

Diplomarbeit

Effektive Mischung durch dichtegetriebene Strömung

Fakultät für Mathematik und Informatik
Universität Heidelberg

Ansgar Burchardt

August 2013

Betreut durch Prof. Dr. Peter Bastian

Inhaltsverzeichnis

1	Motivation	3
2	Physikalische Grundlagen	5
2.1	Eigenschaften poröser Medien	5
2.2	Fluide in porösen Medien	6
2.3	Fingering	7
2.4	Erhaltungsgleichungen	7
2.5	Darcys Gesetz	9
2.6	Vereinfachungen	9
2.7	Dichte	10
3	Modellproblem	11
4	Numerik	14
4.1	Beobachtung	14
4.2	Implementierung	15
4.3	Notation	16
4.4	Finite Volumen für Grundwassergleichung	16
4.5	Discontinuous Galerkin für Kohlenstoffdioxid-Transport	18
5	Ergebnisse	22
5.1	Abhängigkeit von der Gitterauflösung (2D)	22
5.2	Abhängigkeit von der Permeabilität (2D)	23
5.3	Effektive Diffusionskonstante (3D)	28
5.4	Vergleich 2D und 3D	40
6	Fazit	42

1 Motivation

Unter den für den Klimawandel verantwortlichen Treibhausgasen spielt Kohlenstoffdioxid eine große Rolle. Nach [15] ist es bei unbewölktem Himmel für etwa 26% des Treibhauseffekts verantwortlich. Um dem Klimawandel entgegen zu wirken wird daher neben dem langfristigen Wechsel zu regenerativen und CO₂-neutralen Energiequellen als mittelfristige Lösung auch das Einfangen und Speichern von Kohlenstoffdioxid außerhalb der Atmosphäre in Betracht gezogen. So könnte zum Beispiel Kohlenstoffdioxid in konventionellen Kraftwerken, die fossile Energieträger verbrennen, abgetrennt werden (allerdings unter Aufwendung nicht unerheblicher Mengen zusätzlicher Energie) und anschließend in geeignete salzhaltige Grundwasserleiter oder Öl- und Gasfelder eingebracht werden (*Carbon Capture and Storage*). Dort soll das Kohlenstoffdioxid nun möglichst lange, d.h. über mehrere tausend Jahre, verbleiben.

Im Fall von salzhaltigen Grundwasserleitern wird das Kohlenstoffdioxid im überkritischen Zustand eingepresst. Verschiedene Mechanismen halten es dann im Untergrund gefangen[17, Abschnitt 5.5.2]: Zunächst steigt das überkritische Kohlenstoffdioxid bis zu einer Deckschicht (*cap rock*) mit deutlich geringerer Permeabilität auf (*structural trapping*). Bei der Bewegung des CO₂ durch das Gestein bleiben Teile in den Gesteinslücken dauerhaft hängen (*residual trapping*). Auch kann sich das CO₂ in Wasser lösen (*solubility trapping*) oder durch chemische Reaktionen Mineralien bilden (*mineral trapping*). Über einen Zeitraum von zehntausend Jahren nimmt hierbei die Bedeutung insbesondere der beiden letztgenannten Mechanismen zu, vergleiche Abbildung 1.1.

In dieser Arbeit wird ein Aspekt des *solubility trapping* genauer betrachtet: nachdem das überkritische Kohlenstoffdioxid bis zur Deckschicht aufgestiegen ist, befindet sich eine Schicht überkritisches Kohlenstoffdioxid über einer Schicht Salzwasser und es beginnt sich das CO₂ im Wasser zu lösen. Dieses gewinnt dadurch an Dichte und sinkt nach unten; an seiner Stelle steigt Salzwasser ohne oder mit einem geringeren Anteil an gelöstem Kohlenstoffdioxid auf, in welchem sich wieder CO₂ lösen kann. Es kommt also zu einer dichtegetriebenen Strömung, durch die der Lösungsprozess beschleunigt wird.

Ziel ist es zu überprüfen ob es qualitative Unterschiede zwischen zwei und drei Raumdimensionen gibt und zu versuchen den Mischungsprozess durch die dichtegetriebene Strömung durch ein einfacheres Modell zu beschreiben. Dazu wurde unter Verwendung des DUNE-Frameworks[6] ein Programm entwickelt, mit dem der Prozess in einem Modellproblem simuliert werden kann und versucht die Verteilung des gelösten Kohlen-

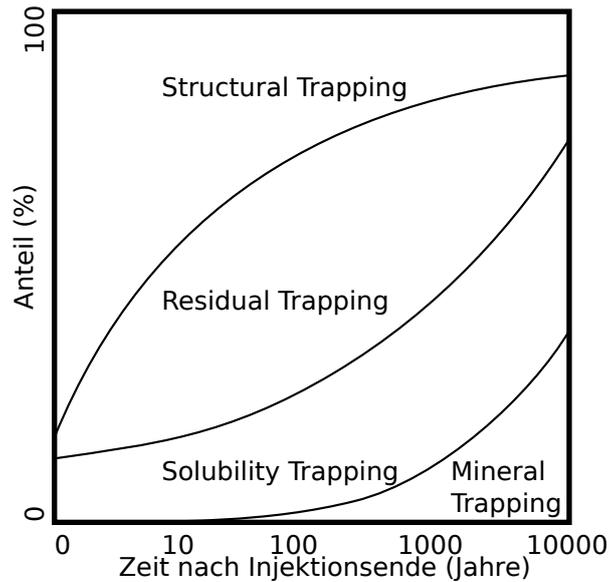


Abbildung 1.1: Rückhaltemechanismen für CO₂ über die Zeit nach [17, Abb. 5.9]. Mit dem Übergang vom structural trapping zu anderen Mechanismen steigt die Sicherheit der Speicherung über die Zeit an.

stoffdioxid durch ein eindimensionales Problem mit einer effektiven Diffusionskonstanten näherungsweise zu beschreiben.

Zunächst wird in Kapitel 2 kurz auf die physikalischen Grundlagen eingegangen. In Kapitel 3 wird dann das betrachtete Modellproblem vorgestellt und in Kapitel 4 die verwendeten numerischen Verfahren zur Lösung beschrieben. Im Kapitel 5 werden dann die Ergebnisse verschiedener Simulationen vorgestellt. Diese werden in Kapitel 6 nochmals kurz zusammengefasst und es wird ein Ausblick auf mögliche Weiterführungen gegeben.

2 Physikalische Grundlagen

In diesem Kapitel werden die für diese Arbeit wichtigen Aspekte für die Beschreibung von Flüssen in porösen Medien kurz beschrieben und die partiellen Differentialgleichungen für den Ein-Phasen-Zwei-Komponenten-Fluss aufgestellt. Einige zusätzliche Annahmen vereinfachen diese.

Es wird im Wesentlichen der Darstellung aus [14] und [4] gefolgt. Mehr zu den physikalischen Prozessen findet sich in [22].

2.1 Eigenschaften poröser Medien

Poröse Medien werden in vielen Bereichen verwendet. Sie können zur Modellierung von etwa Böden, Gesteinen oder auch Knochen oder dem Gehirn eingesetzt werden.

Auf einer mikroskopischen Ebene besteht jeder Punkt \tilde{x} eines porösen Medium entweder aus Festkörper oder dem Porenraum. In letzteren können sich Flüssigkeiten und Gase aufhalten. Die Verteilung des Porenraums wird durch die *Indikatorfunktion γ des Porenraums* beschrieben:

$$\gamma(\tilde{x}) := \begin{cases} 1 & \tilde{x} \text{ liegt im Hohlraum,} \\ 0 & \text{sonst} \end{cases} \quad (2.1)$$

Werden Veränderungen des porösen Mediums selbst zugelassen, kann γ auch von der Zeit abhängen.

Prinzipiell können auf dieser mikroskopischen Ebene Flüsse durch das poröse Medium mit Hilfe der Navier-Stokes-Gleichungen beschrieben werden, allerdings muss einerseits die Grenze zwischen Porenraum und Festkörper modelliert werden und zum anderen wird eine Simulation auf einem größeren Gebiet schnell zu aufwendig da Gitter aus numerischen Verfahren die Funktion γ auflösen müssen. Daher wird wie in dieser Arbeit auch oft zu einer makroskopischen Beschreibung des porösen Mediums übergegangen. Hierzu werden Größen über ein Referenzvolumen $REV(x)$ um x gemittelt und neue Parameter wie etwa die Permeabilität eingeführt, in welche die mikroskopische Struktur des porösen Mediums eingeht. Der Fluss selbst wird durch die Darcy-Gleichung aus Abschnitt 2.5 beschrieben. Die Geschwindigkeit \mathbf{u} dort ist ebenfalls eine gemittelte Größe: während die Navier-Stokes-Gleichungen den Fluss auf mikroskopischer Ebene beschreiben, auf der die Phase der Struktur des Porenraums folgen muss, liefert die Darcy-Gleichung eine makroskopische Fluidgeschwindigkeit, welche als Mittelung nicht die mikroskopische Struktur

aufföst, sondern nur die “grobe” Richtung der Bewegung auf makroskopischer Skala beschreibt.

Als Beispiel für diesen Mittelungsprozess sei hier die *Porosität* φ definiert:

$$\varphi(x) := \frac{1}{|REV(x)|} \int_{REV(x)} \gamma(\tilde{x}) \, d\tilde{x} \quad (2.2)$$

Hierbei ist $REV(x)$ ein Referenzvolumen um x . Dieses darf nicht zu klein gewählt werden da sonst weiterhin die mikroskopische Struktur aufgelöst wird, aber auch nicht zu groß da dann Inhomogenitäten des porösen Mediums geglättet werden.

2.2 Fluide in porösen Medien

Im Hohlraum eines porösen Mediums können sich ein oder mehrere Phasen wie Wasser, Öl oder Luft befinden. Diese lassen sich nicht miteinander mischen, d.h. an jedem Punkt \tilde{x} auf der mikroskopischen Skala befindet sich genau eine der Phasen. Von der mikroskopischen Ebene wird wieder von einer *Indikatorfunktion* γ_α für die Phase α ,

$$\gamma_\alpha(\tilde{x}, t) := \begin{cases} 1 & \tilde{x} \text{ gehört zu Zeit } t \text{ zur Phase } \alpha, \\ 0 & \text{sonst,} \end{cases} \quad (2.3)$$

durch Mittelung über ein Referenzvolumen zur *Sättigung* S_α ,

$$S_\alpha(x, t) := \frac{\int_{REV(x)} \gamma_\alpha(\tilde{x}, t) \, d\tilde{x}}{\int_{REV(x)} \gamma(\tilde{x}, t) \, d\tilde{x}}, \quad (2.4)$$

auf der makroskopischen Skala übergegangen. Im Folgenden wird allerdings nur der Fall betrachtet, in dem der Hohlraum komplett mit einer Wasserphase ausgefüllt ist.

Jede Phase kann, auch schon auf der mikroskopischen Ebene, aus einer Mischung mehrerer Komponenten bestehen. In der in dieser Arbeit betrachteten Anwendung besteht die Wasserphase aus zwei Komponenten: Wasser mit gelöstem CO_2 und Wasser ohne CO_2 . Das Verhältnis der beiden Komponenten zueinander wird durch den *Massenbruch*

$$\omega := \frac{\rho_{\text{CO}_2}}{\rho} \quad (2.5)$$

beschrieben. Hierbei bezeichnet ρ_{CO_2} die *Dichte der CO_2 -haltigen Komponente* und ρ die *Dichte der Phase*. Es ist $0 \leq \omega \leq 1$ und es gilt $\omega(x) = 0$ genau dann, wenn das Wasser an x kein gelöstes CO_2 enthält, sowie $\omega(x) = 1$ genau dann, wenn das Wasser an x mit Kohlenstoffdioxid saturiert ist.

2.3 Fingering

Wird eine dichtere Komponente über eine leichtere Komponente geschichtet, beginnt sich die dichtere Komponente auf Grund der Gravitationskraft nach unten zu bewegen. Selbst in homogenen porösen Medien ist dieser Prozess jedoch nicht stabil: kommt es zu kleineren Störungen, bilden sich makroskopische “Finger” der dichteren Komponente die nach unten in die leichtere Komponente hineinragen (*Fingering*).

Zu diesen Störungen kommt es in jedem realen porösen Medium durch Unregelmäßigkeiten, aber auch in numerischen Simulationen lässt sich der Effekt beobachten. Wie in Kapitel 4.1 genauer ausgeführt, kann dies durch Uminterpretation von numerischen Ungenauigkeiten als Schwankungen von Materialkonstanten mit realen porösen Medien in Verbindung gebracht werden.

2.4 Erhaltungsgleichungen

2.4.1 Massenerhaltung der Phase

Betrachtet sei die zeitliche Änderung der Masse in einem Teilgebiet $T \subset \Omega$. Die Gesamtmasse in T ist gegeben durch $\int_T \varphi \rho dx$, da sich die Phase nur in einem Anteil φ des Integrationsvolumens befindet.

Für die Änderung ist der Fluss über den Rand des Teilgebiets, $-\int_{\partial T} \rho \mathbf{u} \cdot \mathbf{n} ds$, und der Quellterm $\int_T \rho q dx$ verantwortlich. Hierbei ist \mathbf{u} die makroskopische Phasengeschwindigkeit, ρ die Dichte der Phase und \mathbf{n} die äußere Normale. Insgesamt ergibt sich also

$$\frac{\partial}{\partial t} \int_T \varphi \rho dx = - \int_{\partial T} \rho \mathbf{u} \cdot \mathbf{n} ds + \int_T \rho q dx. \quad (2.6)$$

Mit dem Satz von Stokes kann $\int_T \nabla \cdot (\rho \mathbf{u}) dx$ an Stelle von $\int_{\partial T} \rho \mathbf{u} \cdot \mathbf{n} ds$ geschrieben werden. Weiterhin gilt die Aussage bereits für den Integranden selbst, da T beliebig gewählt wurde. Somit erhält man

$$\frac{\partial}{\partial t}(\varphi \rho) + \nabla \cdot (\rho \mathbf{u}) = \rho q. \quad (2.7)$$

2.4.2 Massenerhaltung der CO₂-haltigen Komponente

Es wird nun die zeitliche Änderung der Masse der CO₂-haltigen Komponente im Teilgebiet T betrachtet. Auch hier ist der Fluss über den Rand sowie der Quellterm für die Veränderung verantwortlich, allerdings setzt sich der Fluss hier anders zusammen.

Zum einen wird die CO_2 -haltige Komponente mit der Phase entlang \mathbf{u} transportiert. Wie oben erhält man hierdurch einen Term

$$\mathbf{j}_{\text{trans}} = \rho_{\text{CO}_2} \mathbf{u}. \quad (2.8)$$

Zusätzlich findet allerdings molekulare Diffusion statt, die durch das *Ficksche Gesetz* beschrieben werden kann. Der Massenfluss ist proportional zum Dichtegradienten:

$$\mathbf{j}_{\text{diff}} = -D_m \nabla \rho_{\text{CO}_2} \quad (2.9)$$

mit der Diffusionskonstanten D_m . Allerdings muss für die Diffusion in einem porösen Medium die Diffusionskonstante leicht angepasst werden. Nach [22, 6.1.3: Dispersion in Porous Media] sind die Millington-Quirk-Modelle[18][19] eine häufig verwendete Parametrisierung. In beiden Modellen ergibt sich für die in dieser Arbeit betrachteten Situation einer Phase

$$D_{pm} = \varphi^{\frac{4}{3}} D_m. \quad (2.10)$$

Ein zusätzlicher Effekt in porösen Medien ist die mechanische Dispersion. Durch sie wird die Bewegung einer Komponente entlang \mathbf{u} sowohl transversal als auch longitudinal verschmiert. Eine Möglichkeit sie zu beschreiben ist die *Bear-Scheidegger-Dispersion*:

$$\mathbf{j}_{\text{disp}} = -D_{\text{disp}} \nabla \rho_{\text{CO}_2} \quad (2.11)$$

mit

$$D_{\text{disp}} = \alpha_T \|\mathbf{u}\| \mathbf{I} + (\alpha_L - \alpha_T) \frac{\mathbf{u}\mathbf{u}^T}{\|\mathbf{u}\|}. \quad (2.12)$$

Die Konstanten α_L und α_T beschreiben hierbei den longitudinalen beziehungsweise transversalen Anteil der Dispersion.

Insgesamt ergibt sich also nach der Anwendung des Satzes von Stokes

$$\frac{\partial}{\partial t}(\varphi \rho_{\text{CO}_2}) + \nabla \cdot (\rho_{\text{CO}_2} \mathbf{u} - D \nabla \rho_{\text{CO}_2}) = \rho q_{\text{CO}_2}, \quad (2.13)$$

wobei

$$D := D_{pm} \mathbf{I} + \alpha_T \|\mathbf{u}\| \mathbf{I} + (\alpha_L - \alpha_T) \frac{\mathbf{u}\mathbf{u}^T}{\|\mathbf{u}\|} \quad (2.14)$$

gesetzt wurde. Mit dem Massenbruch ω der CO_2 -Komponente kann dies auch als

$$\frac{\partial}{\partial t}(\varphi \rho \omega) + \nabla \cdot (\rho \omega \mathbf{u} - D \nabla \rho \omega) = \rho q_{\text{CO}_2} \quad (2.15)$$

geschrieben werden. Eigentlich müsste hier die massengemittelte Geschwindigkeit aller Komponenten stehen (vgl. [14, Abschnitt 2.1.3.2]), allerdings wird der Unterschied in dieser Arbeit durch die im Abschnitt 2.6 beschriebene Boussinesq-Approximation ohnehin vernachlässigt.

2.5 Darcys Gesetz

Für eine laminare Strömung eines inkompressiblen Fluids kann die makroskopische Fluidgeschwindigkeit \mathbf{u} aus dem Druck p mit Hilfe von *Darcys Gesetz* berechnet werden:

$$\mathbf{u} = -\frac{\mathbf{K}}{\nu}(\nabla p - \rho \mathbf{g}) \quad (2.16)$$

Dieses Gesetz wurde ursprünglich von Henry Darcy zur phänomenologischen Beschreibung des Flusses von Wasser durch einen Sandboden aufgestellt. Es kann aber auch durch eine Homogenisierungstheorie aus der mikroskopischen Beschreibung durch die Navier-Stokes-Gleichung hergeleitet werden.

Die Eigenschaften des porösen Mediums finden sich im *Permeabilitätstensor* \mathbf{K} wieder. Das Fluid wird durch die *Viskosität* ν beschrieben. Der Term $\rho \mathbf{g}$ beschreibt die Gravitation, es können hier aber auch weitere äußere Kräfte hinzugefügt werden.

Setzt man Darcys Gesetz (2.16) in die Massenerhaltung (2.7) ein, so erhält man die Grundwassergleichung

$$\frac{\partial}{\partial t}(\varphi \rho) - \nabla \cdot \left(\rho \frac{\mathbf{K}}{\nu} (\nabla p - \rho \mathbf{g}) \right) = \rho q. \quad (2.17)$$

2.6 Vereinfachungen

In dieser Arbeit wird die Boussinesq-Approximation verwendet, das heißt die Abhängigkeit der Dichte von der Zusammensetzung der Phase in den Erhaltungsgleichungen wird ignoriert, es sei denn die Dichte wird mit der Gravitationsfeldstärke multipliziert. Hierdurch werden die Gleichungen deutlich vereinfacht. Die Verwendung ist gerechtfertigt, da in [14, Kapitel 4] für das Elder-Problem beobachtet wurde, dass (stationäre) Lösungen für die Boussinesq-Approximation und die vollen Gleichungen einander entsprechen. Es wird in dieser Arbeit davon ausgegangen, dass dies auch für das hier betrachtete Modellproblem gilt, da dieses dem Elder-Problem ähnelt.

Durch die Verwendung der Boussinesq-Approximation ist somit in der Grundwassergleichung (2.17) die Dichte ρ eine Konstante bis auf den Term $\rho \mathbf{g}$. Somit kann ρ als konstanter Faktor herausgezogen und durch ρ geteilt werden und man erhält

$$\frac{\partial}{\partial t} \varphi - \nabla \cdot \left(\frac{\mathbf{K}}{\nu} (\nabla p - \rho \mathbf{g}) \right) = q. \quad (2.18)$$

Ändert sich die Porosität φ nicht mit der Zeit, vereinfacht sich die Gleichung weiter zu

$$-\nabla \cdot \left(\frac{\mathbf{K}}{\nu} (\nabla p - \rho \mathbf{g}) \right) = q. \quad (2.19)$$

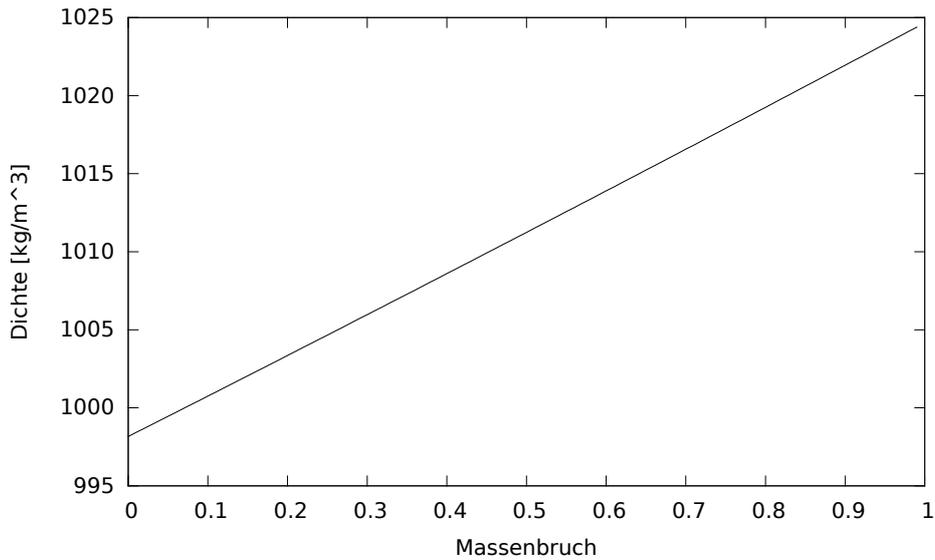


Abbildung 2.1: Abhängigkeit der Dichte ρ vom Massenbruch ω

Auch in der Kontinuitätsgleichung für die CO_2 -haltige Komponente (2.15) kann so durch ρ geteilt werden. Hier erhält man

$$\frac{\partial}{\partial t}(\varphi\omega) + \nabla \cdot (\omega\mathbf{u} - D\nabla\omega) = q_{\text{CO}_2}. \quad (2.20)$$

Homogene und isotrope poröse Medien erlauben weitere Vereinfachungen: Für ein homogenes poröses Medium ist K konstant; im isotropen Fall kann der Permeabilitätstensor K durch einen Skalar ersetzt werden.

2.7 Dichte

Die Abhängigkeit der Dichte $\rho = \rho(\omega)$ von der Menge an gelöstem Kohlenstoffdioxid wurde durch das von [12] beschriebene Modell, das auf experimentellen Daten beruht, berechnet. Hierbei wurde von einer konstanten Dichte und Temperatur ausgerechnet. Die verwendete Implementierung kann zusätzlich auch die Abhängigkeit vom Salzgehalt nach dem Modell von [7] berücksichtigen, aber auch diese wurde als konstant angenommen.

Mit den später verwendeten Parametern steigt die Dichte nahezu linear von $\rho(0) \approx 998 \text{ kg m}^{-3}$ zu $\rho(1) \approx 1024 \text{ kg m}^{-3}$ an, vergleiche Abbildung 2.1.

3 Modellproblem

In dieser Arbeit wird ein einfaches Modellproblem in zwei und drei Raumdimensionen betrachtet, das im Folgenden vorgestellt werden soll.

Es wird ein rechteckiges (quaderförmiges) Gebiet Ω der Kantenlänge $L_x \times L_y$ ($L_x \times L_y \times L_z$) mit isotroper, also skalarer, Permeabilität K betrachtet. Auf der Oberseite Γ_D wird als Dirichlet-Randbedingung der hydrostatische Druck $p = p_0$ und $\omega = 1$ gesetzt; auf den übrigen Seiten Γ_N als Neumann-Bedingung, dass der Fluss über den Rand für Druck und Massenbruch Null ist, also $\mathbf{n} \cdot (\nabla p - \rho \mathbf{g}) = 0$ und $\mathbf{n} \cdot (\omega \mathbf{u} - D \nabla \omega) = 0$. Im Inneren des Gebiets gibt es keine Quellen oder Senken. Schematisch ist dies in Abbildung 3.1 dargestellt.

Anfangsbedingung für den Massenbruch ist $\omega = 1$ auf einem Bereich an der Oberseite und $\omega = 0$ sonst, eventuell mit einem stetigen Übergangsbereich. Es sind verschiedene Wahlen für die Form dieses Bereichs möglich, vergleiche Abbildung 3.2. Für den Druck p wird der hydrostatische Druck p_0 als Anfangsbedingung gewählt.

Dies liefert ein System von partiellen Differentialgleichungen

$$\nabla \cdot \left(\frac{K}{\nu} (\nabla p - \rho \mathbf{g}) \right) = 0, \quad (3.1a)$$

$$\partial_t(\varphi \omega) - \nabla \cdot (\omega \mathbf{u} - D \nabla \omega) = 0 \quad (3.1b)$$

in Ω mit den Randbedingungen

$$p = p_0 \text{ auf } \Gamma_D, \quad (3.2a)$$

$$\mathbf{n} \cdot (\nabla p - \rho \mathbf{g}) = 0 \text{ auf } \Gamma_N, \quad (3.2b)$$

$$\omega = 1 \text{ auf } \Gamma_D, \quad (3.2c)$$

$$\mathbf{n} \cdot (\omega \mathbf{u} - D \nabla \omega) = 0 \text{ auf } \Gamma_N \quad (3.2d)$$

und Anfangsbedingungen

$$p = p_0, \quad (3.3a)$$

$$\omega = \omega_0 \quad (3.3b)$$

mit dem Gebiet $\Omega = (0, L_x) \times (0, L_z)$, bzw. $(0, L_x) \times (0, L_y) \times (0, L_z)$, und den Rändern $\Gamma_D = (0, L_x) \times \{L_z\}$, bzw. $(0, L_x) \times (0, L_y) \times \{L_z\}$, und $\Gamma_N = \partial\Omega \setminus \Gamma_D$. Der Dispersions-tensor D ist durch (2.12) gegeben.

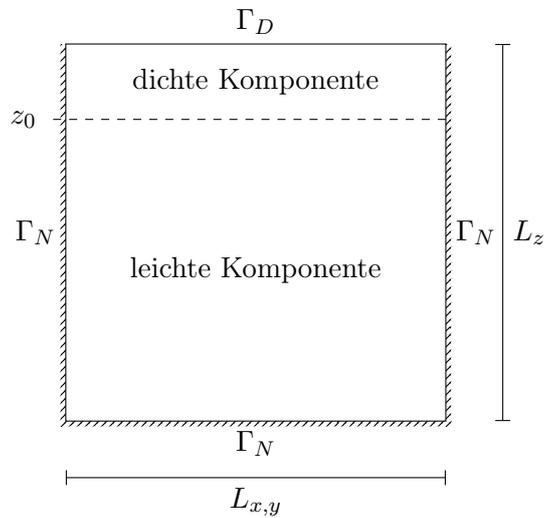


Abbildung 3.1: Schematische Darstellung des Modellproblems: Dirichlet-Bedingung für Druck p und Massenbruch ω am oberen Rand, auf den anderen Rändern no flow Neumann-Bedingung. Als Anfangsbedingung befindet sich eine dichtere Komponente im oberen Bereich, verschiedene Wahlen sind in Abbildung 3.2 dargestellt.

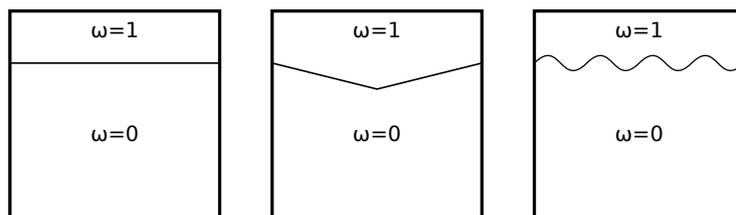


Abbildung 3.2: Verschiedene Anfangsbedingungen für den Massenbruch ω . Die meisten Rechnungen wurden mit der ebenen Trennschicht (links) durchgeführt.

Symbol	Wert	Einheit	Beschreibung
$L_{x,y,z}$	10	m	Gebietsgröße
α_T	0.1	m	transversale Dispersion
α_L	0.001	m	longitudinale Dispersion
D_m	$2 \cdot 10^{-9}$	$\text{m}^2 \text{s}^{-1}$	molekulare Diffusion
K	$10^{-9} \dots 10^{-11}$	m^2	Permeabilität
ν	10^{-3}	Pa s	Viskosität
φ	0.15		Porosität
g	9.81	m s^{-2}	Gravitationsfeldstärke

Tabelle 3.1: Parameter für Modellproblem

Die beiden Differentialgleichungen sind gekoppelt, da zum einen die Dichte $\rho = \rho(\omega(x))$ vom Massenbruch abhängt und zum anderen die Fluidgeschwindigkeit \mathbf{u} durch Darcys Gesetz (2.16) aus dem Druck p berechnet wird.

Die für die späteren Rechnungen verwendeten Parameter sind in Tabelle 3.1 eingetragen.

4 Numerik

In diesem Kapitel wird beschrieben, welche numerischen Verfahren und Software für die Simulation verwendet wurden.

4.1 Beobachtung

Zunächst jedoch eine Beobachtung: Ausgehend von der analytischen Formulierung des Modellproblems in (3.1) mit konstanten, also ortsunabhängigen, Koeffizienten ist nicht ersichtlich wieso es zu Fingering kommen sollte. Wäre das Gebiet in x - und y -Richtung unendlich groß und die Startbedingung nur abhängig von z , also etwa

$$\omega(z) = \begin{cases} 1 & z \geq z_0 \\ 0 & z < z_0, \end{cases}$$

so kann die Lösung

$$\begin{aligned} p(x, y, z) \\ \omega(x, y, z), \end{aligned}$$

sofern sie eindeutig bestimmt ist, nur von z abhängig sein, denn es ist auch

$$\begin{aligned} p(x + x_0, y + y_0, z) \\ \omega(x + x_0, y + y_0, z) \end{aligned}$$

für beliebige $x_0, y_0 \in \mathbb{R}$ eine Lösung. Aus der Eindeutigkeit folgt

$$\begin{aligned} p(x, y, z) &= p(x + x_0, y + y_0, z) \\ \omega(x, y, z) &= \omega(x + x_0, y + y_0, z) \end{aligned}$$

und somit $p = p(z), \omega = \omega(z)$ unabhängig von x und y .

Auch für einen quadratischen Querschnitt muss die (eindeutige) Lösung Symmetrien erfüllen. Entsteht etwa ein Finger in einer Ecke, müsste er auch in anderen entstehen.

Solch Verhalten wird aber nicht erwartet und in der Natur auch nicht beobachtet, allerdings gibt es in der Realität auch keine exakt konstanten Koeffizienten oder perfekt

symmetrische Anfangsbedingungen, sondern alle Werte unterliegen natürlichen Schwankungen.

Auch numerische Verfahren liefern keine exakte Lösungen. Daher wird folgende Annahme gemacht: Im letztlich zu lösenden linearen Gleichungssystem

$$Ax = b$$

aus der Diskretisierung des Differentialgleichungssystems ist es praktisch gleichbedeutend ob Koeffizienten wie K oder φ und somit A und b schwanken oder ob es numerische Fehler bei der Lösung gibt, solange diese nicht zu groß sind.

Somit ergeben auch nicht-symmetrische Lösungen Sinn, obwohl man sie nicht als analytische Lösung erhalten kann. Allerdings hängt die Lösung nun vom verwendeten Löser ab, da die Rundungsfehler an unterschiedlichen Stellen auftreten können. Insbesondere hängt die Lösung nicht mehr stetig von den Daten ab, da kleine Schwankungen zu Bildung von Fingern an unterschiedlichen Stellen im Gebiet führen können. Auch Fehlerabschätzungen sind nicht mehr hilfreich, da sich diese üblicherweise auf die analytische Lösung beziehen oder unterschiedliche Löser miteinander vergleichen.

Die Frage nach Existenz und Eindeutigkeit von Lösungen konnte nur in einzelnen Fällen theoretisch beantwortet werden. Übliche Einschränkungen hierbei sind Betrachtung der Boussinesq-Approximation an Stelle der vollen Gleichungen und verschwindende mechanische Dispersion (also $\alpha_L = \alpha_T = 0$), vergleiche [14, Abschnitt 2.3.1].

Das Modellproblem ist also streng genommen nicht wohlgestellt da die Lösung nicht stetig von den Parametern abhängt und Eindeutigkeit und Existenz nicht geklärt sind. Ist man jedoch nicht an der genauen Lage der Finger, sondern nur an gemittelten Größen wie der Verteilung des Massenbruchs ω entlang der Tiefe z oder an Anzahl und Größe der Finger (aber nicht deren räumliche Verteilung) interessiert, so können numerische Ergebnisse dennoch von Interesse sein. Hierzu müssen mehrere Simulationen durchgeführt werden und überprüft werden, ob die betrachteten Größen signifikant voneinander abweichen.

4.2 Implementierung

Das für diese Arbeit entwickelte Simulationsprogramm verwendet das *Distributed and Unified Numerics Environment (DUNE)*[6]. Das Gebiet Ω wird in ein strukturiertes Gitter aus rechteckigen (quaderförmigen) Elementen unterteilt. Hierzu wurde das YaspGrid-Modul aus DUNE verwendet. Auf diesem wurden mit Hilfe des Diskretisierungsmoduls DUNE-pdelab[5] die partiellen Differentialgleichungen wie unten beschrieben diskretisiert. Durch die Verwendung von DUNE, das bereits Unterstützung von MPI, datenparallele Gitter und parallele Löser mitbringt, konnte das Programm auch leicht parallelisiert werden.

Die zwei partiellen Differentialgleichungen aus dem System (3.1) werden unabhängig voneinander gelöst (*operator splitting*). Dies vereinfacht nicht nur das später zu lösende lineare Gleichungssystem zu zwei kleineren linearen Systemen, sondern hebt auch die nicht-lineare Kopplung zwischen beiden Gleichungen auf: ansonsten ist $\rho = \rho(\omega)$ und $\mathbf{u} = \mathbf{u}(p)$.

Es wird also zunächst die Grundwassergleichung (3.1a) für p gelöst. Wie in Abschnitt 4.4 beschrieben, wurden zur Diskretisierung zell-zentrierte finite Volumen verwendet. Die in der Grundwassergleichung benötigte Dichte ρ der Phase wird aus den alten Werten des Massenbruchs ω berechnet.

Aus dem Druck p wird nun mittels Darcys Gesetz (2.16) die makroskopische Fluidgeschwindigkeit \mathbf{u} berechnet. Diese wurde durch ein *Raviart-Thomas-Element 0. Ordnung (RT0)* dargestellt.

Schließlich kann über die Konvektions-Diffusions-Gleichung (3.1b) für den Transport der CO_2 -haltigen Komponente die Verteilung des Massenbruchs ω im nächsten Zeitschritt berechnet werden. Diese wurde durch ein Discontinuous Galerkin-Verfahren diskretisiert, vergleiche Abschnitt 4.5. Ähnlich zum ersten Schritt wird die zuvor berechnete Geschwindigkeit \mathbf{u} verwendet.

Die letztlich hieraus erhaltenen (linearen, da entkoppelten) Gleichungssysteme wurde mit Hilfe der Löser aus DUNE-istl[9] gelöst. Für die Grundwassergleichung wurde ein algebraisches Mehrgitterverfahren (AMG)[8] verwendet, für die Konvektions-Diffusions-Gleichung ein BCGS-Verfahren.

4.3 Notation

Im Folgenden sei ein Gebiet Ω mit Dirichlet-Rand $\Gamma_D \subset \partial\Omega$ und Neumann-Rand $\Gamma_N = \partial\Omega \setminus \Gamma_D$ gegeben. Betrachtet sei hierauf ein Gitter bestehend aus den Elementen $T \in \mathcal{T}$. Die Seitenflächen (Seitenkanten in 2D) der Elemente seien mit $F \in \mathcal{F}$ (*faces*) bezeichnet und weiter in die inneren Seiten $F \in \mathcal{F}^i$ mit $F \subset \Omega$ sowie $F \in \mathcal{F}^{\Gamma_D}$ mit $F \subset \Gamma_D$ und $F \in \mathcal{F}^{\Gamma_N}$ mit $F \subset \Gamma_N$ unterteilt.

$\mathcal{P}(T)$ bezeichne einen Raum von Polynomfunktionen auf dem Gitterelement T , etwa jene aus der Definition der P1- oder Q1-Räume.

Weiterhin sei $(v, w)_{0,\Omega} := \int_{\Omega} vw \, dx$.

4.4 Finite Volumen für Grundwassergleichung

Die Grundwassergleichung wird mit zell-zentrierten Finiten Volumen analog zum Vorgehen in [10, 2.5. Cell-Centered Finite Volumes] diskretisiert.

Mit der Wahl von

$$W_h := \{u_h \in L^2(\Omega) : u_h|_T = \text{const} \forall T \in \mathcal{T}\}$$

ergibt sich nach Multiplikation mit einer Testfunktion $v \in W_h$

$$\begin{aligned} 0 &= \sum_{T \in \mathcal{T}} \int_T \nabla \cdot \left(\frac{K}{\nu} (\nabla p - \rho \mathbf{g}) \right) v \, dx \\ &= \sum_{T \in \mathcal{T}} \int_{\partial T} \frac{K}{\nu} (\nabla p - \rho \mathbf{g}) \cdot \mathbf{n} v \, ds \\ &= \sum_{T \in \mathcal{T}} \int_{\partial T \cap \Omega} \frac{K}{\nu} (\nabla p - \rho \mathbf{g}) \cdot \mathbf{n} v \, ds + \int_{\partial T \cap \Gamma_D} \frac{K}{\nu} (\nabla p - \rho \mathbf{g}) \cdot \mathbf{n} v \, ds + \int_{\partial T \cap \Gamma_N} j v \, ds. \end{aligned}$$

Nach Ersetzen von ∇p durch einen Differenzenquotienten und der Integrale durch die Mittelpunktsregel erhält man

$$\begin{aligned} r_h(p_h, v) &:= \sum_{F \in \mathcal{F}^i} \frac{K}{\mu} \left(\frac{p_h(x_F^+) - p_h(x_F^-)}{\|x_F^+ - x_F^-\|} - \rho \mathbf{g} \mathbf{n}_F \right) (v(x_F^+) - v(x_F^-)) |F| \\ &\quad + \sum_{F \in \mathcal{F}^{\Gamma_D}} \frac{K}{\mu} \left(\frac{g(x_F) - p_h(x_F^-)}{\|x_F - x_F^-\|} - \rho \mathbf{g} \mathbf{n}_F \right) v(x_F^-) |F| \\ &\quad + \sum_{F \in \mathcal{F}^{\Gamma_N}} j(x_F) v(x_F) |F|. \end{aligned}$$

Hierbei bezeichnen x_F den Mittelpunkt des Faces F , x_F^\pm die Zellmittelpunkte der zum Face F benachbarten Zellen T_F^\pm und \mathbf{n}_F die Normale von T_F^- nach T_F^+ . Die Summanden wurden etwas umgruppiert: in der Integralschreibweise taucht jedes Face zweimal auf, da es Teil des Randes zweier Elemente ist. Diese wurden in einem Summanden je Face zusammengefasst.

Mit der Bilinearform

$$\begin{aligned} a_h(p_h, v_h) &:= \sum_{F \in \mathcal{F}^i} \frac{K}{\mu} \frac{p_h(x_F^+) - p_h(x_F^-)}{\|x_F^+ - x_F^-\|} (v(x_F^+) - v(x_F^-)) |F| \\ &\quad + \sum_{F \in \mathcal{F}^{\Gamma_D}} \frac{K}{\mu} \frac{-p_h(x_F^-)}{\|x_F - x_F^-\|} v(x_F^-) |F| \end{aligned}$$

und der Linearform

$$\begin{aligned} l_h(v_h) &:= \sum_{F \in \mathcal{F}^i} \frac{K}{\mu} \rho \mathbf{g} \mathbf{n}_F (v_h(x_F^+) - v_h(x_F^-)) |F| \\ &\quad + \sum_{F \in \mathcal{F}^{\Gamma_D}} \frac{K}{\mu} \left(\frac{-g(x_F)}{\|x_F - x_F^-\|} + \rho \mathbf{g} \mathbf{n}_F \right) v_h(x_F^-) |F| \\ &\quad + \sum_{F \in \mathcal{F}^{\Gamma_N}} j(x_F) v_h(x_F) |F| \end{aligned}$$

kann r_h auch als

$$r_h(p_h, v_h) = a(p_h, v_h) - l(v_h)$$

geschrieben werden.

Das diskrete Problem lautet somit:

$$\text{Suche } p_h \in W_h, \text{ so dass } r_h(p_h, v_h) = a_h(p_h, v_h) - l_h(v_h) = 0 \text{ für alle } v \in W_h.$$

Um ein lineares Gleichungssystem zu erhalten muss noch eine Basis von W_h gewählt werden. Eine naheliegende Wahl ist

$$\psi_T(x) := \begin{cases} 1 & x \in T, \\ 0 & \text{sonst} \end{cases}$$

für $T \in \mathcal{T}$. Sei also $p_h = \sum p_T \psi_T$. Dann erhält man für jedes $v_h = \psi_{T'}$ eine Zeile eines linearen Gleichungssystems für p_T :

$$\begin{aligned} r_h(p_h, \psi_{T'}) &= 0 \\ \iff a_h\left(\sum_T p_T \psi_T, \psi_{T'}\right) - l_h(\psi_{T'}) &= 0 \\ \iff \sum_T a_h(\psi_T, \psi_{T'}) p_T &= l_h(\psi_{T'}) \\ \iff Ap &= b \end{aligned}$$

wobei A eine Matrix mit $A_{T',T} = a_h(\psi_T, \psi_{T'})$ und p, b Vektoren mit $b_{T'} = l_h(\psi_{T'})$ sind.

Als Löser für das lineare Problem wurde ein BCGS-Verfahren verwendet, das mit dem in [8] beschriebenen AMG-Verfahren vorkonditioniert wurde. Das AMG-Verfahren selbst hat einen SSOR-Vorkonditionierer verwendet.

Anschließend wird aus dem Druck p die Geschwindigkeit \mathbf{u} berechnet und durch eine RT0-Funktion dargestellt. Dies ist eine natürliche Wahl, da p elementweise konstant ist und nur die Normalableitung auf den Seitenflächen durch einen Differenzenquotienten wie oben berechnet werden kann. Hierdurch ist aber gerade eine RT0-Funktion definiert.

4.5 Discontinuous Galerkin für Kohlenstoffdioxid-Transport

Es wird zunächst die Diskretisierung des zeitunabhängigen Teils

$$-\nabla \cdot (\omega \mathbf{u} - D \nabla \omega) = 0$$

mit Continuous Galerkin und homogenen Dirichlet-Randbedingungen betrachtet. Anschließend werden gemischte Randbedingungen betrachtet und letztlich die Diskretisierung mit Discontinuous Galerkin (DG) wie in [2] und [11] beschrieben.

Sei also zunächst

$$V_h = \{v_h \in C_0^\infty : v_h|_T \in \mathcal{P}(T) \forall T \in \mathcal{T}\} \subset V = H_0^1.$$

Dann ist die schwache Formulierung der CO_2 -Transportgleichung in diesem Raum

$$\omega \in V : (\omega \mathbf{u} - \mathbf{D} \nabla \omega, \nabla v)_{0,\Omega} = 0 \quad \forall v \in V$$

mit dem zugehörigen diskreten Problem

$$\omega_h \in V_h : (\omega_h \mathbf{u} - \mathbf{D} \nabla \omega_h, \nabla v_h)_{0,\Omega} = 0 \quad \forall v_h \in V_h.$$

Wie für die Finiten Volumen erhält man durch Einsetzen einer Basisdarstellung von $\omega_h, v_h \in V_h$ ein lineares Gleichungssystem.

Der Fall nicht-trivialer Randbedingungen

$$\begin{aligned} \omega &= g_\omega && \text{auf } \Gamma_D \subset \partial\Omega, \\ \mathbf{n} \cdot (\nabla \omega - \rho \mathbf{g}) &= j_\omega && \text{auf } \Gamma_N = \partial\Omega \setminus \Gamma_D \end{aligned}$$

mit $|\Gamma_D| \neq 0$ lässt sich wie in [3, Kapitel 6] auf den Fall homogener Dirichletbedingungen zurückführen: Wähle

$$\begin{aligned} V &= \{v \in H^1(\Omega) : v|_{\Gamma_D} = 0 \text{ fast überall}\}, \\ V_h &= \{v_h \in C^\infty(\Omega) : v_h|_{\Gamma_D} = 0\} \subset V \end{aligned}$$

und Fortsetzung $\omega_g \in V$ mit $\omega_g|_{\Gamma_D} = g_\omega$, bzw. $\omega_{g,h} \in V_h$ mit der gleichen Eigenschaft. Mit der Lösung $\tilde{\omega}$ des Variationsproblems

$$\tilde{\omega} \in V : ((\omega_g + \tilde{\omega}) \mathbf{u} - \mathbf{D} \nabla (\omega_g + \tilde{\omega}), \nabla v)_{0,\Omega} + (j, v)_{0,\Gamma_N} = 0 \quad \forall v \in V$$

ist dann $\omega := \omega_g + \tilde{\omega}$ Lösung des Problems mit gemischten Randbedingungen. Analog geht man für das diskrete Problem vor. Die Konstruktion der Fortsetzung $\omega_{g,h}$ von g_ω ist hierbei üblicherweise kein Problem.

Für das Discontinuous Galerkin-Verfahren wählen wir als Ansatzraum für die diskrete Formulierung

$$V_h = \{v_h \in L^2(\Omega) : v_h|_T \in \mathcal{P}(T) \forall T \in \mathcal{T}\} \not\subset V.$$

Funktionen aus diesem nicht-konformen Ansatzraum erfüllen nicht wie oben automatisch die Dirichlet-Randbedingungen und können auf den Grenzflächen zwischen den Elementen Sprünge haben. Um diese Sprünge zu beschreiben wird etwas mehr Notation benötigt.

Für $v \in V_h$ und ein inneres Face $F \in \mathcal{F}_h^i$ mit Normalenvektor \mathbf{n}_F , der vom Element T_F^- zum Element T_F^+ zeigt, wird der Sprung und das gewichtete Mittel als

$$\begin{aligned} [v] &:= v^- - v^+, \\ \{v\} &:= w^- v^- + w^+ v^+ \end{aligned}$$

definiert. Hierbei ist

$$v^\pm(x) = \lim_{\substack{y \rightarrow x \\ y \in T_F^\pm}} v(y)$$

der Wert von v auf dem Element T_F^\pm und w^\pm Gewichtungsfunktionen mit $w^\pm \geq 0$ und $w^- + w^+ = 1$.

Nun wird das Residuum als

$$\begin{aligned} r_h(\omega_h, v_h) &:= (\mathbf{D}\nabla\omega_h - \omega_h \mathbf{u}, \nabla v_h)_{0,\Omega} \\ &+ \sum_{F \in \mathcal{F}^i} (\gamma_F([\omega_h], [v_h])_{0,F} - (\mathbf{n}_F^t \{\mathbf{D}\nabla\omega_h\}, [v_h])_{0,F} - (\mathbf{n}_F^t \{\mathbf{D}\nabla v_h\}, [\omega_h])_{0,F} \\ &\quad + (\mathbf{n}_F^t \mathbf{u} \omega_h^{up}, [v_h])_{0,F}) \\ &+ \sum_{F \in \mathcal{F}^{\Gamma N}} (j, v_h)_{0,F} \\ &+ \sum_{F \in \mathcal{F}^{\Gamma D}} (\gamma_F((\omega_h - g_\omega), v_h)_{0,F} - (\mathbf{n}_F^t \mathbf{D}\nabla\omega_h, v_h)_{0,F} - (\mathbf{n}_F^t \mathbf{D}\nabla v_h, \omega_h)_{0,F} \\ &\quad + (\mathbf{n}_F^t \mathbf{u} \omega_h^{up,\Gamma}, v_h)_{0,F}). \end{aligned}$$

definiert. Hierbei ist

$$\omega_h^{up}(x) = \begin{cases} \omega_h|_{T_F^-}(x) & \mathbf{n}_F^t(x) \mathbf{u}(x) > 0, \\ \omega_h|_{T_F^+}(x) & \text{sonst} \end{cases}$$

und

$$\omega_h^{up,\Gamma}(x) = \begin{cases} \omega_h|_{T_F^-}(x) & \mathbf{n}_F^t(x) \mathbf{u}(x) > 0, \\ g_\omega(x) & \text{sonst.} \end{cases}$$

Der Strafparameter γ_F und die Gewichte w^\pm wurden wie in [2] definiert als

$$w^\pm = \frac{\delta_D^\pm}{\delta_D^- + \delta_D^+}$$

mit $\delta_D^\pm = \mathbf{n}_F^t \mathbf{D} \mathbf{n}_F$ für $F \in \mathcal{F}^i$ und $\delta_D = \mathbf{n}_F^t \mathbf{D} \mathbf{n}_F$ für $F \in \mathcal{F}^{\partial\Omega}$, sowie (für Polynomgrad $k = 1$)

$$\gamma_F = \begin{cases} \alpha \frac{2\delta_D^- \delta_D^+}{\delta_D^- \delta_D^+} \dim(\Omega) \frac{|F|}{\min(|T_F^-|, |T_F^+|)} & F \in \mathcal{F}^i, \\ \alpha \delta_D \dim(\Omega) \frac{|F|}{|T_F^-|} & F \in \mathcal{F}^{\partial\Omega}. \end{cases}$$

Das diskrete Problem lautet dann

$$\omega_h \in V_h : r_h(\omega_h, v_h) = 0 \quad \forall v_h \in V_h.$$

Das Residuum kann auch durch eine Bilinearform $a_h(\omega_h, v_h)$ und Linearform $l_h(v_h)$ als $r_h(\omega_h, v_h) = a_h(\omega_h, v_h) - l_h(v_h)$ dargestellt werden. Hierbei gehen die Terme mit ω_h^{up} und $\omega_h^{up,\Gamma}$ abhängig vom Vorzeichen von $\mathbf{n}_F^t \mathbf{u}$ entweder in a_h oder l_h ein. In dieser Schreibweise lautet das diskrete Problem

$$\omega_h \in V_h : a_h(\omega_h, v_h) - l_h(v_h) = 0 \quad \forall v_h \in V_h.$$

Die Dirichlet-Randbedingungen sind hier über Strafterme als natürliche Randbedingungen realisiert. Im zuvor vorgestellten CG-Verfahren wurden sie über die Wahl des Ansatzraums erfüllt, aber durch Modifikationen können sie auch dort als natürliche Randbedingungen umgesetzt werden.

Es wird nun die zeitabhängige Konvektions-Diffusions-Gleichung betrachtet:

$$\frac{\partial}{\partial t}(\varphi\omega) - \nabla \cdot (\omega \mathbf{u} - D \nabla \omega) = 0$$

Diese soll mit Hilfe der Linienmethode gelöst werden, das heißt es wird zuerst im Raum diskretisiert und anschließend in der Zeit. Durch Multiplikation mit einer Testfunktion v und Verwenden der DG-Bilinearform a_h und Linearform l_h von oben erhalte

$$\frac{d}{dt}(\varphi\omega_h, v_h)_{0,\Omega} + a_h(\omega_h, v_h; t) - l_h(v_h; t) = 0$$

Hierbei können a_h und l_h auch von der Zeit t abhängen. Nach Einsetzen der Basisdarstellung $\omega_h(x, t) = \sum \omega_j(t) \psi^j(x)$ und $v_h = \psi^k$ erhält man für alle k

$$\sum_j (\varphi \psi^j, \psi^k)_{0,\Omega} \frac{d}{dt} \omega_j(t) + \sum_j a(\psi^j, \psi^k) \omega_j(t) - l(\psi^k) = 0.$$

Dies ist ein System von gewöhnlichen Differentialgleichungen für $\omega_j(t)$. Es kann mit einer Ein-Schritt-Methode gelöst werden. In dieser Arbeit wurde das in [1] beschriebene und in DUNE-pdelab bereits implementierte implizite Runge-Kutta-Verfahren zweiter Ordnung verwendet.

Für den Zeitschritt musste eine *Courant-Friedrichs-Lewy-Bedingung (CFL)* eingehalten werden, das heißt

$$\Delta t \leq \frac{L}{d \max(|\mathbf{u}|)}$$

mit Seitenlänge L der Elemente und Raumdimension d . Wurde diese zu stark überschritten, so divergierte das Verfahren in den späteren Rechnungen. Die Wahl eines kleineren Zeitschrittes veränderte die Ergebnisse nicht wesentlich.

Es wurden hier für den Massenbruch ω stückweise Polynome ersten Grades verwendet. Als linearer Löser kam ein mit SSOR vorkonditioniertes BCGS-Verfahren zum Einsatz.

5 Ergebnisse

Es werden einige Ergebnisse von Simulationen in zwei und drei Dimensionen vorgestellt.

5.1 Abhängigkeit von der Gitterauflösung (2D)

Um die Abhängigkeit der numerischen Lösung von der Auflösung des Gitters zu betrachten, wurde das Modellproblem in zwei Raumdimensionen auf unterschiedlich feinen Gittern gelöst.

Für die Rechnungen wurde auch die *Gitter-Peclet-Zahl*

$$Pe = \frac{|\mathbf{u}|L}{D_m + \alpha_L|\mathbf{u}|} \quad (5.1)$$

nach [23, Gleichung 16] berechnet. Hierbei ist L die Länge einer Gitterzelle in Flussrichtung. Da die Gitter hier aus Quadraten bestehen, kann diese Abhängigkeit von der Richtung in der Implementierung allerdings vernachlässigt werden.

Die Gitter-Peclet-Zahl gibt das Verhältnis zwischen Konvektion und Diffusion einschließlich Dispersion an. Ist sie klein dominiert die Diffusion, bei großer Gitter-Peclet-Zahl findet hauptsächlich ein Konvektionsprozess statt.

Die berechnete Gitter-Peclet-Zahl ist auf dem ganzen Gebiet nahezu konstant. Dies spricht dafür, dass die molekulare Diffusion gegenüber der Dispersion vernachlässigbar klein ist und somit

$$Pe \approx \frac{L}{\alpha_L}.$$

Die Werte für die verschiedenen Gitter sind in Tabelle 5.1 eingetragen. Wie erwartet ist sie proportional zur Anzahl der Gitterelemente in einer Raumdimension.

Die Ergebnisse auf verschiedenen feinen Gittern sind in Abbildungen 5.1 (50×50 Gitter), 5.2 (100×100) und 5.3 (200×200) dargestellt. Zu sehen sind die räumliche Verteilung der beiden Komponenten in Form des Massenbruchs ω (links) sowie der über die x -Achse gemittelte Massenbruch (rechts).

Die Anzahl und Größe der Finger unterscheiden sich je nach Gitterauflösung. Dies überrascht nicht, da sie wie in Abschnitt 4.1 letztlich durch Rundungsfehler verursacht werden und diese unter anderem von der Gitterauflösung beeinflusst werden. Es unterscheidet

Gitterauflösung	Peclet-Zahl Pe
50×50	2.83
100×100	1.41
200×200	0.71
400×400	0.35
600×600	0.24

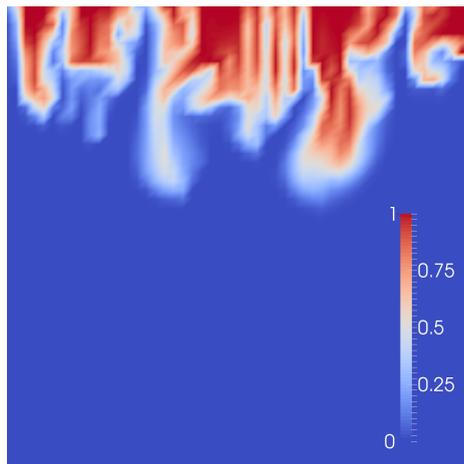
Tabelle 5.1: Gitter-Peclet-Zahl (Gl. 5.1) für die 2D-Rechnungen auf verschiedenen Gittern

sich jedoch auch die (über x gemittelte) Verteilung des Massenbruchs entlang der Tiefe z . In drei Raumdimensionen war dies kaum zu beobachten. Es wird daher davon ausgegangen, dass die später in Abschnitt 5.4 beschriebenen Wirbel von der Gitterauflösung abhängen.

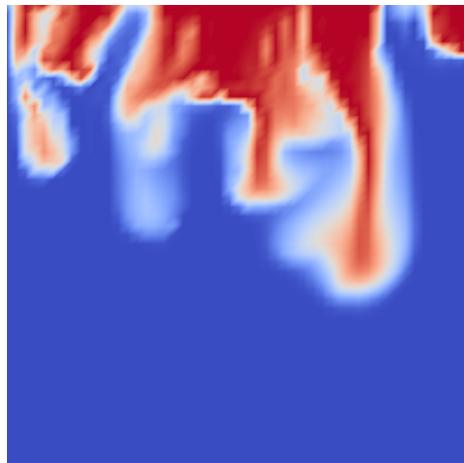
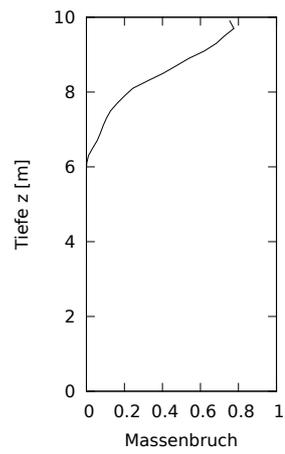
5.2 Abhängigkeit von der Permeabilität (2D)

Nach Darcys Gesetz (2.16) ist die dichtegetriebene makroskopische Geschwindigkeit \mathbf{u} proportional zur Permeabilität K . Dies wurde auch in den Simulationen, die in Abbildung 5.4 dargestellt sind, beobachtet: Wird die Permeabilität K von $1 \times 10^{-9} \text{ m}^2$ auf $1 \times 10^{-10} \text{ m}^2$ oder $1 \times 10^{-11} \text{ m}^2$ verringert, so stellt sich eine ähnliche Verteilung des Massenbruchs entlang der z -Achse erst nach der zehnfachen (hundertfachen) Zeitspanne ein.

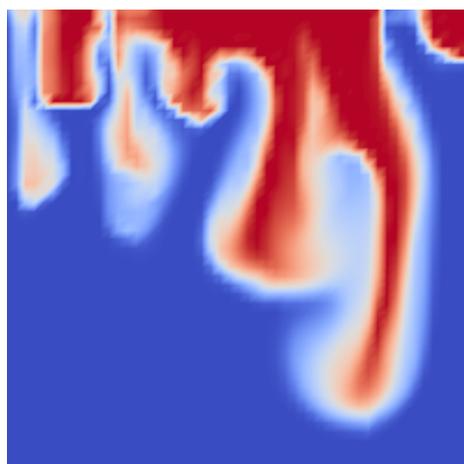
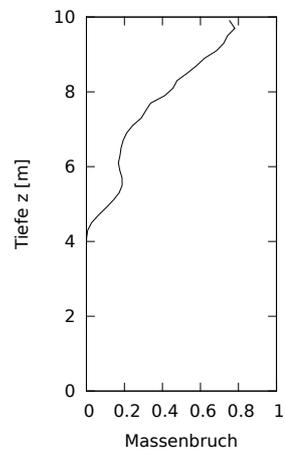
Die Diffusion ist hingegen unabhängig von der Permeabilität, allerdings ist ihr Effekt für die obigen Werte der Permeabilität im Vergleich zur dichtegetriebenen Strömung zu gering, um deutliche Unterschiede zu beobachten. Wird die Permeabilität jedoch noch weiter abgesenkt, so beobachtet man schließlich nur noch Diffusion (ohne Abbildung). Der Effekt der dichtegetriebenen Strömung ist nicht mehr sichtbar.



(a) $t = 30\,000\text{ s}$



(b) $t = 40\,000\text{ s}$



(c) $t = 50\,000\text{ s}$

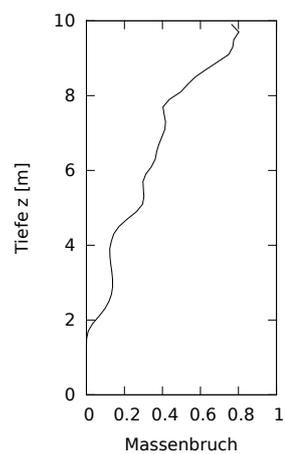
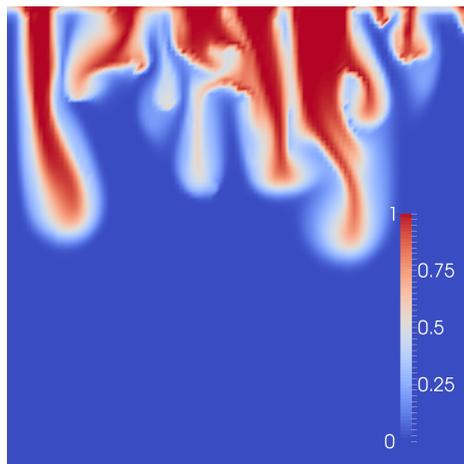
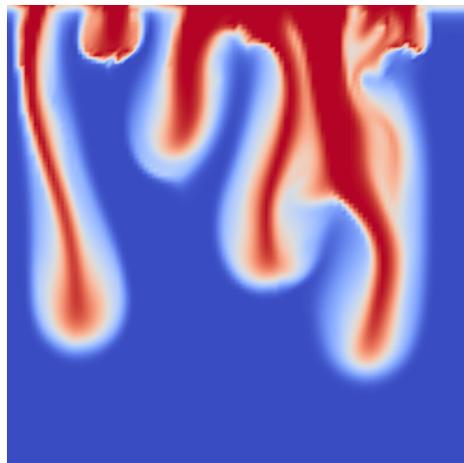
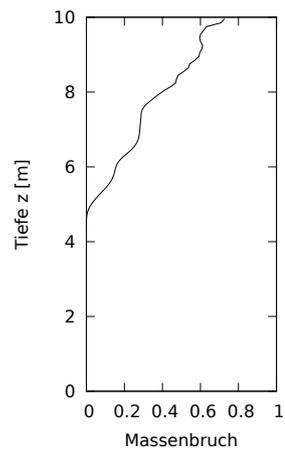


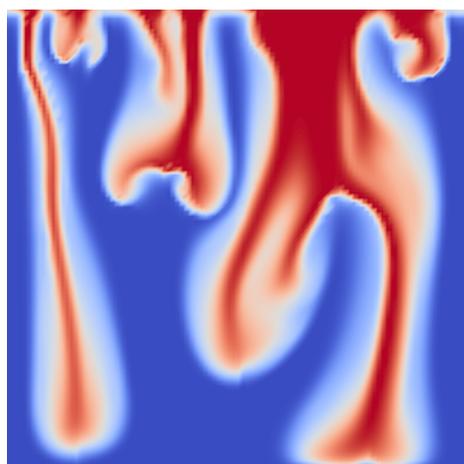
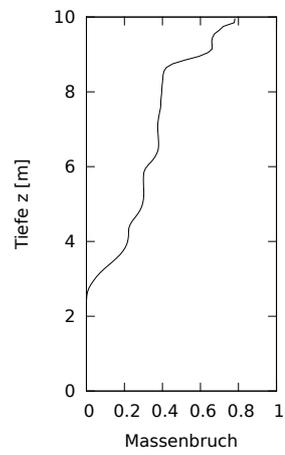
Abbildung 5.1: Simulation auf einem 50×50 Gitter in 2D



(a) $t = 30\,000\text{ s}$



(b) $t = 40\,000\text{ s}$



(c) $t = 50\,000\text{ s}$

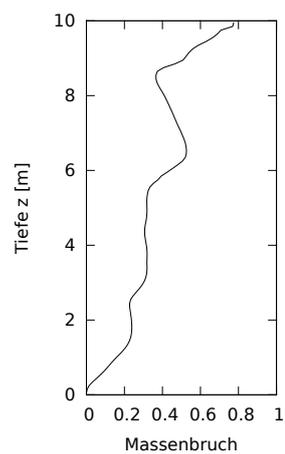
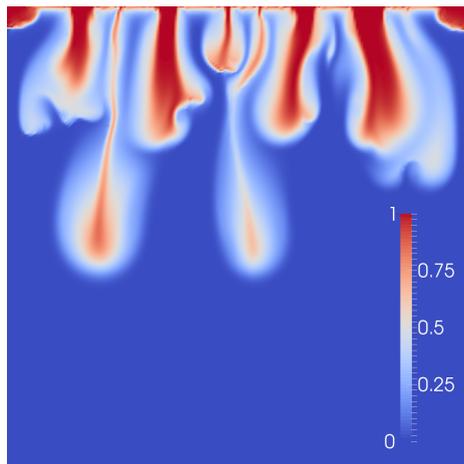
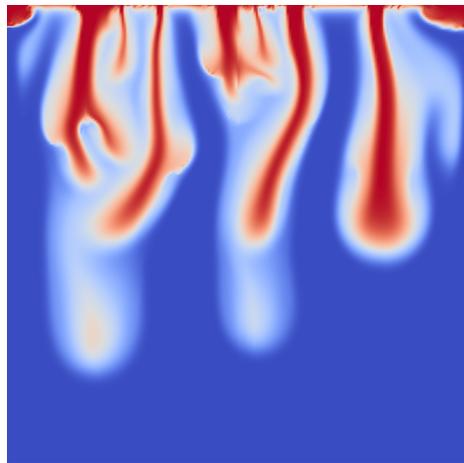
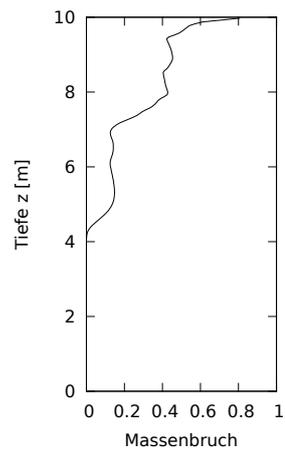


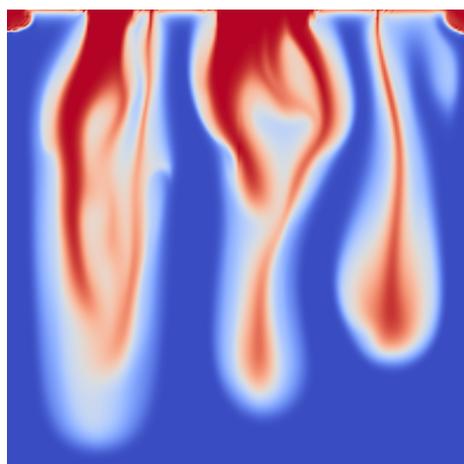
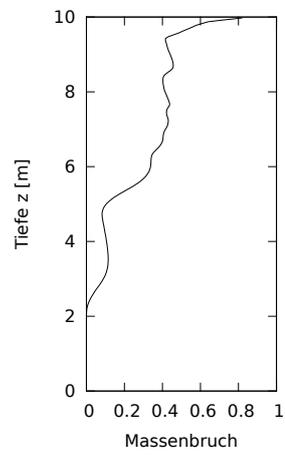
Abbildung 5.2: Simulation auf einem 100×100 Gitter in 2D



(a) $t = 30\,000\text{ s}$



(b) $t = 40\,000\text{ s}$



(c) $t = 50\,000\text{ s}$

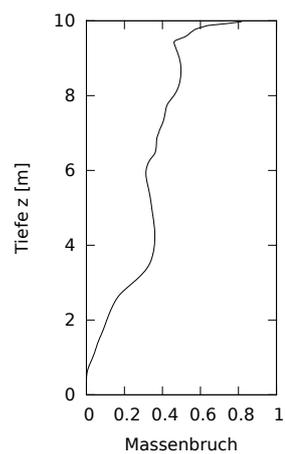
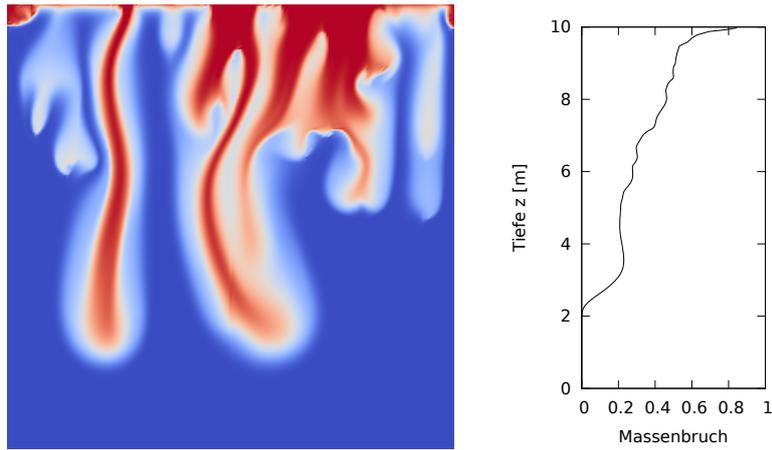
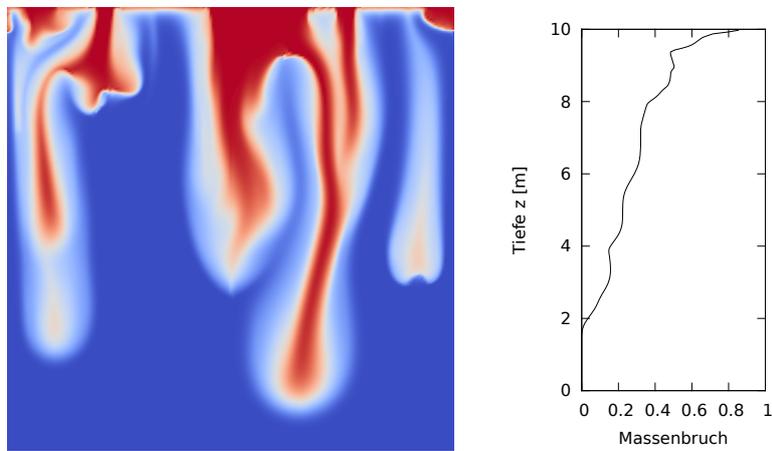


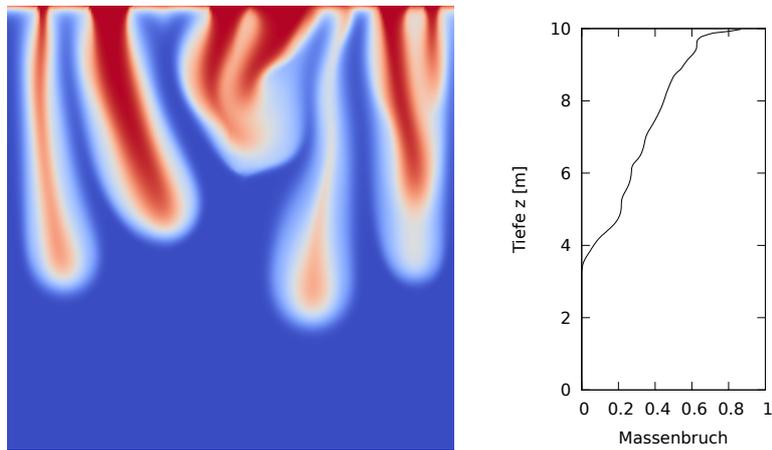
Abbildung 5.3: Simulation auf einem 200×200 Gitter in 2D



(a) $K = 1 \times 10^{-9} \text{ m}^2$ bei $t = 40\,000 \text{ s}$



(b) $K = 1 \times 10^{-10} \text{ m}^2$ bei $t = 400\,000 \text{ s}$



(c) $K = 1 \times 10^{-11} \text{ m}^2$ bei $t = 4\,000\,000 \text{ s}$

Abbildung 5.4: Simulation mit unterschiedlichen Permeabilitäten. Die Geschwindigkeit der dichtegetriebenen Strömung verhält sich linear zur Permeabilität, daher ist eine ähnliche Verteilung des Massenbruchs für eine niedrigere Permeabilität erst nach entsprechend längerer Zeit zu beobachten.

5.3 Effektive Diffusionskonstante (3D)

Das Modellproblem wurde auch in 3D mit dem im Rahmen der Diplomarbeit entwickelten Programm gerechnet. Als Gitter wurden hier unter anderem ein $100 \times 100 \times 100$ Gitter ($10 \text{ m} \times 10 \text{ m} \times 10 \text{ m}$) und ein $100 \times 40 \times 250$ Gitter ($10 \text{ m} \times 4 \text{ m} \times 25 \text{ m}$) verwendet. Das zweite Gitter ermöglicht die Simulation über einen größeren Zeitraum, da es dort erst später zu einer Ansammlung von CO_2 am Boden des Gebiets kommt. Auf den verschiedenen Gittern wurden qualitativ ähnliche Ergebnisse erzielt. Im Folgenden werden nur die Resultate auf dem $100 \times 100 \times 100$ -Gitter vorgestellt.

Auf beiden Gittern gibt es 10^6 Elemente und somit 10^6 Freiheitsgrade für den Druck p und $4 \cdot 10^6$ Freiheitsgrade für den Massenbruch ω . Die Rechnungen wurden auf einem Rechner mit 32–48 Prozessen durchgeführt. Die Größe der Probleme wurde hierbei so gewählt, dass einzelne Rechnungen innerhalb weniger Stunden durchgeführt werden konnten.

Zur Interpretation wird ein vereinfachtes eindimensionales Modell betrachtet für das eine von mehreren Parametern abhängige analytische Lösung aufgestellt werden kann. Durch Mittelung werden die Ergebnisse der Simulation auf eine Raumdimension reduziert und Parameter ermittelt, die es ermöglichen, diese näherungsweise durch die Lösung des 1D-Modells zu beschreiben.

5.3.1 Ein 1D-Problem

In einer Raumdimension und mit verschwindenden Quellterm vereinfacht sich das Differentialgleichungssystem. Gleichung (3.1a) wird zu

$$0 = \frac{\partial}{\partial z} \left(\frac{K}{\nu} \left(\frac{\partial}{\partial z} p - \rho g \right) \right).$$

Für konstante Permeabilität K und Viskosität ν ist dies

$$\frac{\partial^2}{\partial z^2} p = 0.$$

Somit ist

$$u = -\frac{K}{\nu} \left(\frac{\partial p}{\partial z} - \rho g \right)$$

unabhängig von z .

Für die Konvektions-Diffusions-Gleichung (3.1b) erhält man

$$0 = \frac{\partial}{\partial t} \rho \omega + \frac{\partial}{\partial z} \left(u \omega - D \frac{\partial \omega}{\partial z} \right) = \rho \frac{\partial}{\partial t} \omega + u \frac{\partial}{\partial z} \omega - D \frac{\partial^2}{\partial z^2} \omega. \quad (5.2)$$

Hierbei wurde verwendet, dass u unabhängig von z ist und dies auch für D vorausgesetzt. Beide Koeffizienten können aber von der Zeit abhängig sein, das heißt $u = u(t)$ und $D = D(t)$.

Sei nun $z_0 \in \mathbb{R}$. Dann kann für $\Omega = \mathbb{R}$, die Randbedingungen

$$\omega(-\infty, \cdot) = 1, \quad \omega(\infty, \cdot) = 0$$

und die Anfangsbedingungen

$$\omega(z, 0) = \begin{cases} 1 & \text{für } z \leq z_0 \\ 0 & \text{für } z > z_0 \end{cases}$$

die zweite Gleichung analytisch gelöst werden. Dazu definiere

$$\tilde{\omega}(z, t) := \operatorname{erf} \left(\frac{z - z_0 - \int_0^t \frac{u(\tilde{t})}{\varphi} d\tilde{t}}{2\sqrt{\int \frac{D(\tilde{t})}{\varphi} d\tilde{t}}} \right) \quad (5.3)$$

mit der Fehlerfunktion erf . Mit den Abkürzungen $\tilde{u} := \frac{u}{\varphi}$, $\bar{u} := \int_0^t \tilde{u}(\tilde{t}) d\tilde{t}$, $\tilde{D} := \frac{D}{\varphi}$ und $\bar{D} := \int \tilde{D}(\tilde{t}) d\tilde{t}$ ist dann

$$\begin{aligned} \frac{\partial}{\partial t} \tilde{\omega} &= \frac{2}{\sqrt{\pi}} \exp\left(-\frac{(z - z_0 - \bar{u})^2}{4\bar{D}}\right) \left(-\frac{\tilde{u}}{2\sqrt{\bar{D}}} - \frac{z - z_0 - \bar{u}}{4\bar{D}^{\frac{3}{2}}}\tilde{D}\right) \\ \frac{\partial}{\partial z} \tilde{\omega} &= \frac{2}{\sqrt{\pi}} \exp\left(-\frac{(z - z_0 - \bar{u})^2}{4\bar{D}}\right) \frac{1}{2\sqrt{\bar{D}}} \\ \frac{\partial^2}{\partial z^2} \tilde{\omega} &= \frac{2}{\sqrt{\pi}} \exp\left(-\frac{(z - z_0 - \bar{u})^2}{4\bar{D}}\right) (-1) \frac{z - z_0 - \bar{u}}{4\bar{D}^{\frac{3}{2}}} \end{aligned}$$

und somit

$$\begin{aligned} &\frac{\partial}{\partial t} \tilde{\omega} + \tilde{u} \frac{\partial}{\partial z} \tilde{\omega} - \tilde{D} \frac{\partial^2}{\partial z^2} \tilde{\omega} \\ &= \frac{2}{\sqrt{\pi}} \exp(\dots) \left(-\frac{\tilde{u}}{2\sqrt{\bar{D}}} - \frac{z - z_0 - \bar{u}}{4\bar{D}^{\frac{3}{2}}}\tilde{D} + \frac{\tilde{u}}{2\sqrt{\bar{D}}} + \frac{z - z_0 - \bar{u}}{4\bar{D}^{\frac{3}{2}}}\tilde{D}\right) \\ &= 0. \end{aligned}$$

Also wird (5.2) von $\tilde{\omega}$ gelöst und es gilt

$$\tilde{\omega}(-\infty, \cdot) = \operatorname{erf}(-\infty) = -1, \quad \tilde{\omega}(\infty, \cdot) = \operatorname{erf}(\infty) = 1.$$

Um auch die Rand- und Anfangsbedingungen zu erfüllen, sei nun

$$\omega(z, t) := \frac{1}{2} - \frac{1}{2}\tilde{\omega}(z, t). \quad (5.4)$$

Mit Hilfe von $\tilde{\omega}$ kann die Gleichung auch auf $\Omega = \{z \in \mathbb{R} | z > z_0\}$ mit den Randbedingungen

$$\omega(z_0, \cdot) = 1, \quad \omega(\infty, \cdot) = 0$$

und der Anfangsbedingung

$$\omega(\cdot, 0) = 0$$

gelöst werden:

$$\omega(z, t) := 1 - \tilde{\omega}(z, t) \tag{5.5}$$

Die Randbedingung an z_0 wird allerdings nur für $u = 0$ eingehalten.

Für konstante u und D findet man auch für $u \neq 0$ eine analytische Lösung in [13]:

$$\omega(z, t) = \frac{1}{2} \operatorname{erfc} \left(\frac{\varphi x - ut}{2\sqrt{\varphi Dt}} \right) + \frac{1}{2} \exp \left(\frac{ux}{D} \right) \operatorname{erfc} \left(\frac{\varphi x + ut}{2\sqrt{\varphi Dt}} \right) \tag{5.6}$$

mit der komplementären Fehlerfunction $\operatorname{erfc} = 1 - \operatorname{erf}$. Die Lösung stammt von [16] und [21]. Letztere vergleichen auch die exakte Lösung mit der Approximation nur durch den ersten Term. Dieser entspricht der Lösung (5.5). Der Fehler ist hier für $ut = x$ am größten, dies liegt aber gerade in dem Bereich der uns später interessieren wird. Abbildung 5.5 zeigt beide Funktionen mit Parametern D , u und t , die in der Größenordnung mit den später betrachteten Werten übereinstimmen. Da es einen sichtbaren Unterschied gibt, wird im Folgenden für die Ermittlung einer effektiven Diffusionskonstante die exakte Lösung verwendet.

Eine weitere kleine Differenz bleibt jedoch: die Anfangsbedingung in den Simulationen ist nicht gleich 0 im gesamten Gebiet, sondern fällt am oberen Rand von 1 auf 0 ab. Bei einigen Rechnungen gab es auch eine Schicht, in der zum Anfangszeitpunkt $t = 0$ der Massenbruch ω konstant 1 ist bevor er abfällt. Die tatsächliche Lösung sollte daher anschaulich zwischen obiger Lösung und der Lösung für $\Omega = \mathbb{R}$ mit $\omega(-\infty) = 1$ und $\omega(\infty) = 0$ liegen. Diese Unterschiede werden im Folgenden allerdings vernachlässigt.

5.3.2 Bestimmung einer effektiven Diffusionskonstante

Aus den zwei- und dreidimensionalen Ergebnissen der numerischen Simulation wurde durch Mittelung über die x - (und y -)Koordinate eine eindimensionale Projektion berechnet:

$$\omega(z, t) := \frac{1}{A} \iint \omega(x, y, z, t) \, dx \, dy$$

mit der Querschnittsfläche $A = |x_{max} - x_{min}| |y_{max} - y_{min}|$.

Im Dreidimensionalen wurde zur Visualisierung zusätzlich eine zweidimensionale Projektion durch Integration über z berechnet. Diese entspricht einer ‘‘Draufsicht’’ auf das Gebiet und ermöglicht Anzahl und Verteilung der Finger zu bestimmen.

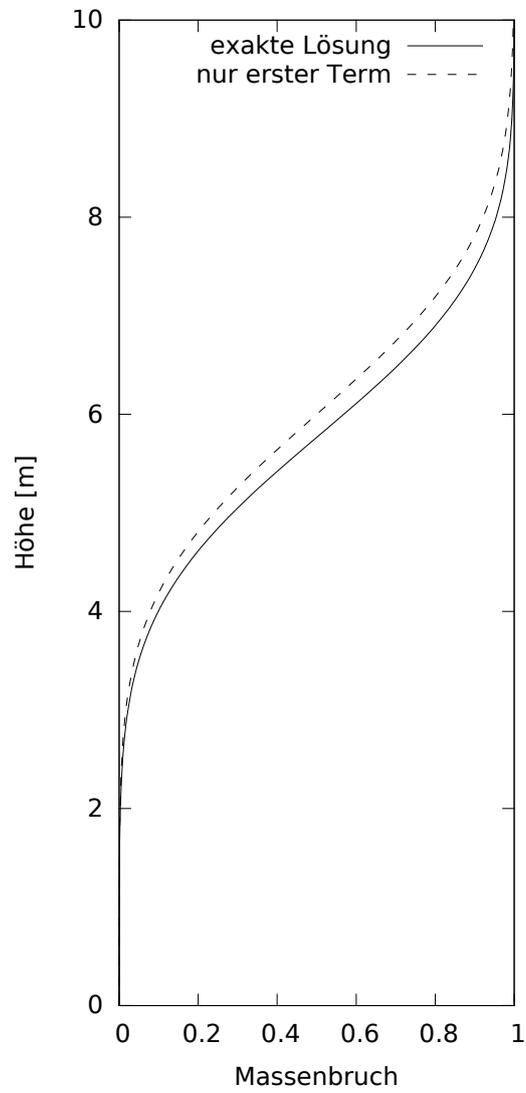


Abbildung 5.5: Vergleich der exakten Lösung aus Gleichung (5.6) mit Approximation durch den ersten Term. Es ist $D = 5 \times 10^{-5} \text{ m}$, $u = 2 \times 10^{-4} \text{ m s}^{-1}$ und $t = 2 \times 10^4 \text{ s}$.

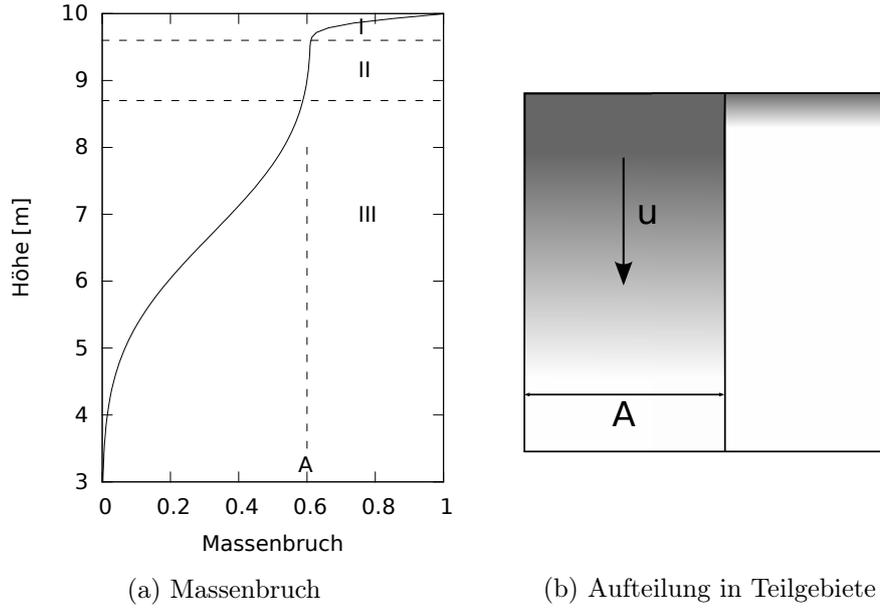


Abbildung 5.6: Aufteilung in zwei virtuelle Teilgebiete. In einem Bereich findet dichtegetriebene Strömung nach unten statt, auf dem Rest des Gebiets nur molekulare Diffusion.

In der eindimensionalen Projektion ist der Massenbruch am oberen Rand des Gebiets bei $\omega = 1$, fällt von dort rasch auf $\omega \approx 0.55$ ab und schließlich langsam auf $\omega = 0$. Dies kann mit der Aufteilung in zwei virtuelle Teilgebiete (vgl. Abbildung 5.6) wie folgt verstanden werden:

Nur auf einem Teil $A \approx 0.55$ der Querschnittsfläche findet dichtegetriebene Konvektion und somit Fingering statt. Auf dem restlichen Teil $1 - A$ findet nur molekulare Diffusion statt.

Diese Aufteilung entspricht nicht ganz der realen Situation, da im Modellproblem das verdrängte Wasser durch den oberen Rand entweichen muss. Für eine einfache Beschreibung soll sie hier jedoch ausreichen.

Es wird versucht den Konvektions-Diffusions-Bereich (II) durch (5.6) aus dem letzten Abschnitt zu beschreiben:

$$\omega_{II}(z, t) = A \cdot \left(\frac{1}{2} \operatorname{erfc} \left(\frac{\varphi(z - z_0) - ut}{2\sqrt{\varphi Dt}} \right) + \frac{1}{2} \exp \left(\frac{u(z - z_0)}{D} \right) \operatorname{erfc} \left(\frac{\varphi(z - z_0) + ut}{2\sqrt{\varphi Dt}} \right) \right) \quad (5.7)$$

Die Parameter A , u und D wurden für jeden Zeitschritt unabhängig durch Fits an die Simulationsergebnisse mit Hilfe von gnuplot[24] bestimmt. Die erhaltenen Werte sind in Abbildung 5.11 (effektive Diffusionskonstante D), Abbildung 5.12 (makroskopische Phasengeschwindigkeit u) und Abbildung 5.13 (Gebietsanteil A) für verschiedene Wahlen an freien Parametern aufgetragen.

Die bestimmten Parameter sind zeitabhängig. So nimmt die Diffusionskonstante mit der Zeit zu, worauf in Abschnitt 5.3.3 kurz eingegangen wird. Auch die Phasengeschwindigkeit u nimmt zu, allerdings ist die Änderung hier geringer. Der Gebietsanteil A nähert sich von unten an 0.55 an.

Die hier so ermittelten Werte sind allerdings nicht ganz korrekt: die analytische Lösung (5.6) geht von *konstanten* Parametern aus. Vergleicht man den ersten Summanden hieraus mit (5.5), so entspricht der Term Dt dem Ausdruck $\int_0^t D(\tilde{t}) d\tilde{t}$ und entsprechend ut dem Ausdruck $\int_0^t u(\tilde{t}) d\tilde{t}$. Das bedeutet, dass für wachsendes D der Parameter unterschätzt wird, also ein zeitabhängiges D größer sein müsste im Vergleich zu dem hier ermittelten Wert. Entsprechendes gilt auch für u .

In [20] wurde in Experimenten für $\varphi = 0.33$ und $K \approx 5.25 \times 10^{-8} \text{ m}^2 \text{ s}^{-1}$ eine deutliche niedrigere Diffusionskonstante erhalten. Dort wurde allerdings auch der Lösungsprozess an der Grenzschicht zwischen (gasförmiger) Kohlenstoffdioxidphase und Wasserphase betrachtet, nicht jedoch die Verteilung der CO_2 -haltigen Wasserkomponente. In dieser Arbeit ist der Lösungsprozess beliebig schnell, da nur die Wasserphase betrachtet und am oberen Rand des Gebietes als Randbedingung $\omega = 1$ gefordert wurde. Es ist daher nicht überraschend, eine größere Diffusionskonstante zu erhalten.

5.3.3 Zeitliche Änderung der effektiven Diffusionskonstanten

Die im vorigen Abschnitt ermittelte und in Abbildung 5.11 dargestellte effektive Diffusionskonstante D des vereinfachten eindimensionalen Problems variiert mit der Zeit. Dies liegt vermutlich an der sich ändernden Grenzfläche zwischen CO_2 -haltiger und CO_2 -freier Komponente: zu $t = 0$ ist diese gerade ein Querschnitt durch das Gebiet Ω . Bildet die Kohlenstoffdioxid-haltige Komponente jedoch Finger, die in den Kohlenstoffdioxid-freien Bereich hineinragen, so nimmt die Größe der Grenzfläche und somit des Gebietes, auf dem sich CO_2 -haltige und -freie Komponente miteinander vermischen, zu.

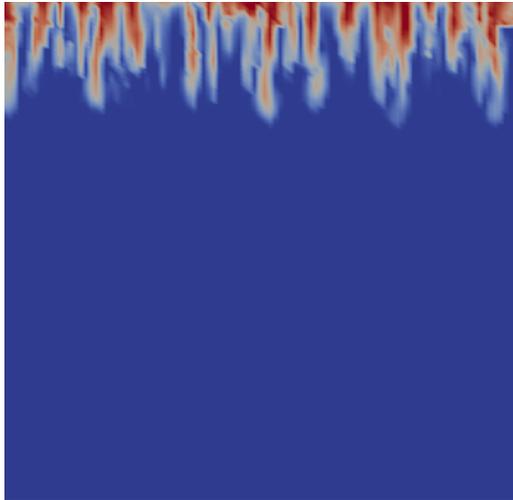
Im Rahmen dieser Arbeit wurde kein physikalisches Modell hierfür erarbeitet. Eine einfache Annahme wäre $D \propto |\Gamma|$ mit Γ der Grenzfläche zwischen beiden Komponenten oder einer Isofläche des Massenbruchs ω . Für die zeitliche Änderung $\frac{d}{dt}|\Gamma|$ wurden zwei einfache Ansätze ausprobiert: $\frac{d}{dt}|\Gamma| = \text{const}$, somit $D_1 = D_{1,1}t + D_{1,0}$ mit zu bestimmenden Parametern $D_{1,1}$ und $D_{1,0}$ und $\frac{d}{dt}|\Gamma| = \Gamma_1 t + \Gamma_0$, also $D_2 = D_{2,2}t^2 + D_{2,1}t + D_{2,0}$ mit Parametern $D_{2,2}$, $D_{2,1}$ und $D_{2,0}$.

Für die Simulation von oben ergibt sich durch einen Fit

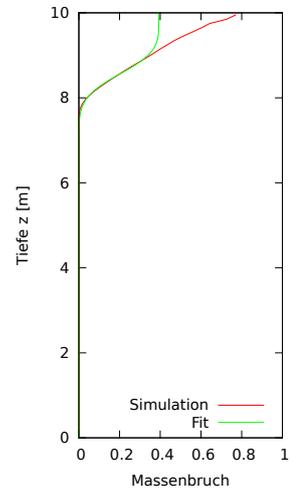
$$D_1 = 3.56 \times 10^{-10} \text{ m}^2 \text{ s}^{-2} t - 1.12 \times 10^{-5} \text{ m}^2 \text{ s}^{-1} \quad (5.8)$$

$$D_2 = 6.98 \times 10^{-15} \text{ m}^2 \text{ s}^{-3} t^2 - 2.42 \times 10^{-10} \text{ m}^2 \text{ s}^{-2} t + 1.37 \times 10^{-6} \text{ m}^2 \text{ s}^{-1}. \quad (5.9)$$

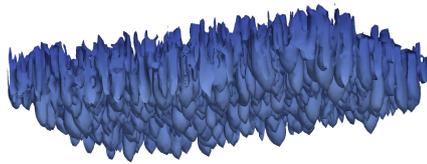
Beide Funktionen sind in Abbildung 5.14 dargestellt. Man beachte, dass für $t > 55\,000 \text{ s}$ die Randbedingung am unteren Rand einen Einfluss auf die Lösung hat.



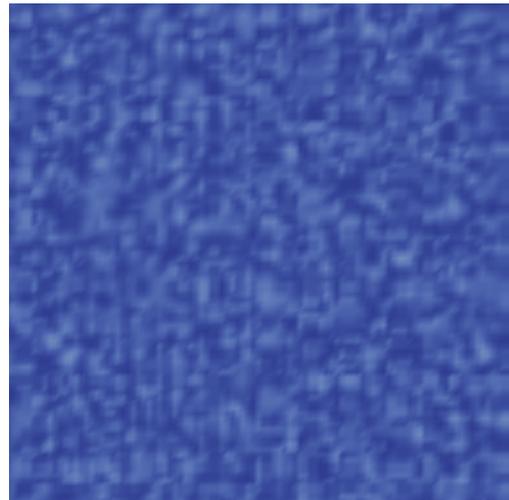
(a) Schnitt bei $y = 5$ m



(b) Fit mit freien Parametern A, D, u

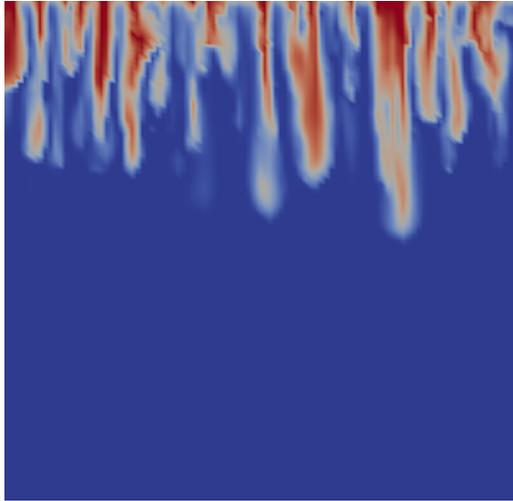


(c) Konturplot für $\omega = 0.2$

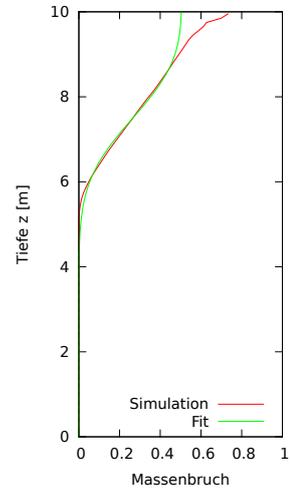


(d) Massenbruch ω gemittelt über z

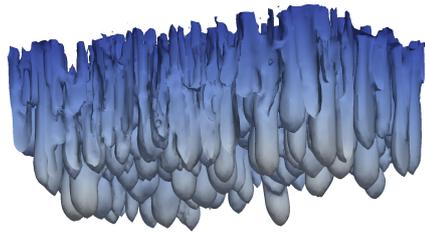
Abbildung 5.7: Ergebnisse der Simulation in 3D zu $t = 30\,000$ s. Auf einem Schnitt durch das Gebiet kann die Bildung von Fingern beobachtet werden (oben links).



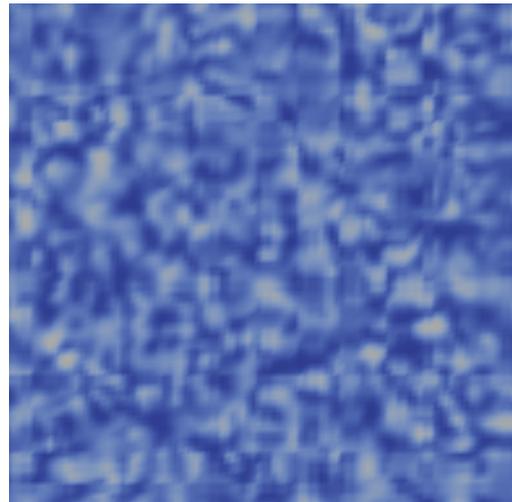
(a) Schnitt bei $y = 5$ m



(b) Fit mit freien Parametern A, D, u

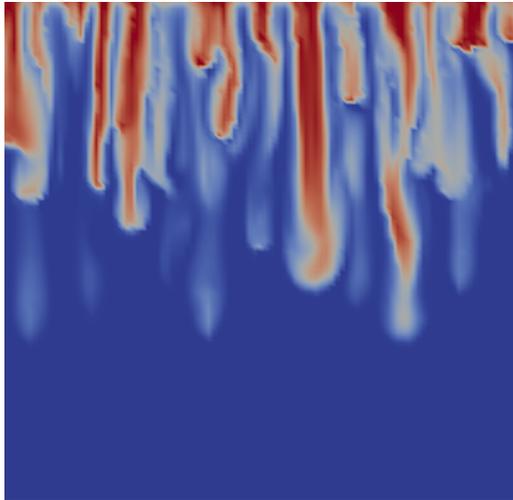


(c) Konturplot für $\omega = 0.2$

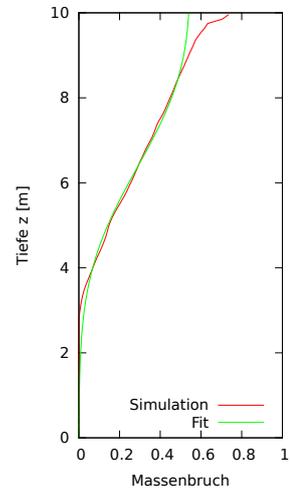


(d) Massenbruch ω gemittelt über z

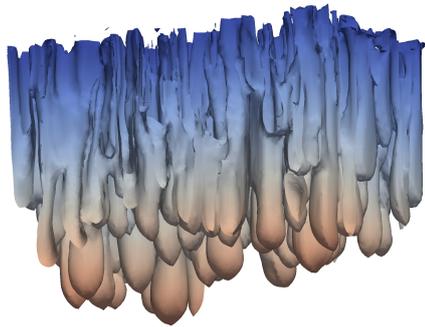
Abbildung 5.8: Ergebnisse der Simulation in 3D zu $t = 40\,000$ s. Die Finger dringen weiter nach unten vor. Der (gemittelte) Verteilung des Massenbruchs ω entlang z lässt sich gut durch das eindimensionale Modellproblem beschreiben (rechts oben).



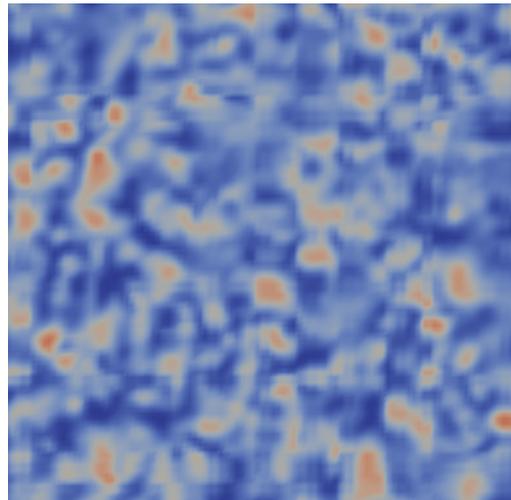
(a) Schnitt bei $y = 5$ m



(b) Fit mit freien Parametern A, D, u

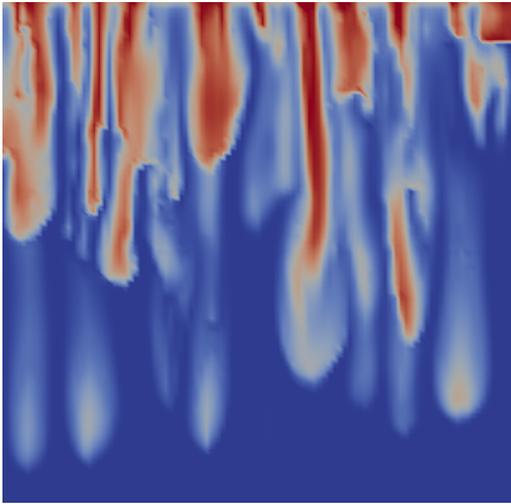


(c) Konturplot für $\omega = 0.2$

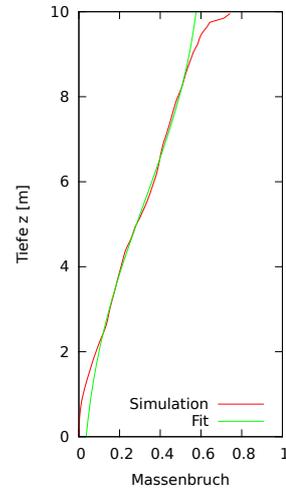


(d) Massenbruch ω gemittelt über z

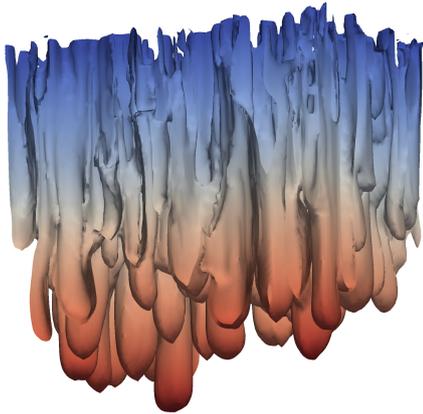
Abbildung 5.9: Ergebnisse der Simulation in 3D zu $t = 50\,000$ s. Die Verteilung der Finger auf der xy -Ebene lässt keine Struktur erkennen (rechts unten).



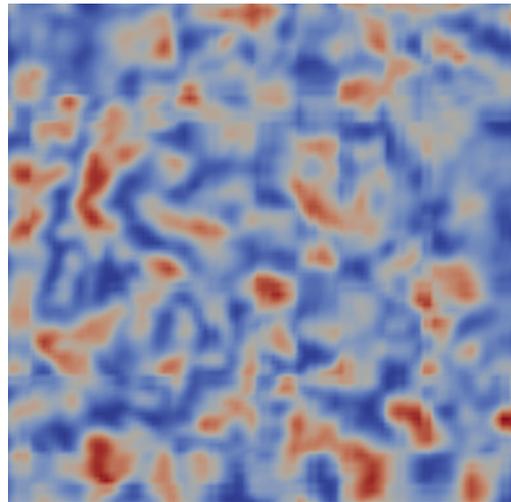
(a) Schnitt bei $y = 5$ m



(b) Fit mit freien Parametern A, D, u



(c) Konturplot für $\omega = 0.2$



(d) Massenbruch ω gemittelt über z

Abbildung 5.10: Ergebnisse der Simulation in 3D zu $t = 60\,000$ s. Finger können sich entlang x - und y -Richtung bewegen. Auf einem Schnitt durch eine Ebene haben diese dann keine durchgehende Verbindung nach oben (links oben). Dies kann in zwei Raumdimensionen nicht passieren und ist somit einer der Unterschiede zwischen zwei- und dreidimensionaler Simulation. Die Abweichungen im Fit der 1D-Lösung werden größer, da der untere Rand nicht mehr zu vernachlässigen ist (rechts oben).

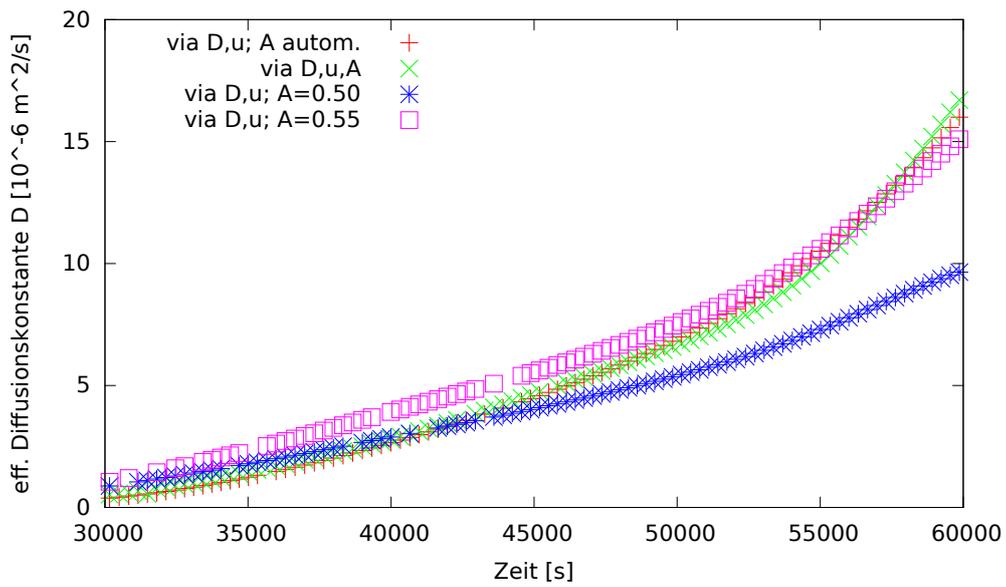


Abbildung 5.11: Effektive Diffusionskonstante D aus dem Fit an die Ergebnisse der 3D-Simulation für vier verschiedene Strategien: D , v freie Parameter und $A = A(z_0)$ für ein festes z_0 ; D , v und A freie Parameter; D , v freie Parameter und $A = 0.50$ (0.55) konstant. Für große t beginnt sich das CO_2 -haltige Wasser am Boden zu sammeln, was zu einer zu hohen effektiven Diffusionskonstante führt.

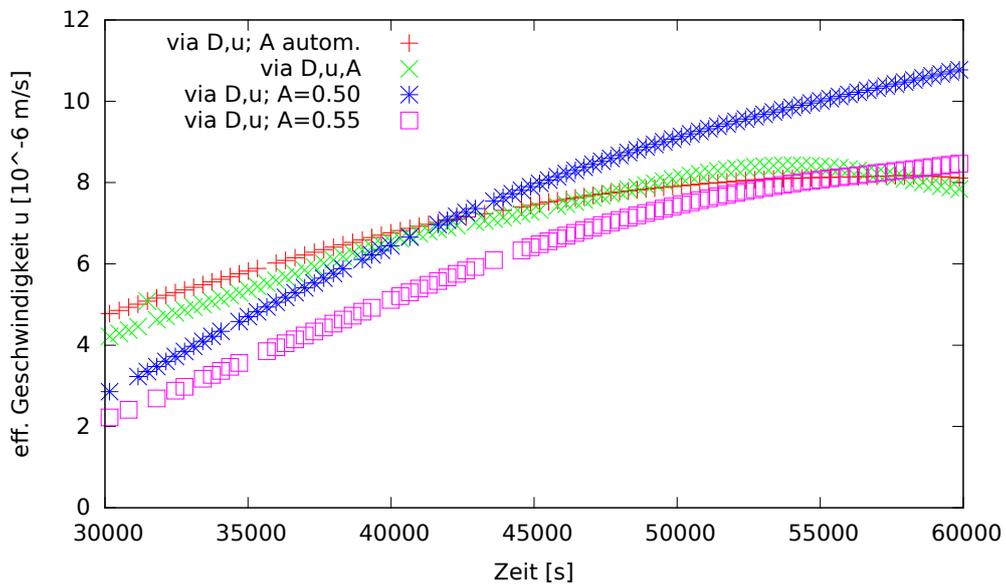


Abbildung 5.12: Effektive Geschwindigkeit u aus dem Fit an die Ergebnisse der 3D-Simulation

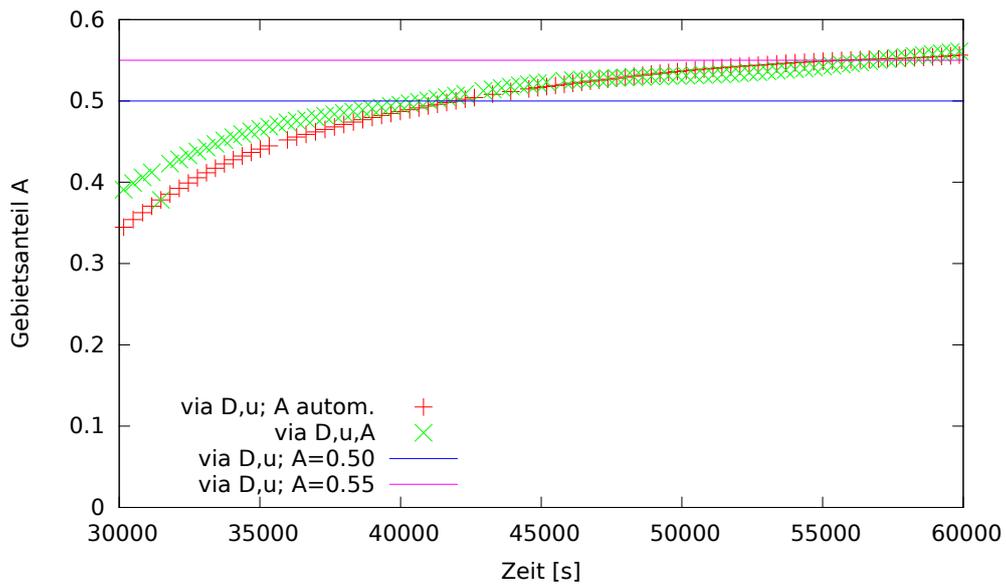


Abbildung 5.13: Gebietsanteil A aus dem Fit an die Ergebnisse der 3D-Simulation

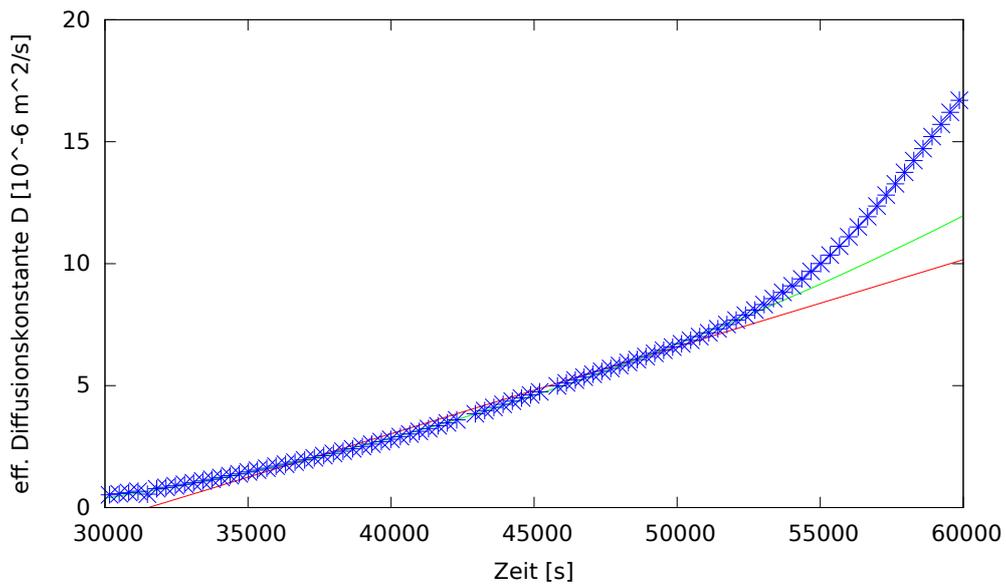


Abbildung 5.14: Fit einer linearen und quadratischen Funktion an die effektive Diffusionskonstante D aus Abschnitt 5.3.2. Für $t > 55\,000\text{ s}$ beeinflusst die Randbedingung am unteren Rand die Ergebnisse der Simulation. Abweichungen sind dort daher nicht verwunderlich. Für kleinere Zeiten beschreibt die quadratische Funktion die ermittelte Diffusionskonstante sehr gut, die Abweichungen der linearen Funktion sind merklich größer.

Für kleinere t scheint eine quadratische Funktion die effektive Diffusionskonstante D recht gut zu beschreiben. Die lineare Funktion weicht merklich stärker von den Ergebnissen der Simulation ab. Für große t kann die Diffusionskonstante D jedoch nicht beliebig anwachsen. Es sollte eine obere Schranke erreicht werden, allerdings kann ohne ein (physikalisches) Modell nicht viel hierzu gesagt werden.

5.4 Vergleich 2D und 3D

Bei den Simulationen wurde unterschiedliches Verhalten abhängig von der Raumdimension beobachtet. Hierzu wurde die 1D-Projektion qualitativ miteinander verglichen.

In der 3D-Simulation fällt der Massenbruch ω monoton mit z ab, ist glatt und entspricht sehr gut der erwarteten Lösung der 1D-Konvektions-Diffusions-Gleichung. In zwei Dimensionen ist der Massenbruch hingegen nicht monoton und es sind deutliche Stufen zu erkennen, an denen der Massenbruch springt. Betrachtet man zusätzlich die Geschwindigkeitsfelder, so befinden sich in Höhe der Stufen Wirbel, welche die dichtegetriebene Strömung stören, etwa in der Höhe $z \approx 7$ m in Abbildung 5.15. Diese sind in 3D nicht zu beobachten. Daher wird vermutet, dass dieser Effekt abhängig von der unterschiedlichen Geometrie in zwei bzw. drei Dimensionen ist: In drei Dimensionen ist es aufgrund des zusätzlichen Freiheitsgrades auf- und absteigenden Wassermassen einfacher sich gegenseitig auszuweichen. In zwei Dimensionen behindern sich diese eher.

Ein weiterer Beleg für diese Vermutung ist das *tip splitting*: in zwei Dimensionen spalten sich Finger an der Spitze auf wenn sie auf aufsteigende Wassermassen treffen. Auch dieser Effekt konnte in drei Dimensionen nicht beobachtet werden.

Ist man genauer an der Verteilung und Prozessen wie *tip splitting* interessiert, sollte die Simulation also auf jeden Fall in 3D durchgeführt werden oder zumindest mit 3D-Ergebnissen verglichen werden.

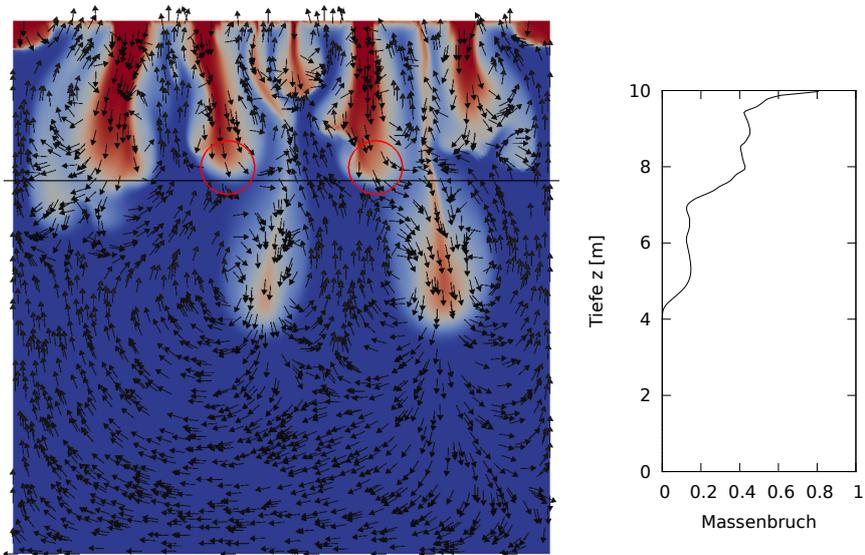


Abbildung 5.15: Massenbruch und Richtung des Geschwindigkeitsfeld in 2D. Man beachte das Aufeinandertreffen zweier Strömungen in der Mitte in der Höhe $z \approx 7$ m und den Sprung in der eindimensionalen Mittelung des Massenbruchs in der gleichen Höhe.

6 Fazit

Im Rahmen der Diplomarbeit wurde unter Verwendung des DUNE-Frameworks ein parallelisiertes Simulationsprogramm für dichtegetriebene Strömungen entwickelt.

Für mehrere einfache Modellprobleme konnte das Programm plausible Ergebnisse liefern. Auch Änderungen an Parametern verhalten sich wie erwartet, etwa die Änderung der Permeabilität, die in Abschnitt 5.2 betrachtet wurde.

Durch Vergleich der Ergebnisse von Simulationen in zwei und drei Dimensionen konnte in Abschnitt 5.4 gezeigt werden, dass die dichtegetriebene Strömung sich abhängig von der Raumdimension signifikant unterschiedlich verhalten kann: so treten einige Effekte wie etwa tip splitting nur bei Betrachtung eines 2D-Problems auf, nicht jedoch in 3D. Die Ergebnisse der Simulation, wie etwa die Verteilung der CO₂-haltigen Komponente im Gebiet Ω , wurden ebenfalls merklich durch diese Effekte beeinflusst. Daher sollten Aussagen auch immer an einem dreidimensionalen Modell überprüft werden.

Weiterhin konnte in Abschnitt 5.3 für die Simulationen im 3D-Fall ein Modell entwickelt werden, dass die Ergebnisse mit Hilfe einer effektiven Diffusionskonstante aus einem vereinfachten eindimensionalen Problem gut beschreibt. Es wurde beobachtet, dass die Parameter mit der Zeit variieren. Für dieses Phänomen konnte eine physikalische Ursache angegeben werden, die allerdings noch nicht in ein Modell integriert wurde. Daher wurde nur versucht, die zeitliche Entwicklung der effektiven Diffusionskonstanten D durch eine lineare oder quadratische Funktion zu beschreiben. Für eine eventuelle Anwendung müsste diese Abhängigkeit genauer betrachtet werden und ein Modell zur Beschreibung entwickelt werden. Auch die Abhängigkeit von Geometrie und Parametern des Problems wurde noch nicht weiter systematisch untersucht, es wurden nur einige qualitative Vergleiche durchgeführt.

Ein ausgiebiger Vergleich mit experimentellen Daten oder anderen theoretischen Arbeiten war auf Grund mangelnder Vergleichsliteratur leider nicht möglich. Hier wurden leider keine Arbeiten gefunden, in denen die räumliche Verteilung des gelösten Kohlenstoffdioxid genauer betrachtet wurde.

Literatur

- [1] R. Alexander. “Diagonally Implicit Runge–Kutta Methods for Stiff O.D.E.’s”. In: *SIAM Journal on Numerical Analysis* 14.6 (1977), pp. 1006–1021. DOI: 10.1137/0714068. URL: <http://epubs.siam.org/doi/abs/10.1137/0714068>.
- [2] Peter Bastian. “Benchmark 3D: Symmetric Weighted Interior Penalty Discontinuous Galerkin Scheme”. In: *Finite Volumes for Complex Applications VI Problems and Perspectives*. Ed. by Jaroslav Fořt et al. Vol. 4. Springer Proceedings in Mathematics. Springer Berlin Heidelberg, 2011, pp. 949–959. ISBN: 978-3-642-20671-9. URL: http://dx.doi.org/10.1007/978-3-642-20671-9_92.
- [3] Peter Bastian. “Lecture Notes on Scientific Computing with Partial Differential Equations”. 2012. URL: http://conan.iwr.uni-heidelberg.de/teaching/numerik2_ss2012/num2.pdf.
- [4] Peter Bastian. “Numerical Computation of Multiphase Flows in Porous Media”. Habilitationsschrift. Technische Fakultät der Christian-Albrechts-Universität Kiel, 1999. URL: http://conan.iwr.uni-heidelberg.de/people/peter/pdf/Bastian_habilitationsthesis.pdf.
- [5] Peter Bastian, Felix Heimann, and Sven Marnach. “Generic implementation of finite element methods in the Distributed and Unified Numerics Environment (DUNE)”. In: *Kybernetika* 46.2 (2010), pp. 294–315. URL: <http://dml.cz/dmlcz/140745>.
- [6] Peter Bastian et al. “Towards a unified framework for scientific computing”. In: *Domain Decomposition Methods in Science and Engineering, volume 40 of LNC-SE*. Springer-Verlag, 2005, pp. 167–174. URL: <http://www.dune-project.org/publications/TM105-frame.pdf>.
- [7] M. Batzle and Z. Wang. “Seismic properties of pore fluids”. In: *Geophysics* 57.11 (1992), pp. 1396–1408. DOI: 10.1190/1.1443207. URL: http://riogrande.nmt.edu/outside/courses/hyd571/supplemental/batzle_wang_geophysics_1992.pdf.
- [8] Markus Blatt. “A Parallel Algebraic Multigrid Method for Elliptic Problems with Highly Discontinuous Coefficients”. PhD thesis. Naturwissenschaftlich-Mathematische Gesamtfakultät der Ruprecht-Karls-Universität Heidelberg, 2010. URL: <http://www.ub.uni-heidelberg.de/archiv/10856>.

- [9] Markus Blatt and Peter Bastian. “The Iterative Solver Template Library”. In: *Applied Parallel Computing. State of the Art in Scientific Computing*. Ed. by Bo Kågström et al. Vol. 4699. Lecture Notes in Computer Science. Springer Berlin Heidelberg, 2007, pp. 666–675. ISBN: 978-3-540-75754-2. DOI: 10.1007/978-3-540-75755-9_82. URL: http://www.dune-project.org/publications/istl_para06.pdf.
- [10] *dune-pdelab Howto*. URL: <http://www.dune-project.org/pdelab/pdelab-howto-1.1.0.pdf>.
- [11] Alexandre Ern, Annette F. Stephansen, and Paolo Zunino. “A discontinuous Galerkin method with weighted averages for advection–diffusion equations with locally small and anisotropic diffusivity”. In: *IMA Journal of Numerical Analysis* 29.2 (2009), pp. 235–256. DOI: 10.1093/imanum/drm050. URL: <http://imajna.oxfordjournals.org/content/29/2/235.abstract>.
- [12] Julio E. Garcia. *Density of aqueous solutions of CO₂*. 2001. URL: <http://escholarship.org/uc/item/6dn022hb>.
- [13] M. Th. van Genuchten and W. J. Alves. “Analytical Solutions of the One-Dimensional Convective-Dispersive Solute Transport Equation”. In: *Technical Bulletin No. 1661* (1982).
- [14] Klaus Johannsen. “Numerische Aspekte dichtegetriebener Strömungen in porösen Medien”. Habilitationsschrift. Fakultät für Mathematik und Informatik der Ruprecht-Karls-Universität Heidelberg, 2004.
- [15] J. T. Kiehl and Kevin E. Trenberth. “Earth’s Annual Global Mean Energy Budget”. In: *Bulletin of the American Meteorological Society* (1997). DOI: 10.1175/1520-0477(1997)078<0197:EAGMEB>2.0.CO;2.
- [16] Leon Lapidus and Neal R. Amundson. “Mathematics of Adsorption in Beds. VI. The Effect of Longitudinal Diffusion in Ion Exchange and Chromatographic Columns”. In: *The Journal of Physical Chemistry* 56.8 (1952), pp. 984–988. DOI: 10.1021/j150500a014. URL: <http://pubs.acs.org/doi/abs/10.1021/j150500a014>.
- [17] Bert Metz et al., eds. *Carbon Dioxide Capture and Storage*. Intergovernmental Panel on Climate Change special reports. Cambridge University Press, New York, 2005. URL: http://www.ipcc.ch/publications_and_data/publications_and_data_reports.shtml.
- [18] R. J. Millington. “Gas Diffusion in Porous Media”. In: *Science* 130.3367 (1959), pp. 100–102. DOI: 10.1126/science.130.3367.100-a. eprint: <http://www.sciencemag.org/content/130/3367/100.2.full.pdf>. URL: <http://www.sciencemag.org/content/130/3367/100.2.abstract>.
- [19] R. J. Millington and J. P. Quirk. “Permeability of porous solids”. In: *Transactions of the Faraday Society* 57 (1961), pp. 1200–1207. DOI: 10.1039/TF9615701200.

- [20] Rasoul Nazari Moghaddam et al. “Quantification of Density-Driven Natural Convection for Dissolution Mechanism in CO2 Sequestration”. In: *Transport in Porous Media* 92.2 (2012), pp. 439–456. DOI: 10.1007/s11242-011-9911-x. URL: <http://dx.doi.org/10.1007/s11242-011-9911-x>.
- [21] Akio Ogata and R. B. Banks. “A Solution of the Differential Equation of Longitudinal Dispersion in Porous Media”. In: *U.S. Geological Survey Professional Paper 411-A* (1961). URL: <http://pubs.er.usgs.gov/publication/pp411A>.
- [22] Kurt Roth. “Soil Physics. Lecture Notes (v1.2)”. 2007. URL: http://www.iup.uni-heidelberg.de/institut/forschung/groups/ts/soil_physics/research/students/lecture_notes05.
- [23] Clifford I. Voss and William R. Souza. “Variable Density Flow and Solute Transport Simulation of Regional Aquifers Containing a Narrow Freshwater-Saltwater Transition Zone”. In: *Water Resources Research* 23.10 (1987).
- [24] Thomas Williams, Colin Kelley, et al. *gnuplot (version 4.6)*. URL: <http://www.gnuplot.info/>.

Erklärung

Hiermit versichere ich, dass ich meine Arbeit selbständig unter Anleitung verfasst habe, dass ich keine anderen als die angegebenen Quellen und Hilfsmittel benutzt habe, und dass ich alle Stellen, die dem Wortlaut oder dem Sinne nach anderen Werken entlehnt sind, durch die Angabe der Quellen als Entlehnungen kenntlich gemacht habe.