = \frac{C(t)Q t_0}{M} = \frac{1}{\sqrt{4\pi P_D(t/t_0)^3}} \exp \left[ -\frac{(1 - t/t_0)^2}{4P_D t/t_0} \right]$$

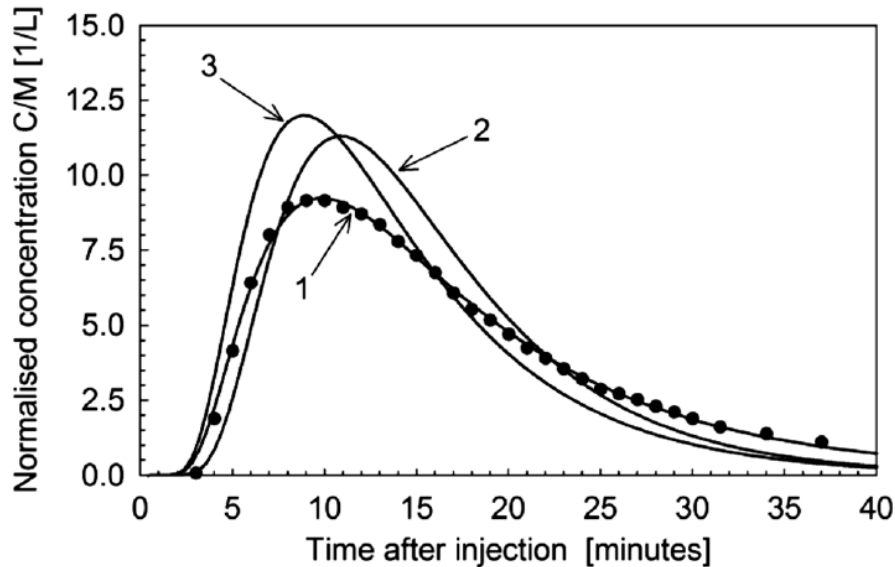
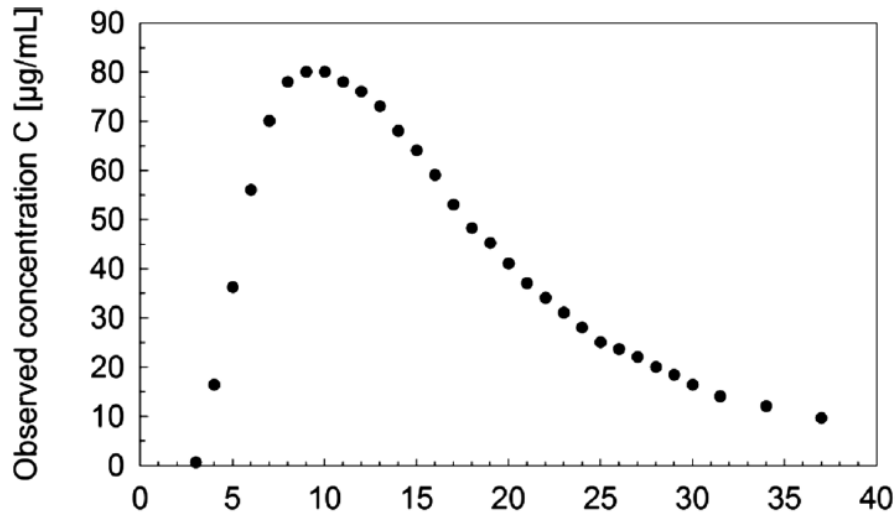
- Macht Durchgänge vergleichbar in unterschiedlich großen Systemen



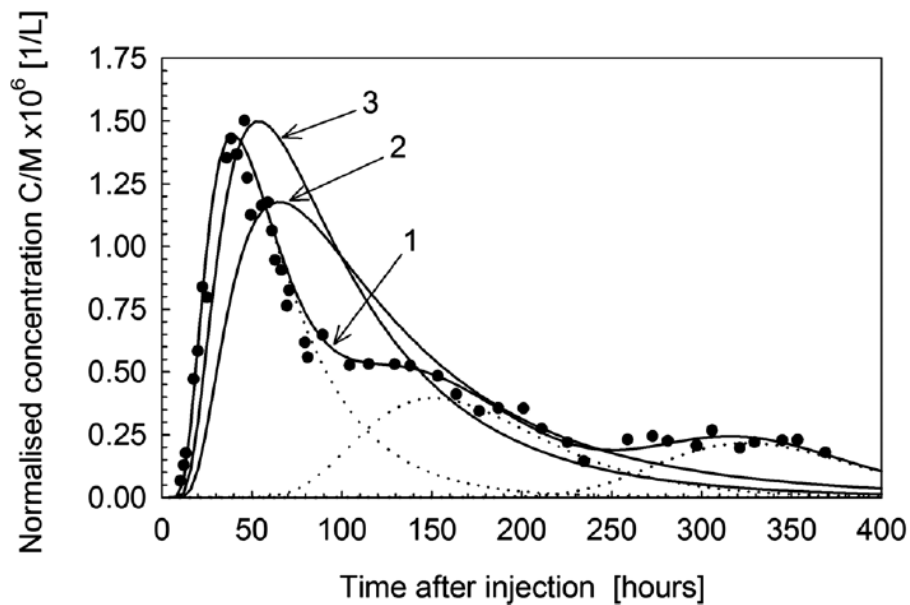
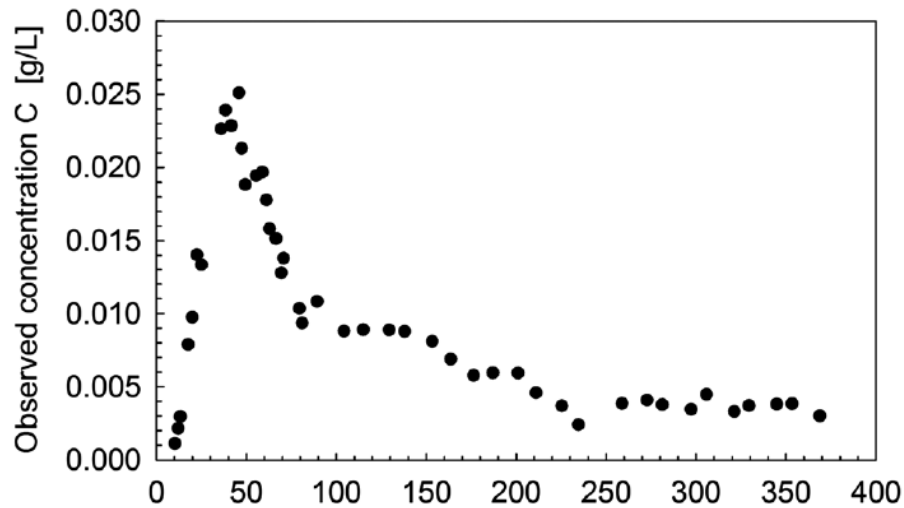




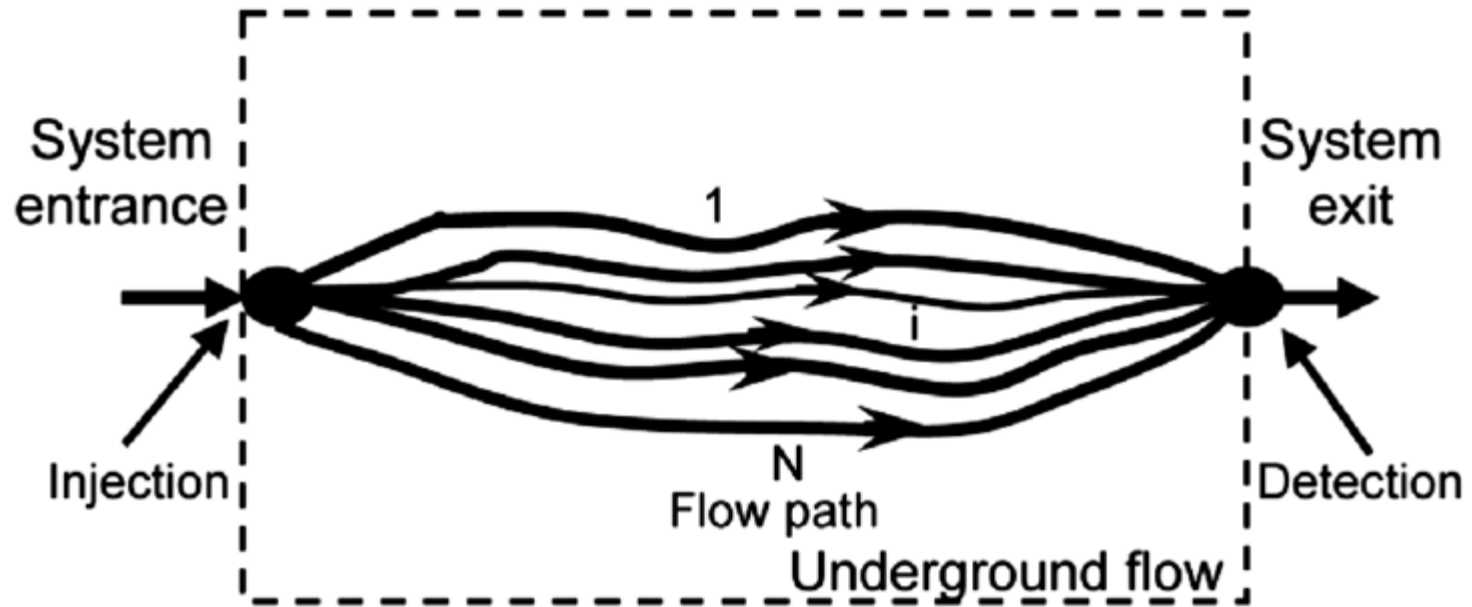


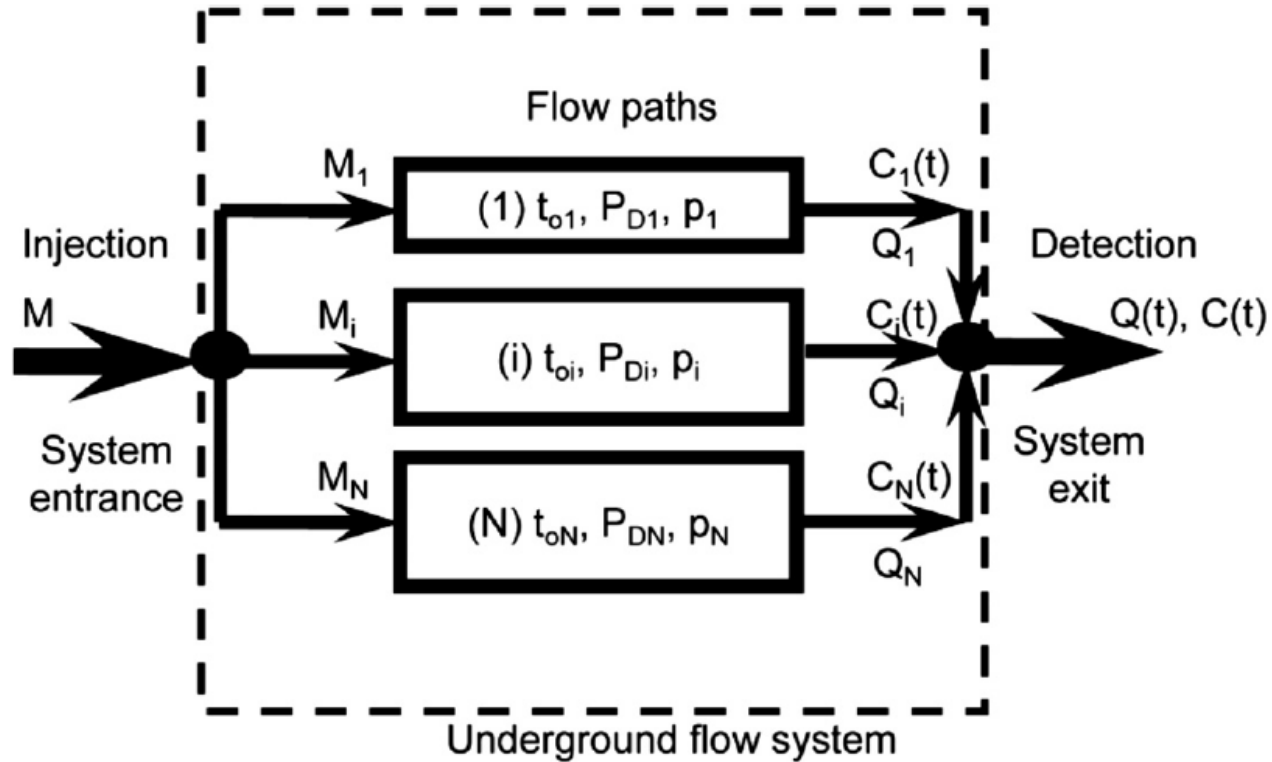


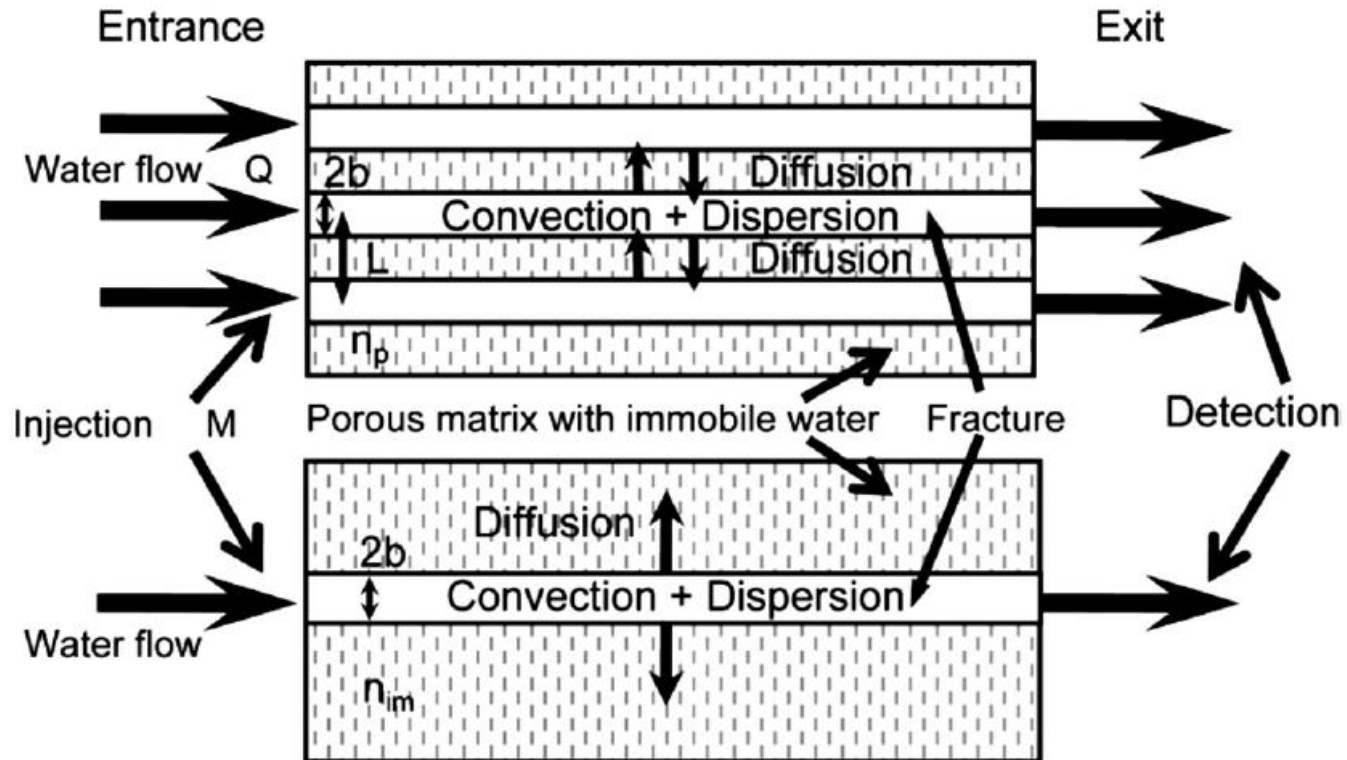
- Messdaten als Funktion der Zeit
- Anpassung der ADV mit verschiedenen Verfahren
- Least Square
- Momentenmethode

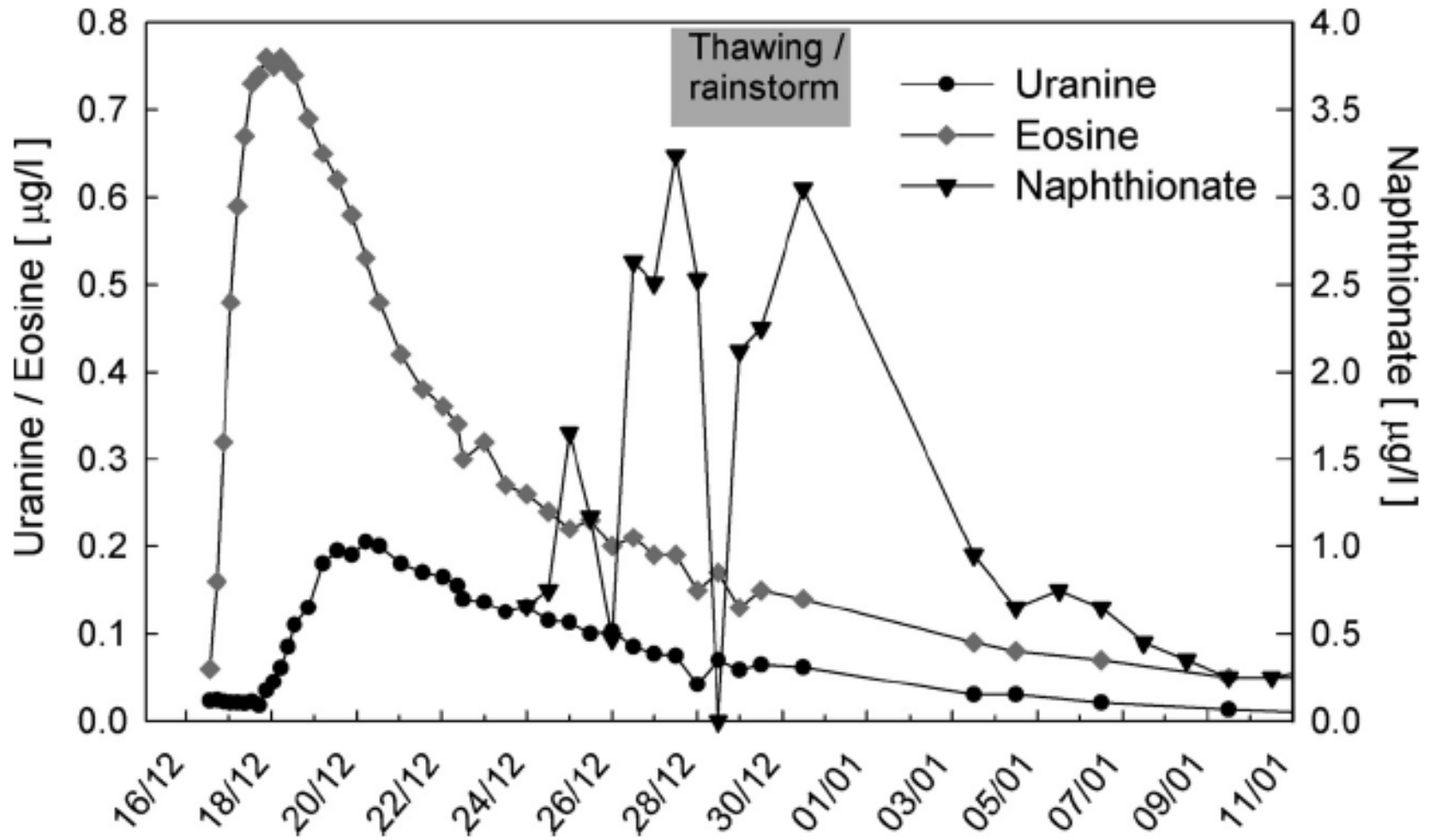


- Es kann mehrere Lösungen geben
- Häufig mehrere Peaks











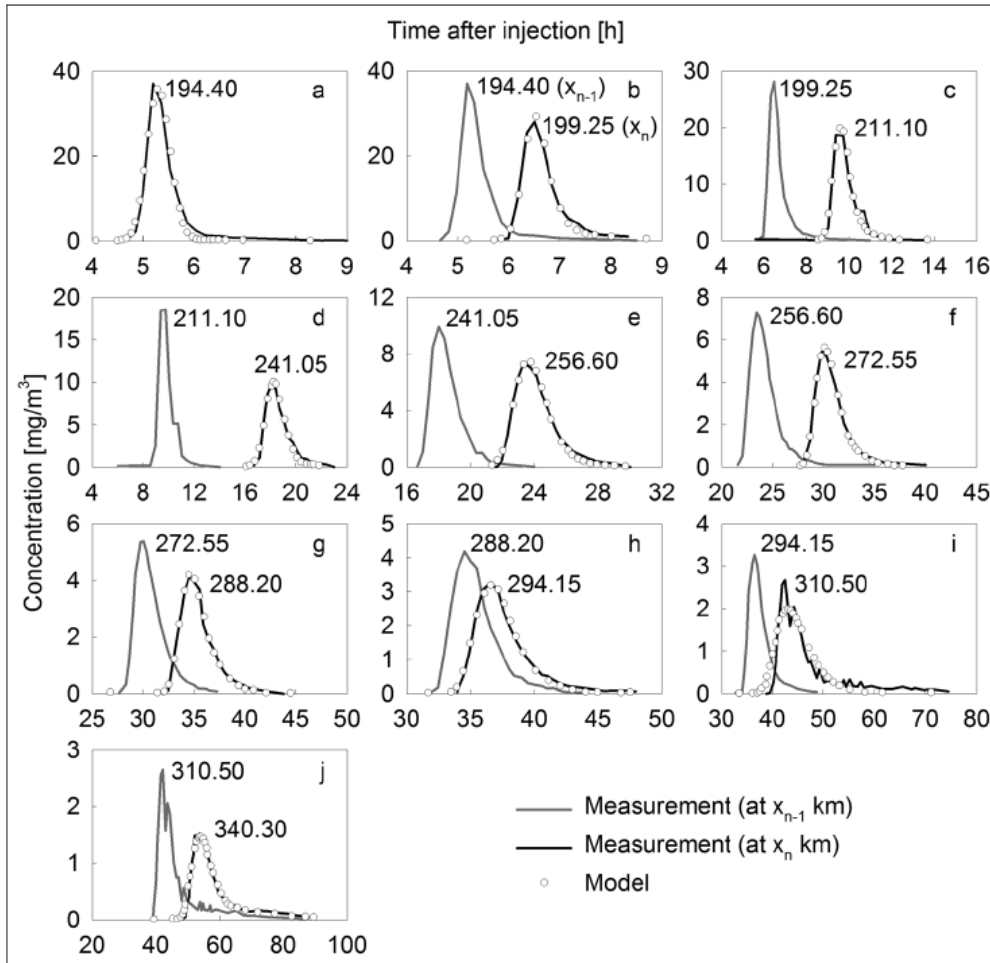


Figure 7.24 Experiment 04/89. Measured tracer breakthroughs at the following river sections ( $x_n$ ): Ottmarsheim (km 194.4), Neuenburg (km 199.25), Fessenheim (km 211.1), Marckolsheim (km 241), Rheinau (km 256.6), Gerstheim (km 272.5), Strasbourg (km 288.2), Kehl (km 294.1), Gambsheim (km 310.5), Plittersdorf (km 350.3).

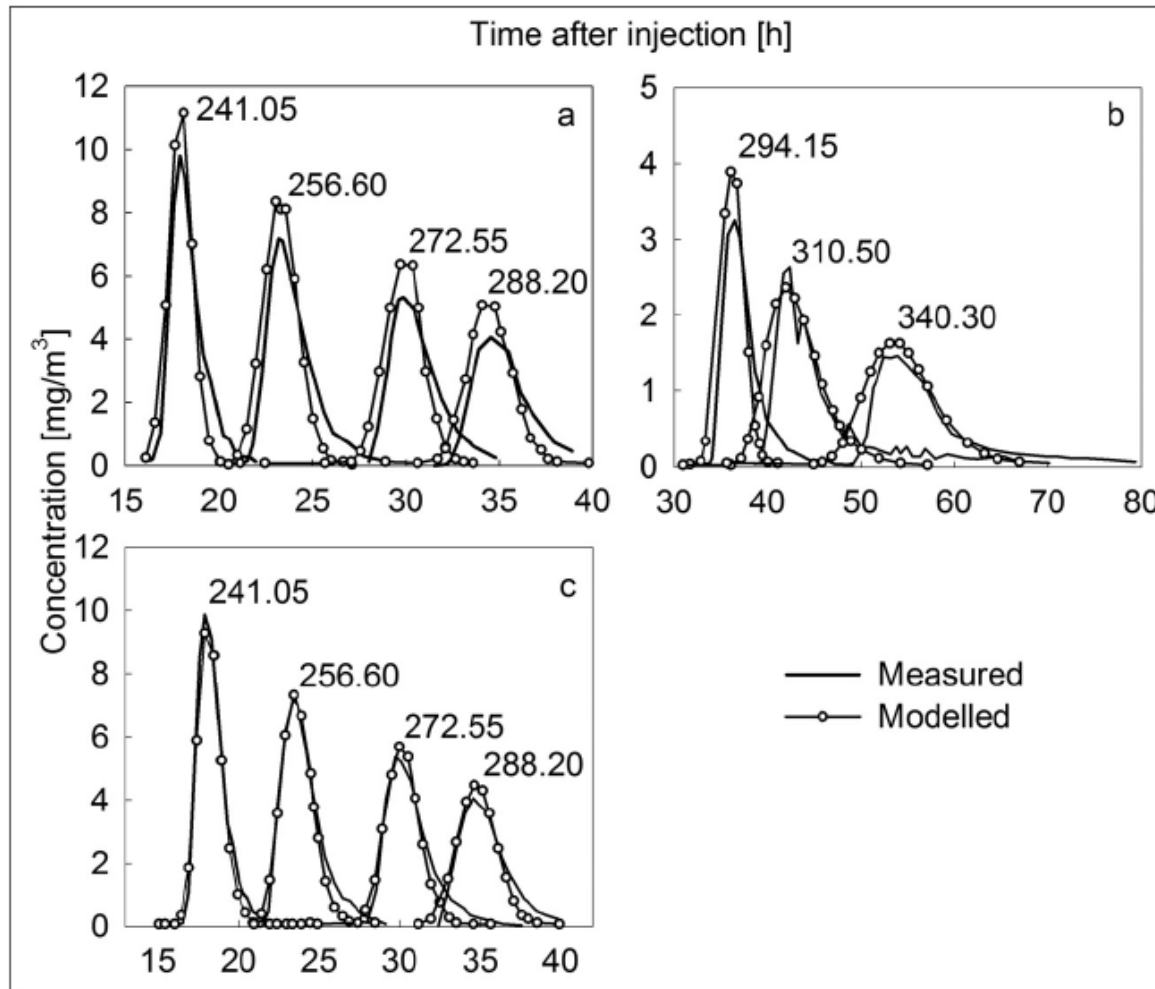
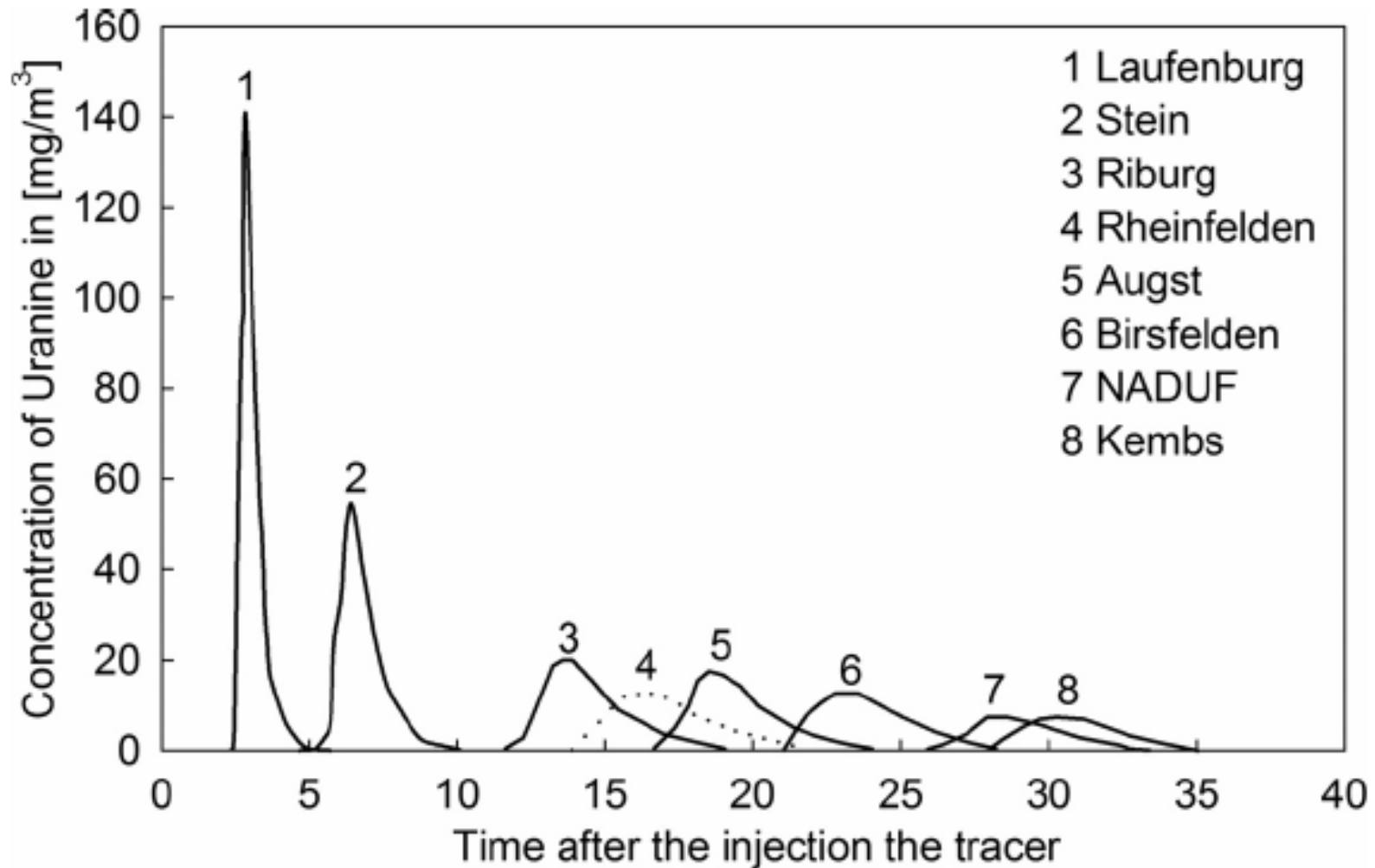
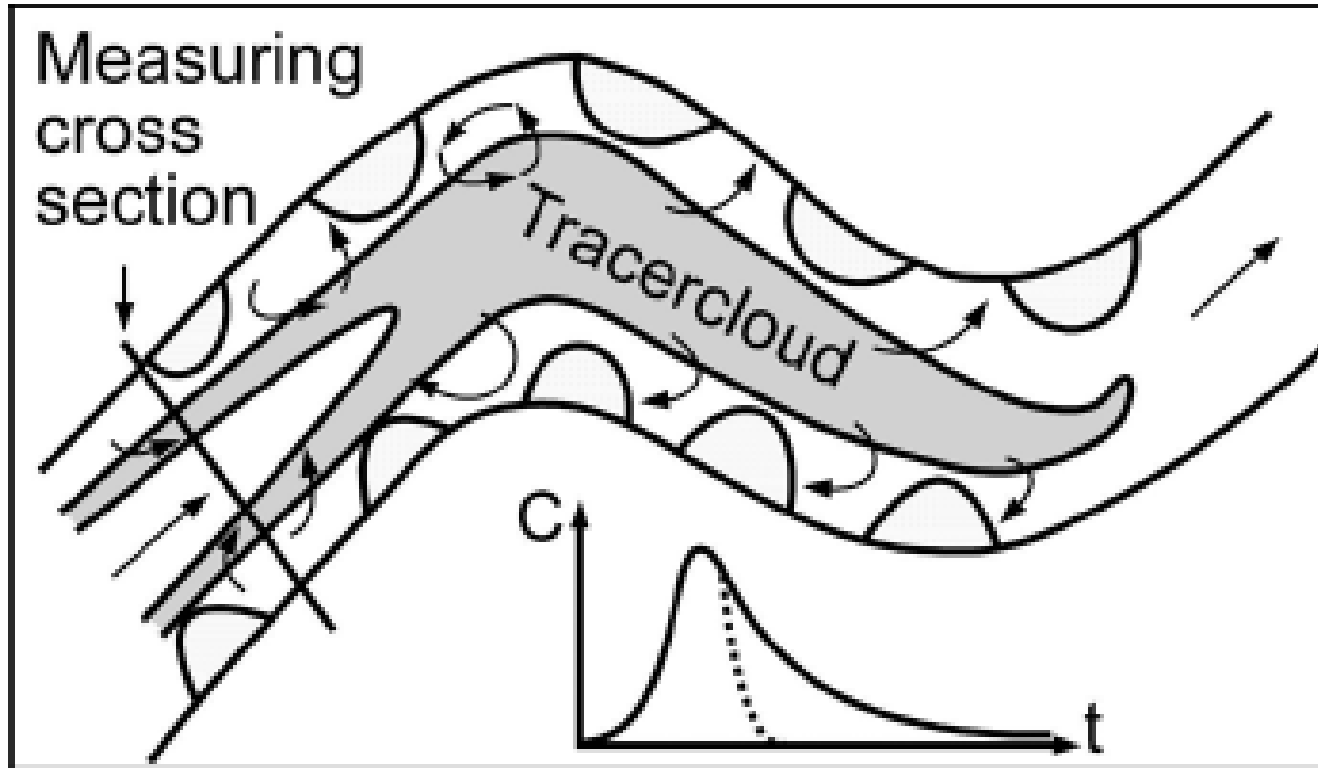


Figure 7.25 Validation of the Upper Rhine river sections: a) postmodelling, Rhine km 241.05–288; b) postmodelling, Rhine km 294.15–340.3; c) forecast improvement, Rhine km 241.05–288.2.

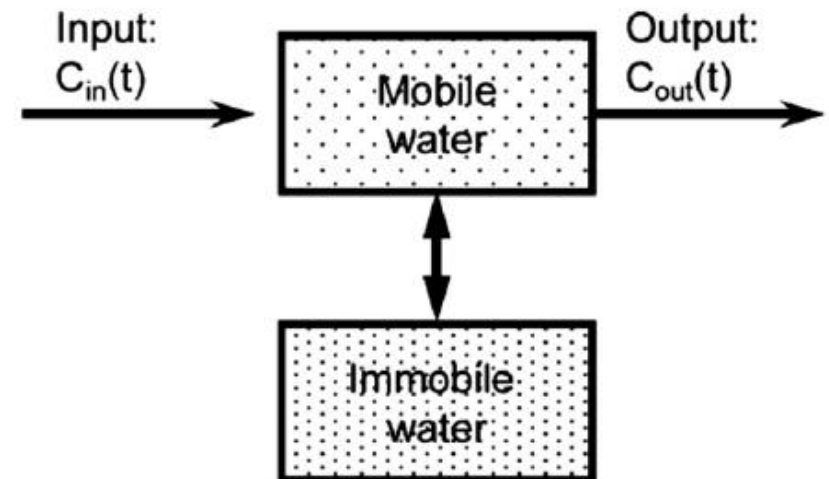


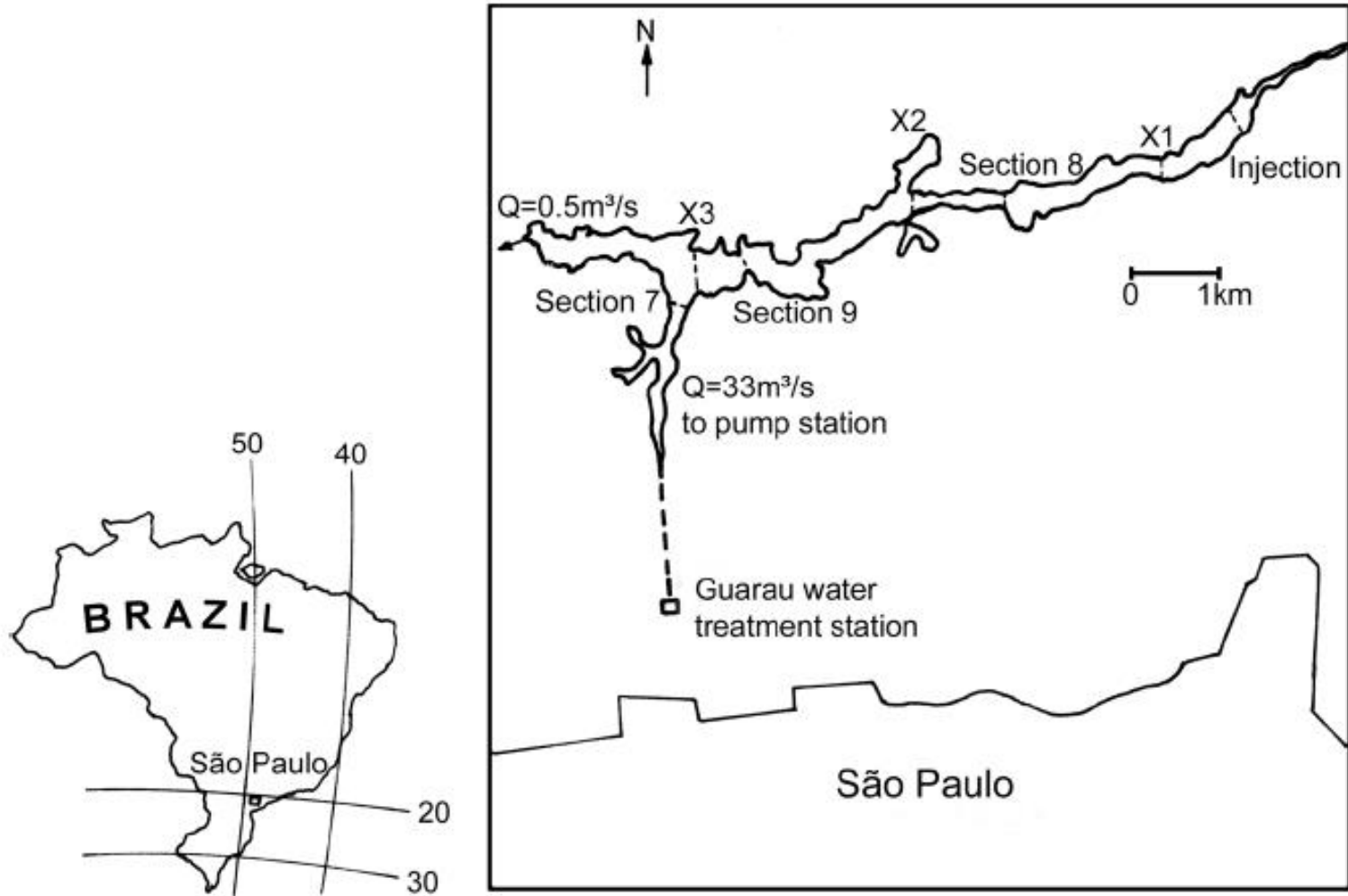


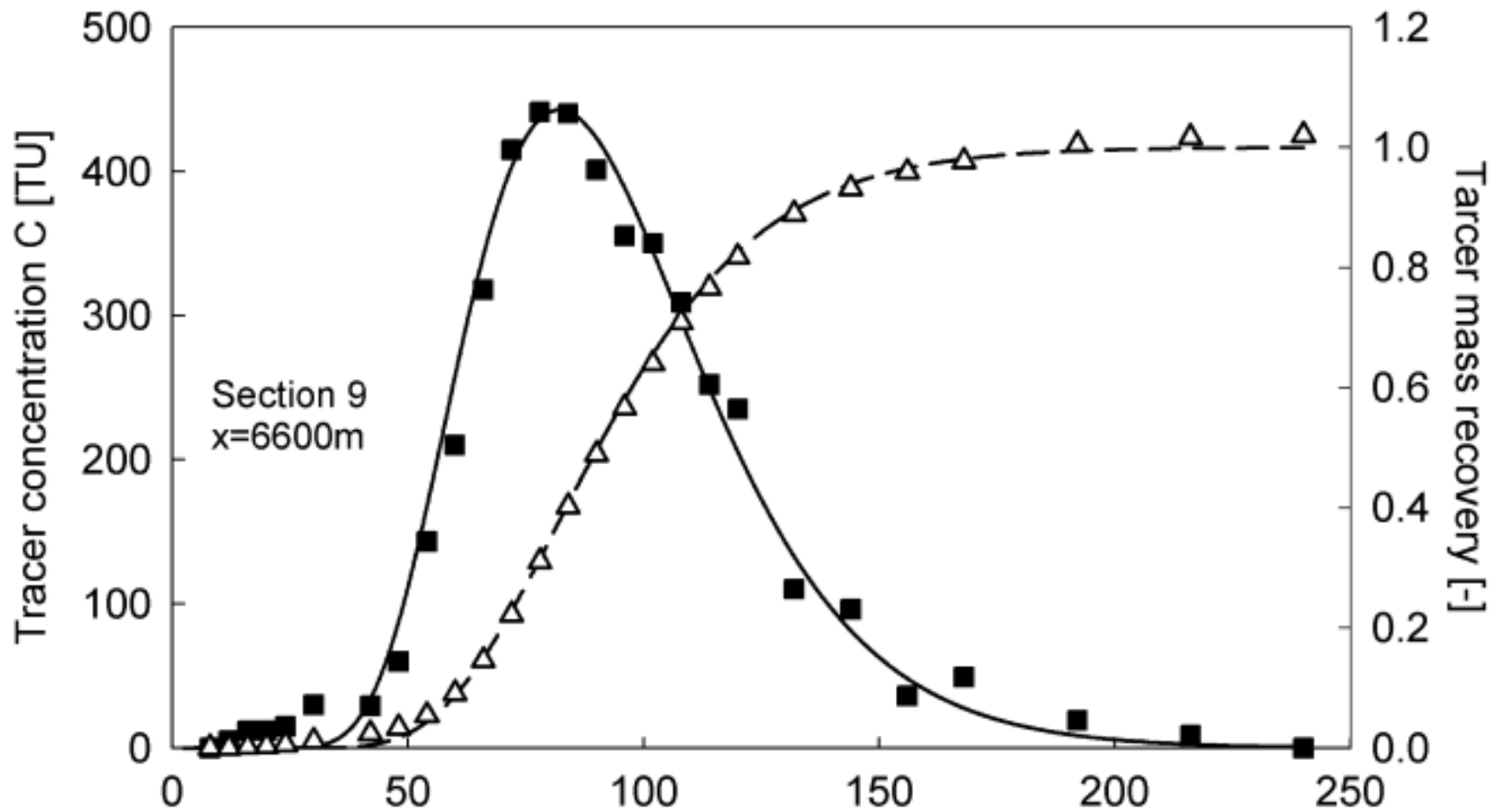
### Single-porosity medium



### Double-porosity medium







- ADV liefert Lösungen für 1D, 2D, 3d
- Damit können Durchgänge vorhergesagt werden
- Es können auch Sorption und Reaktion eingebaut werden
- Grundlegende Vorhersagetechnik