Einleitung

Grundwasser ist eine knappe Ressource. Ein großer Teil des Grundwassers liegt in felsigem Untergrund vor. Wirken Felsen als natürliche Barriere gegenüber dem Eindringen und der Ausbreitung von Schadstoffen, so lassen Spalten/Klüfte eine Strömung und gegebenenfalls auch einen Transport von Schadstoffen zu. Eine genaue Kenntnis der Fließprozesse im Untergrund ist daher für die Nutzung von Grundwasser insbesondere als Trinkwasser notwendig.

Die Strömung in geklüftet porösen Medien wird von einer Geometrie mit schmalen langen Klüften und ausgedehnten Gesteinsblöcken, der sogenannten Gesteinsmatrix, dominiert. Innerhalb der unterschiedlich breiten Klüfte treten unterschiedliche, im Vergleich mit den Geschwindigkeiten in der Gesteinsmatrix, große Geschwindigkeiten auf. Die teilweise sehr großen Gesteinsblöcke fungieren als natürliche Barrieren, sie speichern Flüssigkeit (z.B. Sandstein) und lassen nur sehr langsamen Fluß zu. Ähnliche Fließvorgänge treten auch in anderen Anwendungen auf. So stellen die Adern im Blutkreislauf des menschlichen Körpers Fließwege dar, die von ausgedehnteren Partien weniger durchlässigen Gewebes umgeben sind (siehe Quarteroni, Veneziani [54]). Das hat insbesondere Auswirkungen auf den Wärmetransport, der z.B. bei der Krebstherapie mittels Hyperthermie von entscheidender Bedeutung ist (siehe Sreenivasa et al [59]). Auch in Hautschichten des menschlichen Körpers werden Modelle verwendet, die zu einer ähnlichen Problemstruktur führen. Stellt man die Durchlässigkeitseigenschaften der Haut durch eine Ziegel und Mörtel Struktur dar, so erhält man auch hier schmale Fließwege durch ausgedehntere Bereiche geringerer Durchlässigkeit (siehe Heisig et al [34]).

Wir werden die folgenden Überlegungen anhand von Kluft–Matrix–Systemen in der Hydrogeologie darstellen. Dabei benutzen wir die in der Hydrogeologie übliche Abkürzung 'Matrix' für die Gesteinsmatrix. Dies sollte nicht zu Verwechslungen mit dem mathematischen Begriff 'Matrix' führen. Die Ergebnisse lassen sich auf ähnlich geartete Probleme mit den gleichen numerischen Schwierigkeiten übertragen.

In vielen dieser Anwendungen ist eine möglichst genaue Berechnung der Geschwindigkeiten notwendig, da sie die Grundlage für Transportberechnungen darstellt. So ist bei der Planung von Deponien die Schadstoffausbreitung besonders kritisch, bei der Simulation des menschlichen Organismus der Transport von Stoffen wie Arzneimitteln, Flüssigkeiten und auch Wärme.

Die für diese Problemklasse charakteristischen Skalenunterschiede und Sprünge in den Parametern führen zu Schwierigkeiten bei der numerischen Lösung der Modellgleichungen (siehe Abschnitt 1.2). So muß für eine Vernetzung der sehr langen dünnen Klüfte und der umliegenden Gesteinsmatrix mit isotropen Elementen eine sehr hohe Anzahl von Knoten in Kauf genommen werden. Man benötigt $\mathcal{O}(\varepsilon^{-1})$ Elemente zu Vernetzung einer Kluft mit Kluftweite ε. Bei anisotroper Vernetzung der Klüfte hingegen konvergieren klassische

Mehrgitterverfahren für realistisch schmale Klüfte nicht. Algebraische Mehrgitterverfahren zeigen zwar meist ein akzeptables Konvergenzverhalten, es existieren jedoch kaum theoretische Erkenntnisse über Konvergenz und Robustheit dieser Verfahren. Damit existiert also kein theoretisch abgesicherter Löser bei anisotroper Vernetzung der Klüfte. Bei der Modellierung von Grundwasserfluß in geklüftet porösen Medien werden diese Schwierigkeiten häufig umgangen, indem die geometrisch flachen, langgestreckten Objekte wie Klüfte eine Dimension niedriger betrachtet werden als die umliegenden Gesteinsblöcke von größerer geometrischer Ausdehnung (siehe z.B. Bastian et al [12]). Bei dieser Vorgehensweise ist allerdings ein Fluß aus der Kluft heraus von vorneherein ausgeschlossen. Die Auswirkungen dieser Vereinfachungen sind von Fall zu Fall unterschiedlich (siehe Neunhäuserer [48]).

Ziel der vorliegenden Arbeit ist die Entwicklung und Analyse eines robusten Verfahrens zur Lösung der partiellen Differentialgleichung für die Strömung in geklüftet porösen Medien. Dabei bezieht sich die Robustheit nicht nur auf Diskretisierungsparameter, wie Schrittweite h oder Verfeinerungstiefe j, sondern insbesondere auf Sprünge in den Koeffizienten und verschwindende Kluftweite ε. Die Idee basiert auf einer Gebietszerlegung, welche durch die physikalischen Besonderheiten der Kluft–Matrix–Systeme motiviert ist. Die Grundlage des Verfahrens bildet eine hierarchische Zerlegung in ein Kluft–, ein Interface– und ein Matrixproblem. Aus dieser Zerlegung erhält man in kanonischer Weise (siehe Xu [69], Yserentant [70]) ein Teilraumkorrekturverfahren. Diese Vorgehensweise ermöglicht insbesondere in den Teilproblemen 'Kluft' und 'Matrix' den Einsatz von den physikalischen Gegebenheiten der Teilprobleme angepaßten Lösungsverfahren.
Für das so entstehende neue hierarchische Gebietszerlegungsverfahren zeigen wir robuste Konvergenz, d.h. Konvergenz unabhängig von der Kluftweite, dem Sprung in den Koeffizienten und der Verfeinerungstiefe (Satz 9) und bestätigen diese Ergebnisse anhand von Beispielen numerisch.

Die Arbeit ist wie folgt gegliedert: Zum besseren Verständnis des Problems und der zugrundeliegenden Strukturen geben wir in Kapitel 1 eine Einführung in den hydrogeologischen Hintergrund (Abschnitt 1.1). Da die Gegebenheiten im Untergrund nicht offen zugänglich sind, geht der Strömungsberechnung eine eingehende Analyse der zugrundeliegenden Daten und eine darauf aufbauenden Erstellung eines Kluftgeometriemodells voraus (Abschnitt 1.2). Die Unterschiede zwischen niederdimensionaler und äquidimensionaler Modellierung und die Vorteile der äquidimensionalen Modellierung werden in Abschnitt 1.3 erläutert.
Kapitel 2 dient der Herleitung des mathematischen Modells für die laminare gesättigte Strömung aus der Kontinuitätsgleichung (Abschnitt 2.1) und dem Darcy–Gesetz (Abschnitt 2.2). Daraus erhalten wir eine lineare elliptische Differentialgleichung für die gesättigte Grundwasserströmung (Abschnitt 2.3). Die Bedeutung der Dirichlet– und Neumann–Randbedinungen für diesen Fall wird in Abschnitt 2.4 erläutert. Anschließend wird für die schwache Formulierung (Abschnitt 2.5) der partiellen Differentialgleichung für die Strömung die Existenz und Eindeutigkeit von Lösungen untersucht (Abschnitt 2.6).
Nach der Herleitung und Erstellung eines kontinuierlichen Modells geht es in Kapitel 3 um die Diskretisierung und Lösung des diskreten Problems. Wir verwenden in dieser Arbeit

eine Finite–Elemente–Diskretisierung (Abschnitt 3.2). Die besondere komplexe geometrische Struktur des Problems und die Umsetzung unserer Idee für die Lösung erfordern eine bestimmte Form der Vernetzung, die auch auf feineren Gittern innerhalb der Mehrgitter–Struktur erhalten bleiben muß. In Abschnitt 3.2.1 gehen wir daher auf die Aspekte der Gitterverfeinerung ein, um die vorgegebene Gitterstruktur zu erhalten. Da wir innerhalb der Klüfte anisotrope Parallelogramme und Trapeze verwenden geben wir in Abschnitt 3.2.2 die für die Konvergenzanalyse des Verfahrens wichtigen Transformationsregeln für isoparametrische Finite Elemente an. Die tatsächliche Diskretisierung der Strömungsgleichung und die entsprechenden Fehlerabschätzungen stellen wir in Abschnitt 3.2.3 vor.
Die Abschnitte 3.3 und 3.4 stellen die zentralen Punkte dieser Arbeit dar. Zunächst wird der Lösungsraum hierarchisch in einen Kluftraum, einen Interfaceraum und eine Anzahl von Matrixräumen aufgeteilt. Dies bringt zusätzlich die Möglichkeit, innerhalb der einzelnen Teilprobleme einen den speziellen Gegebenheiten in den Teilproblemen angepaßten Löser auf den Teilrräumen einzusetzen. Dazu spalten wir hierarchisch einen Kluftraum ab (Abschnitt 3.3.1). Die Hauptschwierigkeit bei der Berechnung von Kluft–Matrixsystemen liegt am Interface zwischen den Klüften und der Gesteinsmatrix. Wir spalten daher auch einen Interfaceraum ab (Abschnitt 3.3.2). Den verbleibenden Matrixraum unterteilen wir hierarchisch weiter in eine Reihe kleinerer Matrixräume (Abschnitt 3.3.3). Auf der so entstandenen Zerlegung des Lösungsraums des diskreten Problems führen wir eine Teilraumkorrekturmethode durch. Dazu stellen wir in Abschnitt 3.4.1 die Idee der Teilraumkorrekturmethoden vor und setzen in Abschnitt 3.4.2 die vorangegangenen Überlegungen zu einem hierarchischen Gebietszerlegungsverfahren für Kluft–Matrix–Systeme zusammen. Wir zeigen für dieses Verfahren unter gewissen Regularitätsvoraussetzungen an das Grobgitter die robuste, d.h. von der Kluftweite, dem Koeffizientensprung und der Verfeinerungstiefe unabhängige Konvergenz des Verfahrens.
Wir haben zusätzlich eine Variante des hierarchischen Verfahrens implementiert, die ohne direkte Lösung in den Teilproblemen auskommt. Diese Variante wird in Abschnitt 3.5 beschrieben.
Kapitel 4 dient der Konstruktion eines adaptiven Multilevelalgorithmus auf der Grundlage des in Kapitel 3 vorgestellten Verfahrens. Dazu benötigen wir Fehlerschätzer für isotrope (Abschnitt 4.1.1) und anisotrope (Abschnitt 4.1.2) Elemente. Mit dem Abbruchkriterium (Abschnitt 4.2) und der Verfeinerungsstrategie (Abschnitt 4.3) erhalten wir so einen adaptiven Multilevelalgorithmus für geklüftet poröse Medien (Abschnitt 4.4).
Für die praktische Überprüfung der theoretischen Ergebnisse haben wir bereits bestehende Module und Software–Systeme genutzt und an unsere speziellen Anforderungen angepaßt (Kapitel 5). Da die tatsächlichen Gegebenheiten im Untergrund in den seltensten Fällen in ausreichendem Maße bekannt sind, geht der numerischen Simulation eine Kluftgeometrieerstellung voraus. Dies geschieht auf der Grundlage von umfassenden statistischen Auswertungen von an Aufschlußwänden und in Bohrkernen zur Verfügung stehenden Daten. Aus diesen Daten erzeugt ein Kluftgenerator ein Kluftnetzwerk. Der hier verwendete Kluftgenerator FRAC3D wird in Abschnitt 5.1 vorgestellt. Die Vernetzung der komplexen Geometrie geklüftet poröser Medien mit nichtentarteten Drei–und Vierecken stellt eine schwierige Aufgabe dar. Auf den vom Kluftgenerator zur Verfügung gestellten Daten erstellt ein Netzgenerator ein Grobgitter (Abschnitt 5.2). Das hierarchische Gebietszerlegungsverfahren haben wir in MUFTE–UG integriert. Das

Softwarepaket MUFTE (Abschnitt 5.3.1) umfaßt vor allem Module für unterschiedliche Probleme der Hydrosystem–Modellierung. In UG (Abschnitt 5.3.2) stehen eine Reihe von Finite–Elemente–Diskretisierungen, Fehlerschätzer, eine Gitterverwaltung und die Möglichkeit eigener Gebietsbeschreibungen zur Verfügung. Wir haben für das hierarchische Gebietszerlegungsverfahren die vorhandenen Strukturen ergänzt und erweitert. Für das adaptive Konzept wurden entsprechende Fehlerschätzer integriert. Die eigenen Datenstrukturen werden in Abschnitt 5.3.3 beschrieben.
Kapitel 6 schließlich dient der Überprüfung der theoretischen Ergebnisse aus Abschnitt 3.4 anhand von Beispielen. Wir testen das hierarchische Gebietszerlegungsverfahren zunächst an einem Modellproblem (Abschnitt 6.1). Für dieses Beispiel konvergiert das Verfahren bei einer Vernetzung der Klüfte mit Quasi–Parallelogrammen robust, also unabhängig von der Kluftweite, dem Koeffizientensprung und der Verfeinerungstiefe. Es zeigt sich, daß die Konvergenzraten gerade in der Größenordnung der Konvergenzraten des klassischen Mehrgitterverfahrens für das reduzierte Problem mit Kluftweite $\varepsilon = 0$ liegen. Wir erhalten also trotz Klüften und Koeffizientensprüngen robuste Mehrgittereffizienz.
Anschließend untersuchen wir den tasächlichen Einfluß der Abweichung der Elemente in den Klüften von der Parallelogrammstruktur auf das Konvergenzverhalten des hierarchischen Gebietszerlegungsverfahrens. Für größere Abweichungen der Elemente von Parallelogrammen und sehr schmale Klüfte wird die Konvergenz langsamer, die Konvergenzraten gehen schließlich gegen 1 (Abschnitt 6.1.1). Anhand des Modellproblems untersuchen wir nun die Konvergenzeigenschaften der Zweilevel–Variante des hierarchischen Verfahren aus Abschnitt 3.5. Das hierarchische Zweilevel–Verfahren zeigt vergleichbares Konvergenzverhalten wie das hierarchische Gebietszerlegungsverfahren (siehe Abschnitt 6.1.2). Um die mit dem hierarchischen Gebietszerlegungsverfahren erzielten Ergebnisse einordnen zu können, haben wir das Modellproblem auch mit anderen allgemein verwendeten Verfahren wie klassische Mehrgitter und algebraische Mehrgitterverfahren gerechnet. Klassische Mehrgitterverfahren sind für Kluft–Matrix–Probleme nicht einsetzbar. Hingegen konvergiert das verwendete algebraische Mehrgitterverfahren kaum schlechter als das hierarchische Gebietszerlegungsverfahren (siehe Abschnitt 6.1.3).
Zum Abschluß der Arbeit haben wir den adaptiven Algorithmus auf ein Kluftnetzwerk angewendet (Abschnitt 6.2). Die Anzahl der Unbekannten läßt sich so im Vergleich zur uniformen Verfeinerung stark reduzieren. Die Anzahl der benötigten Iterationsschritte auf einem Level ist unabhängig von der Verfeinerungstiefe.

Danksagung: In erster Linie geht mein Dank an Prof. Dr. R. Kornhuber, der mein Interesse für dieses Arbeitsgebiet geweckt hat und mich jederzeit mit Rat und Tat unterstützt hat. Den Kooperationspartnern in diesem Projekt von der Fakultät für Bauingenieurwesen der Universität Stuttgart insbesondere Prof. Dr. R. Helmig, Dr. R. Hinkelmann und Dr. L. Neunhäuserer danke ich für die Einführung in das Gebiet der Hydrogeologie, die Erklärungen der Sichtweise der Ingenieure auf diesem Gebiet und die freundschaftliche Zusammenarbeit. Meinen Kollegen in der Arbeitsgruppe Scientific Computing der Freien Universität Berlin, insbesondere meinem Kollegen Prof. Dr. R. Krause, gilt mein Dank für ein nettes Arbeitsklima, fruchtbare Diskussionen und Ermutigung, Kritik und Anregungen.

Meinen Eltern und Freunden danke ich für ihr Verständnis und ihre Unterstützung. Diese Arbeit wurde teilweise von der Deutschen Forschungsgemeinschaft unterstützt.