

# 1 Grundwasserströmung in geklüftet porösen Medien

## 1.1 Hydrogeologischer Hintergrund

Ein großer Teil der Erdoberfläche ist von Festgestein bedeckt. Dieser wird intensiv wirtschaftlich genutzt. Als Festgestein werden komplex miteinander verkittete, druckverfestigte oder gewachsene Minerale bzw. Gesteinsbruchstücke bezeichnet. Im Gegensatz dazu versteht man unter Lockergestein unverfestigte, lose Gemenge von Gesteins- und Mineralbestandteilen. Festgestein bietet sich aufgrund seines hohen natürlichen Widerstandes gegenüber der Durchdringung mit Schadstoffen als Standort für Deponien und Endlagerstätten von toxischen oder radioaktiven Substanzen an. Doch wie auch bei der Nutzung von geothermalen Ressourcen sowie Öl- und Gasreservoirien und landwirtschaftlichen Einträgen, muß berücksichtigt werden, daß im felsigen Untergrund eine Vielzahl unterschiedlicher Hohlraumstrukturen, wie z.B. Poren, Trennfugen, Lösungshohlräume, Klüfte und durch Bergbau entstandene Hohlräume auftreten können. Diese Hohlräume sind teilweise untereinander verbunden und ergeben so ein Netz von Regionen höherer Durchlässigkeit, das Strömung von Flüssigkeit und so auch den Transport von Schadstoffen über weite Strecken und mit relativ hoher Geschwindigkeit ermöglicht.

Während Qualität und Auswirkungen der Verunreinigung von Oberflächengewässern direkt gemessen werden können und deren Fließwege, z.B. Flüsse, sichtbar sind, sind die Vorgänge im Untergrund sehr viel schwerer zugänglich. Dabei wurde nach dem Bundesverband der deutschen Gas- und Wasserwirtschaft (BGW) im Jahr 2000 rund 64% der öffentlichen Wasserversorgung der Bundesrepublik Deutschland aus Grundwasser bestritten. Unter dem Begriff Grundwasser wird das unterirdische Wasser zusammengefaßt, das die Hohlräume der Erdkruste zusammenhängend ausfüllt. Der Qualität von Grundwasser und der Vermeidung von Verunreinigungen sollte also besondere Aufmerksamkeit gewidmet werden.

Die Sicherheitstechnische Beurteilung von Deponiestandorten, die Planung und Dimensionierung von Sanierungs- und Sicherungsmaßnahmen für Altlasten erfordern die Kenntnis von Strömungs- und Transportvorgängen im Untergrund. Die unterschiedlichen Nutzungsarten des Untergrundes werfen eine Vielzahl von Fragestellungen auf, die vielfältige Untersuchungen für ein besseres Verständnis der Vorgänge im Untergrund notwendig machen.

Dabei sind gerade in den Festgesteinen die Fließgeschwindigkeiten und Widerstände sehr unterschiedlich und von außen schwer zu beurteilen. Gesteine können eine natürliche Barriere darstellen, sie können aber auch durch ihre Hohlraumstruktur eine verhältnismässig schnelle Strömung zulassen. Hinsichtlich der Durchlässigkeit und Speicherfähigkeit in Gesteinen wird folgende Einteilung vorgenommen:

Aquifer (Grundwasserleiter), wasserdurchlässig und wasserspeicherfähig

Aquitard (Grundwassergeringleiter), wenig wasserdurchlässig, wenig wasserspeicherfähig

Aquitude (Grundwassernichtleiter), sehr wenig wasserdurchlässig, aber wasserspeicherfähig

Aquifuge (Grundwassernichtleiter), weder wasserdurchlässig noch wasserspeicherfähig

Bezeichnung	Durchlässigkeit	Speicherfähigkeit
Aquifer	++	++
Aquitard	+-	+-
Aquitude	-	++
Aquifuge	--	--

Tabelle 1.1: Einteilung von Gesteinen bezüglich Wasserdurchlässigkeit und Wasserspeicherfähigkeit

Entsprechend dem Aufbau der Gesteinshohlräume werden Porengrundwasserleiter, Kluftgrundwasserleiter und Kartstgrundwasserleiter unterschieden. Wir werden uns in dieser Arbeit auf die besonderen Gegebenheiten in geklüfteten Aquiferen konzentrieren.

Im Kluftgrundwasserleiter treten Fließvorgänge mit starken Heterogenitäten auf verschiedenen Längenskalen auf. Welche Merkmale bei Untersuchungen und Modellierung zu berücksichtigen sind, hängt von der Art der Fragestellung, der Größe des zu untersuchenden Gebietes und von der Datenlage ab. Nach Silberhorn–Hemminger [57] und Kobus, Barczewski, Koschitzky [44] lassen sich Kluftsysteme in folgende charakteristische Längenskalen unterteilen. Dabei treten auf den unterschiedlichen Längenskalen unterschiedliche Heterogenitätsmerkmale in der Vordergrund:

Mikroskala: umfaßt einzelne Porenräume, Mikroklüfte und einzelne Fließkanäle in größeren Klüften.

Einzelkluft: Hohlraum zwischen zwei rauhen Bruchflächen. Das Fließverhalten ist heterogen. Neben ausgeprägten Fließpfaden (Channels) existieren Todwasserzonen in der Kluft. Die maßgeblichen Fließprozesse finden in der Kluft statt. Durch Diffusion kommt es zum Austausch zwischen Kluft und Matrix.

Kluftnetzwerk: Ein System von mehreren Klüften. Eine detaillierte Auflösung der rauhen Bruchflächen und des heterogenen Fließregimes in der Kluft ist nicht mehr möglich. Die Klüfte werden im Modell als parallele Platten mit konstanter Öffnungsweite approximiert. Die Interaktion zwischen Kluft und Matrix und die Größenordnungsunterschiede in den Materialeigenschaften zwischen den Klüften und der umgebenden Gesteinsmatrix steuern auf dieser Längenskala maßgeblich das Strömungs- und Transportverhalten des gesamten Systems. Charakterisiert werden die Klüfte durch ihre Richtung, Ausdehnung und ihre Leitfähigkeit/Durchlässigkeit.

Hydrogeologische Aquiferstruktur: Betrachtet werden großräumige hydrogeologische Aquiferstrukturen wie z.B. verschiedene geologische Schichten und einzelne Scherzonen,

dabei wird die kleinräumige Klüftung wie im Kluftsystem aufgegeben und durch ein poröses Kontinuum beschrieben. Einzelne dominante Scherzonen werden als diskrete Strukturelemente beibehalten.

Grundwasserreservoir: Die detaillierte Beschreibung der einzelnen Schichten wird aufgegeben, da sie für die Fragestellungen, die eine großräumige Betrachtung erfordert, nicht relevant ist.

Ein Kluftaquifer stellt also ein komplexes System aus den verschiedenen Komponenten Grobklüfte, Fein Klüfte und Gesteinsmatrix dar. Durch die starken Unterschiede in den Materialeigenschaften stellen Klüfte Diskontinuitäten im Felsgestein dar. Unter den Diskontinuitäten unterscheidet man Scherzonen, Sedimentationsgrenzen, Klüfte und Mikroklüfte, wobei diese in der Hydrogeologie unter dem Begriff Klüfte zusammengefaßt werden. Die umgebende Gesteinsmatrix wird im folgenden auch kurz als *Matrix* bezeichnet. Unter gesättigten Bedingungen werden Klüfte und Kluftzonen meist durch verhältnismäßig hohe Durchlässigkeit und geringe Speicherkapazität charakterisiert, wohingegen die umgebende Gesteinsmatrix eine sehr viel geringere Permeabilität und höhere Speicherkapazität aufweist. Klüfte stellen bevorzugte Fließwege dar und können eine schnelle Ausbreitung von Schadstoffen ermöglichen.

Zusätzlich ist die räumliche Ausdehnung der Gesteinsmatrix meist um einige Größenordnungen größer als die Öffnungsweite der Klüfte. Das Prozeßverhalten im Kluftgrundwasserleiter ist also von starken Heterogenitäten beeinflusst. Bei der Modellierung von Kluftsystemen (siehe Abschnitt 1.2) müssen die besonderen Gegebenheiten wie starke Diskontinuitäten in der Wasserleitfähigkeit und große Unterschiede in den räumlichen Ausdehnung zwischen Gestein und Klüften besonders berücksichtigt werden.

In dieser Arbeit wird nun speziell die Strömung durch in Kluftnetzwerken betrachtet, d.h. wir betrachten Systeme von Klüften mit parallelen Rändern und konstanter Öffnungsweite. Dabei bestimmt der Austausch zwischen den Klüften und der Gesteinsmatrix in großem Maße das Strömungsverhalten des Systems. Bei der Strömungsberechnung ergeben sich eine Reihe von Problemen, wie große Unterschiede in der räumlichen Ausdehnung von Klüften und umgebendem Gestein und starken Variationen in den Wasserdurchlässigkeiten von sehr gering in ungestörten Festgesteinen und sehr hoch in untereinander vernetzten Klüften.

Die Strömungsvorgängen im Kluftaquifer bilden die Grundlage für alle Transportberechnungen, wobei die Strömung für den Transport einen sensitiven Parameter darstellt und daher besonders genau berechnet werden sollte. Bei unseren Untersuchungen legen wir besonderes Augenmerk auf die Skalenunterschiede zwischen Kluft und Matrix und die Koeffizientensprünge am Kluft-Matrix-Interface.

## 1.2 Modellierung von Kluftsystemen

Für eine numerische Simulation von Vorgängen im Untergrund, die sich an den tatsächlichen Gegebenheiten orientiert, ist eine ausreichende Kenntnis der prozeßrelevanten Parameter und der Geometrie notwendig. Die Erhebung der für die Beschreibung eines Kluftsystems notwendigen Daten erfolgt durch Punktmessungen, Bohrlochaufnahmen,

Linienuntersuchungen, Flächenuntersuchungen, geophysikalische Untersuchungen und stereographische Untersuchungen (siehe z.B. Singhal und Gupta [58] und Witthüser und Himmelsbach [67]). So müssen ausreichende Informationen über Kluftgröße, Kluftabstände, Kluftdichte, Öffnungsweiten, Orientierung, Konnektivität und Terminationsverhalten der Klüfte gewonnen werden. In den seltensten Fällen liegen über diese Parameter ausreichende, direkt erfaßte Kenntnisse vor. Schon in die Bereitstellung dieser Eigenschaften gehen statistische Annahmen und Verallgemeinerungen ein. So wird z.B. die Kluftgröße über die Kluftspuren ermittelt, die an den, dem Auge des Betrachters zugänglichen Aufschlußwänden sichtbar sind. Anschließend erfolgt eine statistische Analyse. Kluftabstände sind abhängig von den elastischen Eigenschaften des Gesteins.

Der mathematischen Modellierung von Strömungsprozessen in geklüftet porösem Untergrund gehen also folgende Teilschritte voraus:

Messungen: an Ober- und Bruchflächen und Bohrkernen werden Messungen durchgeführt, Materialeigenschaften werden in Labor und Feldexperimenten bestimmt.

Geometriedaten werden bestimmt: deterministisch und stochastisch/geostatistisch (siehe Silberhorn-Hemminger [57])

Kluftgenerierung: die numerische Simulation von Strömungsvorgängen erfordert die Beschreibung der für das Kluftsystem ermittelten Daten in einem Modell. Auf der Grundlage des vorhandenen Datenmaterials werden die Klüfte in einem geometrischen Strukturmodell diskret erfaßt. Ein Kluftgenerator (siehe Abschnitt 5.1 und z.B. Silberhorn-Hemminger [57]) erstellt auf der Basis der zur Verfügung stehenden Daten eine Abbildung, die die strukturellen Eigenschaften des Systems beinhaltet.

Die Erfassung der geometrischen Strukturen, die Beschreibung der Klüfte in einem numerischen Modell, die Bereitstellung der Bodenparameter durch Feld- und Laborexperimente und die Verarbeitung der so gewonnenen Daten in einem Kluftgenerator sind Gegenstand aktueller Forschung (Hemminger et al. [38], Silberhorn-Hemminger [57]). Aufbauend auf die vom Kluftgenerator gelieferten Daten wird ein Netz generiert (siehe Abschnitt 5.2.1), erst anschliessend kann auf dieser Grundlage eine Diskretisierung durchgeführt und numerische Verfahren zur Lösung des entstehenden Gleichungssystems eingesetzt werden.

Das von uns betrachtete Kluftnetzwerk stellt ein komplexes System mit den Komponenten Grobklüfte, Fein Klüfte und Gesteinsmatrix dar. Die Betrachtung großer Systeme erlaubt im allgemeinen nicht die Einbeziehung kleinskaliger Information, einerseits weil eine Erfassung der notwendigen Daten in der erforderlichen Dichte nicht möglich ist und zum anderen, weil die benötigten Rechnerkapazitäten und Rechnerzeiten in keinem Verhältnis zu den Ergebnissen stünden.

Zur modelltechnischen Untersuchung von Strömungs- und auch Transportverhalten werden im Kluftaquifer eine Reihe von Modellansätzen verwendet, die sich in die folgenden Klassen gliedern lassen:

**Diskretes Modell:** bei diesem Modell werden einzelne, für das Strömungs- und Transportgeschehen relevante, geologische Strukturen direkt erfaßt und in das Modell

eingebunden. Sinnvoll ist dieses Modell bei Einzelkluft und Kluftnetzwerkbetrachtungen mit einigen wenigen dominanten Klüften, Scherzonen oder Kluftsystemen. Strömungs- und Transportprozesse werden in starker Anlehnung an die Natur beschrieben. Voraussetzung für dieses Konzept ist die ausreichende Kenntnis des Kluftinventars: Lage, Ausdehnung der Klüfte, Anordnung der Klüfte zueinander, Materialeigenschaften von Klüften und Matrix.

Aufgrund fehlender Detailkenntnisse ist man oft auf eine stochastische Generierung des Kluftsystems angewiesen. Dies ist nur möglich, wenn die an Aufschlußwänden, Tunnelwandungen und Bohrkernen ermittelten statischen Kenngrößen und Verteilungen für das gesamte Gebiet statistisch repräsentativ sind. Das diskrete Modell kann also nur angewendet werden, wenn die Charakterisierung des Kluftinventars entweder deterministisch oder statistisch möglich ist. Bei sehr großen Gebieten und Gebieten mit einer starken Variation der Kluftparameter stößt die Aussagekraft der diskreten Modellierung an ihre Grenzen.

Die explizite Erfassung aller Klüfte bedeutet meist auch einen erheblichen Rechen- und Speicheraufwand bei Berechnungen, die auf dieser Grundlage durchgeführt werden. Daher war es bislang nicht möglich, größere Kluftsysteme diskret zu berechnen. Erst die Entwicklung neuerer Computergenerationen mit mehr Speicher und Rechenkapazität erlaubt die diskrete Berechnung relevanter Kluft-Matrix-Systeme.

**Kontinuum-Modell:** Diese Modelle werden auch als äquivalente Ansätze bezeichnet. Hier werden Einkontinuum, Zwei-Kontinuum und Mehr-Kontinuum-Modelle zusammengefaßt. Für ein Einkontinuum-Modell werden die Eigenschaften des Kluft-Systems durch eine Homogenisierung in ein kontinuierliches System überführt, dieses setzt eine hinreichend gleichmässige Verteilung und Ausprägung der Klüfte voraus, dann erfolgt eine Mittelwertbildung.

Im Zwei- oder Mehr-Kontinuum-Modell wird das typische hierarchische System von Grobklüften, Fein Klüften und Matrix durch zwei bzw. mehrere sich überlagernde Kontinua beschrieben. Jedes einzelne Kontinuum stellt dabei ein äquivalentes poröses Medium mit äquivalenten Eigenschaften wie Durchlässigkeit und Porosität dar. Diese Vorgehensweise ist nur möglich, wenn die Klüfte im Gebiet von vergleichbarer Größenordnung sind und in ausreichender Dichte vorliegen.

Die verschiedenen Kontinua werde über einen Austauschterm miteinander gekoppelt, der den Fluß zwischen den Systemen kontrolliert.

Der Vorteil dieses Ansatzes ist, daß nicht mehr die Positionierung und die Ausdehnung einzelner Klüfte bzw. Kluftscharen für die Gebietsbeschreibung notwendig ist, sondern lediglich gemittelte äquivalente Eigenschaften.

Gesteine mit hoher Kluftdichte und starker Vernetzung zeigen meist ein Kontinuum-Verhalten. Gesteine mit geringer Kluftdichte, geringer Vernetzung und starker Anisotropie zeigen hingegen kaum Kontinuum-Verhalten. Dann kann die Heterogenität durch die Zusammenfassung sehr unterschiedlicher Komponenten in ein äquivalentes Ersatzsystem nur sehr unzureichend erfaßt werden.

Gegebenenfalls können die beiden beschriebenen Modelle kombiniert werden. Ein Netz aus feinen, gleichmäßig verteilten, in ihren Eigenschaften ähnlichen Klüften wird stückweise

homogenisiert und in einem Kontinuum mit der Gesteinsmatrix zusammengefaßt, einzelne dominante Klüfte werden diskret dargestellt. Dieser Ansatz wird oft als gemischtes oder auch als **Hybrid-Modell** bezeichnet.

In vielen Fällen bietet sich eine Kombination aus diskretem und Kontinuum-Modell, also ein Hybrid-Modell an, da die diskrete Erfassung aller feinen und groben Klüfte mit einem zu großen Zeit- und Speicheraufwand verbunden wäre. In dieser Arbeit wird ebenfalls ein gemischter Ansatz verfolgt. Einzelne Klüfte werden diskret betrachtet, die Gesteinsmatrix stellt ein äquivalentes Kontinuum eines Netzwerkes eines kleineren Maßstabes dar. Dabei gehen wir davon aus, daß die für die diskrete Modellierung einzelner dominanter Klüfte notwendigen Parameter in ausreichendem Umfang vorhanden sind.

### 1.3 Äquidimensionale Modellierung

Die Geometrie von diskret modellierten Kluft-Matrix-Systemen ist geprägt von großen Unterschieden in den Abmessungen. Die Öffnungsweite der Klüfte ist meist um einige Größenordnungen kleiner als die Ausdehnung der Gesteinsblöcke. Üblicherweise werden Kluft und Matrix daher durch Elemente unterschiedlicher Dimension modelliert, indem die Klüfte in 2-D Rechengebieten als Linien oder in 3-D als Linien und Flächen betrachtet werden. Im folgenden wird diese Vorgehensweise als niederdimensionale Modellierung bezeichnet.

Die niederdimensionale Modellierung scheint zunächst aufgrund der Skalenunterschiede zwischen Kluft und Matrix nahe zu liegen. Die Kopplung zwischen den verschiedenen Elementtypen von Kluft und Matrix erfolgt bei dieser Vorgehensweise und einer Diskretisierung mit Finiten Elementen durch eine Addition der passend gewichteten lokalen Elementsteifigkeitsmatrizen. Auf diese Weise kann jedoch die lokale Flußerhaltung am Kluft-Matrix-Übergang nicht gewährleistet werden und damit wird gegebenenfalls der zugrundeliegende physikalische Prozeß nicht richtig erfaßt.

Im Gegensatz zur niederdimensionalen Modellierung werden bei der äquidimensionalen Modellierung Kluft und Matrix mit Elementen gleicher Dimension vernetzt. Daraus resultieren entweder im Kluftbereich anisotrope, also sehr lange schmale Elemente, oder die Matrix muß in der Nähe der Klüfte sehr viel feiner vernetzt werden, als es die Dynamik des Systems in der Matrix fordert. Eine Vernetzung der Matrix mit Elementen mit einer Schrittweite in der Größenordnung der Kluftweite ist nicht praktikabel, da gerade bei größeren Kluft-Matrix-Systemen auf diese Weise der Speicheraufwand und die Rechenzeit unüberschaubar groß würden.

Bei einer Diskretisierung mit anisotropen Elementen in der Kluft scheitern klassische Lösungsverfahren wie z.B. Mehrgitterverfahren an der Lösung des bei der Diskretisierung entstandenen Gleichungssystems (siehe auch Kapitel 3), d.h. geht die Kluftbreite gegen Null, so geht die Konvergenzrate dieser Verfahren gegen 1, die Verfahren konvergieren also nicht.

Die äquidimensionale Modellierung bietet aber eine Reihe von Vorteilen gegenüber der niederdimensionalen Modellierung. Erlaubt die niederdimensionale Modellierung in der Kluft nur Gradienten (d.h. Geschwindigkeiten, siehe Kapitel 2) in Richtung der Kluftachse, können bei der äquidimensionalen Modellierung auch Geschwindigkeiten quer zur Kluftachse auftreten (siehe Abbildung 1.1). Dies ermöglicht die lokale Flußerhaltung am Kluft-Matrix-

Übergang.

Bei der niederdimensionalen Modellierung treten in der Kluft keine reinen Kluftknoten auf. Kluftknoten sind immer gleichzeitig auch Matrixknoten. Sich für die Kluft ergebende Werte der Zustandgrößen sind daher immer auch Matrixwerte. Im Gegensatz dazu treten bei der äquidimensionalen Modellierung in der Kluft Freiheitsgrade auf, die ausschließlich zur Kluft gehören. Auf diese Weise werden Flüsse zwischen Kluft und Matrix zuverlässiger abgebildet (siehe Neunhäuserer [48]). Die Vor- und Nachteile von niederdimensionalem

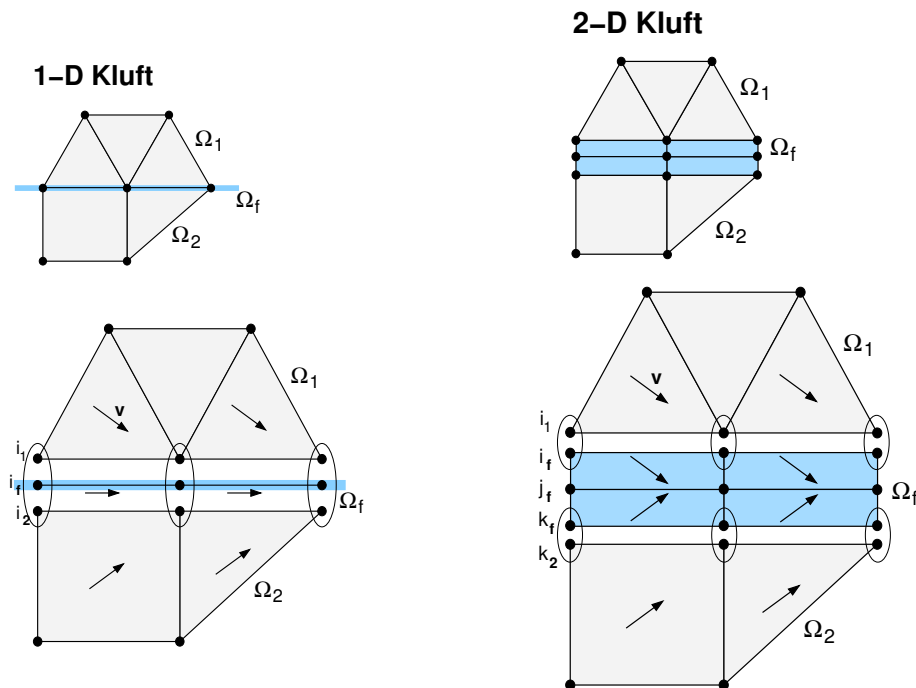


Abbildung 1.1: Niederdimensionale und äquidimensionale Diskretisierung von Kluft und Matrix (nach Neunhäuserer [48]). Links oben: Kluft als 1-D Stabelemente, links unten: mögliche Gradienten bei niederdimensionaler Kluft-Diskretisierung, keine reinen Kluftknoten, rechts oben: Kluft als 2-D Vierecke, rechts unten: mögliche Gradienten bei äquidimensionaler Diskretisierung, reine Kluftknoten

und äquidimensionalem Ansatz und ihre Anwendbarkeit auf verschiedene Modellprobleme hat Neunhäuserer [48] eingehender untersucht. Zusätzlich werden in dieser Arbeit die Eigenschaften der verschiedenen Diskretisierungsverfahren und ihre Anwendbarkeit auf die beiden Modellansätze betrachtet.

Daraus ergibt sich ein weiterer Vorteil der äquidimensionalen Modellierung: Dieser Ansatz erweist sich als flexibler, was die Wahl der Diskretisierung angeht. So kann bei der niederdimensionalen Modellierung kein gemischt-hybrides Finite Elemente Verfahren eingesetzt werden. Dieses Verfahren liefert gegenüber den linearen Finiten Elementen und dem Boxverfahren (einem Finite Volumen Verfahren zweiter Ordnung für die Strömung bei strukturierten Gittern) eine genauere Approximation der Geschwindigkeit. In der vorliegenden Arbeit werden wir nicht mit gemischt hybriden Finiten Elementen arbeiten sondern lineare Finite Elemente verwenden. Der Grund dafür liegt aber in der einfacheren Zugänglichkeit der linearen Finiten Elemente bei der mathematischen Analyse. Es sollte

zunächst der Nachweis erbracht werden, daß der hier verfolgte hierarchische Ansatz für ein Verfahren zur Lösung der Strömungsgleichung in der äquidimensionalen Formulierung zu einem robusten und effektiven Verfahren führt.

Thema dieser Arbeit ist die Entwicklung und Implementierung eines robusten Lösungsverfahrens für die Strömung in äquidimensional diskretisierten Kluft-Matrix-Systemen. Robust bedeutet in diesem Fall stabil gegenüber verschwindender Kluftbreite und den Koeffizientensprüngen am Kluft-Matrix-Übergang. Es wird auf der Grundlage einer hierarchischen Gebietszerlegung ein Mehrgitterverfahren entwickelt, das die Verwendung eines speziellen Löser für anisotrope Gitter für die Klüfte erlaubt und durch Aufspaltung des Matrixproblems in ein Matrix- und ein Interfaceproblem robust ist.