

Kapitel 2

Grundlagen und Numerik der Modellrechnungen

In diesem Kapitel soll ein mathematisches Modell entwickelt werden, welches ermöglicht, den Beitrag der Quarzausscheidung (oder des analogen Prozesses für Kalzit) für die Entwicklung und Lebensdauer von Fluidsystemen quantitativ zu erfassen. Dieses mathematische Modell erfordert im Prinzip die simultane Lösung von mindestens drei nichtlinearen partiellen Differentialgleichungen (DGLn). Der hier eingeschlagene Weg beruht jedoch auf einer simplen Elimination der Massentransportgleichung, welche zu einer besonderen Form der Kopplung der Temperatur- und Druckgleichungen führt. Für jeden Zeitschritt wird durch Lösung dieser beiden Differentialgleichungen ein Druck- und Temperaturfeld berechnet. Unter der Annahme gesättigter Bedingungen kann hieraus das Volumen des ausgeschiedenen oder gelösten Feststoffes bestimmt werden. Dies bedeutet wegen des funktionalen Zusammenhangs zwischen der Porosität ϕ und der Permeabilität k eine intensive Beeinflussung des Strömungsfeldes und damit auch des dadurch vermittelten Wärmetransports.

2.1 Grundgleichungen

Die Simulation des gleichzeitigen Transports von Masse und Energie in einem porösen Medium wird üblicherweise durch ein System von partiellen Differentialgleichungen beschrieben [Brownell, Jr. et al., 1977, Bear and Bachmat, 1984, Furbish, 1997], die als spezielle Formen der Erhaltungssätze von Impuls, Energie und Masse anzusehen sind, jedoch entsprechend dem physikalischen Charakter des zu behandelnden Systems verschiedene Varianten annehmen können. Die in dieser Arbeit verwendeten Gleichungen sollen im folgenden kurz beschrieben und ihre spezielle Wahl begründet werden.

Wegen der Zielvorstellung eines ausgedehnten Geltungsbereiches des Modells (vgl. Tafel 2.1, S. 25) und dem daraus resultierenden nicht-linearen Charakter der Gleichungen ist die Wahl von P und T als primitive Variablen naheliegend. Die in der Hydrologie übliche Verwendung eines Potentials (*hydraulic head*) ist unter potentiell nicht hydrostatischen Bedingungen eher kontraintuitiv. Die alternative, potentiell genauere Formulierung des Problems mit Hilfe einer Stromfunktion [Huyakorn and Pinder, 1983, Klever, 1984, Evans and Raffensperger, 1992, Raffensperger, 1996] an Stelle des Druckes bietet hier ebenfalls wenig Vorteile, die ihre Verwendung trotz der höheren Komplexität lohnenswert erscheinen lassen.

Alle drei Grundgleichungen lassen sich dem Gleichungstyp der *Advektions-Diffusions*-Gleichungen zuordnen:

$$\frac{\partial u}{\partial t} + \overbrace{\mathbf{a} \cdot \nabla u}^{\text{Advektion}} - \underbrace{\nabla (\mathbf{b} \cdot \nabla u)}_{\text{Diffusion}} - f = 0 \quad (2.1)$$

u könnte hier für den hydrodynamischen Druck P (Gl. 2.4), die Temperatur T (Gl. 2.8) oder eine Konzentration C (Gl. 2.10) stehen. Die Koeffizienten \mathbf{a} und \mathbf{b} der verschiedenen Gleichungen sowie die entsprechenden Quellterme unterscheiden sich in ihrer physikalischen Interpretation und ihrem numerischen Wert um Größenordnungen.

Bezogen auf ein Kontrollvolumen [Furbish, 1997] muß die Masse des Fluids erhalten bleiben. Diese Forderung kann formal ausgedrückt werden durch die Kontinuitätsgleichung:

$$\frac{\partial \rho \phi}{\partial t} = \nabla \cdot (\rho \mathbf{q}) + Q^F \quad (2.2)$$

ϕ ist hier die Porosität, \mathbf{q} die mit der Porosität multiplizierte mittlere Geschwindigkeit der Porenfüllung $\mathbf{q} = \phi \mathbf{v}$ und $\rho = \rho_f$ deren Dichte. Die Bewegung des Fluids durch ein poröses Medium wird im allgemeinen durch das Darcy-Gesetz beschrieben [Bear and Bachmat, 1984], das in der hier gegebenen Form den Einfluß der Schwere als eigenständigen Term enthält:

$$\mathbf{q} = \phi \mathbf{v} = -\frac{\mathbf{K}}{\mu} (\nabla P - \rho \mathbf{g}) \quad (2.3)$$

Dabei ist \mathbf{K} die tensorielle Permeabilität des Gesteinselements und μ die dynamische Viskosität des Fluids. Vorausgesetzt ist hierbei die Geltung des Darcy-Gesetztes. Für die hier untersuchten Probleme im Maßstab von mehr als 10^3 m ist dies vermutlich auch in den durch Rißpermeabilität dominierten Kristallingesteinen gewährleistet, da die Systemdimensionen deutlich größer sind als das repräsentative Elementarvolumen (REV, vgl. Abb. 2.1). Die Annahme, derartige Gesteine als poröses Medium zu behandeln ist jedoch in verschiedener Hinsicht kontrovers [Long et al., 1982, 1985, Sahimi, 1995, Kolditz, 1997].

Die Gleichungen 2.1 und 2.2 können durch Elimination der Darcy-Geschwindigkeit $\mathbf{q} = \phi \mathbf{v}$ zu einer einzigen Differentialgleichung zweiter Ordnung zusammengefaßt werden:

$$\frac{\partial (\rho \phi)}{\partial t} = \nabla \cdot \left[\frac{\mathbf{K}}{\mu} (\nabla P - \rho \mathbf{g}) \right] + Q^F \quad (2.4)$$

Die Zeitableitung auf der linken Seite wird üblicherweise umgeformt zu:

$$\frac{\partial (\rho \phi)}{\partial t} = \frac{\partial (\rho \phi)}{\partial P} \frac{\partial P}{\partial t} + \frac{\partial (\rho \phi)}{\partial T} \frac{\partial T}{\partial t} \quad (2.5)$$

$$= \rho ((1 - \phi) \beta_s + \phi \beta_f) \frac{\partial P}{\partial t} - \rho \phi \alpha \frac{\partial T}{\partial t} + \rho \frac{\partial \phi}{\partial t} \quad (2.6)$$

Ihrer Form nach ist die Druckgleichung eine reine Diffusionsgleichung ($\mathbf{a} = 0$) und daher als parabolisch anzusehen.

Die in einer Einheitsmasse des porösen Mediums gespeicherte Energie kann durch das Produkt aus Wärmekapazität und Temperatur, d.h. die Enthalpie beschrieben werden.

$$E_i = c_i T_i \quad (2.7)$$

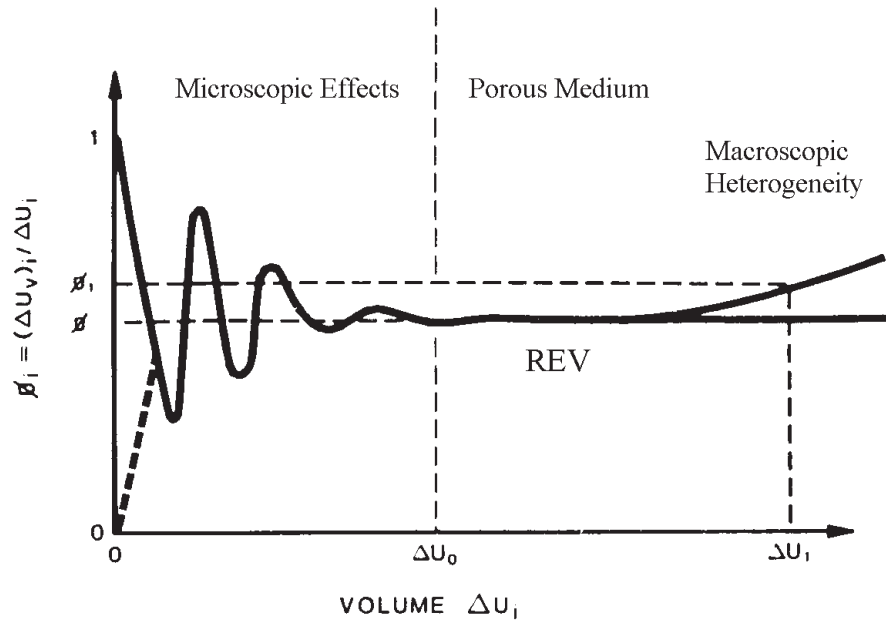


Abbildung 2.1: Qualitative Skizze zum Verständnis des REV [leicht verändert nach Haldorsen, 1986] eines heterogenen Mediums. Diese schematische Darstellung ist folgendermaßen zu verstehen: Vergrößert man das in ein wie auch immer geartetes Meßverfahren eingehende Integrationsvolumen ΔV vom Mikro- zum Makrobereich, so unterscheidet sich das Verhalten des Meßwerts charakteristisch. Im Mikrobereich wirken sich die Heterogenitäten durch einen schwankenden Integralwert aus, der im hier gezeigten Fall der Porosität für kleine Volumina jeweils gegen 0 (Bezugspunkt in der Matrix) oder 1 (Bezugspunkt im Porenraum) strebt. Diese Schwankungen nehmen mit zunehmendem Integrationsvolumen ab und gehen in einen flachen Bereich über, in dem der Integralwert in gewissen Grenzen konstant ist. Innerhalb dieses Intervalls ist es möglich ein Repräsentatives Volumenelement (REV) zu definieren, welches in unserem Fall die Zuordnung eines Kontinuums hydrodynamischer Porositäten zu dem eigentlich aus diskreten Rissen und Kanälen bestehenden System von Transportwegen ermöglicht. Wird das Volumen darüber hinaus vergrößert, beeinflussen makroskopische Inhomogenitäten das Meßergebnis. Generelle Existenz und quantitative Spezifika des Plateauwerts sind hypothetisch und hängen insbesondere vom ermittelten Parameter selber ab. Ausführliche Diskussionen dieser Problematik finden sich z. B. in Sahimi [1995] oder Bear [1972]

Dabei bedeuten E_i die in der Einheitsmasse der Phase i gespeicherte Energie, wobei i entweder die Werte s (Matrix) oder f (Fluid) annimmt. Unter Berücksichtigung dieses Zusammenhangs erhält man für die Bilanzgleichung:

$$\frac{\partial [\phi \rho_f c_f + (1 - \phi) \rho_s c_s] \cdot T}{\partial t} = \nabla \cdot [(\mathbf{L} + \phi \rho_f c_f \mathbf{M}) \cdot \nabla T] - \nabla \cdot [\mathbf{v} \phi \rho_f c_f T] + Q^T \quad (2.8)$$

\mathbf{L} ist hier der Tensor der thermischen Leitfähigkeit

$$\mathbf{L} \equiv (1 - \phi) \lambda_{s,ij} + \phi \delta_{ij} \lambda_f \quad (2.9)$$

während \mathbf{M} eine geschwindigkeitsabhängige thermische Dispersion darstellt. Diese Größe beschreibt auf stark vereinfachte Art den mit der Fluidbewegung verbundenen Mischungsprozeß. Sie wird in dieser Arbeit jedoch keine Rolle spielen. In der hier beschriebenen Entwicklung P3S ist dieser Prozeß jedoch vorgesehen und wird durch ein anisotropes Modell beschrieben, dessen Einzelheiten in [Voss, 1984] erläutert werden. Der Term Q^T stellt einen Produktionsterm dar, welcher sowohl die innere Wärmeproduktion von Matrix und Fluid als auch den Beitrag eventuellen Fluidquellen berücksichtigt. Diese Gleichung setzt voraus, daß thermisches Gleichgewicht zwischen Fluid und Gestein herrscht, die Temperatur des Systems also durch *eine* Gleichung beschrieben werden kann.

Zu dem auch in 2.4 vorhandenen diffusiven Term tritt hier ein advektiver Anteil hinzu. Die relative Größe dieses Ausdrucks bestimmt den Gleichungscharakter: ist die Advektionsgeschwindigkeit \mathbf{a} groß genug, dominiert der advektive Term und die Gleichung nimmt einen hyperbolischen Charakter an. Ein solcher Übergang ist in der Praxis häufig und begründet eine Reihe von im Folgenden noch näher erläuterten Problemen bei ihrer numerischen Lösung.

Die Transportgleichung für den Massenanteil $C = \frac{m_s}{m_f}$ eines gelösten Stoffes ergibt sich zu [Voss, 1984, Nguyen et al., 1982]:

$$\frac{\partial [\phi \rho_f C]}{\partial t} = \nabla \cdot [\phi \rho_f (\mathbf{D} + \mathbf{M}) \cdot \nabla C] - \nabla \cdot [\phi \rho_f C \mathbf{v}] + Q^C \quad (2.10)$$

wobei Q^C wiederum einen Quellterm darstellt, der die Wirkung von physikalisch durchaus verschiedenartiger Prozesse zusammenfassen soll.

Wie man leicht sieht, ist diese Gleichung der Form nach mit derjenigen des Wärmetransports identisch. Ihre Lösung bietet keine prinzipiell neuen Probleme. Die numerische Größe der Koeffizienten unterscheidet sich jedoch in praktisch relevanten Fällen beträchtlich. Massentransportprozesse sind im Gegensatz zum vorher beschriebenen Wärmetransport häufiger advektiv dominiert. Dispersive Vorgänge sind dort gegenüber der eigentlichen Wärmeleitung in der Matrix vergleichsweise gering, während sich das Verhältnis in 2.10 wegen der geringen Diffusivität des Fluids umkehrt [Bear, 1972].

2.2 P-T-Eigenschaften des Systems

Die Differentialgleichungen für P , T und C werden vervollständigt durch die Abhängigkeiten der vorkommenden Materialeigenschaften von diesen Größen, die in Tab. 2.1 zusammengestellt sind. Die für die Berechnung der Fluid- und Matrixeigenschaften verwendeten physikalischen Submodelle und die zu ihrer quantitativen Berechnung benutzten Algorithmen sollen hier kurz beleuchtet werden.

Um die Variationen der druck- und temperaturabhängigen Größen unter plausiblen geologischen Bedingungen auf regionaler Ebene zu verdeutlichen, wurden die betrachteten Parameter in den Abb. 2.4(b) und 2.4(a) jeweils entlang zweier oder mehrerer typischer konduktiver Geothermen (Abb. 2.3)

Parameter	Variable	Bemerkung
ρ_f	P, T, C	P, T nach Haar et al. [1988]
ρ_s	P_s, T_s	konstant
c_f	P, T, C	P, T nach Haar et al. [1988] oder konstant
c_s	P_s, T_s	T nach England and Richardson [1977]
λ_f	P, T, C	P, T nach Haar et al. [1988] oder konstant
λ_s	P_s, T_s	T nach Chapman [1986] bzw. Zoth and Hänel [1988]
μ_f	P, T, C	P, T nach Haar et al. [1988] oder Huyakorn and Pinder [1977]

Tabelle 2.1: Tafel der variablen Materialeigenschaften und ihrer Implementation

dargestellt [Chapman, 1986]. Bei den Fluideigenschaften wurde zusätzlich noch zwischen hydrostatischen und lithostatischen Druckbedingungen unterschieden, die den möglichen Spielraum der Verhältnisse grob eingrenzen.

Sowohl die Wärmeleitfähigkeit λ_s als auch die spezifische Wärmekapazität c_s der Matrix zeigen im plausiblen Parameterintervall eine signifikante Temperaturabhängigkeit. Die im allgemeinen für die Wärmeleitfähigkeit angenommene Abhängigkeit [Balling, 1976, England and Richardson, 1977] :

$$\lambda(T) = \frac{\lambda_0}{1 + bT} \quad (2.11)$$

reduziert bei der realistischen Annahme von $b \approx 0.6 - 1.3 \cdot 10^{-3} K^{-1}$ den unter Oberflächenbedingungen ($25^\circ C, 10^5 Pa$) gemessenen Wert immerhin um mehr als 30% bis zur 'nassen' Schmelztemperatur von Granit (Abb.2.4(b), S. 33). Daß dies in irgendeiner Form auch in konduktiven geothermischen Modellen berücksichtigt werden muß, ist lange bekannt. Nach Chapman [1986] besteht eine Abhängigkeit der Art:

$$\lambda(T) = \lambda_0 \cdot \frac{1 + az}{1 - bT} \quad (2.12)$$

Der Einfluß des Druckes ist jedoch wegen $a \approx 1.5 \cdot 10^{-6} m^{-1}$ und $b \approx 2.0 \cdot 10^{-3} K^{-1}$ mindestens 2 Größenordnungen geringer als derjenige der Temperatur.

Für die spezifische Wärme wird eine Abhängigkeit der Form:

$$c_s(T) = a_0 + \frac{a_1}{T} + \frac{a_2}{T^2} \quad (2.13)$$

angenommen [England and Richardson, 1977]. Dies ist eine vereinfachte Form der lange bekannten Maier-Kelley-Gleichung [Fei and Saxena, 1987]. Die Variation mit dem Druck wird üblicherweise als vernachlässigbar bzw. als unter dem in geothermischen Untersuchungen üblichen Fehlerniveau liegend erachtet.

Für die Modellierung relevanter ist die Kenntnis der Eigenschaften der fluiden Phase (Wasser), die sich in Abhängigkeit von P und T beträchtlich ändern können. Leider ist es nicht möglich, über einen weiten Temperatur- und Druckbereich die physikalischen Eigenschaften von Wasser (insbesondere die Dichte ρ und die Viskosität μ) durch einfache Formeln zu berechnen.

Entscheidend für das Verhalten des Systems ist die Variation der Dichte ρ_f , da sie nicht nur die Basis von konvektiver Fluidbewegung sensu strictu (also durch den Auftrieb bewirkt) ist, sondern auch für die Berechnung der übrigen physikalischen Eigenschaften von Bedeutung ist [Kestin et al., 1984, Kestin and Sengers, 1986, Sengers and Watson, 1986].

Die meisten Simulationsprogramme wurden jedoch naturgemäß für einen engen Temperaturbereich entwickelt, der durch ein in der Temperatur lineares oder bestenfalls quadratisches Modell, etwa:

$$\rho_{H_2O}(T) = \rho_0 \cdot [1 + a_1(T - T_0) + a_2(T - T_0)^2] \quad (2.14)$$

beschrieben werden kann [Mercer et al., 1975, Sorey, 1978, Garg and Kassoy, 1981, Smith and Chapman, 1983]. Insbesondere für Anwendungen im Bereich der Isolierung von Giftmüll oder der Warmwasserspeicherung ist dies ein brauchbarer Ansatz. Im Bereich der Reservoirsimulation oder allgemeinerer geologischer Fragestellungen sind Modelle höherer Ordnung bzw. die Einbeziehung des Druckes P notwendig [Sorey, 1978, Verma and Pruess, 1988]. Die oben angegebene Formel führt unter bestimmten Bedingungen zu dramatisch falschen Werten der Dichte und damit der davon abhängigen Größen (Abb.2.4(b)). Ihr Einfluß auf die Fluidbewegung ist schon mehrfach dokumentiert worden [Strauss and Schubert, 1977, Garg and Kassoy, 1981].

Wasser verhält sich in den meisten seiner physikalischen Eigenschaften ziemlich kompliziert. Jeder Versuch einer analytischen Darstellung dieser Funktionen steht vor folgender Schwierigkeit: Entweder kann eine verhältnismäßig einfache funktionale Form (etwa ein Polynom in P, T oder ρ, T) erzielt werden [Burnham et al., 1969, Saxena and Fei, 1987]. Dann muß aber ein reduzierter Geltungsbereich in Kauf genommen werden. Auf der anderen Seite kann versucht werden, eine einheitliche Formel für einen großen Geltungsbereich zu entwickeln [Keenan et al., 1969, Haar et al., 1988, Kestin et al., 1984, Kestin and Sengers, 1986]. Dieser Weg führt zu komplizierten Formeln, die zudem wegen ihres impliziten Charakters in ρ iterative Lösungen erfordern.

Die frühen Versuche [Burnham et al., 1969], die Dichte ρ (oder das spezifische Volumen V) als Polynom in T und p auszudrücken, führen zu Polynomen hoher Ordnung und zur Notwendigkeit der Kombination verschiedener Gleichungen für unterschiedliche Bereiche. Dies führt natürlich zu Problemen bei der Berechnung von Ableitungen dieser Funktionen – z.B. für eine stückweise lineare Interpolation [Helgeson and Kirkham, 1974a]. In der zitierten Publikation ist eine verbesserte Formel dieses Typs angegeben:

$$V_{H_2O}(T, P) = \sum_{j=0}^n \sum_{i=0}^{n-j} a_{ij} T^i P^{rj-1} \quad (2.15)$$

Die a_{ij} und r sind für verschiedene Gebiete spezifiziert. Es werden einheitliche Polynomansätze für V, α, β und weitere Eigenschaften angegeben – insbesondere die Dielektrizitätskonstante ϵ und ihre Ableitungen, welche im Falle der Berechnung der Eigenschaften von Lösungen notwendig sind [Helgeson and Kirkham, 1974a,b, Walther and Helgeson, 1977].

Eine weitere Möglichkeit besteht in einer Entwicklung des Quotienten $\frac{P}{\rho RT}$ in eine Potenzreihe in ρ, T oder P, T . Diese Potenzreihen werden häufig als Virialpolynome bezeichnet. Obwohl die Idee eines Polynoms in P für den hier verfolgten Zweck attraktiv erscheint, ist es noch nicht gelungen [Dobbins et al., 1988], eine einigermaßen befriedigende Formel dieses Typs zu entwickeln. Eine vereinfachte Form des Virialpolynoms [Ferry and Baumgartner, 1986] wurde von Saxena and Fei [1987] für Bedingungen der tiefen Kruste angegeben ($P > 10^8 Pa, T > 400K$). Für diesen Bereich liegt das berechnete Volumen systematisch über den Werten nach Helgeson and Kirkham [1974b], jedoch weniger als 2%. Wegen des ungünstigen Geltungsbereiches scheint sie jedoch für unsere Fragestellung kaum geeignet.

Die meisten veröffentlichten Versuche gehen von der sogenannten RKE (Redlich-Kwong Equation) aus, die als eine Generalisierung der Zustandsgleichung von van der Waals (1881) betrachtet werden kann:

$$P = \frac{RT}{V - b} - \frac{a}{(V + b)\sqrt{T}} \quad (2.16)$$

Die Koeffizienten a und b wurden ursprünglich als konstant angesehen und hatten eine direkte physikalische Interpretation [Ferry and Baumgartner, 1986]: b ist der von den Molekülen selbst eingenommene Raum (Kovolumen), a drückt den schon früh als selbst temperaturabhängig erkannten Anteil der gegenseitigen Anziehung aus. Die Annahme komplizierterer Interaktionspotentiale führte zu einer Reihe von theoretisch untermauerten oder empirischen Modifikationen. Zu den wichtigsten unter ihnen gehören die Ansätze von Holloway [1977, 1981] und Jacobs and Kerrick [1981]. Hier werden sowohl a als $a(T, V)$ betrachtet, als auch der erste Term der Gleichung durch den Ausdruck

$$\frac{RT(1 + y + y^2 - y^3)}{V(1 - y)^3}$$

ersetzt, wobei

$$y = \frac{b}{4V} = \frac{\rho b}{4} \quad (2.17)$$

ist. Diese Gleichung beschreibt in guter Näherung das Verhalten von Wasser für Temperaturen $\geq 300^\circ\text{C}$ und ermöglicht Extrapolationen bis zu Manteldrücken. Einen nach unten erweiterten Gültigkeitsbereich weist die von Halbach and Chatterjee [1982] vorgeschlagene Modifikation auf. Sie beruht auf einer empirisch begründeten Anpassung von Polynomen $a(T)$ und $b(P)$. Diese auf der RKE aufbauenden Funktionen besitzen wegen der geringen Zahl der vorkommenden Terme den Vorteil relativer Einfachheit. Es muß aber dafür in Kauf genommen werden, daß die gesuchte Variable (V) lediglich implizit vorkommt und daher numerische Verfahren angewendet werden müssen, um ihren Wert für gegebene P und T zu bestimmen. Bei geschickter Wahl des Startwerts bei der iterativen Bestimmung von V - beispielsweise durch ein *update* alter Werte bei nur kleinen Änderungen von P und T - kann der Aufwand jedoch niedrig gehalten werden.

Die IAPS-Formulierung (IAPS = International Association for the Properties of Steam) für die thermophysikalischen Eigenschaften von Wasser [Kestin and Sengers, 1986] ist zur Zeit das genaueste Verfahren, die Dichte und die damit zusammenhängenden weiteren Größen in einem weiten Bereich von Temperaturen und Drücken zu bestimmen. Insbesondere bietet sie die Möglichkeit, Prozesse in der Nähe des kritischen Bereiches einzubeziehen, wo die anderen Formulierungen deutlich ungenauer sind. Im Falle reinen Wassers spielt dieser Bereich jedoch vermutlich keine Rolle. Für die Berechnung des thermodynamischen Verhaltens von Wasser wurden in der vorliegenden Arbeit die Formeln von Haar et al. [1988] für die Berechnung der Dichte und ihrer Ableitungen implementiert. Sie entsprechen einer älteren provisorischen IAPS- Formulierung aus dem Jahre 1978, die jedoch in den relevanten Druck- und Temperaturbereichen keine wesentlichen Abweichungen gegenüber neueren Formeln von 1986 aufweisen.

Die Formeln des IAPS-Typs bestehen ähnlich wie die früheren Ansätze von Keenan et al. [1969] aus einer Darstellung der Helmholtzfunktion A , welche sich additiv aus einem Idealgasterm A_i , einer Basisfunktion A^b und einem Residualterm A^r zusammensetzt (Gl. 2.18):

$$A^{HGK}(\rho, T) = A^i(T) + A^b(\rho, T) + A^r(\rho, T) \quad (2.18)$$

wobei die Teilfunktionen durch

$$\begin{aligned}
A^{ideal}(T) &= -RT \left[1 + \left(c_1 + \frac{c_2}{T} \right) + \sum_{i=3}^{18} c_i \left(\frac{T}{100} \right)^i \right] \\
A^{basis}(\rho, T) &= RT \left[-\ln(1-y) - \frac{\gamma_2-1}{1-y} + \frac{\gamma_1+\gamma_2+1}{2(1-y)^2} + 4y \left(\frac{B}{b} - \gamma_3 \right) - \frac{\gamma_1-\gamma_2+3}{2} + \ln \left(\frac{\rho RT}{P_0} \right) \right] \\
A^{residual}(\rho, T) &= \sum_{i=1}^{36} \frac{g_i}{k_i} \left(\frac{T_0}{T} \right)^{l_i} \cdot (1 - e^{-\rho})^{k_i} + \sum_{i=37}^{40} g_i \delta^{l_i} \cdot \exp(-\alpha_i \delta^{k_i} - \beta_i \tau_i^2)
\end{aligned} \tag{2.19}$$

definiert sind. Dabei bedeutet $T_r = \frac{T}{647.073} = \frac{T}{T_0}$ eine reduzierte Temperatur. Die γ_i , a_i und g_i sind reelle Koeffizientensätze, k_i und l_i sind ganzzahlige Exponenten. $\delta_i = \frac{\rho-\rho_i}{\rho_i}$ und $\tau_i = \frac{T-T_i}{T_i}$ sind dimensionslose Dichten bzw. Temperaturen. Die Werte aller erwähnten Konstanten liegen in [Haar et al., 1988, Flowers, 1986] tabelliert vor. b und B sind definiert als:

$$\begin{aligned}
b &= b_1 \ln \frac{T}{T^*} + \sum_{i=0,2,3,5} b_i \left(\frac{T^*}{T} \right)^i \\
B &= \sum_{i=0,2,4} B_i \left(\frac{T^*}{T} \right)^i
\end{aligned}$$

Der Druck P kann dann nach der thermodynamischen Identität

$$P = \rho^2 \left(\frac{\partial A}{\partial \rho} \right)_T \tag{2.20}$$

berechnet werden. Gleichung 2.18 ist implizit in ρ und kann beispielsweise iterativ durch das Verfahren von Newton-Raphson oder Brent [Press et al., 1986, Ueberhuber, 1995] gelöst werden. Die so berechnete Dichte in Abhängigkeit von P und T ist in Abb. 2.2 dargestellt. Die isobare Expansivität α und die Kompressibilität β sind leicht durch Ableitung analytisch zu berechnen oder durch finite Differenzen anzunähern. Dies gilt auch für die spezifische Wärmekapazitäten:

$$c_V = -T \left(\frac{\partial^2 A}{\partial T^2} \right)_\rho, \quad c_P = c_V + \frac{T}{\rho^2} \cdot \left[\frac{\left(\frac{\partial P}{\partial T} \right)_\rho}{\left(\frac{\partial P}{\partial \rho} \right)_T} \right] \tag{2.21}$$

Obwohl diese Formulierung ursprünglich für einen Druckbereich ≤ 100 MPa entwickelt worden ist, ist sie im gesamten betrachteten Bereich genau genug bzw. mindestens so genau wie die übrigen erwähnten Ansätze. Der Vergleich mit den für höhere Drücke entwickelten Formeln [Jacobs and Kerrick, 1981, Halbach and Chatterjee, 1982] ergibt, daß die Abweichungen im Hochdruckbereich ($P \leq 800$ MPa) klein sind (im untersuchten Bereich $\leq 5\%$). Ähnlich genau, und wegen der geringeren Zahl von Koeffizienten numerisch vielversprechend, ist die von Saul and Wagner [1989] entwickelte Gleichung, die jedoch nicht berücksichtigt wurde. Abb. 2.2 gibt eine zusammenfassende Darstellung der Volumen- und Transporteigenschaften von reinem Wasser im Bereich von $P < 800$ MPa und $T < 800$ °C

Die Transporteigenschaften von Wasser - die dynamische Viskosität μ_f und die Wärmeleitfähigkeit λ_f - können als Funktion der Dichte ρ und der Temperatur nach Sengers and Watson [1986] bzw.

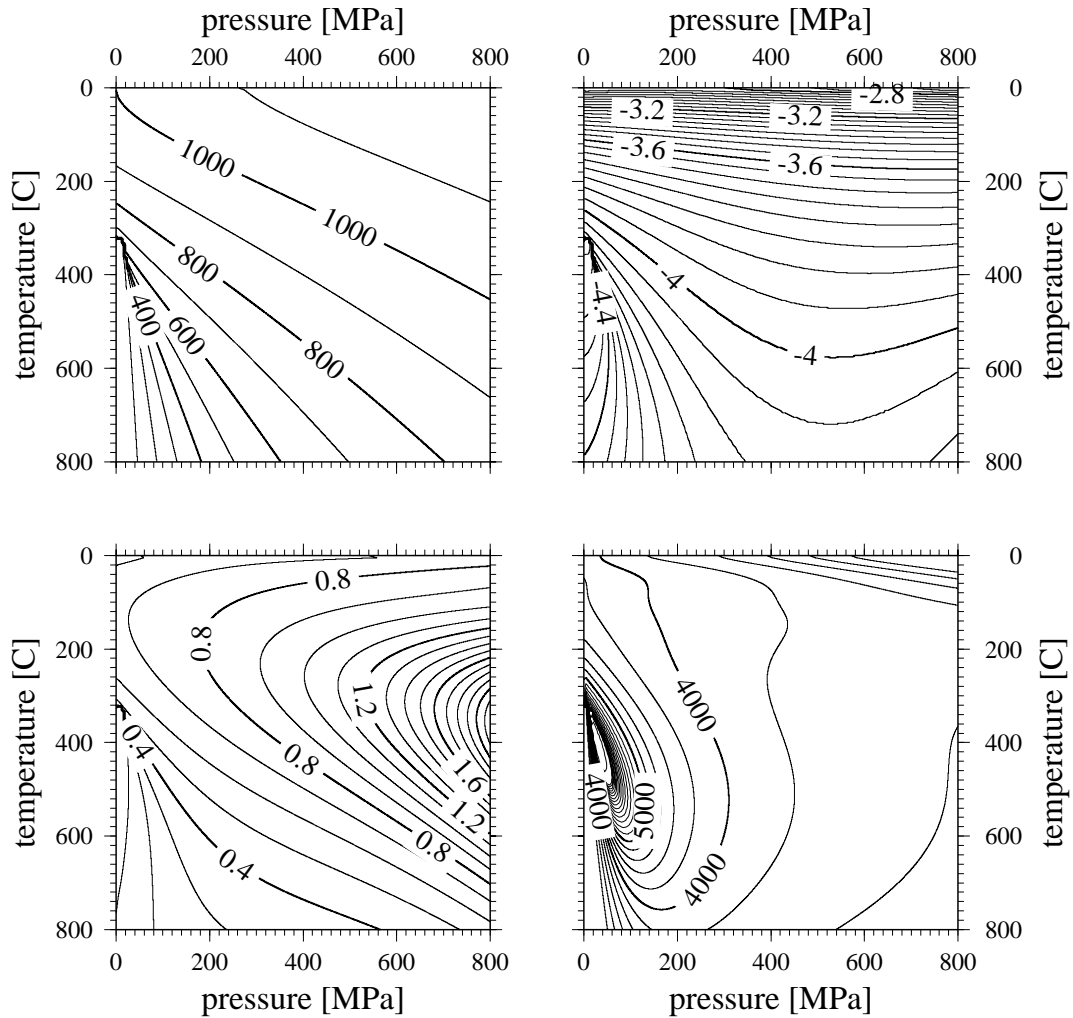


Abbildung 2.2: Eigenschaften von reinem H_2O , berechnet nach dem Ansatz von [Haar et al., 1988] und [Kestin et al., 1984, Kestin and Sengers, 1986]. Horizontal ist der Druck in MPa, vertikal die Temperatur in Celsius aufgetragen. – Oben links: Dichte in $\frac{\text{kg}}{\text{m}^3}$. Oben rechts: Dekadischer Logarithmus der dynamischen Viskosität μ in $\text{Pa}\cdot\text{s}$. Unten links: Wärmeleitfähigkeit λ in $\frac{\text{W}}{\text{mK}}$. Unten rechts: Wärmekapazität c_v in $\frac{\text{J}}{\text{kgK}}$.

Haar et al. [1988] über den gesamten interessanten Bereich mit Hilfe von Polynomansätzen berechnet werden. Für die dynamische Viskosität μ gilt nach [Kestin et al., 1984, Kestin and Sengers, 1986]:

$$\frac{\mu}{\mu^*} = \mu_0 \cdot \mu_1 \quad (2.22)$$

wobei die Teilfunktionen durch

$$\mu_0(T) = \frac{\sqrt{\frac{T}{T^*}}}{\sum_{i=0}^3 \frac{a_i^\mu}{T^*}} \quad (2.23)$$

und

$$\mu_1(P, T) = \exp \left[\frac{\rho}{\rho^*} \sum_{i=0}^5 \sum_{j=0}^6 b_{ij}^c \left(\frac{T^*}{T} - 1 \right)^i \left(\frac{\rho}{\rho^*} \right)^j \right] \quad (2.24)$$

definiert sind. Die Wärmeleitfähigkeit λ ist analog zu berechnen:

$$\frac{\lambda}{\lambda^*} = \lambda_0 \cdot \lambda_1 \quad (2.25)$$

wobei sich die entsprechenden Teilfunktionen sich nur in ihren Koeffizienten a , b und c_{ij} unterscheiden. Ihre Werte sind für beide Fälle der genannten Publikation Haar et al. [1988] zu entnehmen.

Tatsächlich kommt es bei der Verwendung dieser Formeln zu signifikanten Abweichungen der dynamischen Viskosität μ_f von den von Huyakorn and Pinder [1977] oder anderen Autoren [Strauss and Schubert, 1977, Mercer et al., 1975] angegebenen Näherungen für niedrige Temperaturen ($T \leq 350^\circ\text{C}$) und Drücke (Abb. 2.4(b)):

$$\mu = 2.394 \cdot 10^{-4} \cdot 10^{\frac{248.37}{T+133}} \quad (2.26)$$

Der für die in der Kruste nachgewiesenen Paläofluidsysteme hohe Salzgehalt der zirkulierenden Wässer übt potentiell einen großen Einfluß auf die physikalischen Eigenschaften aus. So verschiebt sich beispielsweise der kritische Punkt zu deutlich höheren Temperaturen und Drücken, so daß insbesondere bei hydrothermalen Simulationen [z. B. Norton and Knapp, 1977, Norton and Knight, 1977, Hayba and Ingebritsen, 1997] Zweiphasengebiete erheblich leichter auftreten können. Eine vorhandene Salinität übt auch einen beträchtlichen Einfluß auf das Lösungsverhalten aus [Bodnar and Costain, 1991]. Leider sind die Algorithmen für ihre Berechnung kompliziert und/oder die zugrundeliegende Datenbasis ungenügend. Da die volumetrischen und thermodynamischen Eigenschaften für die Simulation geochemischer Prozesse von einiger Bedeutung sind, haben sie die größte Beachtung auf sich gezogen. Das Volumenverhalten von Salzlösungen ist schon 1976 kompiliert und durch eine einfache Polynomregression interpoliert worden [Potter II and Brown, 1976], welche jedoch im Detail nicht unumstritten ist. Der Volumenanteil der gelösten Spezies kann für niedrige Konzentrationen nach dem Ansatz von Walther and Helgeson [1977] berechnet werden. Verbesserte Versionen dieser Gleichung geben Helgeson and Lichtner [1987] und [Tanger IV and Helgeson, 1988]. Die Eigenschaften saliner Lösungen sind jedoch Gegenstand intensiver theoretischer Forschung [Pitzer and Pabalan, 1986, Tödheide, 1982]. Eine praktisch wichtige Entwicklung ist die empirische Aufstellung einer Zustandsgleichung für Ozeanwasser [Bischoff and Rosenbauer, 1985] sowie die empirischen Formeln für hydrothermale Systeme ($0.1 < P < 100 \text{ MPa}$, $0 < T < 350^\circ\text{C}$), die von Phillips et al. [1981] angegeben wurden und in einigen in dieser Arbeit verwendeten Modellrechnungen zugrundegelegt wurden. Wesentlich schlechter als bei den volumetrischen und thermodynamischen Größen steht es bei der

Viskosität μ , die bisher nur für den Bereich verhältnismäßig niedriger Temperaturen und Drücke ($0.1 < P < 50$ MPa, $0 < T < 350$ °C) untersucht wurde [Kestin et al., 1981, Phillips et al., 1981, 1983, Raffensberger, 1996]. Es deutet jedoch vieles darauf hin, daß sich dieser Parameter als Funktion der Salzkonzentration verhältnismäßig harmlos verhält.

Da im implementierten Rechenprogramm allgemeine Abhängigkeitsfunktionen vorgesehen sind ist es verhältnismäßig leicht, diese Effekte zumindest in begrenzten Bereichen in dementsprechend angelegten Modellen zu berücksichtigen. Liegen die Werte tabelliert vor, können die nichtlinearen Eigenschaften unabhängig von ihrer analytischen Form durch lineare oder gegebenenfalls logarithmische Interpolation an jedem Punkt des P - T -Bereichs berechnet werden.

Zur Verdeutlichung sollen hier die wesentlichen Fluid- und Matrixeigenschaften für typische kontinentale konduktive Krustenprofile dargestellt werden. Grundlage dafür ist die von Chapman [1986] vorgestellte Familie von Geothermen. Sie weichen von den üblicherweise für solche Zwecke verwendeten Tiefenfunktionen [Lachenbruch, 1970, 1971, Lachenbruch and Sass, 1977, Rybach, 1981] in einigen Punkten ab. Die thermische Leitfähigkeit λ und die Wärmekapazität c_s sind nach den Formeln 2.12 und 2.13 als temperatur- und druckabhängig angenommen. Weiterhin wird eine (granitische) Oberkruste von der (mafischen) Unterkruste abgegrenzt. Die Grenze wird bei $z_U = 16$ km angesetzt. Die beiden Bereiche unterscheiden sich in folgenden Parametern: Die Verteilung der Wärmeproduktion ist für die Oberkruste ähnlich wie bei Lachenbruch [1970] exponentiell abfallend angenommen. Die gewählte Abklingkonstante ist $D = 8$ km. Die Produktion der Unterkruste ist konstant mit $A_U = 0.5 \mu\text{W}/\text{m}^3$. Die Wärmeleitfähigkeit der Oberkruste wurde mit $3\text{W}/\text{mK}$ angesetzt. Der Koeffizient der Temperaturabhängigkeit in Gl. 2.12 ist $b_O = 1.5 \cdot 10^{-3}$. Für die Unterkruste sind die entsprechenden Werte $2.4\text{W}/\text{mK}$ und $b_U = 1 \cdot 10^{-4}$. Die Druckabhängigkeit ist beide Male klein und identisch. Die Wärmekapazität für die Gesteinsmatrix wurde nach einer von England and Richardson [1977] gegebenen Näherung berechnet.

Die Annahme einer Abhängigkeit der Parameter von Druck und Temperatur bedeutet, daß die analytischen Lösungen für 1-D-Modelle [Rybach, 1981] durch ein Iterationsverfahren ergänzt werden müssen. Ausgehend von der Oberfläche wird zunächst der Temperaturwert $T^0(z_i)$ schichtweise durch Projektion ausgehend von der Temperatur $T(z_{i-1})$ und den vorgegebenen Modellparametern p_i^0 berechnet. Diese Temperatur dient zur Berechnung neuer Parameter $p_i^1(T_i^0)$, die wiederum eine iterierte Temperatur T_i^1 bedingen. Dieser Prozeß wird wiederholt, bis $\frac{\|T^j - T^{j-1}\|}{\|T^{j-1}\|} \leq \alpha_{tol}$ wird. Eine nähere Diskussion der Wahl der Parameterwerte ist [Chapman, 1986] zu entnehmen. Ihr Tiefenverlauf ist in Abb. 2.4(a) zusammenfassend dargestellt.

In den Abbildungen 2.3 bis 2.4(b) wird (wo relevant) jeweils eine Geotherme für einen Wärmefluß an der Oberfläche von 30, 60 und 90 mW/m^2 angegeben (vgl. Abb. 2.3). Zusätzlich tauchen bei den Fluideigenschaften (Abb. 2.4(b)) wegen der Bedeutung dieser beiden Grenzbedingungen jeweils hydrostatische und lithostatische Druckverhältnisse auf, die als charakteristische Werte der in der Kruste realisierten Druckbedingungen gelten können.

Die verwendeten Geothermen beruhen auf einer Philosophie, die hauptsächlich von der Erfahrungstatsache einer linearen Beziehung $Q_0 = Q_{red} - D \cdot A_0$ zwischen Oberflächenwärmefluß q_0 und der dort vorhandenen Wärmeproduktion A_0 ausgeht. Die Interpretation dieses Zusammenhangs durch eine näherungsweise exponentielle Abnahme der Wärmeproduktion mit einer Skalenlänge D und einem basalen Wärmefluß q_{red} ist jedoch in den letzten Jahren durch eine Reihe von Arbeiten [Furlong and Chapman, 1987, Nielsen, 1987, Drury, 1989] in Frage gestellt worden, welche den Einfluß lateraler Inhomogenitäten von Leitfähigkeit und Produktion (in der Oberkruste) untersuchen. Furlong and Chapman [1987] schlagen vor, den sich aus der obigen Beziehung ergebenden A_0 -Achsenabschnitt Q_{red} nicht als basalen „Mantelwärmefuß“, sondern als gemittelten Wärmefuß in einer Tiefe $z \approx D$ zu interpretieren [Nielsen, 1987]. Tatsächliche Temperaturen in der tiefen Kruste werden vermutlich überschätzt, wobei Extremfälle von mehr als 100 °C vermutet werden können.

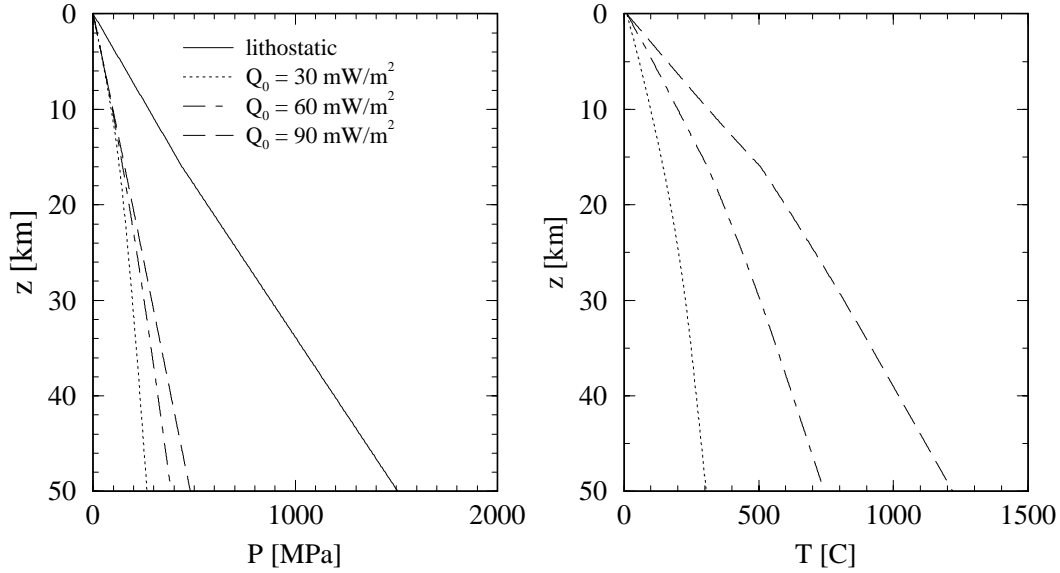


Abbildung 2.3: Kontinentale Geothermen nach Chapman [1986]. Porendruckverläufe (links) und die dazugehörigen Geothermen (rechts) für Wärmeflußwerte an der Oberfläche von $30 - 90 \frac{\text{mW}}{\text{m}^2}$.

2.3 Numerische Lösung

Die gekoppelten Differentialgleichungen 2.4, 2.8 und 2.10 können für ein zweidimensionales Gebiet durch ein Verfahren gelöst werden, welches eine Galerkin-Methode [Zienkiewicz and Taylor, 1989a,b, Hughes, 1987] für die räumliche Diskretisierung mit einem Finite-Differenzen-Schema für die zeitliche Diskretisierung verbindet. Beide können im Rahmen der *Methode der gewichteten Residua* kombiniert werden [Fletcher, 1984].

Eine partielle DGL kann als Operator angesehen werden, der auf die auf einem Gebiet D gesuchte Funktion $u(x, t)$ wirkt. Zu lösen ist also die Operatorgleichung

$$\mathbf{L}(u) = 0 \quad (2.27)$$

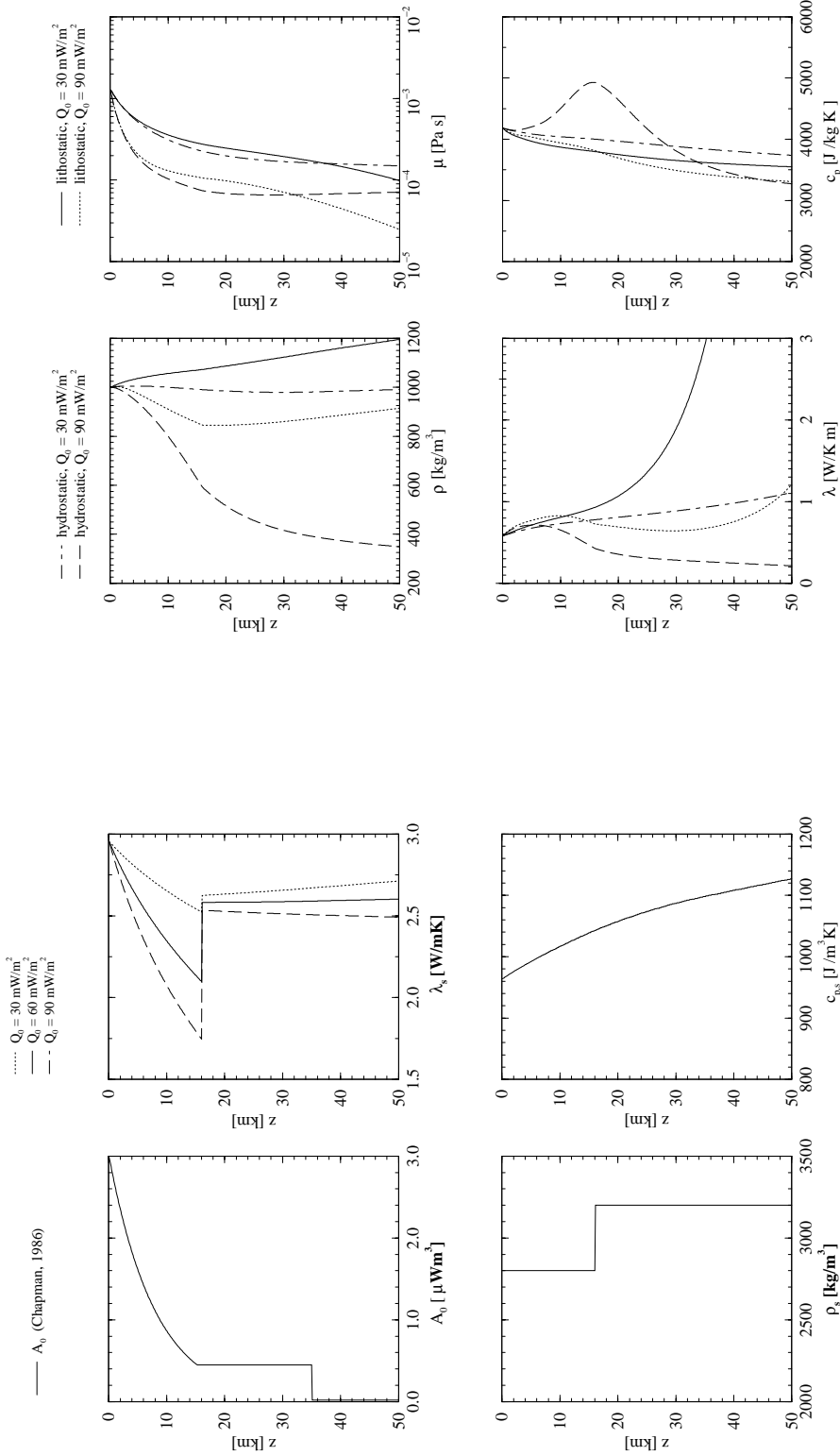
die zusammen mit den Randbedingungen $\mathbf{B}(u) = 0$ auf S für $t \geq 0$ und den Anfangswerten $\mathbf{I}(u) = 0$ für $t = 0$ erfüllt werden muß. Es soll eine diskrete Näherungslösung an N Punkten

$$u_N = \sum_{j=1}^N u_j(t) N_j(r) \quad (2.28)$$

angesetzt werden. Die N_j werden im Folgenden als Basis- oder Interpolationsfunktionen bezeichnet. Ersetzt man in Gleichung 2.27 die wirkliche Lösung u durch u_N , so ist das Residuum

$$R_N \stackrel{\text{def}}{=} \mathbf{L}(u_N) \neq 0 \quad (2.29)$$

Die $u_j(t)$ werden nun so bestimmt, daß für alle $i \leq N$ das Integral der mit Gewichtsfunktionen \tilde{N}_i multiplizierten Residua verschwindet. Die so definierte Funktion wird oft als *schwache Lösung* der DGL bezeichnet [z. B. Johnson, 1987]



(a) Parameter für die in Abb. 2.3 abgebildeten kontinentalen Geothermen nach Chapman [1986]. Oben links: Verteilung der Wärmeproduktion mit der Tiefe. Oben rechts: Thermische Leitfähigkeit λ . Unten links: Dichte. Unten rechts: Wärmekapazität c_s .

(b) Volumen- und Transporteigenschaften von reinem Wasser entlang der Geothermen in Abb. 2.3 jeweils für hydrostatische und lithostatische Bedingungen. Oben links: Dichte ρ_f . Oben rechts: Dynamische Viskosität μ_f . Unten links: Thermische Leitfähigkeit λ_f . Unten rechts: Wärmekapazität c_f . Bei c_f ist unter hydrostatischen Bedingungen deutlich die Nähe des kritischen Bereichs als Maximum zu erkennen.

Abbildung 2.4: Physikalische Fluid- und Gesteinseigenschaften in der Kruste.

$$\int_D R_N \tilde{N}_i(r) dV = 0 \quad (2.30)$$

Die Methode von Galerkin [Hughes, 1987, Zienkiewicz, 1984] besteht darin, die oben definierten Gewichtsfunktionen $\tilde{N}_i = N_i$ zu wählen. Durch eine diskrete Ausführung dieses inneren Produktes kann das Problem in ein lineares Gleichungssystem für die Funktionswerte an diskreten Punkten (Knoten) überführt werden. Dies erfolgt durch eine Aufteilung der entstehenden Integrale in Teilintegrale über M Elemente, so daß die Gl. 2.30 semidiskret als gekoppeltes System gewöhnlicher DGLn

$$\mathbf{A} \frac{\partial u}{\partial t} + \mathbf{B} u = q \quad (2.31)$$

für die diskreten Werte u_i geschrieben werden kann. Die Matrix \mathbf{A} wird in Anlehnung an ihre physikalische Bedeutung in der Strukturmechanik als Massenmatrix bezeichnet, während \mathbf{B} häufig als Steifigkeitsmatrix bezeichnet wird. q ist in dieser Terminologie der Lastvektor. Die zeitliche Diskretisierung durch Finite Differenzen führt dann auf lineare algebraische Gleichungssysteme für die Druck- oder Temperaturwerte an den Knotenpunkten i .

2.3.1 Diskretisierung I: Finite Elemente

Die in der Näherungslösung 2.28 vorkommenden N_i müssen bestimmten Bedingungen genügen: Um die Konvergenz des Verfahrens bei einer vorgegebenen Ordnung k der Integranden (d. h. die höchste vorkommende räumliche Ableitung) in 2.30 zu sichern, werden die Basisfunktionen N_j derart gewählt, daß folgende Eigenschaften erfüllt sind [Hughes, 1987]: Die Funktionen N_i sind innerhalb der Elemente mindestens k -fach stetig differenzierbar, an den Elementgrenzen müssen jedoch nur die Ableitungen bis zum Grade $k-1$ stetig sein. Damit ist die Integrierbarkeit gesichert, da nur endliche Unstetigkeiten in der k -ten Ableitungen existieren. Elemente bzw. die dazugehörigen Basisfunktionen, welche die ersten beiden Bedingungen erfüllen, werden als kompatibel bezeichnet. Die Funktionen N_i sollten vollständig in dem von Hughes [1987] beschriebenen Sinne sein.

Im allgemeinen werden für diese Funktionen Polynome gewählt. Um die Integration so effektiv wie möglich durchführen zu können, sollten sie bei vorgegebener Genauigkeit von möglichst niedriger Ordnung sein. Explizit ergibt die Aufstellung der Integrale für die Druckgleichung 2.4 beispielsweise:

$$\sum_{i=1}^N \left[\int_V \frac{\partial(\rho\phi)}{\partial t} N_i dV - \int_V \nabla \cdot \left[\frac{\mathbf{K}\rho}{\mu} \cdot (\nabla P - \rho\mathbf{g}) \right] N_i dV - \int_V \tilde{Q} N_i dV \right] = 0 \quad (2.32)$$

Die Ordnung der höchsten vorkommenden Ableitung der abhängigen Variable P und damit der Näherung P_N ist hier 2. Glücklicherweise erlaubt die Form der zu behandelnden Gleichungen eine Reduktion der Ordnung der Integranden durch die Anwendung des Green'schen Satzes, so daß sich die Ordnung der höchsten auftretenden Ableitung auf 1 vermindert

$$\int_V \nabla \cdot \left[\frac{\mathbf{K}\rho}{\mu} \cdot (\nabla P - \rho\mathbf{g}) \right] N_i dV = \int_S \frac{\mathbf{K}\rho}{\mu} \cdot (\nabla P - \rho\mathbf{g}) \cdot \mathbf{n} N_i dS + \int_V \frac{\mathbf{K}\rho}{\mu} \cdot (\nabla P - \rho\mathbf{g}) \cdot \nabla N_i dV \quad (2.33)$$

Dabei ist S die das Volumen V umschließende Oberfläche. Lineare Basisfunktion sind daher ausreichend, um die Kompatibilität der Elemente zu sichern. Weiterhin werden die N derart gewählt, daß für jedes Element E_k die Bedingungen:

$$\begin{aligned} N_k(r) &= 0 & r \notin E_k \\ \sum_{k=1}^M N_k(r) &= 1 & r \in E_k \end{aligned} \quad (2.34)$$

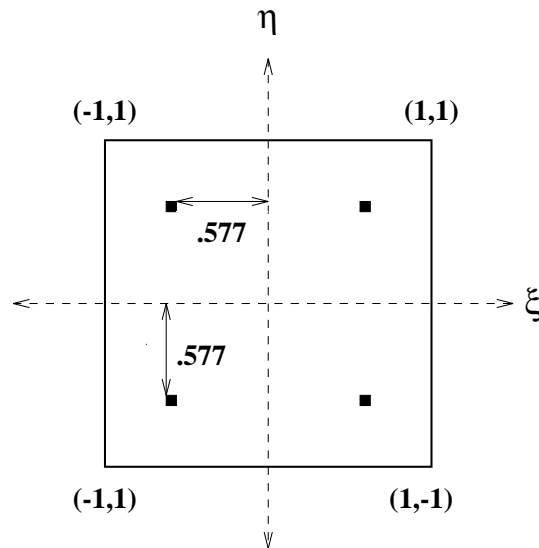


Abbildung 2.5: Definition der Größen am Einheitselement. Die markierten Punkte sind die für die numerische Integration benutzten Gaußpunkte.

erfüllt werden. Außerdem soll im Knoten j gelten:

$$N_i = \begin{cases} 1 & i = j \\ 0 & i \neq j \end{cases} \quad (2.35)$$

Innerhalb eines Elements sind so nur die den beteiligten Knoten zugeordneten Funktionen $\neq 0$ und gehen in die Integrale ein. Wegen dieser Eigenschaft sind die entstehenden Gleichungssysteme dünn besetzt und haben Bandstruktur. Sie können deshalb effektiv durch spezielle, an diese Struktur angepaßte Methoden gelöst werden.

Im Programm P3S wurden lineare zweidimensionale 4-Knoten Elemente (Lagrange-Elemente), d.h. bilineare Interpolationsfunktionen N_i gewählt [Reddy, 1984, Schwarz, 1984].

Die Basisfunktionen können ohne Einschränkung der Allgemeinheit für ein Einheitsquadrat mit den Eckpunkten $\xi = \pm 1$ und $\zeta = \pm 1$ betrachtet werden, da diese lokalen Koordinaten (oft auch als „natürlich“ bezeichnet) und ihre Funktionen mit Hilfe des linearen Zusammenhangs

$$\mathbf{x}(\xi) = \sum_{i=1}^{N_{Element}} N_i^l(\xi) x_i \quad (2.36)$$

jederzeit zwischen globalem und lokalem Koordinatensystem transformiert werden können. Für eine beliebige abhängige Variable $\mathbf{u}(\xi)$ kann so geschrieben werden:

$$\mathbf{u}(\xi) = \sum_{i=1}^{N_{Element}} N_i^l(\xi) u_i \quad (2.37)$$

Insbesondere können die räumlichen Ableitungen mit Hilfe der Jacobimatrix

$$\mathbf{J} = \begin{bmatrix} \frac{\partial \xi}{\partial x} & \frac{\partial \xi}{\partial y} \\ \frac{\partial \eta}{\partial x} & \frac{\partial \eta}{\partial y} \end{bmatrix} \quad (2.38)$$

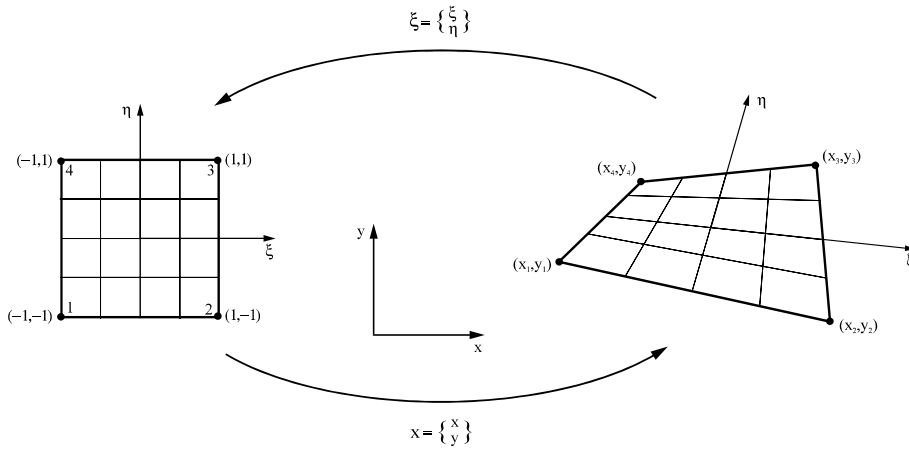


Abbildung 2.6: Globale und lokale Größen

ineinander überführt werden:

$$\begin{aligned} \nabla^x \mathbf{u} &= \mathbf{J} \nabla^\xi \mathbf{u} \\ \nabla^\xi \mathbf{u} &= \mathbf{J}^{-T} \nabla^x \mathbf{u} \end{aligned} \quad (2.39)$$

Für jeden Knoten i der Diskretisierung können primitive lineare Funktionen definiert werden, aus denen sich die Basisfunktionen konstruieren lassen. Aus den eindimensionalen Interpolationsfunktionen

$$\begin{aligned} n_1^i &= \frac{1}{2}(1 - \xi) & n_2^i &= \frac{1}{2}(1 + \xi) \\ n_3^i &= \frac{1}{2}(1 - \eta) & n_4^i &= \frac{1}{2}(1 + \eta) \end{aligned} \quad (2.40)$$

erhalten wir durch Produktbildung die zweidimensionalen lokalen Basisfunktionen

$$\begin{aligned} N_1^l &= n_1 n_3 & N_2^l &= n_4 n_3 \\ N_3^l &= n_4 n_2 & N_4^l &= n_1 n_2 \end{aligned} \quad (2.41)$$

die samt ihren einfach zu bildenden Ableitungen und Integralen durch die oben definierte Jacobimatrix in die globalen Basisfunktionen N_i umgerechnet werden können. Diese Diskretisierung ermöglicht die Modellierung auch unregelmäßiger Geometrien, da keine rechten Winkel vorausgesetzt werden.

2.3.2 Diskretisierung II: Zeitschritt

Obwohl es prinzipiell möglich ist, Druck- und Temperatur- und Konzentrationsgleichung gleichzeitig zu lösen, wurde aus Effektivitätsgründen ein anderer Weg beschritten: Die Gleichungen werden durch ein zyklisches Iterationsschema gelöst. Dies hat nicht nur den Vorteil einer geringeren Anzahl der aktiven Variablen in den Gleichungssystemen, sondern bietet auch einen natürlichen Weg, die durch die Kopplung und die nichtlinearen Terme - z.B. durch die komplizierten Fluideigenschaften - entstehenden Probleme anzugehen. Weiterhin ermöglicht die getrennte Lösung eine effiziente Berücksichtigung der häufig sehr unterschiedlichen Zeitkonstanten der physikalischen Prozesse.

Der erste Term auf der linken Seiten von 2.31 enthält die zeitliche Ableitung der Variable u . Er wird durch ein Differenzenverfahren angenähert. Die zeitlichen Ableitungen der Temperatur bzw. des Druckes zum Zeitpunkt $t^{(n)}$ werden dabei durch

$$\frac{\partial u}{\partial t} \approx \frac{u^{(n+1)} - u^{(n)}}{\Delta t^{(n)}} \quad (2.42)$$

angenähert, wobei

$$u^{(n+1)} = u(t^{(n+1)}) = u(t^{(n)} + \Delta t^{(n)})$$

sein soll. Da $u^{(n)}$ bekannt ist, entsteht jeweils ein zunächst noch nichtlineares Gleichungssystem für $u^{(n+1)}$:

$$\left[\frac{1}{\Delta t^{(n)}} \mathbf{A} + \theta \mathbf{B} \right]^{(n+\theta)} u^{(n+1)} = \left[\frac{1}{\Delta t^{(n)}} \mathbf{A} - (1 - \theta) \mathbf{B} \right]^{(n+\theta)} u^{(n)} + P^{(n+\theta)} \quad (2.43)$$

wobei die Abhängigkeit von u durch die hochgestellten Indizes ausgedrückt werden soll.

Dieses Schema ist unter dem Namen θ -Methode bekannt: Durch Wahl des Parameters θ kann sowohl ein voll implizites Verfahren (*backward Euler*, FI) realisiert werden ($\theta = 1$), als auch eine Variante des genaueren Crank-Nicholson-Schemas ($\theta = \frac{1}{2}$, im Weiteren mit CN bezeichnet) [Hughes, 1987, Wood, 1990]. Die Simulation eines expliziten Verfahrens ($\theta = 0$) ist wegen des identischen Rechenaufwands praktisch ohne Bedeutung. Das beschriebene θ -Schema ist im linearen Falle (d. h. \mathbf{A} und \mathbf{B} unabhängig von u) unbedingt stabil für alle Zeitschritte Δt , wenn $\theta \geq \frac{1}{2}$ ist [z. B. Wood, 1990]. Wird θ kleiner gewählt, besteht eine Beschränkung: Die zellenbezogene Courantzahl

$$\text{Co}^h = \frac{\|\mathbf{v}\| \Delta t}{\Delta x}$$

darf den Wert 1 nicht überschreiten. Physikalisch bedeutet dies, daß sich eine Störung während eines Zeitschritts nicht mehr als um eine räumliche Zellenweite fortpflanzen sollte. Obwohl die impliziten Verfahren häufig stabile Lösungen bei größeren Zeitschritten erlauben, ist der physikalische Sinn solcher Lösungen fragwürdig [O'Neill, 1981].

Praktisch ist neben der Stabilität – die lediglich die Beschränktheit der Lösung impliziert – die Genauigkeit des Verfahrens von Interesse. Bei sonst gleichen Bedingungen sollte das Verfahren bei $\theta = \frac{1}{2}$ eine Genauigkeit zweiter Ordnung erreichen, sonst jedoch nur die Ordnung 1.

Tatsächlich ist jedoch die erhöhte Genauigkeit für den Schwellenwert $\frac{1}{2}$ nur bei stark reduzierten Zeitschritten möglich [Johnson, 1987]. Problematisch ist auf jeden Fall die Fortpflanzung von Störungen hoher Wellenzahl: Erfahrungsgemäß führt das CN-Verfahren (oder generell jedes θ -Verfahren für $\theta \neq 1$) zu Oszillationen bzw. einem unerfreulichen Phasenverhalten für die kurzen Perioden (z. B. bei scharfen Gradienten) [Wood, 1990, Wood and Lewis, 1975]. Besonders abrupte Anfangsbedingungen führen auch im rein konduktiven Bereich zu – allerdings abklingenden – transienten Schwingungen. Bei advektiv dominierten Bedingungen muß der Zeitschritt deutlich unterhalb des durch die Bedingung $\text{Co}^h = 1$ gegebenen Wertes liegen. Praktisch erweist sich das voll implizite Schema als robuste Alternative, die jedoch bei großen Co^h überdiffusiv ist.

In den Abb. 2.7 und 2.8 sind Beispiele für Pecletzahlen von 1 und 100 dargestellt. Es wird sowohl eine Front, als auch eine Gauß'sche Störung der Amplitude T_0 untersucht, die mit konstanter Geschwindigkeit angeströmt wird.

$$T(x) = T_0 \cdot \exp -\frac{1}{2} \left(\frac{x}{x_s} \right)^2 \quad (2.44)$$

Die hier vorgestellten Überlegungen gelten a fortiori für nichtlineare Verhältnisse [Wood, 1990], wo die überschießenden Werte – je nach Art der Nichtlinearität – zu einem destruktiven Konvergenzverhalten führen können.

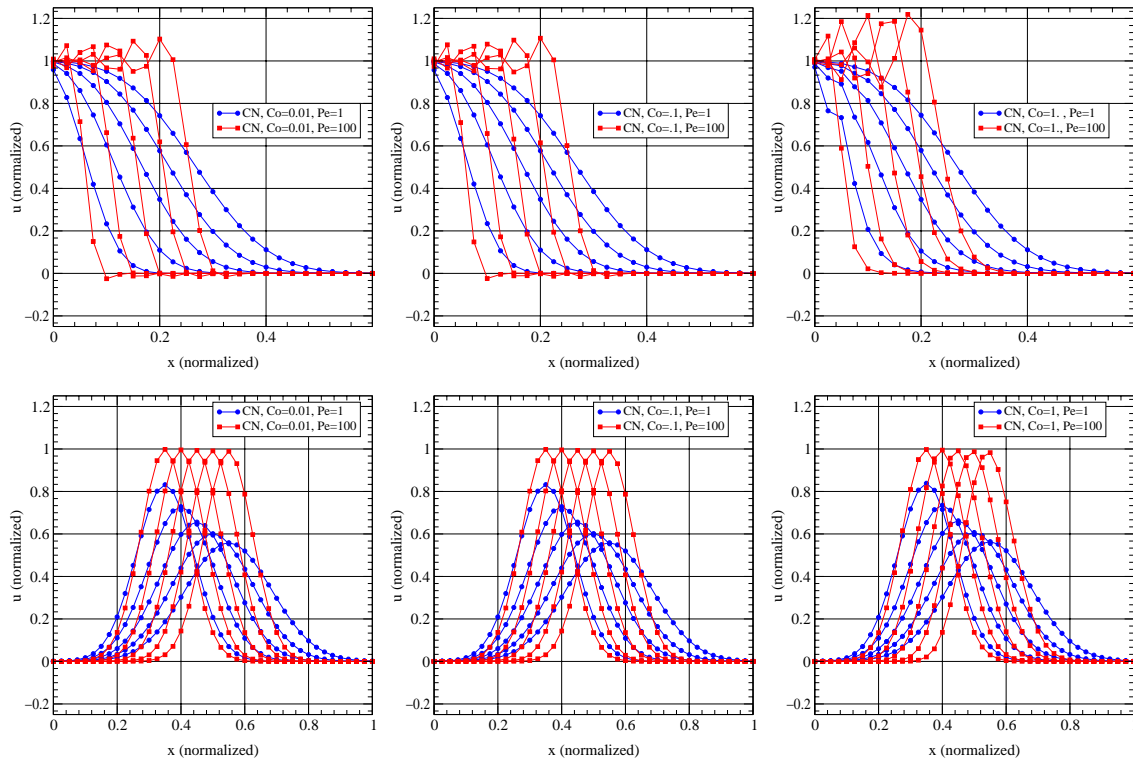


Abbildung 2.7: Wirkung des Zeitschritts auf den eindimensionalen Transport einer Front (oben) und einer Gauß'schen Störung (unten) jeweils für eine Pecletzahlen von 1 und 100 bei Verwendung des CN-Verfahrens ($\theta = .5$). Die Front stellt eine besondere Schwierigkeit dar, was sich im oszillierenden Charakter der Lösung bei $Pe = 100$ und $Co = 1$ zeigt. Eine glattere Anfangslösung pflanzt sich hier korrekter fort.

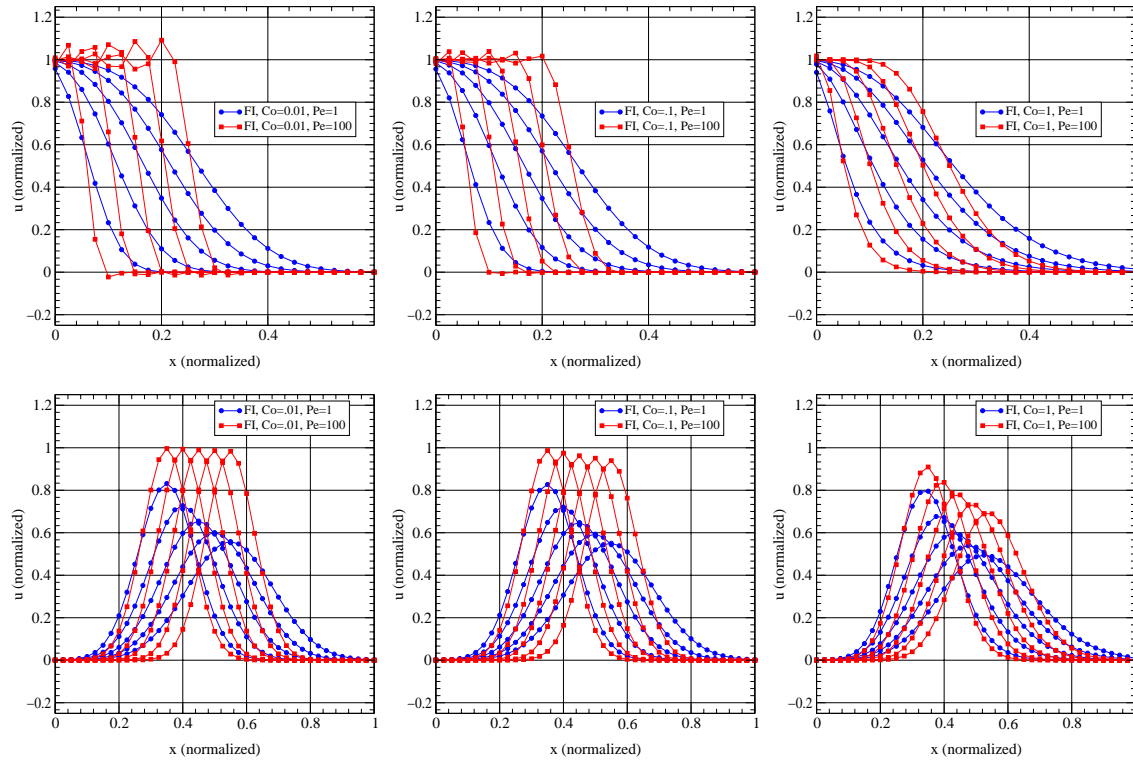


Abbildung 2.8: Darstellung der Wirkung des FI-Verfahrens ($\theta = 1$) auf die Modelle von Abb. 2.7. Deutlich ist das diffusivere Verhalten bei großen Courantzahlen zu erkennen, welches die Oszillationen stark dämpft.

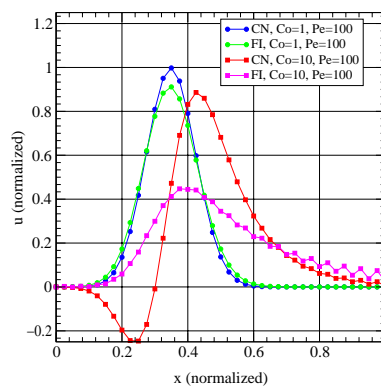


Abbildung 2.9: Transport bei einer Courantzahl $Co = 10$ und $Pe = 100$. Beide Verfahren zeigen ein Auseinanderlaufen des Wellenzugs und daher unphysikalische Lösungen. Die eigentlich positive FI-Lösung oszilliert, da ihre Ausläufer den rechten Rand erreichen.

Von erheblicher praktischer Bedeutung ist eine optimale Wahl des Zeitschrittes: Modelle sind häufig inhomogen und demzufolge ungleichmäßig diskretisiert, oder sie enthalten zeitabhängige Komponenten (Randbedingungen, Quellen oder Materialparameter). Um nicht ineffizient kleine Zeitschritte zu erhalten, wurden daher mehrere Steuerungsalgorithmen implementiert:

1. Je nach Problemstellung kann das hier verwendete θ -Schema entweder für jeden Zeitschritt benutzt werden oder es kann jede der beteiligten DGLn für jeweils ganze Vielfache eines Basiszeitschritts gelöst werden. Damit wird den durchaus unterschiedlichen Zeitkonstanten der in den verschiedenen Gleichungen betrachteten Prozesse Rechnung getragen.
2. Generell kann der Zeitschritt für gegebene Zeiten nach einer vorgegebenen Funktion vergrößert oder verkleinert werden. Die einfachste dieser Funktionen ist die Multiplikation mit einem konstanten Faktor. Ein solches Verfahren der zyklischen Vergrößerung – entsprechend einem im Großen und Ganzen exponentiellen Abklingen der Phänomene – hat sich beispielsweise bei der Modellierung von Abkühlungsprozessen bewährt.
3. Nach dem oben gesagten besteht eine enge Kopplung zwischen der räumlichen Diskretisierung und dem Zeitschritt, welche durch die dimensionslosen Fourierzahlen Fo^P und Fo^T und – im advektiv dominierten Fall – der Courantzahl Co gegeben ist. Es liegt daher nahe, die Änderung des Zeitschritts an die Entwicklung dieser Zahlen zu koppeln. Dazu wird zunächst bei jedem Schritt bzw. jeder Iteration das Maximum der Courantzahl über das Gitter berechnet und der maximale Zeitschritt gleich einem vorgegebenen Bruchteil oder auch Vielfachen des daraus berechneten Werts gesetzt. Numerische Experimente zeigen, daß vor allem bei nur lokal vorhandenen hohen Courantzahlen Δt durchaus ein Mehrfaches des theoretisch Wünschenswerten sein kann.
4. Dies ist naturgemäß der Fall, wenn sich die untersuchten Variablen nur langsam ändern. Es ist daher auch die Möglichkeit gegeben, den Zeitschritt an eine vorgegebene Maximaländerung (z. B. 1%) zu koppeln: Wird dieser Wert überschritten, erfolgt eine Reduktion der Schrittlänge [Kipp, 1987]. Praktisch hat sich ein weiteres einfaches Verfahren bewährt, welches von Hornung and Messing [1984] beschrieben wird:

Es sei $\Delta u^{(k)} = \max \|u^{(k)} - u^{(k-1)}\|$ das Maximum der Änderungen von u im letzten Zeitschritt und Δu^{opt} eine angestrebte Optimalwert dieser Größe. Bildet man den Quotienten $a = \frac{\Delta u^{opt}}{\Delta u^{(k)}}$, so kann der folgende Zeitschritt $\Delta t^{(k+1)}$ durch

$$t^{(k+1)} = \begin{cases} a^2 t^{(k)} & \text{wenn } a \leq 1 \\ \frac{1+a}{2} t^{(k)} & \text{wenn } a > 1 \end{cases} \quad (2.45)$$

ermittelt werden. Bei einigermaßen glattem Verhalten der Lösung $u(t)$ wurden mit diesem Verfahren sehr gute Erfahrungen gemacht. Sind jedoch schnelle zeitliche Änderungen zu erwarten, so sollte es mit einer zusätzlichen Reduktion für $a \ll 1$ [Hornung and Messing, 1984] oder einem der oben schon beschriebenen Verfahren kombiniert werden. Auch wenn eine Herausbildung stationärer Zustände – z. B. freie Konvektion (!) – zu erwarten ist, muß der Zeitschritt begrenzt werden.

5. Auch der nichtlineare Charakter der Gleichungen erfordert oft eine Steuerung des Zeitschritts: Konvergiert die oben beschriebene Iteration nicht nach einer vorgegebenen Anzahl von Schritten (i. A. 5 – 10) oder sind die maximalen relativen Änderungen von P und T zu groß, wird der Zeitschritt mit halbiertem oder allgemein verkleinertem Δt neu gestartet. Dieses Kriterium kann durch die Wahl der Konvergenzschwelle und der maximalen Iterationszahl in seiner Empfindlichkeit beeinflusst werden.

2.3.3 Diskretisierung III: Nichtlineare Iteration

Die Nichtlinearität – die \mathbf{A} , \mathbf{B} und \mathbf{P} sind im allgemeinen Funktionen von \mathbf{u} – wird iterativ behoben: Das generelle Schema der hier implementierten Picard-Iteration [Wood, 1990, Huyakorn and Pinder,

1983, Frind and Verge, 1978] besteht darin, einen Wert des Feldes zwischen $t^{(n)}$ und $t^{(n-1)}$ zu bestimmen, an welchem die beteiligten Matrizen berechnet werden. Dies geschieht durch die Wahl eines Parameters χ (z. B. $\chi = \theta$), so daß $u^{n+\chi,k}$ durch das gewichtete Mittel

$$u_i^{(n+\chi,k)} = \chi u_i^{(n+1,k-1)} + (1 - \chi) u_i^{(n)} \quad (2.46)$$

für die Iteration k bestimmt werden kann. Zu Beginn jedes Zeitschrittes - bei der ersten Iteration - werden sämtliche von u abhängigen Koeffizienten auf Basis eines dementsprechend projizierten Wertes der beiden Variablen berechnet:

$$u_i^{(n+\chi,0)} = u_i^{(n)} + \chi \frac{\Delta t^{(n)}}{\Delta t^{(n-1)}} \left(u_i^{(n)} - u_i^{(n-1)} \right) \quad (2.47)$$

Die Iteration kann für schwach nichtlineare Verhältnisse durch ein Relaxationsverfahren [Cooley, 1983, Wood, 1990] beschleunigt werden. Damit ist gemeint, daß der iterierte Wert von u_i aus:

$$\begin{aligned} u_i^{n,k} &= u_i^{n,(k-1)} + \omega^{(n)} (u_i^{(n,k)} - u_i^{(n,k-1)}) \\ &= u_i^{n,(k-1)} + \omega^{(n)} \Delta u_i^{n,k} \end{aligned} \quad (2.48)$$

berechnet wird. Δu kann aus dem in 2.43 aufgestellten Gleichungssystem:

$$\hat{\mathbf{A}} \mathbf{u} = \hat{\mathbf{P}} \quad (2.49)$$

durch die Transformation

$$\hat{\mathbf{A}} \Delta \mathbf{u} = \hat{\mathbf{P}} - \hat{\mathbf{A}} \mathbf{u}^{(n)} \quad (2.50)$$

unmittelbar und ohne nennenswert erhöhten Rechenaufwand ermittelt werden.

Der Relaxationsparameter $\omega^{(n)}$ wird mit dem Startwerten $\omega^{(1)} = 1$ durch

$$\omega^{(k)} = \begin{cases} \frac{3+s^{(k)}}{3+|s^{(k)}|} & s^{(k)} \geq -1 \\ \frac{1}{2|s^{(k)}|} & \text{sonst} \end{cases} \quad (2.51)$$

bestimmt, wobei

$$s^{(k)} = \frac{\Delta u_{max}^{(k)}}{\omega^{(k-1)} \Delta u_{max}^{(k-1)}}$$

gesetzt wird und Δu_{max} der betragsgrößte Zuwachs ist. Die Iteration wird abgebrochen, wenn dieser Wert unter eine vorgegebene Schranke gerät, die bei den in dieser Arbeit gezeigten Simulationen meist bei $\frac{\Delta u}{u}_{max} = 10^{-4}$ liegt.

2.3.4 Lineare Gleichungssysteme

Bei der hier verwendeten Diskretisierung werden die in den Gleichungssystemen auftauchenden Integrale über Bewegungsterme und Zeitableitungen elementweise ausgewertet, die Quellterme jedoch knotenweise berücksichtigt.

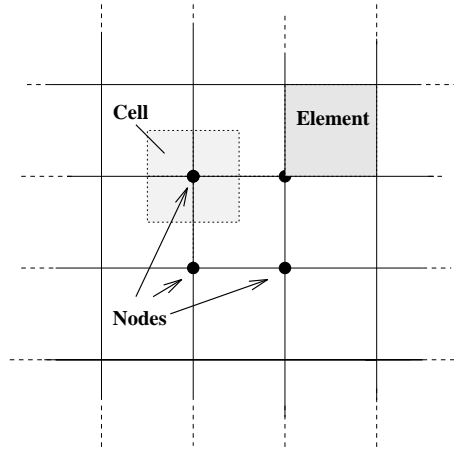


Abbildung 2.10: Definition der in P3S verwendeten Diskretisierungselemente

Für den Beitrag des k -ten Elements zu den oben definierten Matrizen ergibt sich bei der Druckgleichung:

$$\begin{aligned}
 A_{ij,k}^P &= \int_V [\rho_f [(1 - \phi) \beta_s + \phi \beta_f]] N_j N_i V \\
 B_{ij,k}^P &= \int_V \frac{\mathbf{K}\rho}{\mu} \nabla N_j \nabla N_i dV \\
 Q_{i,k}^P &= \int_V \rho_f \phi \alpha \frac{\partial T_i}{\partial t} N_j N_i dV + \\
 &\quad \int_V \left[\frac{\mathbf{K}\rho}{\mu} \rho \mathbf{g} \right] \cdot \nabla N_i dV
 \end{aligned} \tag{2.52}$$

Die Matrix \mathbf{A} wird dann durch die Summe über die M Elemente

$$\mathbf{A} = \sum_{k=1}^M \mathbf{A}_k \tag{2.53}$$

gebildet. Analog verfährt man mit \mathbf{B} und \mathbf{Q} . Da die Quellterme knotenweise verarbeitet werden, muß zu \mathbf{Q} noch der generalisierte Quellterm

$$Q_i^P = Q_i^{*,P} + Q_i^{**,P} \tag{2.54}$$

addiert werden. Er umfaßt zunächst die potentielle Fluidquelle am Knoten i , $Q_i^{*,P}$, mit deren Hilfe auch ein Fluß durch die Oberfläche S (d. h. eine Neumann'sche Randbedingung) vorgegeben werden kann. Die Realisierung Dirichlet'scher Randbedingungen ($P = P_D$ auf dem Rand) erfolgt durch den Ausdruck $Q_i^{**,P}$. Dies bedeutet die Einführung eines zusätzlichen Quellterms. Er wird so gewählt, daß

$$Q_i^{**,P}(t) = \nu^P \cdot (P_{D,i}(t) - P_i^{t+\Delta t}) \tag{2.55}$$

gilt. Die Wahl des *penalty*-Parameters ν^P entscheidet sowohl über die Genauigkeit der Einhaltung der Randbedingung als auch die Genauigkeit der durch sie induzierten Quellterme [Voss, 1984]. Durch die Wahl von ν^P muß ein *trade-off* zwischen diesen beiden angestrebten, sich widersprechenden Zielen gefunden werden (vgl. Abb. 2.11).

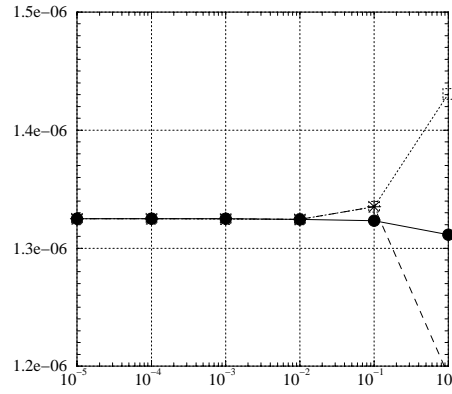


Abbildung 2.11: Einfluß der Wahl von ν^P (Gl. 2.55) auf die Berechnung der Quellterme $Q_i^{**,P}$. Dargestellt sind die berechneten Quellterme nebeneinander liegender Knoten gleicher Dirichlet'scher Randwerte in Abhängigkeit von ν^P . In diesem Fall sollte ein Wert nahe 0.001 gewählt werden: Hier sind sowohl die Randbedingungen auf 4-5 Dezimalen genau befriedigt, als auch die $Q_i^{**,P}$ ähnlich genau bestimmt.

Die Auswertung der Energiegleichung führt ganz analog zu:

$$\begin{aligned}
 A_{ij,k}^T &= \int_V [(1 - \phi) \rho_s c_s + \phi \rho_f c_f] N_j \tilde{N}_i dV \\
 B_{ij,k}^T &= \int_V [\rho_f c_f \phi \mathbf{v} \nabla] N_j \cdot \tilde{N}_i dV + \\
 &\quad \int_V [(\lambda_s(1 - \phi) + \lambda_f \phi) \mathbf{I} + \\
 &\quad \rho_f c_f \phi \mathbf{D}^T] \cdot \nabla N_j \cdot \nabla \tilde{N}_i dV
 \end{aligned} \tag{2.56}$$

Der entsprechende Quellterm ist hier

$$Q_i^T = Q_i^{*,T} + Q_i^{*,P} c_f \Delta T_i^{*,P} + Q_i^{**,P} c_f \Delta T_i^{**,P} \tag{2.57}$$

wobei die ΔT^* und ΔT^{**} die Temperaturdifferenzen der in der Druckgleichung 2.4 vorgeschriebenen Fluidquellen zur Umgebung darstellen. Zu beachten sind hier die von den N_i abweichenden Gewichtsfunktionen \tilde{N}_i in den Integralen, auf deren Bedeutung im folgenden Abschnitt 2.3.5 eingegangen wird.

Die Diskretisierung der Massentransportgleichung entspricht vollkommen derjenigen der Differentialgleichung für T :

$$\begin{aligned}
 A_{ij,k}^C &= \int_V [(1 - \phi) \rho_s + \phi \rho_f] N_j \tilde{N}_i dV \\
 B_{ij,k}^C &= \int_V [\rho_f \phi_f \mathbf{v} \nabla] N_j \tilde{N}_i dV + \\
 &\quad \int_V [\rho \phi (D_f \mathbf{I} + \mathbf{D}^C)] \cdot \nabla N_j \cdot \nabla \tilde{N}_i dV
 \end{aligned} \tag{2.58}$$

mit dem Quellterm:

$$Q_i^C = Q_i^{*,C} + Q_i^{*,P} \Delta C_i^{*,P} + Q_i^{**,P} \Delta C_i^{**,P} \tag{2.59}$$

Die praktische Integration wird durch eine Gauß'sche Quadratur über - dem bilinearen Charakter der Funktionen entsprechend - 4 Punkte im Einheitsquadrat ausgeführt und anschließend auf globale

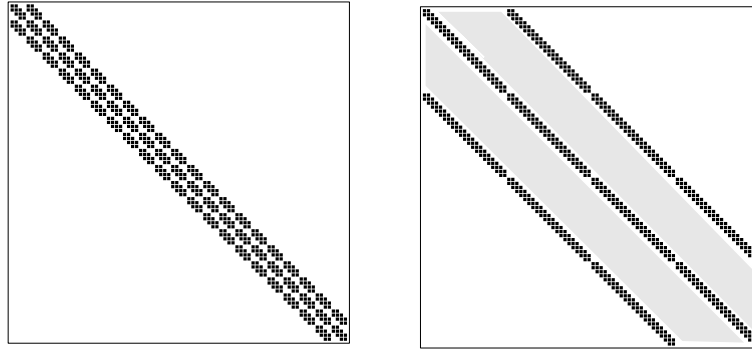


Abbildung 2.12: Beispiel der typischen Besetzungsstruktur der FE-Matrizen für reguläre Gitter. Es handelt sich hier um ein Gitter von 3×15 Elementen. Werden die Knoten in x -Richtung numeriert, ergibt sich die Bandbreite $n_B = 4 + 1 = 5$ (linke Seite), gegenüber $n_B = 17$ im Falle einer Numerierung in y -Richtung. Der schattierte Bereich muß bei Bandspeicherung mit einbezogen werden.

Koordinaten umgerechnet. Dazu müssen auch die nichtlinearen Terme der $P - T$ -abhängigen Fluid- und Gesteinseigenschaften an den Gaußpunkten berechnet werden. Dies geschieht wegen der zeit-aufwendigen direkten Berechnung dieser Parameter (insbesondere ρ_f) durch Interpolation von einem vorgegebenen (äquidistanten) Gitter in $P - T$. Die Interpolation ist bilinear, so daß die Gitterweite an das Verhalten des Systems angepaßt werden sollte.

Die effiziente Lösung dieser Gleichungssysteme ist ein wesentliches Problem, da sie den weitaus größten Anteil an der benötigten Rechenzeit hat. Dies gilt besonders, da dies sowohl im Zyklus der nichtlinearen Iterationen, als auch mit jedem Zeitschritt erfolgen muß. Die Wahl des Verfahrens muß daher mit Überlegung erfolgen.

Wegen des Konvektionsterms in 2.8 und 2.10 sind die Gleichungssysteme asymmetrisch [Zienkiewicz, 1984, Zienkiewicz and Taylor, 1989a]. Sie sind jedoch strukturell – d. h. auf den Besetzungsplan bezogen (Abb. 2.12) – symmetrisch und vor allem sehr dünn besetzt. Im Falle regulärer Gitter mit geeigneter Numerierung der Knoten erhalten sie sogar Bandstruktur. Dies legt nahe, die Matrix bandweise abzuspeichern. Entscheidend dabei ist die Bandbreite des benutzten Speicherschemas. Es ist bekannt, daß bei der direkten Lösung eines solchen Systems neue Matrixelemente $\neq 0$ nur innerhalb dieser Bandbreite entstehen [Golub and Van Loan, 1989]. Die ursprünglich dort nicht vorhandenen Elemente müssen daher berücksichtigt werden. Die schwache Besetzung der Matrix wird daher bei einem solchen Schema nur unvollkommen ausgenutzt. Die Bandbreite der Matrizen hängt jedoch stark von der Numerierung der Elemente/Knoten ab: Sie ist gleich dem maximalen Abstand der Knoten in der Indizierung (vgl. Abb. 2.12). Dieser Wert kann durch eine Umsortierung nach den einschlägigen Verfahren [z. B. Schwarz, 1984, 1988] minimiert werden. Dies ist jedoch oft aufwendig, besonders wenn eine Gitterverfeinerung (aus numerischen oder anderen Gründen) angebracht erscheint. Ähnliche Aussagen ergeben sich für die ebenso beliebte Profilspeicherung (*skyline*) [Schwarz, 1984, 1988]. Im vorhandenen Programm ist eine Bandspeicherung implementiert. Die Gleichungssysteme werden durch eine Variante des LU-Algorithmus [Golub and Van Loan, 1989] gelöst, der an den vorliegenden Fall strukturell symmetrischer, numerisch asymmetrischer Bandmatrizen angepaßt ist.

Alternativ dazu wären Speicherschemata zu betrachten, die lediglich die nicht verschwindenden Elemente einbeziehen [Saad, 1990]. Soll gleichzeitig eine direkte Lösung des Gleichungssystems angestrebt werden, so ist dies jedoch nur mit erhöhtem Aufwand in der Verwaltung der hier neuentstehenden Matrixelemente möglich [Zlatev, 1993, Pissanetzky, 1984]. Die Effizienz der direkten Verfahren nimmt jedoch im allgemeinen Fall mit steigender Bandbreite und Zahl der Gleichungen schnell ab, so daß

iterative Verfahren [Hackbusch, 1991, Barret et al., 1994] konkurrenzfähig werden. Dies gilt sowohl für den benötigten Speicherplatz als auch die Rechenzeit. Es sind dafür neuerdings eine ganze Reihe von Quellen zugänglich [z. B. Seager, 1988, Oppe et al., 1988, Barret et al., 1994, da Cunha and Hopkins, 1995], die auch die Ausnutzung paralleler Rechnerarchitekturen ermöglichen [da Cunha and Hopkins, 1995]. Im speziellen Fall wurde eine komprimierte Zeilenpeicherung (*CRS*) implementiert, und ein GMRES-Verfahren [Saad and Schultz, 1986] zur Lösung eingesetzt, welches mit einer unvollständigen LU-Zerlegung präkonditioniert wird [Saad, 1992]. Es konnten wegen des standardisierten Speicherschemas jedoch auch Algorithmen aus den genannten Quellen im Baukastenverfahren eingesetzt werden. Praktisch ergab sich, daß derartige Verfahren schon bei vergleichsweise geringen Knotenzahlen ($N < 1000$) deutlich effektiver sind als direkte Verfahren. Die Varianten des *GMRES*-Verfahrens haben sich als die im Durchschnitt robustesten Verfahren durchgesetzt, so daß der durch die notwendige Abspeicherung der Arnoldivektoren höhere Speicherverbrauch gerechtfertigt erscheint. In bestimmten Fällen können jedoch die weniger aufwendigen Verfahren kurzer Rekursion (*BiCG*, *CGS*, *BiCGstab*, *TFQMR*) effektiver sein.

2.3.5 *Upwind*-Verfahren

Die Lösung einer Advektions-Diffusions-Gleichung in ihrer allgemeinen Form 2.1 ist ein klassischer Problemfall für finite Methoden und macht besondere Anstrengungen nötig. Im Falle verschwindender Diffusion bzw. Dispersion geht sie in eine hyperbolische Gleichung über, die Wellenlösungen des Typs $f(x \pm vt)$ hat. Ist $v = 0$ und verschwindet damit der Koeffizient der ersten Ortsableitung, bleibt eine parabolische DGL vom Diffusionstyp übrig. Im stationären Falle ist die Gleichung gar elliptisch. Diese Klassifizierung der Gleichungen weist auch physikalisch auf unterschiedliche Prozesse hin: Bei elliptischen Gleichungen beeinflusst eine Störung im Gebiet simultan das gesamte Gebiet. Parabolische und hyperbolische Gleichungen weisen physikalisch auf Prozesse hin, die sich zeitlich fortentwickeln. Die Lösung zu einem Zeitpunkt $t > t_0$ entsteht aus den Anfangsbedingungen durch Fortpflanzung in eine bestimmte Richtung. Parabolische DGLn beschreiben dabei Prozesse, welche dissipativen Charakter aufweisen, wie beispielsweise Ausgleichsvorgänge. Bei hyperbolischen Verhältnissen besteht eine entscheidende Einschränkung: Information pflanzt sich nur entlang bestimmter charakteristischer Linien fort, wie in unserem Falle beispielsweise diejenigen der Geschwindigkeit des Strömungsfeldes. Dies ist auch der Grund, weshalb mit wechselndem Erfolg versucht wurde die auf diese Eigenschaft abgestimmte numerische Methoden für die verschiedenartigen Prozesse zu hybridisieren [z. B. Neuman, 1981, Thomasset, 1981, Douglas Jr. and Russel, 1982, Zienkiewicz et al., 1979, Li, 1990]. In einer konkreten Modellsimulation können durchaus gleichzeitig in verschiedenen Zonen alle Typen vertreten sein. Es ist daher ein Verfahren nötig, das robust genug ist für einen weiten Parameterbereich.

Insbesondere die durch das Auftreten von hyperbolischem Verhalten bedingten spezifischen Schwierigkeiten sind oft beschrieben worden [z. B. Zienkiewicz, 1984, Roache, 1978, Huyakorn and Pinder, 1983, Fletcher, 1984, 1988]. Bei der Lösung advektiv-diffusiver DGLn durch Finite Differenzen (FD) treten Oszillationen auf, wenn die räumliche Diskretisierung des Konvektionsterms durch zentrale Differenzen erfolgt und der Betrag der für ein Element definierten lokalen Pecletzahl den theoretisch begründeten Wert 2 erreicht oder überschreitet. Neuerdings haben Noorishad et al. [1992] klargestellt, daß der Raum der sinnvollen Lösungen bei einem CN-Verfahren durch die Bedingung:

$$\begin{aligned} \frac{Co}{Co-1} &\geq Pe & , \text{ falls } & Pe > 1, \quad Co > 1 \\ \frac{Co}{Co+1} &\geq Pe & , \text{ falls } & Pe < 1, \quad Co > 0 \end{aligned} \tag{2.60}$$

schärfer strukturiert werden kann. Diese beiden Bedingungen sind in Abb. 2.13 dargestellt.

Das Verhalten der Lösung wird durch das Verhältnis der Koeffizienten der beiden Differentialausdrücke bestimmt. Das Verhältnis der eigentlichen Koeffizienten muß durch Multiplikation mit einer Längendimension dimensionslos gemacht werden, um die Ortsableitungen verschiedenen Grades zu skalieren.

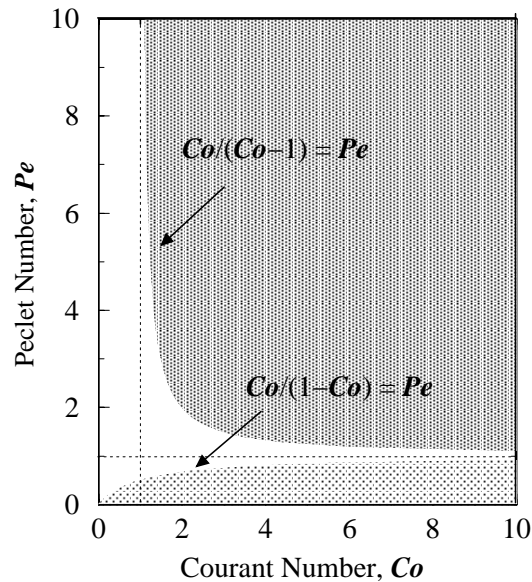


Abbildung 2.13: Nach Noorishad et al. [1992] kann die transiente Konvektions-Diffusionsgleichung nur außerhalb der schattierten Zonen sinnvoll gelöst werden. Sie werden begrenzt durch die Bedingungen 2.60.

Damit kann das Verhalten der Gleichung durch eine einzige Zahl (Pe) zusammengefaßt werden. Demgemäß geht die Gleichung bei hohen Werten dieser dimensionslosen Zahl in den hyperbolischen Bereich über, während sie für $Pe \Rightarrow 0$ parabolische Züge gewinnt.

Die lokale zellenbezogene Pecletzahl:

$$Pe^h = \frac{ah}{b} \quad (2.61)$$

enthält neben der Geschwindigkeit $a = \|\mathbf{a}\|$ eine charakteristische Längendimension des Elementes (h) und die in b zusammengefaßten diffusiven Terme der Wärme- oder Massentransportgleichungen. Dem vektoriellen bzw. tensoriellen Charakter der Koeffizienten \mathbf{a} und \mathbf{b} in 2.1 kann durch eine geeignete Normbildung Rechnung getragen werden. Pe gibt auf Element- oder Zellenebene das Verhältnis des konvektiven zum diffusiven Anteil wieder.

Die Problematik soll hier an einem sehr vereinfachten Fall (d. h. 1D, lineare, isotrope Verhältnisse, äquidistantes Gitter mit $\Delta x = h$) erläutert werden. Die den einzelnen Termen der DGL entsprechenden Ausdrücke können dann als:

$$\begin{aligned} \frac{\partial u}{\partial x} &= \frac{1}{2h} \{ -1 \ 0 \ 1 \} \mathbf{u}^T \\ \frac{\partial^2 u}{\partial x^2} &= \frac{1}{h^2} \{ -1 \ 2 \ -1 \} \mathbf{u}^T \\ \frac{\partial u}{\partial t} &= \{ 0 \ 1 \ 0 \} \dot{\mathbf{u}}^T \end{aligned}$$

geschrieben werden [z. B. Brooks and Hughes, 1982]. Dabei soll unter \mathbf{u}_k der Vektor $\{u_{k-1} \ u_k \ u_{k+1}\}$ verstanden werden. In dieser Semidiskretisierung ist die Ortsableitung durch zentrale Differenzen gebildet worden.

Falls das Problem in der Praxis nicht durch engere Diskretisierung oder höhere Differenzterme überwunden werden kann, ist eine schon klassische Methode zur Bekämpfung der Oszillationen einsetzbar.

Sie wird üblicherweise als *upwind*-Technik bezeichnet. Der übliche symmetrische Differenzterm für die Berechnung des Gradienten wird dabei durch eine einseitige Diskretisierung gegen die Strömungsrichtung (*upwind* oder *upstream*) ersetzt oder generell in diese Richtung asymmetrisch gewichtet berechnet [z. B. Clauser and Kiessner, 1987]. Durch diesen Typus von Methoden kann vermieden werden, entweder sehr große Gitter zu verwenden oder erhöhte Bandbreiten der gebildeten Matrix in Kauf zu nehmen.

Die *upwind*-Diskretisierung kann interpretiert werden durch

$$\begin{array}{rcl}
 a\frac{1}{2h} & \{ & -1 \ 0 \ 1 \} \mathbf{u}^T & \text{zentrale Differenzen} \\
 + a\frac{ah}{2} \frac{1}{h^2} & \{ & -1 \ 2 \ -1 \} \mathbf{u}^T & \text{dto.} \\
 \hline
 = a\frac{1}{h} & \{ & -1 \ 1 \ 0 \} \mathbf{u}^T & \text{'upwind'}
 \end{array}$$

Im zweiten Summanden ist unschwer eine künstliche Diffusivität der Größe $\frac{ah}{2}$ zu erkennen, die das Verfahren stabilisiert. Es sind dagegen jedoch eine Reihe Einwände vorzubringen, die die verminderte Genauigkeit des Verfahrens und die in vielen Fällen signifikante Veränderung der Physik des Problems betreffen – wirkliche und numerische Diffusivität können durchaus ähnliche Größenordnungen erreichen. Nach dem hier gesagten darf mit gleichem Recht argumentiert werden, daß die zentralen Differenzen eine negative künstliche Dissipation beinhalten, da die quasi hyperbolische Physik die Verwendung von Information verbietet, die in Flußrichtung liegt. Ein Vergleich der üblichen *upwind*-Lösungen mit entsprechenden analytischen Lösungen zeigt jedoch, daß dieser Einfluß sicher überkorrigiert ist.

Weiterhin besteht für multidimensionale Probleme das zusätzliche Problem der Konstruktion eines Schemas, welches keine zusätzlichen Fehlerterme in die Komponenten der Gleichung einführt, deren Richtung nicht mit der Geschwindigkeit \mathbf{a} übereinstimmt. Diese Schwierigkeiten haben im Bereich der FD dazu geführt daß eine große Zahl von Schemata entwickelt wurde, die *upwind*-Verfahren weiterentwickeln [z. B. Leonard and Niknafs, 1991] oder ersetzen [Le Veque, 1990].

Die Methode der Finiten Elemente (FE) wie bisher beschrieben entspricht einer Diskretisierung durch FD mit geeignet gemittelten physikalischen Koeffizienten [Gray, 1984, Pinder and Gray, 1976, Fletcher, 1984] und führt ebenfalls zu zentralen Diskretisierungen – bei den oben genannten Vereinfachungen sogar zum gleichen Schema. Es ist daher nicht überraschend, daß auch hier Oszillationen auftauchen. Die FE-Methode erlaubt jedoch ebenfalls eine asymmetrische Behandlung im Rahmen einer generalisierten Galerkin-Methode (bekannt auch als Methode von Galerkin-Petrov [Fletcher, 1984]). Dies geschieht praktisch durch die Wahl geeigneter Gewichtsfunktionen, welche die Integralbeiträge an den Gaußpunkten entsprechend asymmetrisch gewichten.

Optimale Gewichtung

In Falle eindimensionaler Probleme können nach [Christie et al., 1976] Testfunktionen konstruiert werden, welche durch die Addition eines zusätzlichen Terms zu den n_j entstehen:

$$\tilde{n}_1 = n_1 - 3\alpha n_1 n_2 \qquad \tilde{n}_2 = n_2 + 3\alpha n_1 n_2$$

Dabei ist die Größe α ein Maß der Asymmetrie der Funktion. Dieses Verfahren kann im 1D-Fall und unter stationären Bedingungen als optimal angesehen werden (z. B. [Thomasset, 1981, Fletcher, 1984]), wenn α durch

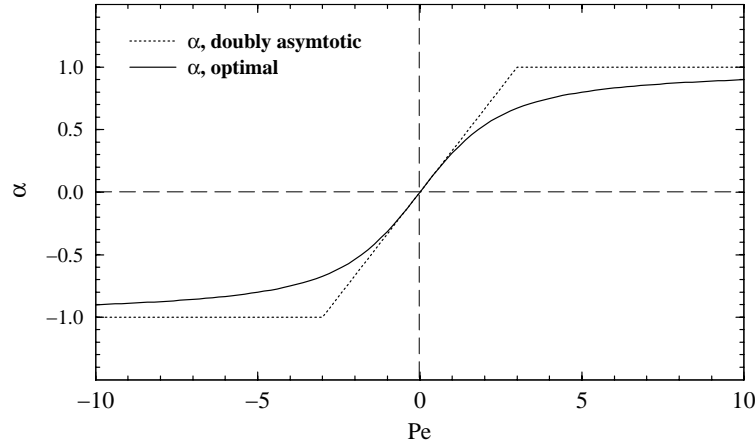


Abbildung 2.14: Optimaler *upwind*-Parameter α nach Christie et al. [1976]. Gestrichelt ist die sogenannte doppelt asymptotische Näherung $\alpha = \text{sign}(\text{Pe}^h) \cdot \min(\|\frac{\text{Pe}^h}{3}\|)$

$$\alpha^{opt}(\text{Pe}^h) = \coth(\text{Pe}^h) - \frac{1}{\text{Pe}^h} \quad (2.62)$$

berechnet wird. Dabei ist $\text{Pe}^h = \frac{ah}{b}$ wiederum die lokale Pecletzahl.

Diese Funktion bewirkt für große Pe (d.h. advektiv dominierten Transport) ein klassisches *upwind*-Verhalten, während der Perturbationsterm im entgegengesetzten Fall verschwindet:

$$\lim_{\text{Pe}^h \rightarrow \infty} \alpha^{opt} = 1 \quad \lim_{\text{Pe}^h \rightarrow 0} \alpha^{opt} = \frac{\text{Pe}^h}{3}$$

In Heinrich et al. [1977] und Zienkiewicz and Heinrich [1978] wird eine *ad-hoc* Generalisierung für zwei Dimensionen gegeben, wobei die bidimensionalen Gewichtsfunktionen durch Produktexpansion aus den eindimensionalen hervorgehen. Wie jedoch lange bekannt ist [z. B. Hughes et al., 1982, Cantekin and Westerink, 1990], wird eine im eindimensionalen Verfahren gegebene Optimalität des Verfahrens nicht unbedingt übertragen. Der vektorielle Charakter der Geschwindigkeit macht die Einführung einer richtungabhängigen Gewichtung erforderlich: Da der Perturbationsterm einer künstlich hinzugefügten Diffusivität entspricht, ist es wegen des Auftretens unnötiger Diffusion senkrecht zur Richtung von \mathbf{a} ratsam, diese getrennt zu kontrollieren.

Eine dem klassischen *upwind*-Verfahren mit konstantem α entsprechende gebräuchliche Wahl ist:

$$\alpha_\xi = c \frac{a_\xi}{\|\mathbf{a}\|}$$

wobei a_ξ die Geschwindigkeit in ξ -Richtung ist [Voss, 1984]. Die Konstante c ist dabei frei wählbar ($0 < c < 1$).

Im hier verwendeten Programm wurde eine andere Variante verwendet: Die optimale Wahl für α wird derart erweitert, daß komponentenweise Pecletzahlen definiert werden. Die dazugehörigen α werden dann nach Formel 2.62 berechnet. Das Verfahren wurde von Heinrich et al. [1977] und Huyakorn and Pinder [1983] beschrieben.

Wie von Voss [1984] gezeigt wurde ist es wünschenswert, bei der Berücksichtigung geschwindigkeitsabhängiger Terme eine konsistente Berechnung dieser Größe vorzunehmen. Da ∇P innerhalb eines Elements bei linearen Testfunktionen als konstant angenommen wird, entstehen bei einer linearen (oder

höheren) Variation der übrigen Variablen (z. B. ρ_f, μ_f) scheinbare Geschwindigkeiten. Konsequenterweise werden bei der Berechnung der lokalen Pecletzahl die konsistent interpolierten Geschwindigkeiten an den Elementmittelpunkten (Zentroid) verwendet.

Im natürlichen Koordinatensystem ist die charakteristische Elementdimension in beiden Koordinatenrichtungen 2, während sich der Geschwindigkeitsbetrag mit Hilfe von Gl. 2.38 berechnen läßt. In ξ -Richtung wird der Elementparameter h^a konsistent dazu durch

$$h^a = 2 \frac{\|a^g\|}{\|\mathbf{a}\nabla\xi\|} \quad (2.63)$$

bestimmt [Hughes et al., 1986b, Tezduyar and Park, 1986]. Es kann jedoch bei nicht zu stark deformierten Gittern und isotropen Verhältnissen auch ein vereinfachtes Verfahren (etwa $h = \sqrt{\det(J)}$) verwendet werden. Im Falle einer Anisotropie der diffusiven Anteile können auch diese in die entsprechende Richtung projiziert werden. Mit diesen Größen erhält man eine unabhängige optimale Gewichtung in beide Koordinatenrichtungen.

SUPG-Verfahren

In einer umfangreichen Artikelreihe wurde von Hughes et al. eine neue überlegene Formulierung vorgeschlagen [Hughes et al., 1982, Hughes and Brooks, 1982, Hughes and Tezduyar, 1984, Hughes et al., 1985, 1986a,b, Hughes and Mallet, 1986a,b, Tezduyar and Park, 1986]. Sie wird von den Erfindern als *Streamline-Upwind/Petrov-Galerkin*-Methode bezeichnet und stellt einen Spezialfall der *Least-Squares-FEM* (LSFEM) dar [Jiang, 1998]. Im folgenden wird sie kurz mit SUPG bezeichnet. Näheres zur Konvergenz dieser Methode und entsprechende Fehlerabschätzungen sind den schon genannten Publikationen sowie den Arbeiten von Johnson [1987] und Szepessy [1989] zu entnehmen.

Eine asymmetrische Gewichtung wird hier durch die direkte Einführung einer diskontinuierlichen bidimensionalen Gewichtsfunktion

$$\tilde{N}_i = N_i + \tau N_i^* \quad (2.64)$$

gewährleistet. Der Perturbationsterm wird definiert durch

$$N_i^* = \frac{1}{2} h^a \mathbf{n} \cdot \nabla N_i \quad (2.65)$$

$\mathbf{n} = \mathbf{a}/\|\mathbf{a}\|$ ist dabei der Einheitsvektor in Richtung der Geschwindigkeit \mathbf{a} ; τ ist eine numerische Konstante, die zur Optimierung des Verfahrens benutzt werden kann.

Eine Reihe zeitlicher und/oder räumlicher Kriterien werden in Tezduyar and Ganjoo [1986] und Hughes and Mallet [1986a] diskutiert. Die im Rahmen dieser Arbeit durchgeführten numerischen Experimente deuten an, daß die konkrete Wahl der Funktion τ für die meisten Modelle unkritisch ist. Unterschiede ergeben sich im wesentlichen bei der Behandlung von Quelltermen.

Im entsprechenden Modul von P3S hat sich das folgende einfache Verfahren bewährt: τ setzt sich multiplikativ aus einem optionalen zeitlichen und einem räumlichen Gewicht zusammen. Ersteres kann nach Tezduyar and Ganjoo [1986] durch $\tau^t = \frac{2}{\sqrt{15}} + \left(1 - \frac{2}{\sqrt{15}}\right) \text{Co}^h$ $\tau^t = c + (1-c)\text{Co}^h$ mit $c = 2/\sqrt{15}$ für $\text{Co}^h \leq 1$ angegeben werden. Andernfalls wird es = 1 gesetzt. Der räumliche Anteil ist nach Hughes and Mallet [1986a] $\tau^s = \alpha^{opt}(\mathcal{P}^h)$ und kann wiederum nach der Formel 2.62 oder der doppelt asymptotischen Näherung berechnet werden. Dabei ist $\mathcal{P} = \frac{\|\mathbf{a}\| h^a}{2b^v}$ eine geeignet definierte Pecletzahl, welche auf den Parameterwerten des Elementmittelpunktes beruht, während h_a ein Gitterparameter in Richtung der Geschwindigkeit ist.

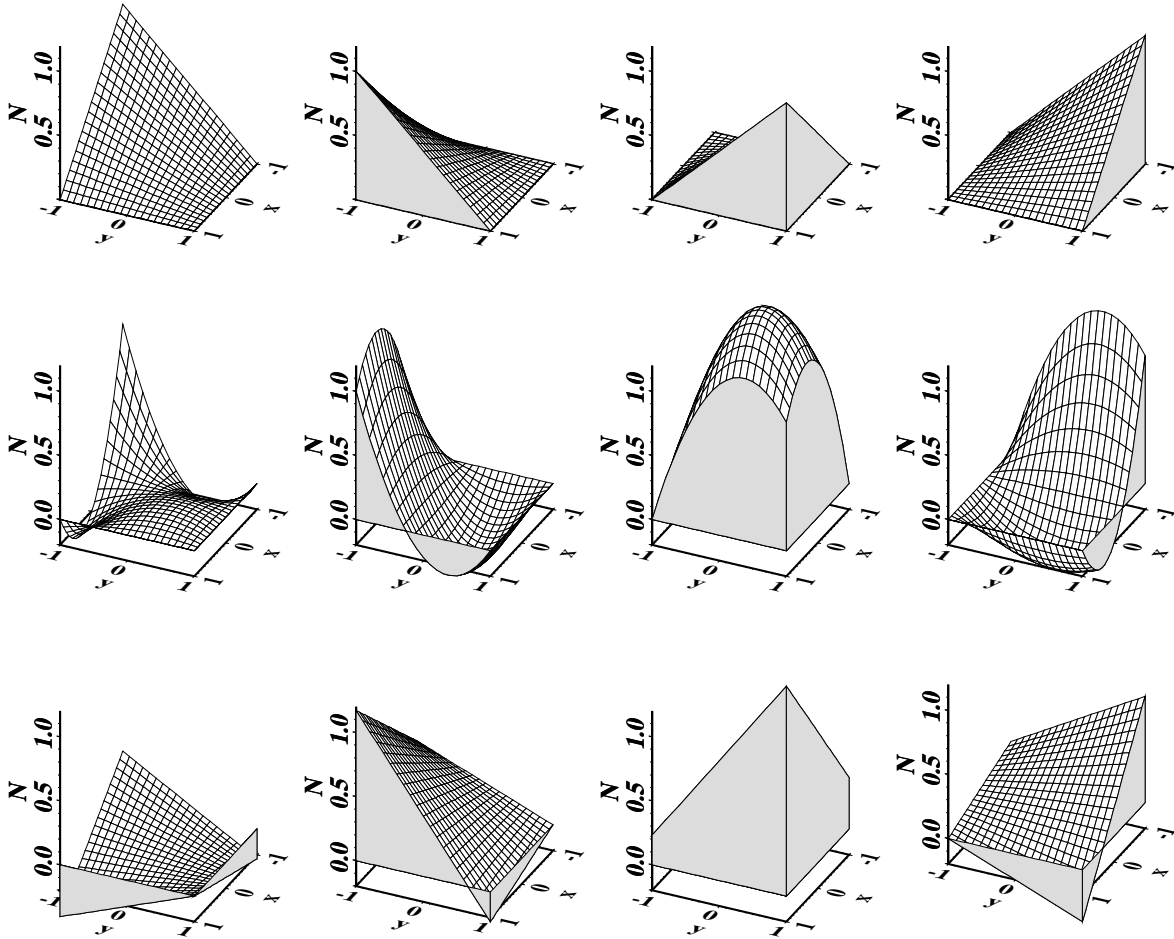


Abbildung 2.15: Asymmetrische Basisfunktionen auf einem bilinearen 2D Element. Dargestellt sind lokale Funktionen auf dem jeweiligen Einheitselement. Für die hier gezeigten Gewichtsfunktionen wurde eine Geschwindigkeit in Richtung von 30° mit einer Pecletzahl von $Pe_h = 25$ angenommen. Die Courantzahl ist 0.8. Von oben nach unten sind dargestellt:

- (a) Symmetrische Galerkin-Gewichtsfunktionen \tilde{N}_i . Sie entsprechen den bilinearen Basisfunktionen.
- (b) Die hier gezeigte Gewichtsfunktion entspricht einer bilinearen Basisfunktionen mit quadratischem Störterm, d. h. einer der in Heinrich et al. [1977] und Huyakorn and Pinder [1983] beschriebenen *upwind*-Gewichtung.
- (c) zeigt die in der SUPG-Methode verwendeten Funktionen. Ihr diskontinuierlicher Charakter ist deutlich zu erkennen.

Diese Definition läßt sich derart verstehen, daß zu den üblichen bilinearen Basisfunktionen ein konstanter Term addiert wird, welcher von der Geschwindigkeit in Richtung des Gradienten bestimmt wird. τ kann nun nach verschiedenen Kriterien optimal gewählt werden: Beispielsweise kann der schon genannte Optimalwert für stationäre Probleme oder der von Hughes and Brooks [1982] angegebene Wert für optimale Phasengenauigkeit benutzt werden. Mehrere gebräuchliche Varianten für transiente Probleme werden von Hughes et al. [1985][vgl. auch Tezduyar and Ganjoo, 1986] angegeben.

Die Wirkung dieser Konstruktion asymmetrischer Gewichtsfunktionen läßt sich folgendermaßen verdeutlichen: Die relevanten Terme des Integranden in 2.30 lassen sich schreiben als

$$\tilde{N}_i \cdot (\dots \mathbf{a} \nabla T \dots) = \dots N_i \mathbf{a} \nabla T + \nabla N_i \cdot \tau \mathbf{a} \mathbf{a}^T \nabla T \dots$$

Der zusätzliche Term auf der rechten Seite kann als numerische Diffusivität der Größe $\tau \mathbf{a} \mathbf{a}^T$ interpretiert werden. Im Unterschied zu älteren Verfahren werden die generalisierten Gewichtsfunktionen

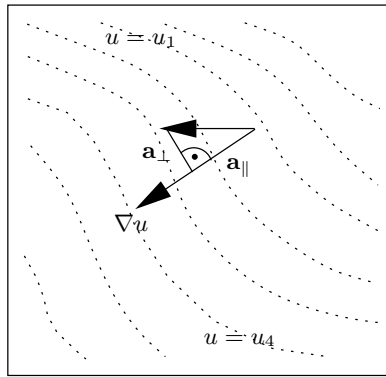


Abbildung 2.16: Geometrische Verhältnisse beim SUPG/DISC-Verfahren.

konsistent auf alle Terme der Gleichung angewendet. Die Hauptachse des numerischen Diffusivitätstensors 2. Ordnung liegt in Richtung der Geschwindigkeit \mathbf{v} . Rotiert man das Koordinatensystem in diese Richtung, verschwinden alle Elemente außer demjenigen mit a_x^2 : Die Diffusivität wirkt nur in *einer* Richtung und läßt daher im Idealfall die falsche Diffusion senkrecht zur Stromrichtung verschwinden [z. B. Nakazawa et al., 1982].

Die mit dieser Methode berechneten Lösungen weisen minimale transversale und longitudinale numerische Diffusivität auf und sind frei von instabilen Oszillationen. Sie verhindern jedoch nicht die Existenz von überschießenden Lösungen in der Nähe von Diskontinuitäten (d. h. starken Gradienten) [Johnson, 1987]. Diese Strukturen bleiben jedoch beschränkt und lokal. Das Verhalten an Diskontinuitäten kann in multidimensionalen Modellen noch verbessert werden durch die Hinzunahme eines weiteren Terms, welcher ebenfalls von den gleichen Autoren [Hughes and Mallet, 1986a] vorgeschlagen wurde und als *discontinuity capturing term* bezeichnet wird (DISC-Verfahren): Er beruht auf der Beobachtung, daß auch der Winkel zwischen Geschwindigkeit und dem Gradienten der Lösung das Verhalten bestimmt. Analog zum Term 2.65 kann eine Geschwindigkeitskomponente parallel zum Lösungsgradienten (Abb. 2.3.5) ermittelt werden:

$$\mathbf{a}_{\parallel} = \begin{cases} \frac{\mathbf{a} \cdot \nabla T}{\|\nabla T\|^2} \cdot \nabla T & \text{falls } \nabla T \neq 0 \\ 0 & \text{sonst} \end{cases} \quad (2.66)$$

Mit dieser Geschwindigkeit kann dann die Gewichtsfunktion leicht variiert geschrieben werden als:

$$\tilde{N}_i = N_i + \tau_1 \mathbf{a} \nabla N_i^* + \tau_2 \mathbf{a}_{\parallel} \nabla N_i^* \quad (2.67)$$

Wie einzusehen ist, wird damit auch bei linearen Koeffizienten der diskretisierten Gleichung ein nichtlineares Verfahren durch die Gewichtsfunktion eingeführt. Dies stellt jedoch im Falle *per se* nichtlinearer Gleichungen, wie sie hier betrachtet werden, keinen schwerwiegenden Nachteil dar.

2.3.6 Konzentrierte vs. konsistente Massenmatrix

Die im vorletzten Abschnitt beschriebenen Matrizen \mathbf{A} ergeben sich unmittelbar aus dem Verfahren der gewichteten Residua und werden als konsistente Form der Massenmatrix bezeichnet.

Vergleicht man den oben schon gezeigten vereinfachten Fall einer Semidiskretisierung der Advektions-Diffusionsgleichung 2.1 mit dem verwendeten Schema, so sieht man, daß dem Term

$$\{0 \quad 1 \quad 0\} \hat{\mathbf{u}}_k^T \quad (2.68)$$

für die Zeitableitung hier ein gemischter Vektor entspricht:

$$\left\{ \frac{1}{6} \quad \frac{2}{3} \quad \frac{1}{6} \right\} \mathbf{u}^T \quad (2.69)$$

In dieser abweichenden Verteilung der Zeitableitung auf räumliche Punkte liegt der Grund für die in diesem Falle höhere Genauigkeit der FE um den Preis eines notwendigerweise *impliziten* Verfahrens [Zienkiewicz et al., 1979, Gresho et al., 1978, Gresho and Chan, 1979]. Um ein häufig effizienteres *explizites* Zeitschritt-schema zu ermöglichen wurde oft diskutiert, die Massenmatrix \mathbf{A} zu diagonalisieren [Zienkiewicz, 1984, Hughes, 1987, Zienkiewicz and Taylor, 1989a] bzw. durch Hybridisierung mit FD-Methoden geeignet zu definieren. Konzentrierte (kondensierte) Massenmatrizen dieser Art sind beispielsweise in den verbreiteten Programmen SUTRA [Voss, 1984] oder AQUA [Vatnaskil Consulting Engineers, 1990] implementiert. Eine solche Matrix wird konzentriert (*lumped*) genannt und entspricht derjenigen, welche üblicherweise bei FD-Verfahren benutzt wird [Fletcher, 1984]. Neben der schon genannten ursprünglichen Motivation wurde jedoch auch ein stabileres Verhalten der Lösung der Advektions-Diffusions-Gleichung beschrieben [Carey and Sepehrnoori, 1984]. Bei der Lösung einer reinen Diffusionsgleichung wie derjenigen für den Druck oder im Falle kleiner Pecletzahlen erscheint es durchaus möglich (und sogar vorteilhaft), eine diagonale Massenmatrix zu bilden [Ikeda, 1977].

Anstelle einer knotenweisen Diskretisierung der vorkommenden Größen [Voss, 1984] – dies entspricht der Verwendung spezieller, stückweise konstanter Basisfunktionen über eine Zelle (vgl. Abb. 2.10) – wurden eine Reihe von Verfahren zur nachträglichen Diagonalisierung der Matrix vorgeschlagen. In der hier beschriebenen Methodologie wurden die Zeilensummenmethode

$$\mathbf{B}_{ij,k}^{lumped} = \begin{cases} \sum_{j=1}^{N_e} \mathbf{B}_{ij,k}^{consistent} & i = j \\ 0 & i \neq j \end{cases} \quad (2.70)$$

benutzt. N_e ist hier die Zahl der Knoten/Element. Alternativ dazu kann die Methode der skalierten Diagonalen:

$$\mathbf{B}_{ij,k}^{lumped} = \begin{cases} c \mathbf{B}_{ij,k}^{consistent} & i = j \\ 0 & i \neq j \end{cases} \quad (2.71)$$

verwendet werden. Die Skalierungskonstante in dieser Formel wird mit

$$c = \frac{\sum_{i,j=1}^{N_e} \mathbf{B}_{ij,k}^{consistent}}{\sum_{i=1}^{N_e} \mathbf{B}_{i,k}^{consistent}} \quad (2.72)$$

berechnet. Beide Methoden sind in Zienkiewicz and Taylor [1989a] näher beschrieben.

Im allgemeinen ist die Verwendung einer solchen konzentrierten Matrix wenig zu empfehlen. Die Ergebnisse von Carey and Sepehrnoori [1984] können so interpretiert werden daß das Verhalten der Lösung zum parabolischen hin verschoben wird. Im expliziten Rahmen ist damit der Stabilitätsbereich vergrößert ($\approx \frac{1}{\sqrt{3}}$) [Carey and Sepehrnoori, 1984, Hughes, 1987]. Dies wiegt jedoch kaum das deutlich diffusivere Verhalten auf, welches besonders bei der Verwendung von generalisierten Gewichtsfunktionen auftritt. In diesem Falle wird wegen der auftretenden geschwindigkeitsabhängigen Terme auch die Massenmatrix asymmetrisch und sollte nicht künstlich diagonal (und damit auch symmetrisch) gemacht werden.

Insbesondere im 2D-Fall sind diese Effekte dramatisch. Die bei der Entwicklung des hier beschriebenen Programmes vorgenommenen Testrechnungen bestätigen die negativen Ergebnisse von Gresho et al. [1978], Zienkiewicz et al. [1985], die vor der Verwendung diese Matrixtyps bei Gleichungen erster Ordnung warnen. Im Rahmen einer expliziten Methode kann der konsistente Charakter der Massenmatrix

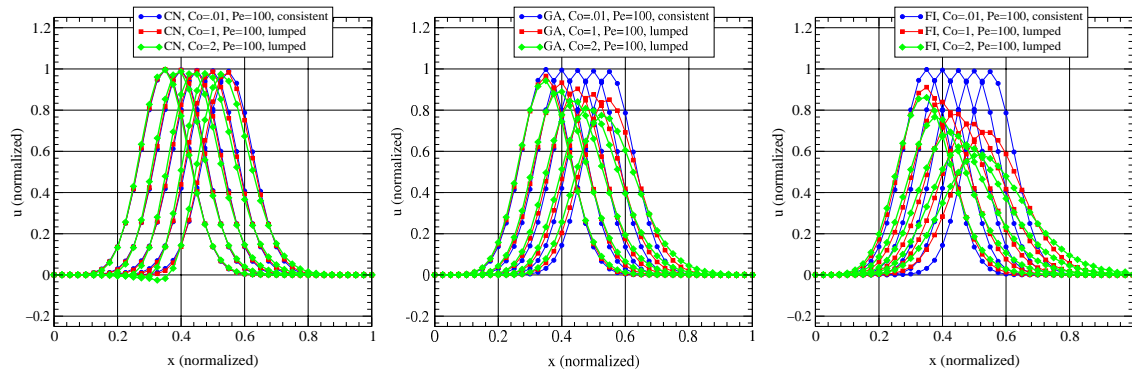


Abbildung 2.17: Effekt der konzentrierten Massenmatrix. Das Modell ist ein eindimensionaler Transport einer Gauß'schen Störung und identisch mit dem in den Abb. 2.8 und 2.7 gezeigten. Hierbei bezeichnet CN das Crank-Nicholson-Verfahren ($\theta = .5$), GA das Galerkin-Verfahren ($\theta = 2/3$) und FI das implizite Eulerverfahren ($\theta = 1.$). Für genügend kleine Zeitschritte und damit Courantzahlen Abschätzung die hier dargestellten Ergebnisse für die konzentrierte Massenmatrix den oben schon dargestellten konsistenten Ergebnissen. Während sich bei hohen Werten von Co jeweils eine erhöhte Phasenfehler und unzulässige negative Lösungswerte (CN) oder exzessive Diffusivität (GA, FI) verzeichnen lassen.

praktisch auch durch Verwendung eines mehrstufigen Verfahrens durch eine sukzessive Approximation erhalten werden [Donea et al., 1984].

2.4 Verifizierung des Verfahrens und numerische Tests

Jede numerische Simulation physikalischer Prozesse erfordert eine Verifizierung des Programms. Dies gilt besonders bei derartig komplizierten mathematischen Modellen wie dem hier vorgestellten. Die Verifikation des Gesamtmodells ist jedoch nur schwer zu leisten: Im Falle einfacher Modelle ist es möglich, einen direkten Vergleich mit analytischen oder semianalytischen - d.h. numerisch auf einem kontrollierbaren Niveau - berechenbaren Fällen durchzuführen. Einige Beispiele für dieses Verfahren sind in [Mercer et al., 1982] angegeben. Bei dem hier diskutierten Problem ist eine solche Methode kaum anwendbar, da analytische Lösungen lediglich für Teilaspekte bekannt sind [vgl. etwa Bear and Veruijt, 1987, Javandel et al., 1984, Voss, 1984]. Es bleibt jedoch der Weg, die verwendeten Teilalgorithmen einzeln zu prüfen.

Dies war in den verschiedenen Stadien der Arbeit durchaus möglich für die Submodelle, welche durch die Differentialgleichungen für Druck und Temperatur vorgegeben sind. Es sind eine große Zahl von analytischen Lösungen bekannt [z. B. Spear and Peacock, 1989, Brehm, 1989], die jedoch meistens (z. B. viele der in Carslaw and Jaeger [1959] vorhandenen Formeln) nur für konstante Koeffizienten - d. h. konstante oder zumindest lineare physikalische Eigenschaften - angegeben werden können. Mit diesen Modellen (z. B. eindimensionaler Temperatur- oder Druckausgleich bei einer Rechteckfunktion [Jones and Nur, 1984], Rayleigh-Benard'sche Konvektion in einer horizontalen Schicht [Klever, 1984]) kann daher nur die allgemeine Leistungsfähigkeit des Algorithmus geprüft werden, nicht aber die Richtigkeit der Verwendung nichtlinearer Fluid- und Matrixeigenschaften. In diesem Bereich konnte daher nur mit plausiblen Überschlagsrechnungen gearbeitet werden.

Nach Turcotte and Schubert [1979] ist für einen seminifiniten Halbraum $x \geq 0$ eine analytische Lösung der Gleichung

$$\frac{\partial U}{\partial t} = \kappa \frac{\partial^2 U}{\partial x^2} \quad (2.73)$$

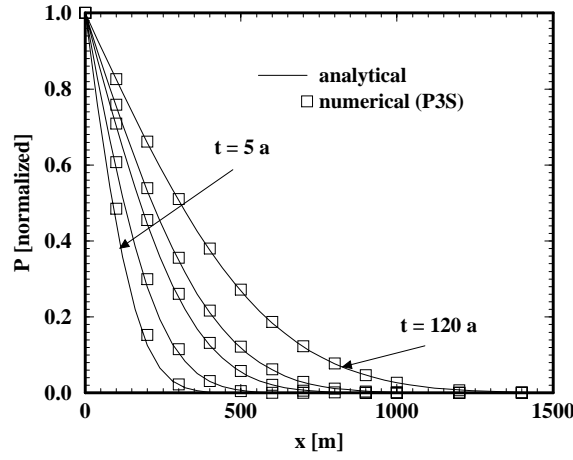


Abbildung 2.18: Modell zur Validierung der Drucksimulation

mit den Anfangs- bzw. Randbedingungen:

$$\begin{aligned}
 U &= U_0 \quad \text{für } t = 0 \quad x > 0 \\
 U &= U_1 \quad \text{für } t > 0 \quad x = 0 \\
 U &\Rightarrow 0 \quad \text{für } t > 0 \quad x \Rightarrow \infty
 \end{aligned} \tag{2.74}$$

bekannt. Sie kann unter Verwendung der inversen Fehlerfunktion

$$\begin{aligned}
 \operatorname{erfc}(\eta) &\equiv 1 - \operatorname{erf}(\eta) \\
 &\equiv 1 - \frac{2}{\sqrt{\pi}} \int_0^\eta \exp(-\eta'^2) d\eta'
 \end{aligned}$$

angegeben werden als:

$$\frac{U - U_0}{U_1 - U_0} = \operatorname{erfc} \left(\frac{x}{2\sqrt{(\kappa t)}} \right) \tag{2.75}$$

Ersetzt man U durch P und interpretiert den in 2.73 vorkommenden Parameter durch

$$\kappa = \frac{K}{\mu [\phi\beta_f + (1 - \phi)\beta_s]} \tag{2.76}$$

so kann die analytische Lösung dieser vereinfachten Druckgleichung zur Validierung des Algorithmus für die Drucksimulation herangezogen werden. Abb. 2.18 zeigt einen Vergleich der analytischen mit der numerischen Lösung durch P3S, wobei die Randbedingung für $x \Rightarrow \infty$ durch einen weit entfernten rechten Rand realisiert wurde [vgl. Brehm, 1989]. Die eingezeichneten Symbole sind die von P3S numerisch ermittelten Werte auf einem Gitter mit $N_x = 20$ Elementen, während die durchgezogene Linie jeweils die analytische Lösungen mit $P_0 = 100$ MPa und $P_1 = 200$ MPa darstellt. Die in κ vorkommenden temperaturabhängigen physikalischen Größen sind entsprechend einer Basistemperatur von $T_0 = 300$ °C und einem mittleren Druck von 150 MPa gewählt. Die verwendeten Werte sind: $\mu_f = 1.12 \cdot 10^{-4}$ Pa · s, $\rho_f = 858$ kg/m³, $\beta_f = 5 \cdot 10^{-10}$ 1/Pa, $\beta_s = 5 \cdot 10^{-10}$ 1/Pa und $\phi = 0.01$.

Das bei der Energiegleichung verwendete Modell ist ganz analog zum Druckmodell: κ kann hier als $\kappa = \frac{\lambda}{\rho_s c_s}$ interpretiert werden. Die in Abb. 2.19 eingezeichneten Symbole sind die von P3S numerisch ermittelten Werte auf einem Gitter mit $N_x = 20$ Elementen, während die durchgezogenen Linien

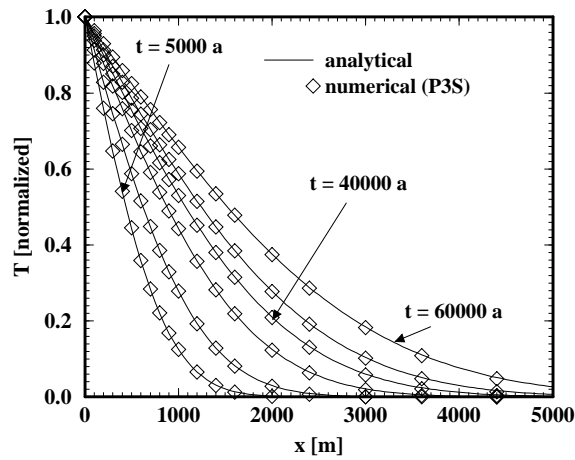


Abbildung 2.19: Modell zur Validierung der Temperatursimulation.

wieder die analytischen Lösungen mit $T_0 = 300^\circ\text{C}$ und $T_1 = 200^\circ\text{C}$ sind. Die in κ vorkommenden physikalischen Größen sind temperaturunabhängig mit $\lambda_s = 3\text{ W/mK}$, $\rho_s = 2650\text{ kg/m}^3$ und $c_s = 840\text{ J/kgK}$ angenommen worden.

Zusätzlich wurde der Temperaturmodul im Zusammenhang der Modellierung von Wärmeleitfähigkeitsmessungen an analytischen Lösungen getestet und praktisch eingesetzt [Honarmand, 1993].

Die Kopplung der Teilalgorithmen für P und T erfolgt – von den nichtlinearen Materialeigenschaften sei hier abgesehen – durch den Advektionsterm. Wie oben schon erwähnt, ist die numerische Behandlung dieses Terms eines der klassischen Probleme der Fluidodynamik. Schon in den vorangegangenen Abschnitten wurden einige simple Modelle gezeigt, die die Wirkung verschiedener Aspekte des Gesamtalgorithmus demonstrieren und insbesondere die bekannten Grenzen der Validität aufzeigen sollten. Hier sollen noch einige zusätzliche Beispiele gegeben werden.

Ergänzt man das zuletzt beschriebene Modell durch eine konstantes Geschwindigkeitsfeld $a(x) = \text{const}$, so ergibt sich (vgl. Luckner and Schestakow [1986], Clauser and Kiessner [1987]) die Differentialgleichung

$$\frac{\partial T}{\partial t} = \kappa \frac{\partial^2 T}{\partial x^2} - \kappa^* v \frac{\partial T}{\partial x} \quad (2.77)$$

mit der folgenden Lösung des transienten Problems:

$$\frac{T - T_0}{T_1 - T_0} = \frac{1}{2} \left[\text{durch} \left(\frac{x - \kappa^* vt}{2\sqrt{\kappa t}} \right) + \exp \left(\frac{\kappa^* vx}{\kappa} \right) \cdot \text{durch} \left(\frac{x + \kappa^* vt}{2\sqrt{\kappa t}} \right) \right] \quad (2.78)$$

Dabei ist:

$$\kappa = \frac{(1 - \phi) \lambda_s + \phi \lambda_f}{\rho_s c_s} \quad \kappa^* = \frac{\phi \rho_f c_f}{\rho_s c_s}$$

wobei zusätzlich zu den oben schon gegebenen Parameterwerten noch c_f mit 4365 J/kgK vorgegeben wurde.

In Abb. 2.20 wird die Wirkung der *upwind*-Verfahren anhand des Transports einer eindimensionalen Lösungsfrent demonstriert. Das Gitter ist gleichabständig mit einem $\Delta x = 200\text{ m}$. Demgemäß erreicht die von der Fluidbewegung mitgeführte Temperaturfront bei einer Courantzahl von 1 nach 10

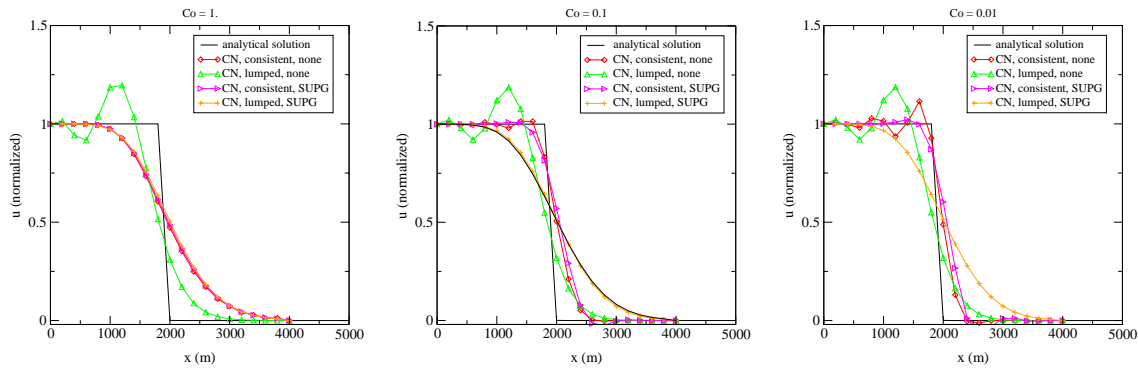


Abbildung 2.20: Wirkung des Upwind-Verfahrens für den 1D-Fall. Gezeigt ist die normierte Temperaturverteilung für das im Text beschriebene Modell. Die Zellenpeletzahl ist $Pe^h \approx 1000$, während die Courantzahl Co^h zwischen 1 und .01 variiert wird. Im Falle einer groben Zeitdiskretisierung $Co^h = 1$ sind alle Varianten überdiffusiv. Bei kleineren Zeitschritten ist die Lösung genauer, jedoch um den Preis einer Oszillation der Lösung. Die *upwind*-Verfahren (hier vertreten durch SUPG) bieten eine Möglichkeit der Dämpfung dieser Schwingungen, die bei extrem starken Lösungsgradienten auftauchen. Die Verwendung von kondensierter Massenmatrizen führt fast immer zu oszillierenden Lösung und sollte daher vermieden werden.

Zeitschritten etwa 2000 m. Die oben schon erwähnte Ausdehnung des effektiven Stabilitätsbereichs durch Anwendung eines *upwind*-Verfahrens ist bei den niedrigen Courantzahlen deutlich zu erkennen, wie auch die Wirkung der erhöhten numerischen Dispersion bei $Co = 1$. Abb.2.21 zeigt ebenfalls den advektiven Transport einer Front, die aus verschiedenen Richtungen angeströmt wird [vgl. dazu Hughes and Tezduyar, 1984, Tezduyar and Park, 1986]. Die analytische Lösung ist ebenfalls eine Advektion der Anfangsbedingungen.

Als realistischere Modelle soll hier einer der von Sudicky [1989] gezeigten Fälle vorgestellt werden. Es handelt sich um eine homogene Strömung, die eine durch Dirichlet'sche Randbedingungen an der Eintrittsseite induzierte Störung mit sich führt (Abb. 2.23). Der dispersive Anteil – eine physikalische Diffusion ist nicht vorhanden – wird durch eine longitudinale Dispersivität von 0.05 m gegenüber einer transversalen von 0.005 m realisiert. Damit ergibt sich ein Pe von 20. Der gewählte Zeitschritt von 10 entspricht einem Co von 1.

Die mit den hier implementierten Modifikationen des Galerkinverfahrens erzielten Ergebnisse sind zwar nicht frei von numerischen Artefakten, jedoch konnte der Bereich verlässlicher Diskretisierungen deutlich erweitert werden. Dies ist bei der Untersuchung mehrdimensionaler Probleme sicher von erheblichem praktischen Vorteil, da Rechenzeit- und Speicheranforderungen nichtlinear mit der Diskretisierungsdichte wachsen.

2.5 Quarzlösung

Die oben beschriebene Massentransportgleichung 2.8 kann bei Annahme eines Modells für die Lösung und Ausscheidung beispielsweise durch zyklische Iteration mit den Gleichungen für die Temperatur und den Druck gelöst werden. Ist die Reaktionskinetik eines Umwandlungsprozesses bekannt, können unter Verwendung einfacher Modelle stoffliche Veränderungen (Gleichgewicht, Reaktionen 1. Ordnung, oder allgemeinere kinetische Formulierungen) wie Adsorption oder radioaktiver Zerfall einbezogen werden. Speziell für die Lösung und Deposition von Quarz (bei niedrigen Temperaturen und Drücken) können detaillierte Modelle der Lösungsreaktion angegeben werden [Dove and Rimstidt, 1994, Rimstidt and Barnes, 1980, Bird et al., 1986].

Die Kopplung aller drei Probleme führt jedoch wegen der sehr unterschiedlichen Zeitskalen und der oben schon erwähnten konvektiven Dominanz zu Schwierigkeiten numerischer und praktischer Art. Für

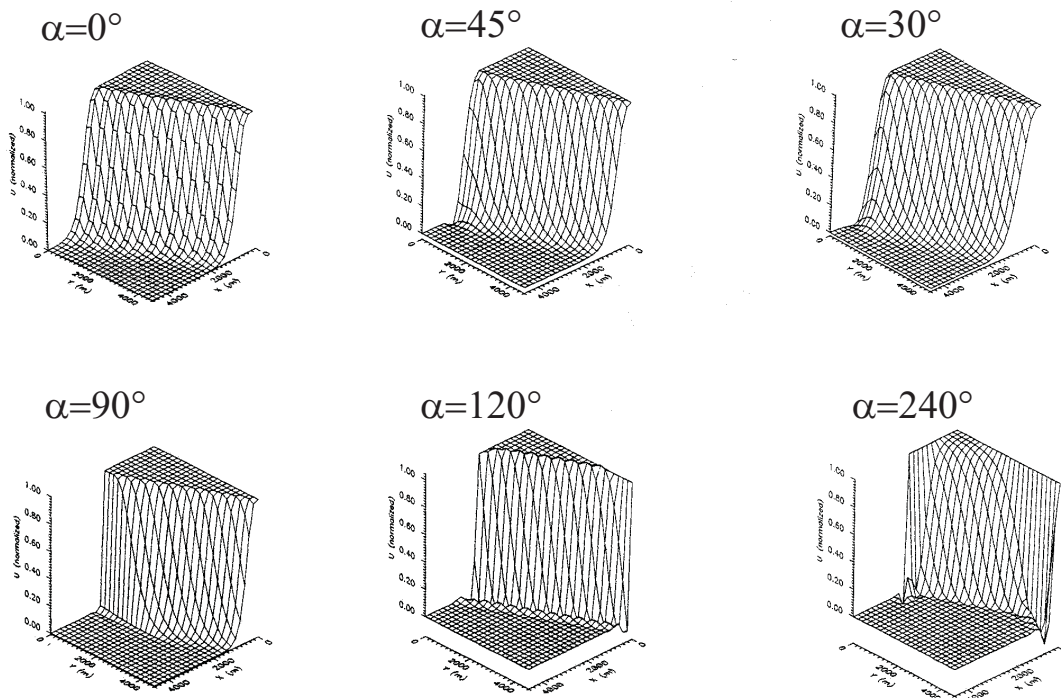


Abbildung 2.21: Advektiver Transport einer Front. Die Front wird hier aus verschiedenen Richtungen angeströmt. Bis auf die durch die spezielle Realisierung der Randbedingungen bedingten Effekte an den Rändern zeigen sämtliche Lösungen nur geringe Überschwingeffekte an der Kante der diskontinuierlichen Lösung ($Pe = \infty, Co = 0.2$).

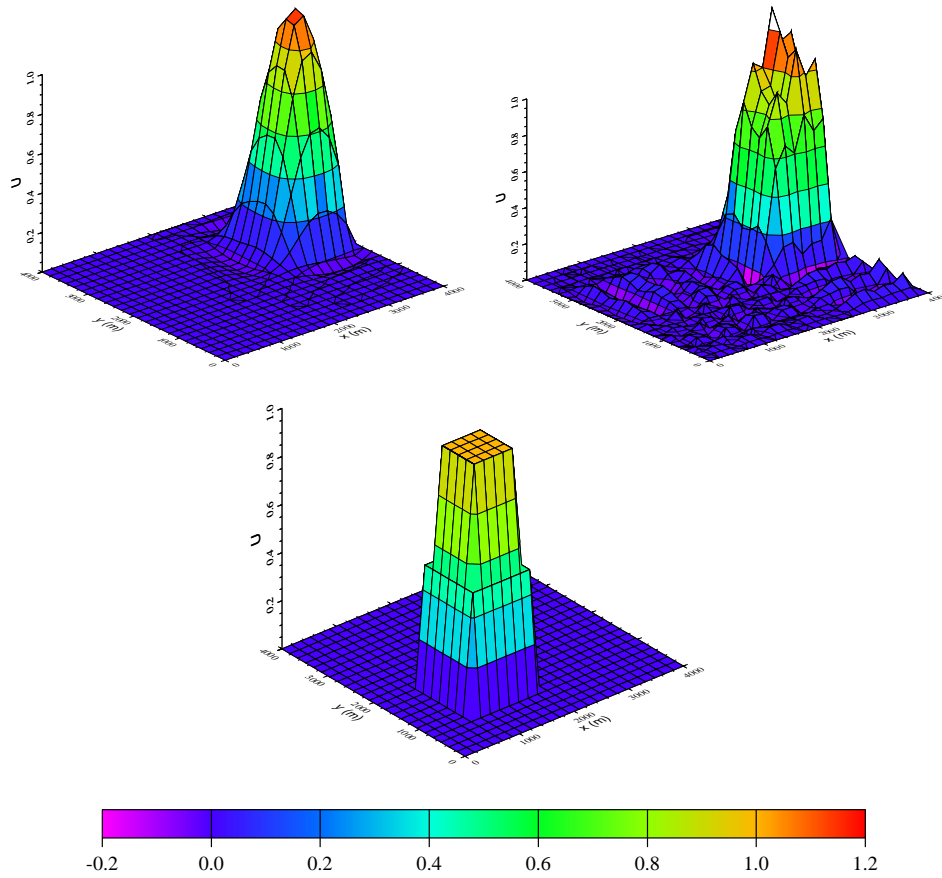


Abbildung 2.22: Advektiver Transport einer Blockstörung. Dargestellt sind Resultate der SUPG-links sowie einer unmodifizierten Galerkin-Methode (rechts). Wie in Abb. 2.21 ist die analytische Lösung in diesem Fall ($Pe = \infty$) eine Translation der Anfangswerte (unten). Die Courantzahl ist $Co = 0.125$. Deutlich zu sehen ist das trotz eines vorhandenen Überschwingens friedfertige Verhalten der modifizierten Lösung.

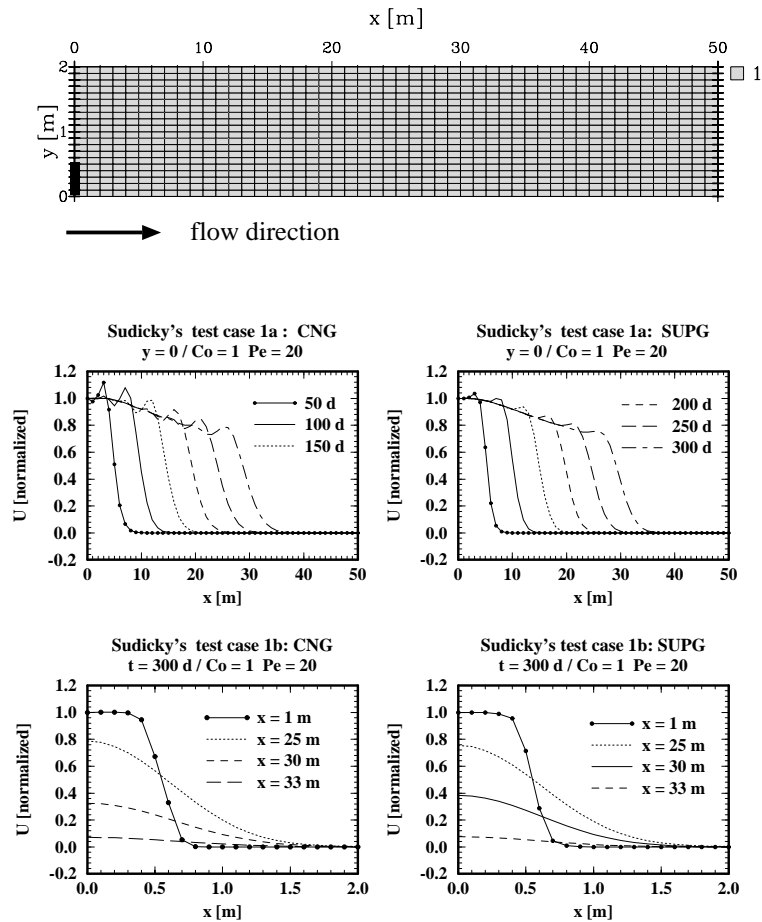


Abbildung 2.23: Das hier gezeigte Modell wurde in Sudicky [1989] vorgestellt. Es besteht aus einem Streifen der Ausdehnung $2 \times 50 m$, diskretisiert durch 20×50 Elemente. Anfangs- und Randwerte sind eine normierte Konzentration $U(x, y, 0) = 0$ bis auf eine Störung von $U(x, y, 0) = 1$ für $0 \leq x \leq 0.5 m$ und $y = 0$ (schwarz gekennzeichnet). Ergebnisse für dieses Testmodell: *Oben:* Normierte Konzentration entlang $x = 0$ für verschiedene Zeitpunkte zwischen $t = 50 d$ und $300 d$ (Fall 1a). *Unten:* Normierte Konzentration entlang $x = 0$ für verschiedene Abstände $y = 1, 25, 30$ und $33 m$ zum Zeitpunkt $t = 300 a$ (Fall 1b). Das charakteristische überschießen der Lösung in der Nähe der Front ist deutlich gemildert ohne eine nennenswerte Einbuße der Steilheit.

den hier betrachteten Problemkreis lassen sich jedoch einige fundamentale Vereinfachungen machen, die eine andere Möglichkeit ihrer Behandlung eröffnen [Raffensberger, 1996]:

Die Massentransportgleichung 2.10 kann durch die Wahl geeigneter Normierungsfaktoren dimensionslos gemacht werden [z. B. Bear and Bachmat, 1991]: Ist das behandelte Gebiet homogen und isotrop, sowie ρ_f und ϕ konstant und > 0 , kann Gl. 2.10 auf eine einfache Form gebracht werden:

$$\frac{\partial C}{\partial t} = D^* \nabla^2 C - v \nabla C + \frac{R}{\phi} \quad (2.79)$$

Das Gewicht der verschiedenen physikalischen Prozesse wird hier kontrolliert durch dimensionslose Gruppen, die das Verhältnis der entsprechenden Terme in der Gleichung ausdrücken.

Die erste ist die auf den Transport bezogene Pecletzahl Pe_C des Systems:

$$Pe_C = \frac{vL}{D^*} \quad (2.80)$$

Sie gibt das relative Gewicht von Advektion und Diffusion/Dispersion wieder. Als charakteristische Dimension L kann man hier die Länge auffassen, auf der sich signifikante Änderungen von Druck, Temperatur und Konzentration ergeben. Obwohl diese Größe unter Normalbedingungen oft mit der Systemdimension angegeben wird, kann sie unter den in der Kruste häufig realisierten inhomogenen Verhältnissen oft wesentlich kleiner sein. Werte zwischen 100 m und mehreren 1000 m erscheinen hier sinnvoll. Die generalisierte Diffusivität $\mathbf{D}^* = \mathbf{D} + \mathbf{M}$ setzt sich aus der effektiven (auf Fluid und Matrix bezogenen) molekularen Diffusivität \mathbf{D} und der mittleren Dispersivität \mathbf{M} zusammen [Raffensberger, 1996, Domenico and Schwartz, 1990]. Der erste dieser Terme ist klein: Molekulare Diffusion im Fluid – um Größenordnungen wichtiger als diejenige im Gestein – ergibt ein \mathbf{D} von $\approx 10^{-8} \text{ m}^2/\text{s}$ [z. B. Philpotts, 1990] und läßt sich daher weitgehend vernachlässigen. Für Zeiten von $10^6 - 10^7 \text{ a}$ ergeben sich diffusive Transportlängen in der Größenordnung von $\ll 1000 \text{ m}$, so das dieser Prozeß bei Permeabilitäten von $k > 10^{-21} \text{ m}^2$ unter fast allen realistischen Bedingungen von der Advektionsterm dominiert wird [Etheridge et al., 1983]. Die Dispersion ist schwerer abzuschätzen. Phillips [1991] argumentiert, daß M sich der Größenordnung nach wie vl_g verhält, wobei l_g die den dispersiven Pseudotransportprozeß bestimmende Korrelationslänge des porösen Mediums darstellt. Wie es auch immer definiert wird, es sollte $l_g \ll L$ sein, damit überhaupt eine Behandlung durch die Theorie poröser Medium sinnvoll ist. Unter dieser Prämisse ist auch M vergleichsweise klein gegenüber vL , und somit die Pecletzahl Pe groß. Mit den oben genannten Werten und typischen Fluidgeschwindigkeiten von $0.01 - 100 \text{ m/a}$ ist sogar die Bedingung $Pe_C \gg 1$ praktisch immer erfüllt, d. h. der Transport advektiv dominiert.

Die zweite in diesem Zusammenhang wichtige dimensionslose Gruppe ist die Damköhlerzahl Da : Je nachdem, ob Advektion oder Diffusion/Dispersion vorherrscht ihrer Da^I oder Da^{II} definiert werden [Raffensberger, 1996, Domenico and Schwartz, 1990, Knapp, 1989]:

$$Da^I = \frac{rL}{v} \quad (2.81)$$

$$Da^{II} = \frac{rL^2}{D^*} \quad (2.82)$$

Dabei ist r die Reaktionskonstante einer angenommenen Kinetik erster Ordnung. Beide Damköhlerzahlen können als ein Verhältnis zweier L und l bzw. ihrer Quadrate dargestellt werden: Demgemäß ist die Ausgleichslänge l_e (*equilibration length*) eine charakteristische Größe für die Rolle chemischer Reaktionen in einem System mit gleichzeitig erfolgendem advektiven und diffusiven Transport. Entsprechend den Damköhlerzahlen I und II ergeben sich [Raffensberger, 1996, Phillips, 1991, Knapp, 1989]:

$$l_e^I = \frac{v}{\phi r} \quad (2.83)$$

$$l_e^{II} = \left(\frac{D^*}{r} \right)^{1/2} \quad (2.84)$$

$$(2.85)$$

Wie man unmittelbar sieht, ist der erste der Ausdrücke unabhängig von der effektiven Diffusionskonstanten D^* , während im zweiten, diffusiven Fall die Fluidgeschwindigkeit nicht auftaucht. Die Distanz l_e muß für die hier vorgeschlagene Näherung klein sein gegen die charakteristische Dimension des zu untersuchenden Systems L , d. h. $l_e/L \ll 1$. Wie man aus den unten noch näher zu betrachtenden Annahmen über die Reaktionskinetik im speziellen Fall des Transports von SiO_2 abschätzen kann, liegt l_e für typische Werte der Geschwindigkeit in den gezeigten Simulationen nur in Ausnahmefällen im problematischen Bereich.

Zu den häufigsten im Porenraum deponierten Mineralien gehören Quarz und Kalzit. Wie aus den in Kap. 4 formulierten Argumenten hervorgeht, müßte der gesuchte Versiegelungsmechanismus *temperaturkontrolliert* sein. Weiterhin erfordert der hier beschriebene Mechanismus, daß keine oder nur vernachlässigbar wenige weitere Reaktionen des transportierten Stoffes stattfinden. Beides ist glücklicherweise der Fall für SiO_2 , welches sich in Wasser kongruent löst. Die Lösung von Quarz geht zudem nach geologischen Maßstäben schnell vor sich. Nach den veröffentlichten Untersuchungen [Walther and Wood, 1984, Lasaga, 1986, Rubie, 1986, Walther and Wood, 1986] läßt sich die Reaktionskinetik folgendermaßen beschreiben: Eine Lösungsreaktion wie die hier besprochene kann in der Nähe des Gleichgewichts durch

$$r = r_{0,eff} \exp \frac{\Delta G}{RT} \quad (2.86)$$

beschrieben werden, wobei durch die Bezeichnung 'effektiv' angedeutet werden soll, daß hier ein komplizierter, porengemetrie- und reaktionsabhängiger Faktor gemeint ist. In dieser Gleichung steht links der Massentransfer in mol/sm^2 , R ist die Boltzmannkonstante und ΔG die Differenz der freien Energien von Produkten und Reaktanten. Empirisch ist mit Hilfe der Gleichung 2.86 ein Zusammenhang der Reaktionskonstanten von einer ganzen Reihe von Reaktionen ermittelt worden, der sich für Krustenbedingungen als:

$$\ln r = \frac{-a}{T} - b \quad (2.87)$$

darstellen läßt, wobei a, b Konstanten darstellen [Walther and Wood, 1984], die nicht von der speziellen Reaktion abhängen. Mit diesem Zusammenhang können Reaktionsraten unter sehr verschiedenen Bedingungen abgeschätzt werden. Derartige Betrachtungen führen zu dem Ergebnis, daß unter fast allen Bedingungen die Lösung von Quarz unter nur sehr geringen Abweichungen vom Gleichgewicht vorstatten geht. Für sie ist daher der Transport der die Reaktion beschränkende Faktor. Nimmt man für die Reaktionsrate $\approx 10^{-6}$ an ($T > 100^\circ\text{C}$, vgl. Abb. 2.24) und setzt die Geschwindigkeit mit 1 m/a an, liegt l_e unterhalb von 1 m und damit weit jenseits sinnvoller Annahmen für L in den in Kap. 3 gezeigten Simulationen. Die dazugehörige Äquilibrationszeit $t_e = 1/r$ liegt bei $\approx 12\text{ d}$.

In einer neueren Studien kommt de Caritat [1990] ebenfalls zu dem Ergebnis, daß Flußgeschwindigkeiten schon unter ungünstigsten Bedingungen (Fluß durch einen Riß mit einer Weite von 10^{-3} m , $T \approx 20^\circ\text{C}$) größer als 1 m/a ($\approx 3 \cdot 10^{-8}\text{ m/s}$) sein müssen, um signifikante Übersättigungen zu erreichen. A fortiori gilt das bei höheren Temperaturen: bei 300°C ist die kritische Geschwindigkeit schon mindestens $10^3 - 10^5\text{ m/a}$. Diese Werte liegen zumindest für erhöhte Temperaturen weit jenseits der in den hier angenommenen realen geologischen Bedingungen gegebenen Geschwindigkeiten. Anders gesagt: bei typischen Fluidgeschwindigkeiten von $0.01 - 100\text{ m/a}$ braucht eine stark untersättigte SiO_2 -Lösung nur wenige Meter, um eine Sättigung zu erreichen [vgl. auch Pedersen et al., 1997].

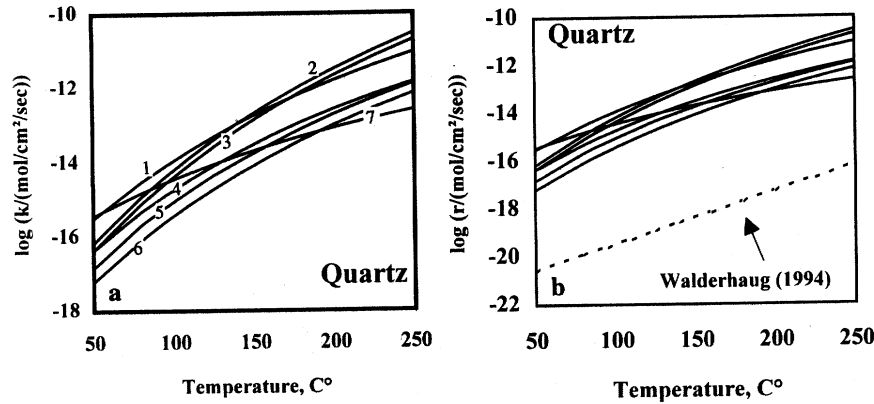


Abbildung 2.24: Reaktionsrate r in Abhängigkeit von der Temperatur nach verschiedenen Autoren, zusammengestellt in Oelkers [1996]. Die überraschend großen Unterschiede von mehr als zwei Dekaden erklären sich aus unterschiedlichen oder unterschiedlich gedeuteten Laborbedingung [Oelkers, 1996]. Ebenfalls eingetragen ist die von Walderhaug [1994] aus Felddaten geschätzte Kurve.

Es soll hier jedoch nicht verschwiegen werden, daß Indizien vorliegen, daß im Feld bestimmte (oder besser geschätzte) Reaktionsraten systematisch niedriger liegen als die experimentell gewonnenen Daten der hier relevanten Publikationen [Walderhaug, 1994]. Die Laboraten selber sind untereinander vergleichsweise konsistent, weisen aber nichtsdestotrotz eine beachtlichen Wertebereich auf. Die Unterschiede, die in erster Linie in unterschiedlichen Annahmen bei der Interpretation der eigentlichen Meßdaten begründet sind, werden von Oelkers [1996] diskutiert.

Die Vereinfachung ($l_e \ll 1$) definiert den Reaktionstyp der Gradientenreaktion [Phillips, 1991]. Die Beobachtung, daß sich die Differentialgleichungen für die Konzentration als Bestimmungsgleichungen für die ursprünglichen Quellterme lesen lassen, geht auf Wood and Hewett [1982] zurück. Die dort und in weiteren Publikationen [Wood and Hewett, 1984, Davis et al., 1985, Hewett, 1986, Wood, 1986, Wood and Hewett, 1986] gezeigten schematischen Darstellungen und analytischen Lösungen zur Quarzdeposition in konvektierenden Systemen verschiedenen Typs waren Anlaß zu den im folgenden Kapitel 3 gezeigten Modellrechnungen. Auch andere Autoren haben sich zur Modellierung diagenetischer Vorgänge [Rabinowicz et al., 1985, Lee and Bethke, 1994] oder auch von Porositätsveränderungen der geologischen Barriere bei der nuklearen Endlagerung [Verma and Pruess, 1988] für ein derartiges Modell entschieden.

Die Annahme einer derartigen Gradientenreaktion hat eine weitreichende Konsequenz: Die Masse gelösten Stoffes an einem Punkt hängt nur von der Gleichgewichtslöslichkeit und damit direkt von Druck und Temperatur an diesem Punkt ab. Fließt nun ein Fluid entlang einem Gradienten von P oder T muß Quarz aus der Matrix aufgenommen oder im Porenraum abgeschieden werden. Auf den ersten Blick scheint die Annahme einer reinen Gradientenreaktion eine Maximalannahme zu sein: Die Berücksichtigung der Reaktionskinetik würde auf jeden Fall zu einer Verringerung der Wirkung führen. Dies ist jedoch falsch. Erfolgt der Transport schnell im Vergleich zur Reaktionsgeschwindigkeit, ist die ausgeschiedene Masse nur von der Reaktionskinetik selber beschränkt, da das System ständig im Ungleichgewicht gehalten wird. Der limitierende Prozeß ist dann die Reaktionskinetik, und nicht, wie im hier vorgestellten Modell, der Transport. Weiterreichende Untersuchungen in einem chemisch vergleichbar einfachen Modell und die manchmal überraschenden Ergebnisse der Berücksichtigung einer Kinetik dokumentieren die Arbeiten von Bolton et al. [Bolton et al., 1996, 1997, 1998]. Andererseits erlaubt die Effektivität und Flexibilität des hier verfolgten Ansatzes, in vielen Aspekten (z. B. Fluidphysik oder Porositätsmodelle) über die beispielsweise von Aharonov et al. [1997b] vorgelegten prinzipiellen Untersuchungen hinauszugehen.

2.5.1 Numerik der Quarzdeposition

Mit den gerade beschriebenen Vereinfachungen kann die in (Gl. 2.8) gegebene diskrete Bilanzgleichung umgeformt und anschließend durch Einsetzen bekannter Werte von P und T nach der ausgeschiedenen Stoffmasse aufgelöst werden.

Wenn der Transport durch Diffusion – wie oben begründet – vernachlässigt wird, vereinfacht sich Gleichung 2.8 zu:

$$Q = \frac{\partial [\phi \rho_f C]}{\partial t} + \nabla \cdot [\phi \rho_f C \mathbf{v}] + Q^C \quad (2.88)$$

Wegen der oben (S. 56) näher beschriebenen Reaktionskinetik für das hier in erster Linie untersuchte Mineral Quarz ist bei gegebenem Temperatur- und Druckfeld die Konzentration in der Lösung nur noch eine Funktion $C = C_S(P, T)$.

Der zeitabhängige Term auf der rechten Seite von Gl. 2.88 kann umgeformt werden: Ist $C_S(P, T)$ die unter 2.5 definierte Sättigungslöslichkeit, so gilt nach der Kettenregel

$$\frac{\partial C}{\partial t} = \frac{\partial C_S}{\partial T} \frac{\partial T}{\partial t} + \frac{\partial C_S}{\partial P} \frac{\partial P}{\partial t} \quad (2.89)$$

Die vor den Zeitableitungen von Druck und Temperatur stehenden Terme sind Ableitungen einer Funktion $C_S(P, T)$ und selbst Funktionen von Druck und Temperatur.

Für den Advektionsterm führt diese Prozedur zu:

$$\begin{aligned} \nabla \cdot [\phi \rho_f C \mathbf{v}] &= \phi \rho_f \mathbf{v} \cdot \nabla C \\ &= \phi \rho_f \mathbf{v} \cdot \left[\frac{\partial C_S}{\partial T} \nabla T + \frac{\partial C_S}{\partial P} \nabla P \right] \end{aligned} \quad (2.90)$$

Die Änderung der Konzentration kann bei Anwendung einer analog zu den Differentialgleichungen für P und T durchgeführten Diskretisierung durch wenige zusätzliche Rechenschritte berechnet werden:

$$\mathbf{Q}^C = \mathbf{A}^{C,T} \frac{\partial \mathbf{T}}{\partial t} + \mathbf{A}^{C,P} \frac{\partial \mathbf{P}}{\partial t} - \mathbf{B}^{C,T} \mathbf{T} - \mathbf{B}^{C,P} \mathbf{P} \quad (2.91)$$

mit:

$$\begin{aligned} A_{ij,k}^{C,P} &= \int_V [\phi \rho_f \frac{\partial C}{\partial P}] N_j N_i dV \\ A_{ij,k}^{C,T} &= \int_V [\phi \rho_f \frac{\partial C}{\partial T} N_j] N_j N_i dV \\ B_{ij,k}^{C,P} &= \int_V [\phi \rho_f \mathbf{v} \frac{\partial C}{\partial P}] \nabla N_j \cdot N_i dV \\ B_{ij,k}^{C,T} &= \int_V [\phi \rho_f \mathbf{v} \frac{\partial C}{\partial T}] \nabla N_j \cdot N_i dV \end{aligned} \quad (2.92)$$

Ähnlich kann der – in der Praxis jedoch häufig weniger relevante – Diffusionsterm einbezogen werden: Auch hier führt die Anwendung der Kettenregel unmittelbar auf eine effektive Berechnungsvorschrift:

$$\frac{\partial}{\partial x} \left[\phi \rho_f (\mathbf{D} + \mathbf{M}) \frac{\partial C}{\partial x} \right] = \frac{\partial}{\partial x} \left[\phi \rho_f (\mathbf{D} + \mathbf{M}) \left(\frac{\partial C}{\partial T} \frac{\partial T}{\partial x} + \frac{\partial C}{\partial P} \frac{\partial P}{\partial x} \right) \right] \quad (2.93)$$

Da die P_i , T_i und die diskreten Zeitableitungen bekannt sind, kann die Änderung der Konzentration in jedem Knoten explizit berechnet werden. Durch Integration der knotenweise definierten Ausscheidungsrate Q über Zeitschritt und Elementvolumen erhält man die ausgeschiedene Masse m_s , woraus dann leicht das Volumen des ausgefällten Quarzes berechnet werden kann. Die Änderung der Elementporosität läßt sich dann für kleine Δm bzw. $\Delta \phi$ durch $\Delta \phi = \Delta V_{SiO_2}/V = \Delta m_i/\rho_{SiO_2}$ berechnen.

Dieser Schritt ist nicht ohne Problem, da besonders in der Nähe von Permeabilitätskontrasten ein Nettoübertrag von Masse stattfindet. Dies läßt sich folgendermaßen plausibel machen: Die Werte von Q werden zwar wie die Feldwerte nodal berechnet, beruhen aber auf den physikalischen Eigenschaften mehrerer umliegender Elemente. Der Wert an jedem Knoten ist durch Integration über die umliegenden Elemente bestimmt, da diese die Kopplungskoeffizienten bestimmt. Ist der Permeabilitätskontrast zwischen diesen groß, so wirkt sich diese Integration wie eine gewichtete arithmetische Mittelung der Permeabilitäten aus: damit wird der Fluß im niedrigpermeablen Element zu hoch, im hochpermeablen zu niedrig. Dieses spezifische Problem dieser Implementation kann ad-hoc durch eine gewichtete Integration über die beteiligten Elemente deutlich reduziert werden. Dabei werden die Anteile der mit dem normierte Fluidvolumen

$$w_i = \frac{\phi_i V_i}{\sum_{i=1}^4 \phi_i V_i}$$

des entsprechenden Elements multipliziert. Die Berechnung der durch Druckrandbedingungen induzierten Quellterme setzt eine sorgfältige Wahl des Parameters ν^P voraus, da ein zu großer Wert zwar die Einhaltung der Randbedingung erzwingt, die Genauigkeit der Berechnung der Q^{**} nach Gl. 2.55 jedoch reduziert oder sogar eine stabile Berechnung verhindert (Abb. 2.11, S. 43 für Werte von $\nu^P > 0.1$).

Mit anderen Worten: das Resultat der vorangegangenen Argumentation kann als eine komplizierte nichtlineare DGL in der Variablen ϕ :

$$\frac{\partial \phi}{\partial t} = \Phi(\phi, P, T, \dots) \quad (2.94)$$

$$(2.95)$$

aufgefaßt werden, die *zusätzliche nichtlineare Kopplung* der vorher beschriebenen Gleichungen bewirkt, da sowohl die Porosität als auch die davon abhängige Permeabilität verändert werden. Sie unterscheidet sich von derjenigen durch den Advektionsterm oder die Materialgleichungen durch ihre wesentlich größere Zeitkonstante und ihr „Gedächtnis“: Der Wert der Porosität zum Zeitpunkt t_0 hängt von den Werten von P , T zu allen Zeiten $t \leq t_0$ ab. Die Lösung der Differentialgleichung kann wegen der im Vergleich zu den übrigen DGLn größeren Zeitkonstanten explizit, d. h. ohne aufwendige Verfahren gelöst werden. Die Bausteine der Bestimmungsgleichung sind aus der Iteration der beiden anderen Gleichungen bekannt, so daß die Berechnung erfordert nur einen vernachlässigbaren zusätzlichen Aufwand erfordert.

2.5.2 Quarzlöslichkeit

Zur Modellierung der Ausscheidung und Lösung als Gleichgewichtsprozeß ist eine Gleichung für die Löslichkeit des betrachteten Stoffes in Abhängigkeit von P und T nötig.

Glücklicherweise ist für den in diesem Zusammenhang ohne Zweifel wichtigsten Stoff, nämlich Quarz, eine solche bekannt. Weiterhin scheint seine Löslichkeit in pH-Bereichen um 7 (neutral) nur geringfügig vom pH-Wert der Lösung abzuhängen, so daß dieser Faktor vermutlich in vielen geologischen Zusammenhängen tatsächlich zu vernachlässigen ist. Die verwendete Gleichung ist für reines Wasser von Fournier and Potter [1982] auf Basis einer Regression bekannter empirischer Daten für die

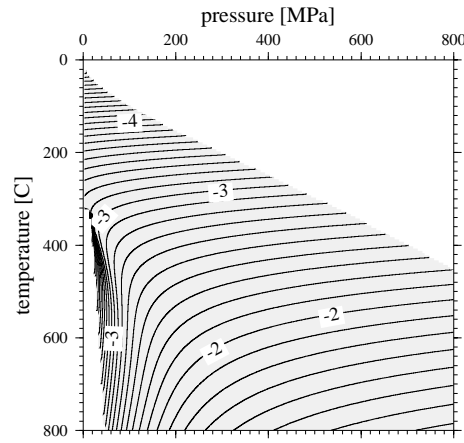


Abbildung 2.25: Dekadischer Logarithmus der Gleichgewichtslöslichkeit (als Massenkonzentration) von Quarz in reinem H_2O , berechnet nach Fournier and Potter [1982]. Horizontal ist die Temperatur $T(^{\circ}C)$, vertikal der Druck in MPa aufgetragen. Es ist nur der von den Autoren angegebene Geltungsbereich gezeigt.

Löslichkeit entwickelt worden, wobei die molale Konzentration c von Quarz als Funktion der Dichte $\rho_{H_2O}(P)$ und der Temperatur ausgedrückt wird:

$$\ln(c_{SiO_2}) = a_1 + a_2 \cdot \ln(\rho_{H_2O}) + a_3 \cdot \ln(\rho_{H_2O})^2 \quad (2.96)$$

wobei die a_i selbst Polynome in T sind:

$$\begin{aligned} a_1 &= -4.66206 + 3.4063 \cdot 10^{-3}T + 2.179 \cdot 10^3T^{-1} - 1.1292 \cdot 10^6T^{-2} + 1.3543 \cdot 10^8T^{-3} \\ a_2 &= -1.14180 \cdot 10^{-4}T - 8.80697 \cdot 10^2T^{-1} \\ a_3 &= 3.9465 \cdot 10^{-4}T \end{aligned}$$

Der Geltungsbereich dieser Gleichung wird für spezifische Dichten zwischen 1000 und 100kg/m^3 mit $25 - 900^{\circ}C$ angegeben. Er schließt den überwiegenden – und vor allem den interessantesten – Teil der in der Kruste realisierten Druck- und Temperaturbereiche ein (vgl. Abb. 2.25). Neuere, nach oben erweiterte P-T-Bereich abdeckende Formeln sind von Manning [1994] und Wasserman et al. [1995] veröffentlicht worden, die für den Bereich $> 500^{\circ}C$ geringfügig höhere Löslichkeiten vorhersagen.

Die molale Konzentration ist definiert als $c = \frac{n_{mol}}{m_{H_2O}}$ und hat daher die Einheit mol/kg_{H_2O} . Die Massenkonzentration C berechnet sich dann mit:

$$C = \frac{m_{SiO_2}}{m_{SiO_2} + m_{H_2O}} = \frac{c \cdot m_{SiO_2}^{mol}}{m_{H_2O} + c \cdot m_{SiO_2}^{mol}}$$

Der Einfluß einer Salinität auf die Lösung von Quarz ist bisher systematisch hauptsächlich im Bereich geringer Temperaturen ($T \leq 350^{\circ}C$) und Drücke ($P \leq 100\text{MPa}$) untersucht worden, wenn auch einzelne Ergebnisse außerhalb dieses Bereichs vorliegen [Fournier, 1983, Fournier and Marshall, 1983]. Es gibt jedoch Hinweise, daß die Salinität in wesentlichen $P - T$ -Bereichen zwar die gelöste Menge erhöht, nicht jedoch die Temperaturabhängigkeit verändert – mit anderen Worten, die Kurve $c(T)$ nur parallel verschiebt [Wood, 1986, Dove and Rimstidt, 1994].

Für den Bereich $100^{\circ}C \leq T \leq 300^{\circ}C, c \leq 6$ kann unter der Annahme von pH-Werten nahe am Neutralen die Löslichkeit nach 2.96 berechnet werden, wenn ρ_{H_2O} durch eine effektive Dichte ρ_{eff} ersetzt wird. Diese wird definiert durch:

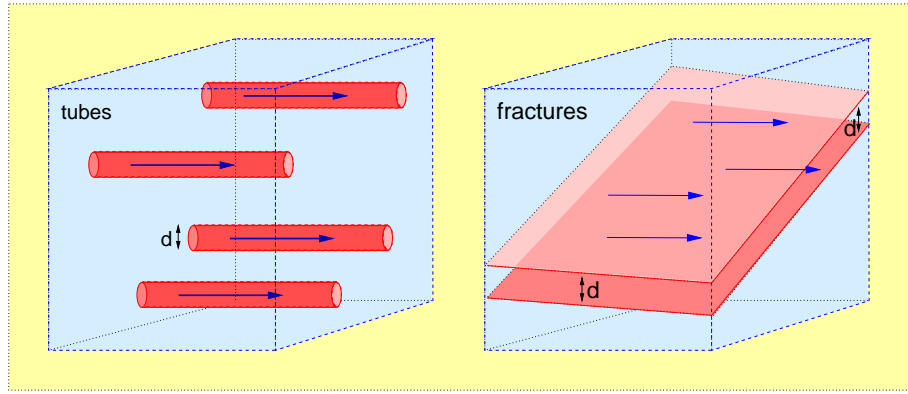


Abbildung 2.26: Einfache Modellvorstellungen für den Zusammenhang von Porosität und Permeabilität. Während die Röhrengometrie zu einer quadratischen Abhängigkeit führt, besteht bei einer Verteilung planarer Risse eine kubische Beziehung. Zur Verdeutlichung ist hier jeweils nur eine Richtung der permeablen Elemente dargestellt. Risse wie Röhren sind in der Realität im Raum angeordnet, so daß sich im Allgemeinen eine Richtungsabhängigkeit ergibt.

$$\rho_{eff} = \rho F \left(1 - \frac{c_{NaCl} h}{55.52} \right) \quad (2.97)$$

wobei F den Gewichtsanteil des Wassers in der Lösung bedeuten soll. Die mittlere (scheinbare) Hydrationszahl h kann im angegebenen Geltungsbereich nach Fournier [1983] als klein angesehen werden, so daß der zweite Ausdruck der Gleichung vernachlässigt werden kann. Für höhere Temperaturen sind bedeutend höhere Werte ($h = 12$, $300^\circ\text{C} \leq T \leq 800^\circ\text{C}$, [Quist and Marshall, 1968]) berechnet worden, die nur schwer in Einklang mit den genannten Ergebnissen gebracht werden können. Für saline Lösungen außerhalb des oben angegebenen Bereiches muß auf andere Berechnungsformeln [Walther and Helgeson, 1977, Phillips et al., 1981, 1983, Helgeson and Lichtner, 1987] zurückgegriffen werden.

2.5.3 ϕ - K-Relationen

Zur Realisierung des obigen Modells fehlen jetzt nur noch funktionale Zusammenhänge zwischen der Porosität ϕ und der Permeabilität \mathbf{K} . Im hier behandelten isotropen Fall – Permeabilitätsanisotropien sollen in dieser Arbeit nicht behandelt werden – wird wie schon oben erwähnt meist eine Formulierung wie:

$$\frac{K}{K_0} = a \cdot \frac{\phi}{\phi_0}^\gamma \quad (2.98)$$

gewählt, wobei γ im Folgenden als Permeabilitätsexponent bezeichnet werden soll [z. B. McKenzie, 1984, Connolly and Thompson, 1989]

Für einige der einfachsten Sonderfälle lassen sich Exponenten γ durch direkte Integration der mittleren Fluidgeschwindigkeit (Poiseuille-Gesetz) über die Durchtrittsfläche bestimmen [z. B. Brace, 1984, Gueguen and Palciauskas, 1994]. Für eine gleichförmige Verteilungsdichte n_f von Rissen der Öffnung d (Abb. 2.5.3, rechts) ist die Permeabilität durch $\phi_f = n_f d$ und die Porosität durch $K_f = \frac{n_f d^3}{12}$ gegeben. Elimination von d ergibt die Beziehung [Norton and Knapp, 1977, Verma and Pruess, 1988]:

$$K_f = \frac{\phi_f^3}{12n_f} \quad (2.99)$$

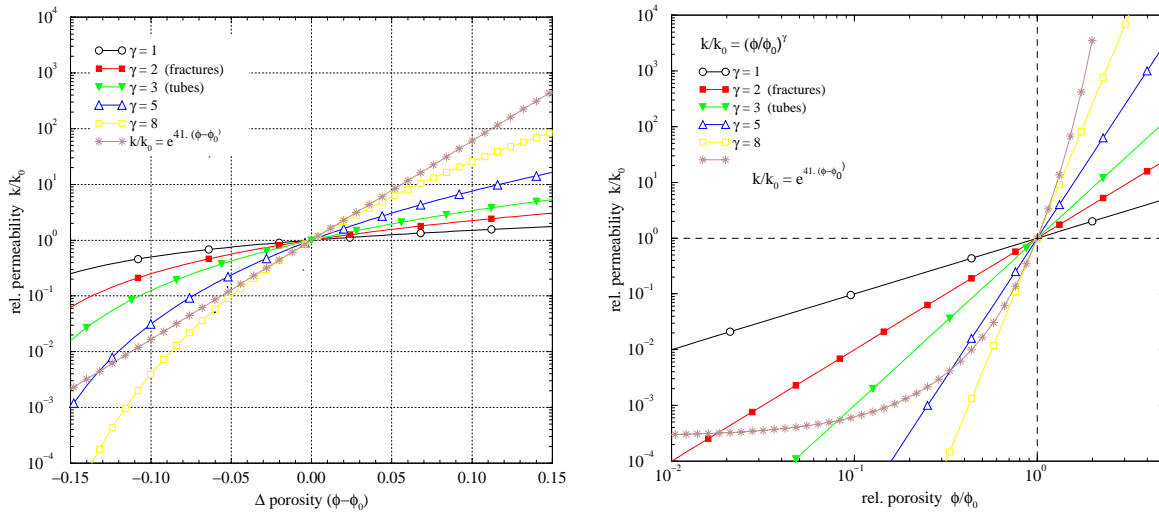


Abbildung 2.27: $\phi - K$ -Relationen für verschiedene Permeabilitätsexponenten γ . Ebenfalls gezeigt ist eine von Raffensperger [1995b] gegebene empirische Funktion für Sandsteine (vgl. Abb. 2.28), die hier als Beispiel einer Reihe empirischer Funktionen für Sedimente stehen soll, die deutlich größere Änderungen vorhersagen als die einfachen Modelle im Text. Für die in dieser Arbeit vorgestellten Simulationen, die vergleichsweise geringe Änderungen der Porosität bewirken, liegt der Wert dieser Funktion in der Nähe derjenigen für $\gamma = 8$. Es ist jedoch kein petrophysikalisches Modell dieses Verhaltens bekannt. Links ist diese Beziehung für eine Basisporosität von $\phi_0 = 0.2$ ausgewertet. Aus dieser Wahl ergibt sich der Geltungsbereich $\phi_{rel} < 15$

Bei Röhren mit dem Radius d (Abb. 2.5.3) ergibt sich nach der gleichen Methode aus $\phi_r = \pi n_r d^2$ und $K_r = \frac{\pi n_r d^4}{8}$ eine quadratische Abhängigkeit:

$$K_r = \frac{\phi_r^2}{8\pi n_r} \quad (2.100)$$

Diese einfachsten Modelle sind sicher zur Beschreibung der Realität nur bedingt tauglich. In Kristallingesteinen können Röhren als erste primitive Näherung für das Verhalten von Korngrenzenporosität dienen, während das kubische Modell tektonische oder thermale Risse beschreiben kann. Die realistischere Beschreibung eines Gesteins erfordert neben einer statistischen Behandlung diskreter Verteilungen der Basisparameter auch eine Richtungsabhängigkeit. Die Versuchs in dieser Hinsicht sind zahlreich [z. B. Gueguen and Dienes, 1989] und lassen an Komplexität nichts zu wünschen übrig. Praktisch ist jedoch die Verteilung der Basisparameter nicht bekannt, sondern es wird der umgekehrte Weg beschritten: empirische Daten werden zur Bestimmung unbekannter Koeffizienten in theoretisch begründeten oder auch ad-hoc angenommenen Gleichungen benutzt. Die empirische Basis ist – insbesondere in den für die Kohlenwasserstoffproduktion wichtigen Sedimentgesteinen – gewaltig, läßt aber nur schwer allgemeingültige Relationen erkennen (vgl. Abb. 2.28).

In dieser Arbeit werden, wenn nicht besonders erwähnt, Relationen der durch den Exponenten γ charakterisierten Familie von Beziehungen verwendet, die in Abb. 2.27 zusammengestellt sind. In der Literatur ist ein weiter Bereich für diese Größe präsent: In der oben schon zitierten Arbeit [Wood and Hewett, 1982] entscheiden sich die Autoren für den Wert $\gamma = 1$. Walder and Nur [1984] wählen $\gamma = 2$ für eine konservative Schätzung des Effektes, während McKenzie [1984] für eine der Kozeny-Karman-Gleichung [s. Gueguen and Palciauskas, 1994, Furbish, 1997] ähnliche Formulierung mit einem Exponenten von 3 argumentiert. Mavko et al. [1998] schlagen einen Exponenten von 5 vor. Bei Untersuchungen von kompaktierenden Sedimenten im Zusammenhang der Diagenese sind allerdings empirisch oder semiempirisch höhere Werte (≤ 25) angepaßt worden [z. B. Pape et al., 1998a, Oelkers, 1996, Raffensperger, 1995c, David et al., 1994, McKenzie, 1984, Dutta, 1986]. Die insbesondere von

David et al. [1994] angeführten Werte von bis zu 25 (!) sind typisch für perkolierende Netzwerke in der Nähe des kritischen Punkts [Connolly, 1997a, Stauffer and Aharony, 1995]. In diesen Fällen ist das Verhalten durch die Mikrostruktur bestimmt: Mit der Porosität nimmt auch die Konnektivität des Gesamtnetzwerks ab. Diese Annahme ist sicher für die in David et al. [1994] diskutierte mechanische Kompaktion plausibel, da sich hier auch die Mikrostruktur des Gesteins selber drastisch verändert. Ein solches Verhalten kann aber auch bei dem in dieser Arbeit behandelten Prozeß nicht ausgeschlossen werden. Es wäre besonders unter Bedingungen zu erwarten, unter denen die Reaktionskinetik eine Rolle spielt, da diese stark von mikrostrukturellen Eigenschaften (inneren Oberflächen u. ä.) bestimmt ist [zu diesem Effekt vgl. Aharonov et al., 1997a]. In dieser Untersuchung wurden überwiegend $\gamma \leq 8$ verwendet, und nur in Ausnahmefällen höhere Exponenten zugelassen. Es wurde jedoch bei diesem Relationstyp ein Porositätsschwellenwert ϕ_c (meist 10^{-5}) benutzt, der ein totales Verschwinden der Permeabilität bewirkt [Nur and Walder, 1992, Walder and Nur, 1984, David et al., 1994]. Er ist durch die Gleichung

$$\frac{k}{k_0} = \frac{\phi^\gamma - \phi_c^\gamma}{\phi_0^\gamma - \phi_c^\gamma} \quad (2.101)$$

für $\phi \geq \phi_s$ definiert. Er wurde in den gezeigten Modellierungen nur selten erreicht.

In dieser Arbeit wird an einigen Stellen eine von Raffensberger [1996] gegebene empirische Beziehung für Sandsteine verwendet, die ähnlich wie die sehr hohen Exponenten schon bei geringen Porositätsänderungen zu drastischen Änderungen der Permeabilität führen:

$$\frac{k}{k_0} = e^{41(\phi - \phi_0)} \quad (2.102)$$

Die dieser Formel zugrundeliegende Studie ist eine der umfassendsten Untersuchung auf diesem Gebiet und beruht auf einer großen Zahl von Messungen an Sandsteinen [vgl. auch Wendt et al., 1986, Hearn et al., 1986, Haldorsen, 1986]. Die aufgetragenen Daten weisen allerdings eine beachtliche Streuung auf (Abb. 2.28). Bei der Vielfalt der möglichen Porengeometrien ist es jedoch fraglich, ob eine derartige Regression das physikalische Verhalten eines spezifischen Sandsteins beschreiben kann, dessen Porosität systematisch verändert wird. Der Streubereich ließe durchaus andere Regressionen von Teilmengen zu. Eine petrophysikalische Interpretation der gefundenen Formel 2.102 ist nicht bekannt. Vergleichbar im qualitativen Verhalten ist jedoch die für Sandsteine geltende und durch eine Summe von Potenzfunktionen gebildete Relation von Pape et al. [1998b] ($k = a\phi + b\phi^2 + c\phi^{10}$). Ihre Asymptoten sind $\gamma = 10$ bei $\phi > 0.1$ und $\gamma = 1$ bei kleinen Porositäten. Die Konstanten und Exponenten beruhen hier auf fraktalen Überlegungen zur Oberflächenrauigkeit der Fließwege [vgl. dazu etwa Schopper et al., 1988, Pape et al., 1998b,a].

Es muß nochmals darauf hingewiesen werden, daß die hier verwendeten simplen Modelle kaum die Realität natürlicher Gesteine beschreiben. Es sind neuerdings eine Reihe von Ansätzen gemacht worden, die Statistik natürlicher Porengrößenverteilungen zu beschreiben. Dazu gehören neben der schon zitierten Arbeit [Verma and Pruess, 1988] besonders die Untersuchungen von Gueguen and Dienes [1989] und Gavrilenko and Gueguen [1989]. Die oben benutzten Formeln können als besonders einfache Spezialfälle des dort entwickelten Formalismus angesehen werden. Weiterhin ist zu berücksichtigen, daß der reale Prozeß der Ausscheidung von gelösten Stoffen von einer Reihe von physikalischen Vorgängen (z. B. Drucklösungsvorgänge oder kompliziertere Reaktionen mit dementsprechender Kinetik) geprägt ist, die derart einfache Gesetze unwahrscheinlich machen. Andererseits muß darauf hingewiesen werden, daß die Porosität vermutlich nicht gleichmäßig verfüllt wird: Sicher wird sich die Länge der Flußwege mit dem Volumenanteil ändern. Beispielsweise ist nicht zu erwarten, daß sich ein durchströmtes Rißsystem lediglich zu einem solchen von engeren Rissen verändert, sondern durch die Unregelmäßigkeiten bald eine Röhrencharakteristik entwickelt, deren Tortuosität wiederum variabel sein kann. Chigira and Watanabe [1994] haben unter Berufung auf ältere experimentelle Ergebnisse argumentiert, daß die Ausscheidung bevorzugt an Verengungen und anderen Inhomogenitäten des Porenraums stattfindet, so daß eine $\phi - k$ -Beziehung mit großem Exponenten zu erwarten ist. Eine

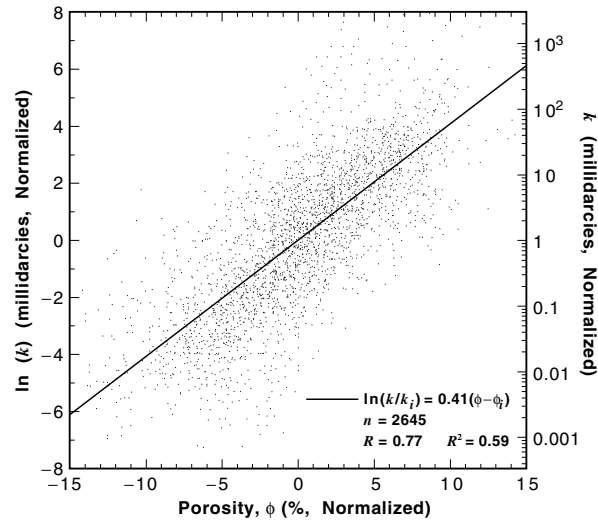


Abbildung 2.28: Empirische Relation von ϕ und k von Sandsteinen nach Raffensberger [1996]. Auffällig ist hier einerseits ein im Großen und Ganzen loglineares Verhalten, das jedoch von einer starken Streuung (4 Dekaden) begleitet ist. Die Daten lassen durchaus andere Anpassungen zu.

solcher Prozeß sollte sich auch auf eine vorhandene Anisotropie auswirken, so daß eine Verzerrung des ursprünglichen Permeabilitätstensors durchaus wahrscheinlich ist [Ondrak et al., 1994]. Die Bedeutung der Porengeometrie und die daraus abgeleitete Beziehung zwischen ϕ und k ist für den gekoppelten Gesamtprozeß entscheidend. Mit den hier vorgestellten und in den Modellrechnungen dieser Arbeit verwendeten einfachen Ansätzen sind nur Untersuchungen prinzipieller Probleme möglich.

2.5.4 Validierung des gekoppelten Gesamtverfahrens

Zur direkten Validierung des gekoppelten Gesamtverfahrens stehen keine geeigneten analytischen Lösungen zur Verfügung. Die Situation ist in dieser Beziehung vollkommen anders als für das oben beschriebene Transportmodell. Es genügt beispielsweise nicht, einen einfachen, linear durchflossenen Kasten zu konstruieren, der durch festgehaltene Druck und Temperaturwerte am oberen und unteren Rand realisiert wird. Eine solche Anordnung führt zur Entstehung einer Permeabilitätsstruktur, welche den Druckgradienten sehr inhomogen werden läßt und damit den direkten Vergleich mit den in Wood and Hewett [1982] oder Lichtner [1988] beschriebenen zeitlichen Porositätsänderungen ausschließt. Ein Vergleich mit den von Davis et al. [1985] und Hewett [1986] gegebenen analytischen zweidimensionalen Lösungen ist aus ähnlichen Gründen schwierig und nur qualitativ möglich. Die von Raffensberger [1995c] veröffentlichten Modellrechnungen liegen jenseits der hier gemachten Annahmen in Bezug auf die Gleichgewichtshypothese ($l_e/L \ll 1$).

Zum qualitativen Vergleich sollen hier einige von Steefel and Lasaga [1994] gezeigte Ergebnisse für eine permeabilitätsgekoppelte Simulation eines geothermischen Reservoirs gezeigt werden. Hier wurde ein homogenes Gebiet von ca. 3×12 km betrachtet, welches quasi aus reinem Quarz besteht. Antrieb der Konvektionsbewegung ist eine Temperaturstörung von 300°C , die einer Basistemperatur von 125°C an der unteren Begrenzung überprägt wird. Die Form dieser Störung ist eine Gaußfunktion mit einer Dispersion von ca. 4 km. Die Obergrenze des Gebiets ist konstant 50°C . Alle Ränder sind impermeabel.

Vergleichbar mit dem in dieser Arbeit vorgestellten Verfahren sind die Modellierungen für Quarz im Gleichgewichtsbereich. Die Kopplung wird hier durch die Annahme einer kubischen Relation zwischen Porosität und Permeabilität mit $\gamma = 3$ bei einer Basisporosität von $\phi_0 = 0.05\%$ realisiert.

Bei dem Vergleich mit den eigenen Simulationen (Abb. 2.31) ist eine generelle Übereinstimmung

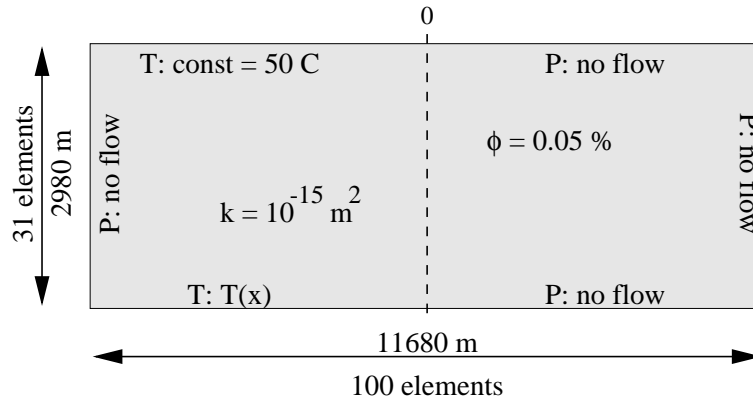


Abbildung 2.29: Geometrie des Referenzmodells von Steefel and Lasaga [1994]. An der Basis wurde die ortsabhängige Temperatur $T = T_0 + (T_1 - T_0) \exp -10(x/L)^2$ mit $T_0 = 125$ und $T_1 = 300$ °C angesetzt, die einer Anfangsbedingung eines geothermischen Gradienten von ≈ 25 K/km entspricht. Die Dispersion der Gauß'schen Störung ist $L = 4$ km. Für die Vergleichsrechnungen wurde im Gegensatz zur spiegelsymmetrischen Behandlung (gestrichelte Symmetrieachse bei $x = 0$) von Steefel and Lasaga [1994] das Gesamtmodell benutzt.

in Größenordnung und Struktur festzustellen. In den numerischen Werten ergeben sich jedoch (für $t = 75000$ a) geringe Abweichungen in der maximalen/minimalen Porosität (< 0.0002) und der darauf zurückzuführenden Permeabilität.

Die mögliche Quellen dieser Abweichungen sind:

- Ein gewisser, wenn auch nach Ansicht von Steefel and Lasaga [1994] geringer Effekt ist die Vernachlässigung der Reaktionskinetik in der hier vorliegenden Simulation. In der vorliegenden Arbeit wurden die Gleichgewichtslöslichkeit von Fournier and Potter [1982] benutzt, deren Beziehung zu den kinetischen Daten der Arbeit von Steefel and Lasaga [1994] unklar ist.
- Die thermophysikalischen Modelle des Fluids und der Matrix unterscheiden sich. Insbesondere besteht bei dem verwendeten Fluidmodell (vgl. Abschnitt 2.2) eine Druckabhängigkeit. Wird der Druck als Basisvariable verwendet, muß über seinen Wert verfügt werden. Er wurde hier willkürlich mit 0.5 MPa angenommen. Auch die Matrixeigenschaften wurden abhängig von P und T behandelt. Für eine relevante Rolle dieser Unterschiede sprechen die schon leicht unterschiedlichen berechneten Temperaturverteilungen.
- Numerische Abweichungen können sich aus den völlig unterschiedlichen Methoden bei der Simulation ergeben. Für die gekoppelte Berechnung von P und T sollten diese gering sein, da die räumliche und zeitliche Diskretisierung so gewählt wurde, daß $Pe \cdot Co$ klein ist. Das hier beschriebene Verfahren hat neben den oben beschriebenen physikalischen Grenzen eigene Probleme, die mit der unvollkommen realisierten Umverteilung der nodal berechneten Quarzausscheidung und der Elementdefinition von Permeabilität und Porosität zusammenhängen. Deren Beitrag ist bei den glatten Porositätsverteilungen schwer abzuschätzen, werden aber bei Modellen mit scharfen Änderungen der Permeabilität deutlicher.

Eine weitere Validierung ist auf interne Prüfungen angewiesen, die lediglich eine Konsistenz nachweisen. Sinn oder Unsinn der gewählten Diskretisierungen können so quasi empirisch durch numerische Experimente (Wahl verschiedener Schrittweiten bei der Zeit, zunehmende Verfeinerung des Gitters im Räumlichen, Einsatz verschiedener Verfahren) überprüft werden. Dies ist bei den meisten der gezeigten Modelltypen geschehen (vgl. Abb. 2.32).

Der Nachweis der Wirkungen eines solchen gekoppelten Systems in der Realität ist schwierig, da geeignete Daten (räumliche Verteilungen von Porenraum) kaum zur Verfügung stehen. Dieses Problem teilt diese Arbeit mit den meisten bisher veröffentlichten Studien auf diesem Gebiet.

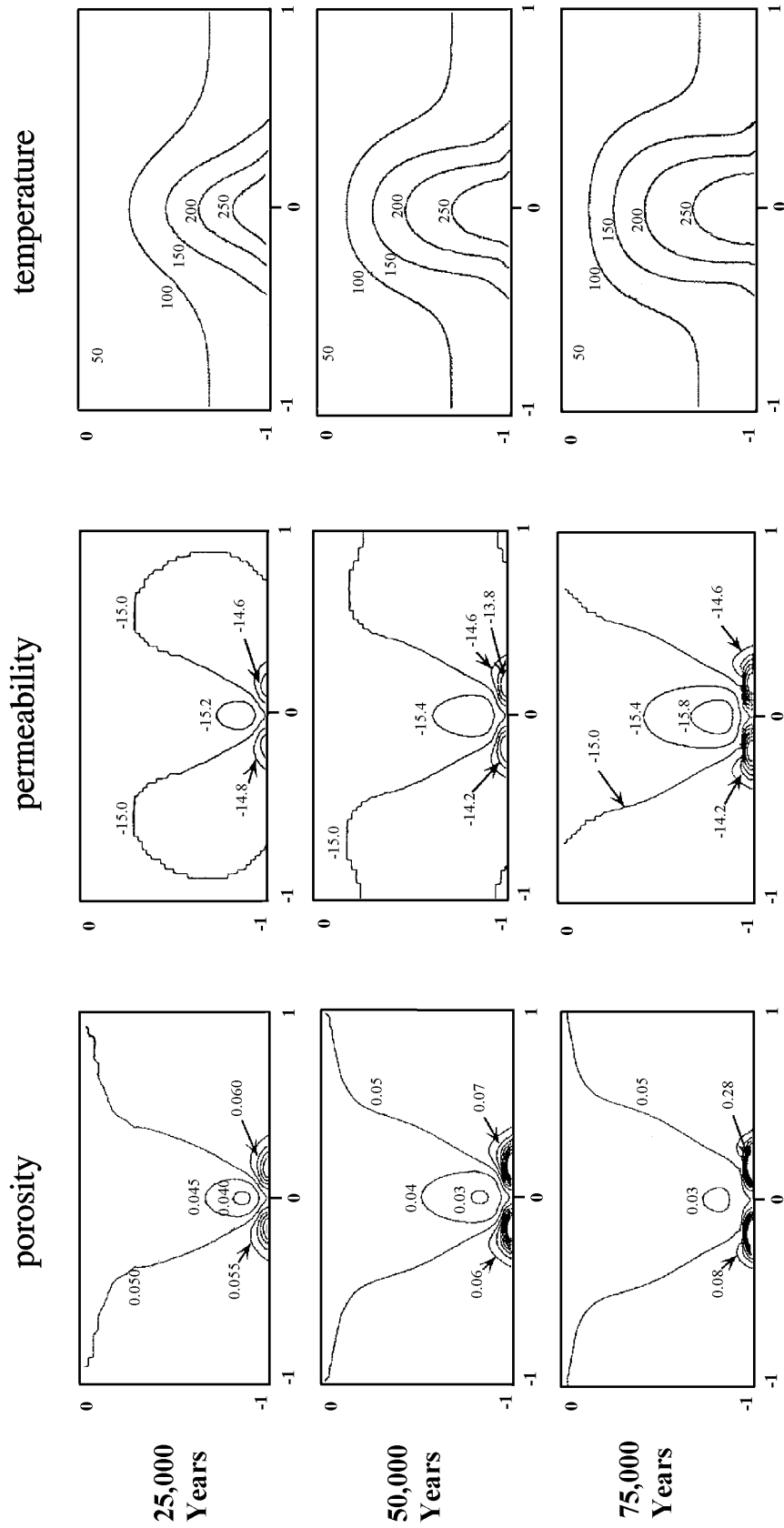


Abbildung 2.30: Modellrechnungen von Steefel and Lasaga [1994] für eine reaktive, permeabilitätsgekoppelte Simulation, die von einer Basispermeabilität von $k_0 = 10^{-15} \text{ m}^2$ ausgeht. Dies entspricht einer Rayleighzahl von ≈ 50 . Dargestellt ist die Entwicklung von Porosität, Permeabilität und Temperatur nach 25000, 50000 und 75000 *a*. In dieser, der Literatur entnommenen Zeichnung wurde im Gegensatz zu Abb. 2.31 eine in Bezug auf die vertikale und horizontale Ausdehnung normierte Darstellung gewählt. Es ergibt sich dadurch eine Überhöhung von > 2 . Deutlich ist die reduzierte Permeabilität im Bereich aufwärtsgerichteter Strömung und die symmetrische Zone hoher Porosität zu sehen, die nahe der Unterkante entstehen.

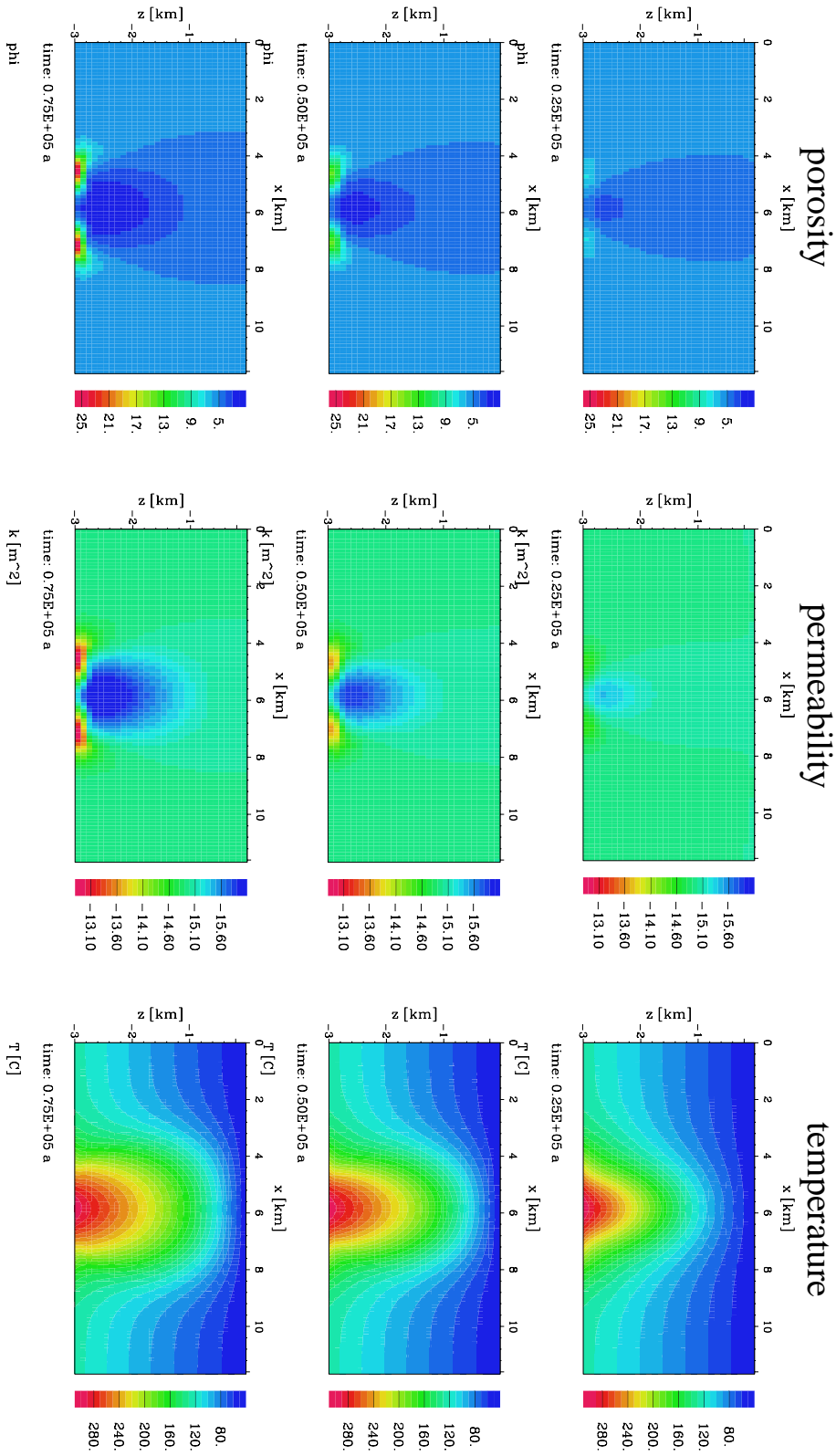


Abbildung 2.31: Eigene Ergebnisse für die in Steefel and Lasaga [1994] beschriebene Modellkonfiguration. Die Ergebnisse stimmen in der Größenordnung und Struktur überein. Zu den beobachteten Abweichungen werden im Text nähere Erläuterungen gegeben.

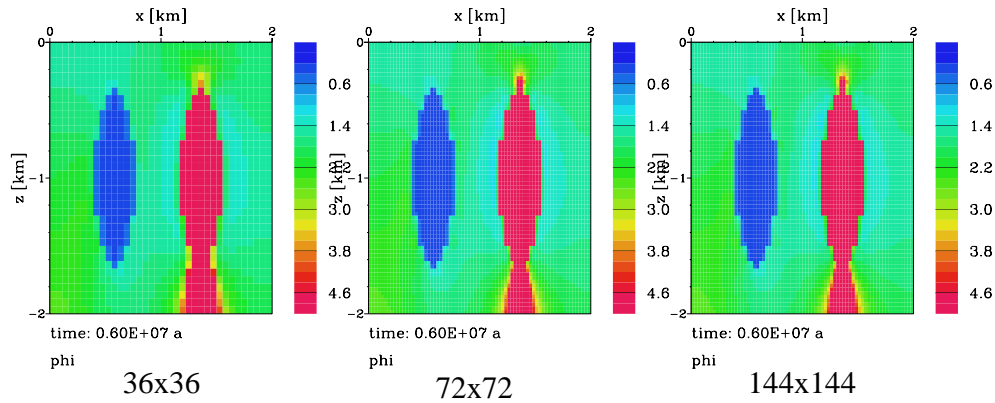


Abbildung 2.32: Beispiel für die Rolle der räumlichen Diskretisierung. Das Modell besteht aus zwei Linsen unterschiedlicher Permeabilität, die gegen einen Temperaturgradienten angeströmt werden. Die Extremwerte der beiden feineren Gitter weichen um weniger als 0.5% voneinander ab.

2.5.5 Folgerungen

In diesem Kapitel wurde ein Modellierungsverfahren für den gekoppelten Transport von Fluid, Wärme und Stoff entwickelt, welches durch die folgenden Stichworte charakterisiert werden kann:

- räumliche Diskretisierung aller DGLn. durch Finite Elemente (z. Zt. bilineare Lagrange-Elemente)
- zeitliche Diskretisierung durch Finite Differenzen θ -Schema mit adaptiver Schrittweite
- nichtlineare Kopplung durch generelle druck- und temperaturabhängige Fluid- und Matrixeigenschaften $g_{f,m} = g_{f,m}(P_{f,m}, T)$
- Kopplung durch sequentielle Iteration
- Picarditeration für die Nichtlinearität
- SUPG-Schema für große Peclet- und Courantzahlen
- direkte oder iterative Lösungsverfahren (präkonditionierte Krylov-Verfahren) für die symmetrischen und unsymmetrischen linearen Gleichungssysteme
- Behandlung der Konzentration nach dem Verfahren von Wood and Hewett [1982] und Phillips [1991]
- Veränderung von Porosität und Permeabilität durch Ausscheidungs- und Lösungsvorgänge

Hierbei sind vor allem die letzten beiden, nämlich die Behandlung der Transportgleichung betreffenden Punkte wichtig. Bei dem verwendeten Verfahren handelt es sich um eine Lösung unter Vernachlässigung der Reaktionskinetik (Äquilibrationlänge \ll Systemdimension). Dieser Ansatz unterscheidet sich von den bisher publizierten Verfahren durch die oben (Abschn. 2.5) beschriebene Vereinfachung. Sie ermöglicht, innerhalb der implizierten Grenzen, Effekte erster Ordnung sehr effizient zu berechnen. Durch diese Effizienz und die große Flexibilität in Bezug auf die physikalisch/chemischen Eigenschaften von Gestein und Fluid ist dieses Verfahren besonders für die Modellierung von Systemen hoher geometrischer Komplexität und großer Heterogenität geeignet.

