

Nicht-kartesische Gitter für TOUGH2

Vorhaben 3609R03210
Forschung und Entwicklung
zum Nachweis der Langzeit-
sicherheit von tiefen geolo-
gischen Endlagern

Nicht-kartesische Gitter für TOUGH2

Vorhaben 3609R03210
Forschung und Entwicklung
zum Nachweis der Langzeit-
sicherheit von tiefen geolo-
gischen Endlagern

– *revidierte Fassung* –

Martin Navarro
Holger Seher

Datum: April 2011

Auftrags-Nr.: 855800

Anmerkung:

Das diesem Bericht zu Grunde lie-
gende FE-Vorhaben 3609R03210
wurde im Auftrag des Bundesminis-
teriums für Umwelt, Naturschutz
und Reaktorsicherheit durchgeführt.
Die Verantwortung für den Inhalt
dieser Veröffentlichung liegt beim
Auftragnehmer.

Der Bericht gibt die Auffassung und
Meinung des Auftragnehmers wie-
der und muss nicht mit der Meinung
des Auftraggebers übereinstimmen.

Deskriptoren:

TOUGH2, Gitter

Kurzfassung

Der Code TOUGH2 ist ein am Lawrence Berkeley Laboratory, USA, entwickelter Code zur Simulation des mehrdimensionalen gekoppelten Fluid-, Gas-, Nuklid- und Wärmetransports. Die Beschränkung des TOUGH2-internen Gittergenerators auf kartesische Blockgitter und radialsymmetrische Gitter stellt eine deutliche Einschränkung dar, wenn Körper mit komplexer Geometrie abgebildet oder lokale Gitterverfeinerungen realisiert werden sollen. In der vorliegenden Arbeit wird anhand ausgewählter Gitterstrukturen untersucht, welche Fehler bei der Strömungsberechnung bei Verwendung nicht-kartesischer Gitter entstehen. Es wird zudem die Wirkung verschiedener Korrekturverfahren beschrieben. Im Rahmen der Arbeit wurden nicht-kartesische Gitterstrukturen entwickelt, mit deren Hilfe sich Blockgitter lokal verfeinern lassen. Für diese wird gezeigt, auf welche Weise sich eine vollständige Fehlerkorrektur erreichen lässt. Der Nachweis der Fehlerkorrektur wird durch analytische und numerische Lösung der Massenbilanz- und Flussgleichungen erbracht. Zur Generierung nicht-kartesischer Gitter für TOUGH2 wurde ein Konverter entwickelt, der aus FLAC3D-Gittern TOUGH2-Gitter erstellt und ggf. Gitterkorrekturen durchführt.

Abstract

TOUGH2 is a code developed at the Lawrence Berkeley Laboratory (USA) for the simulation of the multidimensional coupled fluid, gas, nuclide and heat transport. The limitation of the TOUGH2-internal grid generator to Cartesian grid blocks and radially symmetric grids is a clear limitation when it comes to modelling bodies with complex geometries or realising local grid refinements. By looking at selected grid structures, the present study investigates what errors occur in flow calculations if non-Cartesian grids are used. It also describes the effects of different correction procedures. Non-Cartesian grid structures were developed as part of this study with the help of which it is possible to locally refine grid blocks. It is shown for these structures in which way full error correction is achievable. The proof of error correction is furnished by analytic and numeric solutions of the mass balance and flow equations. For the generation of non-Cartesian grids for TOUGH2, a converter was developed which converts FLAC3D grids into TOUGH2 grids and performs grid corrections if necessary.

Inhaltsverzeichnis

1	Einleitung und Zielsetzung	1
2	Gittertests und Korrekturverfahren	3
2.1	Methodik.....	3
2.1.1	Gittertests	3
2.1.2	Gittermodifikationen.....	4
2.1.3	Referenz-Darcy-Versuch	7
2.1.4	Berechnung des Flusses durch das Gitter	8
2.2	Diagonal geteiltes Element	9
2.3	Geschertes Blockgitter.....	12
2.4	Konsistent orthogonalisierte Verfeinerungselemente	15
2.4.1	Keilelement und Pyramidenelement.....	15
2.4.2	Konsistente Orthogonalisierung	17
2.4.3	Durchströmung des Keilelementes	18
2.4.4	Durchströmung des Pyramidenelementes	23
3	Numerische Analysen	27
3.1	Gitterkonvertierung	27
3.2	Modellbeschreibung.....	28
3.3	Codemodifikationen	29
3.4	Einphasenströmung.....	30
3.5	Zweiphasenströmung	31
4	Schlussfolgerungen	35
	Literaturverzeichnis.....	37
	Abbildungsverzeichnis.....	39

Tabellenverzeichnis..... 41

1 Einleitung und Zielsetzung

Der Code TOUGH2 (**T**ransport of **U**nsaturated **G**roundwater and **H**eat) ist ein am Lawrence Berkeley Laboratory, USA, entwickelter Code zur Simulation des mehrdimensionalen gekoppelten Fluid-, Gas-, Nuklid- und Wärmetransports /PRU 99/.

In TOUGH2 werden die Massenerhaltungssätze aller Phasenkomponenten gekoppelt und implizit gelöst. TOUGH2 arbeitet mit verschiedenen EOS (**e**quation-**o**f-**s**tate)-Modulen, in denen Komponenten eingeführt und in ihrem thermodynamischen Verhalten beschrieben werden. Mit den Modulen EOS3, EOS4, EOS7, EOS7R, EWASG kann der gekoppelte Transport verschiedener Fluide (Flüssigkeitsphase und Gasphase) auf der Grundlage eines verallgemeinerten Darcy'schen Gesetzes berechnet werden.

Der Code TOUGH2 beinhaltet den Gittergenerator MESHMAKER, der kartesische Blockgitter und radialsymmetrische Gitter erzeugen kann. Die Beschränkung auf diese Gittertypen stellt eine deutliche Einschränkung dar, wenn Körper mit komplexer Geometrie (z.B. Strecken oder Bohrlöcher in geschichtetem Material) abgebildet oder lokale Gitterverfeinerungen realisiert werden sollen. In kartesischen Gittern müssen lokale Gitterverfeinerungen durch das gesamte Modellgebiet fortgeführt werden, was eine unnötige Erhöhung der Elementanzahl und der Rechenzeit bedeutet. Insbesondere im Rahmen der durch die GRS im Vorhaben 3605R02548 durchgeführten Kopplung der Codes TOUGH2 und FLAC¹ wiegt eine Beschränkung auf kartesische Gitter schwer, da FLAC komplexere Gittergeometrien erlaubt und das gemeinsame Gitter sich durch deformative Prozesse verzerren kann.

In der vorliegenden Arbeit im Rahmen des Vorhabens 3609R03210 wurden daher folgende Ziele verfolgt:

¹ Der Code FLAC3D (**F**ast **L**agrangian **A**nalysis of **C**ontinua in **3** **D**imensions) ist ein kommerzieller, expliziter Finite-Differenzen-Code der Itasca Consulting Group zur Simulation mechanischer und auch hydromechanischer Prozesse. Er eignet sich insbesondere zur Behandlung geotechnischer Probleme. Elastische und plastische Deformationen können mit verschiedenen konstitutiven Gesetzen simuliert werden. Für komplexere Simulationen sind verschiedene Erweiterungsmodule erhältlich.

1. Untersuchung der Fehler, die bei der (stationären) Strömungsberechnung durch Verwendung nicht-kartesischer Gitter mit TOUGH2 entstehen
2. Untersuchung von Korrekturmöglichkeiten für konforme Gitter²
3. Entwicklung von Gitterelementen, mit denen ein konformes Gitter lokal verfeinert werden kann
4. Entwicklung eines Konverters, der aus FLAC3D-Gittern TOUGH2-Gitter erstellt und ggf. Gitterkorrekturen durchführt

² Bei konformen Gittern entsprechen die Berührungsflächen zwischen Elementen vollständigen Elementflächen.

2 Gittertests und Korrekturverfahren

Dieses Kapitel befasst sich mit möglichen Fehlern, die in TOUGH2 bei Verwendung nicht-kartesischer Gitter auftreten können, sowie mit der Auswirkung verschiedener Korrekturverfahren. Dies geschieht zunächst exemplarisch für ein diagonal geteiltes Element und für ein geschertes Blockgitter. Für diese Gitterstrukturen wird der Fehler durch analytische Lösungen der in TOUGH2 verwendeten Flussgleichung abgeleitet, und zwar sowohl für das Ursprungsgitter, als auch für verschiedene Modifikationen.

Im Anschluss werden zwei Gitterstrukturen untersucht, mit deren Hilfe Gitterverfeinerungen möglich werden. Für die beiden Verfeinerungselemente wird der Fehler des Ursprungsgitters sowie des korrigierten Gitters aufgezeigt. Der Fehler wird wieder durch analytische Lösung der in TOUGH2 verwendeten Flussgleichung berechnet.

2.1 Methodik

2.1.1 Gittertests

Die Vorgehensweise für die Gittertests und die betrachteten Verfahren zur Fehlerkorrektur werden in Abb. 2.1 (S. 6) am Beispiel eines diagonal geteilten Blocks illustriert. Abb. 2.1-A zeigt die zu testende Gitterstruktur aus zwei Keilelementen, die durch Teilung eines rechteckigen Blocks entsteht. TOUGH2 berechnet die Zustandsgrößen in den Zentren der Elemente. Will man das diagonal geteilte Element durchströmen lassen, so müssen zwei Randelemente definiert werden, in deren Zentren die Potenzial-Randbedingungen aufgebracht werden. Es lässt sich kein Test konstruieren, der ausschließlich die zu testende Gitterstruktur prüft. Weil immer auch Randelemente definiert werden müssen, sind die Testergebnisse grundsätzlich auch von den Eigenschaften dieser Randelemente abhängig.

Zur Berechnung des Fehlers bei der Strömungsberechnung wird zunächst der Fluss Q im Ursprungsgitter (Abb. 2.1-A) zwischen den Elementzentren 1 und 4 gemäß der in TOUGH2 implementierten Flussgleichung berechnet. In den Elementzentren herrschen die Drücke p_1 bis p_4 . Der Fluss wird mit dem Fluss Q_0 eines Referenz-Darcy-Versuchs ins Verhältnis gesetzt (Abb. 2.1-B). Der „relative Fluss“

$$\frac{Q}{Q_0} \quad (2.1)$$

zeigt die Abweichung vom erwarteten Fluss Q_0 an. Es wäre möglich, anhand des relativen Flusses einen Fehlerindikator

$$\left| \log \frac{Q}{Q_0} \right| \quad (2.2)$$

einzuführen, der berücksichtigt, dass man von einem Fehlerindikator in der Regel positive Werte erwartet. Die Betragsbildung bedeutet jedoch einen Informationsverlust, und darüber hinaus sind die logarithmierten relativen Flüsse weniger anschaulich als die relativen Flüsse selbst. Aus diesem Grund wird im Weiteren der relative Fluss zur Fehler einschätzung genutzt und dieser auf einer logarithmischen Achse aufgetragen.

2.1.2 Gittermodifikationen

In TOUGH2 werden einerseits die Gitterelemente und andererseits die miteinander verbundenen Elementpaare charakterisiert. Für die Strömungsberechnung sind bei einem Gitterelement die Lage des Elementzentrums (Parameter X, Y, Z) und das Volumen (Parameter EVOL) relevant, bei einer Elementverbindung die Größe der Interfacefläche (Parameter AREAX) sowie die Abstände der beiden Elementzentren zum gemeinsamen Interface (Parameter D1, D2). Diese Gitterdaten können in TOUGH2 einzeln modifiziert werden, selbst wenn dies zu einer geometrisch inkonsistenten Gitterbeschreibung führt³. Gitterbeschreibungen, bei denen das Elementzentrum im geometrischen Schwerpunkt des Elementes liegt, und bei denen die übrigen Gitterdaten den geometrischen Gegebenheiten des ursprünglichen Gitterentwurfs entsprechen, werden nachfolgend „Ursprungsgitter“ genannt.

Wie in Abb. 2.1-C bis -F dargestellt, werden neben den Ursprungsgittern verschiedene Modifikationen der Zentrumsabstände und Interfaceflächen betrachtet, die den Fehler bei der Strömungsberechnung verkleinern oder eliminieren sollen. Ziel aller vorgestellten Modifikationen ist es, die Verbindungslinie zwischen zwei Elementzentren zu der

³ Z. B. dürfen die Interface-Abstände D1 und D2 modifiziert werden, ohne dass sich die Eingabedaten für das Volumen oder die Elementzentren verändern.

jeweiligen Interface-Fläche senkrecht zu stellen. Diese Prozedur soll nachfolgend „Orthogonalisierung einer Elementverbindung“ genannt werden. Die sich hieraus ergebenden Zentrumsabstände und Interfaceflächen legen die neue Gitterbeschreibung für TOUGH2 fest.

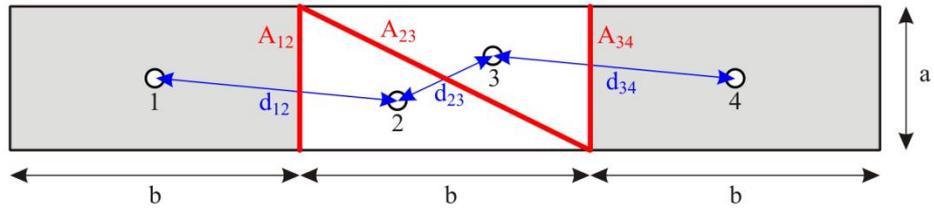
Es werden zwei grundsätzliche Arten der Orthogonalisierung von Elementverbindungen betrachtet, für die an dieser Stelle die Begriffe „konsistente Orthogonalisierung“ und „inkonsistente Orthogonalisierung“ definiert werden. Die Orthogonalisierung einer Elementverbindung soll dann und nur dann konsistent sein, wenn die Interface-Flächen oder Elementzentren so modifiziert werden

- dass es ein zugehöriges konformes Gitter mit diesen Gitterdaten gibt und
- für alle Elementverbindungen dieses Gitters Orthogonalität erzeugt wird.

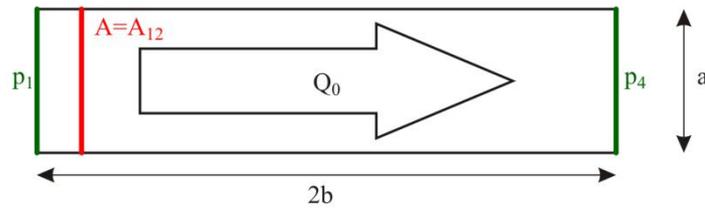
Ansonsten soll die Orthogonalisierung inkonsistent heißen. Elementzentren, die aus ihrer zentralen Lage im Element verschoben werden, sollen weiterhin „Zentren“ heißen.

Abb. 2.1-C und -D zeigen Methoden der konsistenten Orthogonalisierung durch Flächen- und Zentrumsänderungen. In Abb. 2.1-E und -F werden die Änderungen so durchgeführt, dass sie für einzelne Verbindungen Orthogonalität erzeugen, nicht aber für alle Elemente gemeinsam. Diese Methoden der Orthogonalisierung sind dem zur Folge inkonsistent.

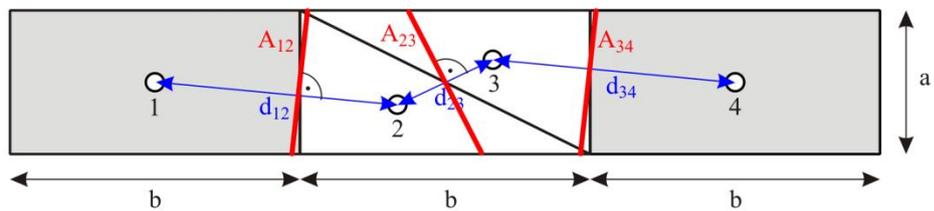
A. Ursprungsgitter



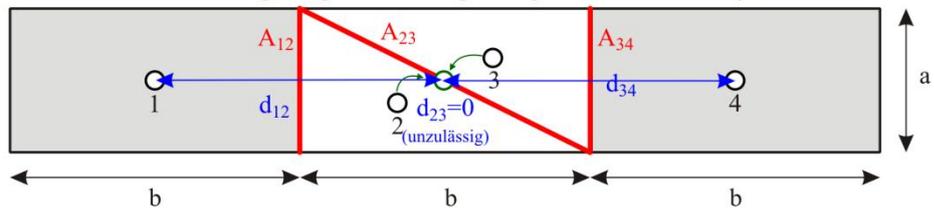
B. Referenzversuch (Darcy)



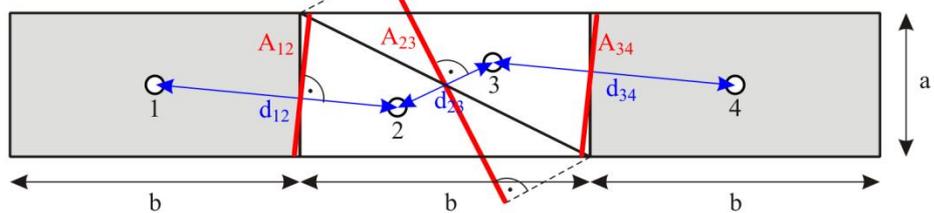
C. Konsistente Orthogonalisierung durch Drehung und Anpassung der Flächen



D. Konsistente Orthogonalisierung durch Zentrumsverschiebung
(in diesem Fall unzulässig wegen Überlagerung zweier Zentren)



E. Inkonsistente Orthogonalisierung durch Flächenprojektion



F. Inkonsistente Orthogonalisierung durch individuelle Zentrumsverschiebung

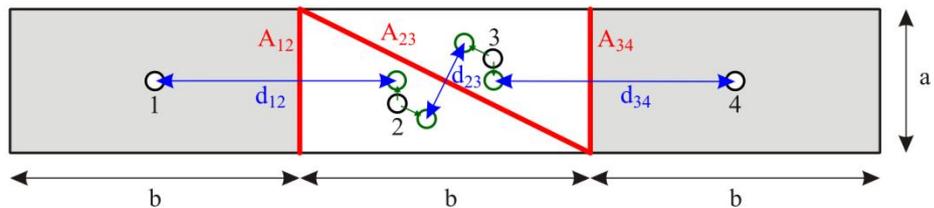


Abb. 2.1: Diagonal geteiltes Element: Definition und Modifikationen.

2.1.3 Referenz-Darcy-Versuch

Für jedes zu untersuchende Gitter wird ein Referenz-Darcy-Versuch definiert. Dieser Versuch beruht auf folgenden Annahmen:

- 1-Phasen-Fluss (Flüssigkeitsphase) mit einer Komponente (Wasser)
- Homogene Permeabilität
- Keine Quellen
- Stationäre Strömung
- Keine Gravitation

TOUGH2 simuliert den Transport verschiedener Phasen (flüssig und gasförmig). Diese Phasen bestehen aus verschiedenen Komponenten, die sich advektiv mit dem Phasenstrom bewegen oder sich diffusiv innerhalb der Phase bewegen. Der Transport wird über die Massenbilanzgleichung

$$\frac{\partial M^\kappa}{\partial t} = -\text{div}(F_{\text{adv}}^\kappa + F_{\text{dif}}^\kappa) + q^\kappa$$

gelöst, wobei M^κ die Massendichte der Komponente⁴ κ und F_{adv}^κ bzw. F_{dif}^κ die advektiven und diffusiven Flussdichten sind. q^κ ist ein Quellterm für jede Komponente. Der Standard-Code beinhaltet keine hydrodynamische Dispersion.

Die hier interessierende advective Flussdichte F_{adv}^κ der Komponente κ wird durch die Flussdichten F_β der sie enthaltenden Phasen definiert:

$$F_{\text{adv}}^\kappa = \sum_{\beta} X_{\beta}^{\kappa} F_{\beta},$$

wobei X_{β}^{κ} der Massenanteil der Komponente k in der Phase β ist. Die Flussdichten der Phasen F_{β} werden durch ein verallgemeinertes Darcy'sches Gesetz beschrieben

⁴ In EOS7 steht $\kappa = 1$ für Wasser, $\kappa = 2$ für Lauge und $\kappa = 3$ für Luft.

$$F_{\beta} = -k \frac{k_{r,\beta} \rho_{\beta}}{\mu_{\beta}} (\nabla p_{\beta} - \rho_{\beta} g). \quad (2.3)$$

Dabei ist k die intrinsische (in TOUGH2 „absolute“ genannte) und $k_{r,\beta}$ die relative Permeabilität. ρ_{β} ist die Dichte, μ_{β} dynamische Viskosität des Fluids und g die Erdbeschleunigung. Der Term

$$k_{\beta} \frac{k_{r,\beta}}{\mu_{\beta}}$$

wird in TOUGH2 „Mobilität“ genannt.

Für die oben formulierten Annahmen für den Referenz-Darcy-Versuch vereinfacht sich die Gleichung (2.3) für den Wasserfluss zu

$$F = -K \nabla p \quad (2.4)$$

mit der Durchlässigkeit

$$K := \frac{k_{\beta} \rho_{\beta}}{\mu_{\beta}},$$

wobei β die flüssige Phase bezeichnet. Für den Darcy-Versuch errechnet sich der Fluss zwischen der Einstrom- und der Ausstromseite durch

$$Q_0 = -KA \frac{p_{\text{ein}} - p_{\text{aus}}}{d} \quad (2.5)$$

K ist hier die Durchlässigkeit, A der Durchtrittsquerschnitt, p_{ein} und p_{aus} die Drücke auf der Ein- und Ausstromseite und d die Länge der Säule.

2.1.4 Berechnung des Flusses durch das Gitter

Der Fluss Q durch das diskrete Gitter wird durch Lösung desjenigen Gleichungssystems berechnet, das sich durch Anwendung von Gleichung (2.4) für jede einzelne Elementverbindung sowie durch eine Flussbilanzierung ergibt. Zur Berechnung des Flusses zwischen zwei Elementen muss grundsätzlich entschieden werden, wie die Permeabilitäten und Mobilitäten der Elemente zur Lösung der Gleichung (2.4) gewichtet werden. Dies spielt an dieser Stelle jedoch keine Rolle, weil sich eine Wichtung wegen der angenommenen Homogenität und Einphasigkeit erübrigt. Es ergibt sich somit folgende Gleichung für die Flussdichte F_{12} von Element 1 zu Element 2:

$$F_{12} = -K \frac{p_2 - p_1}{d_1 + d_2}.$$

Hierbei ist p_i der Druck in Element 1 und d_i der Abstand des Zentrums von Element i zum gemeinsamen Interface der Elemente 1 und 2.

Mit $d := d_1 + d_2$ ergibt sich der Fluss Q_{12} aus der Flussdichte F_{12} durch Multiplikation mit der Interface-Fläche A_{12} :

$$Q_{12} = -KA_{12} \frac{p_2 - p_1}{d} \quad (2.6)$$

Die Parameter d_1 , d_2 und A_{12} sind im TOUGH2-Input im Block CONNE als Parameter D1, D2, AREAX gespeichert. Korrekturmöglichkeiten für die Strömung in nicht-kartesischen Gittern ergeben sich demnach durch Modifikation der Parameter d_1 , d_2 und A_{12} .

2.2 Diagonal geteiltes Element

In Kapitel 2.1.2 wurde das diagonal geteilte Gitterelement beschrieben (Abb. 2.1). Dieses Element besteht aus zwei gleich großen Keilen und eignet sich dazu, die grundsätzlichen Effekte aufzuzeigen, die bei der Verwendung nicht-kartesischer Koordinaten bzw. verschiedener Korrekturverfahren auftreten. Aus Symmetriegründen wird nur eine Strömungsrichtung betrachtet.

Zur Durchströmung des Elementes wird dieses wie in Abb. 2.1 gezeigt von Rechteckelementen eingerahmt, in deren Zentren Druckrandbedingungen definiert werden. Die Einzelemente werden wie in Abb. 2.1 nummeriert. A_{ij} ist die Interfacefläche zwischen den Elementen i und j , d_{ij} ist der Abstand der jeweiligen Zentren. Die Flächen A_{ij} ergeben sich aus den in Abb. 2.1 dargestellten Längen a und b sowie aus der Elementdicke c . An den Zentren i herrschen die Drücke p_i . Als Randbedingungen werden die Drücke p_1 und p_4 vorgegeben.

Der Fluss Q von Element 1 zu Element 4 berechnet sich zu

$$Q = \frac{K \cdot (P_4 - P_1)}{\frac{d_{12}}{A_{12}} + \frac{d_{23}}{A_{23}} + \frac{d_{34}}{A_{34}}}. \quad (2.7)$$

Der Fluss im Referenz-Darcy-Versuch beträgt

$$Q_0 = A_{12}K \frac{P_4 - P_1}{d_{14}}$$

Für das Ursprungsgitter und die vier in Abb. 2.1 dargestellten Modifikationen ergeben sich die in Tab. 2.1 dargestellten Beziehungen. (Die Buchstaben beziehen sich auf Abb. 2.1).

Tab. 2.1: Zentrumsabstände und Interfaceflächen für das diagonal geteilte Element

Ursprungsgitter (A)
$d_{12} = \sqrt{\left(\frac{5 \cdot b}{6}\right)^2 + \left(\frac{a}{6}\right)^2}, d_{23} = \frac{\sqrt{a^2 + b^2}}{3}, d_{34} = \sqrt{\left(\frac{5 \cdot b}{6}\right)^2 + \left(\frac{a}{6}\right)^2}$ $A_{12} = a \cdot c, A_{23} = \sqrt{a^2 + b^2} \cdot c, A_{34} = a \cdot c$
Konsistente Orthogonalisierung durch Flächendrehung und -anpassung (C)
$d_{12} = \sqrt{\left(\frac{5 \cdot b}{6}\right)^2 + \left(\frac{a}{6}\right)^2}, d_{23} = \frac{\sqrt{a^2 + b^2}}{3}, d_{34} = \sqrt{\left(\frac{5 \cdot b}{6}\right)^2 + \left(\frac{a}{6}\right)^2}$ $A_{12} = \frac{5 \cdot a \cdot b \cdot c}{6 \cdot d_{12}}, A_{23} = \frac{a \cdot b \cdot c}{\sqrt{a^2 + b^2}}, A_{34} = \frac{5 \cdot a \cdot b \cdot c}{6 \cdot d_{34}}$
Konsistente Orthogonalisierung durch Zentrumsverschiebung (D)
<p>– nicht zulässig, da $d_{23} = 0$ wäre –</p>
Inkonsistente Orthogonalisierung durch Flächenprojektion (E)
$d_{12} = \sqrt{\left(\frac{5 \cdot b}{6}\right)^2 + \left(\frac{a}{6}\right)^2}, d_{23} = \frac{\sqrt{a^2 + b^2}}{3}, d_{34} = \sqrt{\left(\frac{5 \cdot b}{6}\right)^2 + \left(\frac{a}{6}\right)^2}$ $A_{12} = \frac{6 \cdot a \cdot c \cdot d_{12}}{5 \cdot b}, A_{23} = \frac{a \cdot c \cdot \sqrt{a^2 + b^2}}{b}, A_{34} = \frac{6 \cdot a \cdot c \cdot d_{34}}{5 \cdot b}$
Inkonsistente Orthogonalisierung durch Zentrumsverschiebung (F)
$d_{12} = b, d_{23} = \frac{2 \cdot a \cdot b}{3 \cdot \sqrt{a^2 + b^2}}, d_{34} = b$ $A_{12} = a \cdot c, A_{23} = \sqrt{a^2 + b^2} \cdot c, A_{34} = a \cdot c$

Abb. 2.2 zeigt die Berechnung des relativen Flusses Q/Q_0 für das Ursprungsgitter und die verschiedenen Gittermodifikationen bei Seitenverhältnissen des geteilten Elementes und der Randlelemente zwischen 0,1 und 10. Es wurden dabei die in Tab. 2.1 angegebenen Längen d_{ij} und Flächen A_{ij} verwendet. Die inkonsistenten Orthogonalisierungen durch Flächenänderung (E) bzw. Zentrumsverschiebung (F) und das Ursprungsgitter zeigen deutliche Abweichungen des relativen Flusses von 1 an, deren Betrag mit steigendem a/b -Verhältnis anwächst. Allein die konsistente Orthogonalisie-

– in diesem Fall durch Anpassung und Drehung der Flächen – erzeugt keinen Fehler. Durch Einsetzen der in Tab. 2.1 dargestellten Zentrumsabstände und Interfaceflächen für die konsistente Orthogonalisierung in die Flussgleichung (2.7) für das diagonal geteilte Element ergibt sich in der Tat

$$\frac{Q}{Q_0} = 1.$$

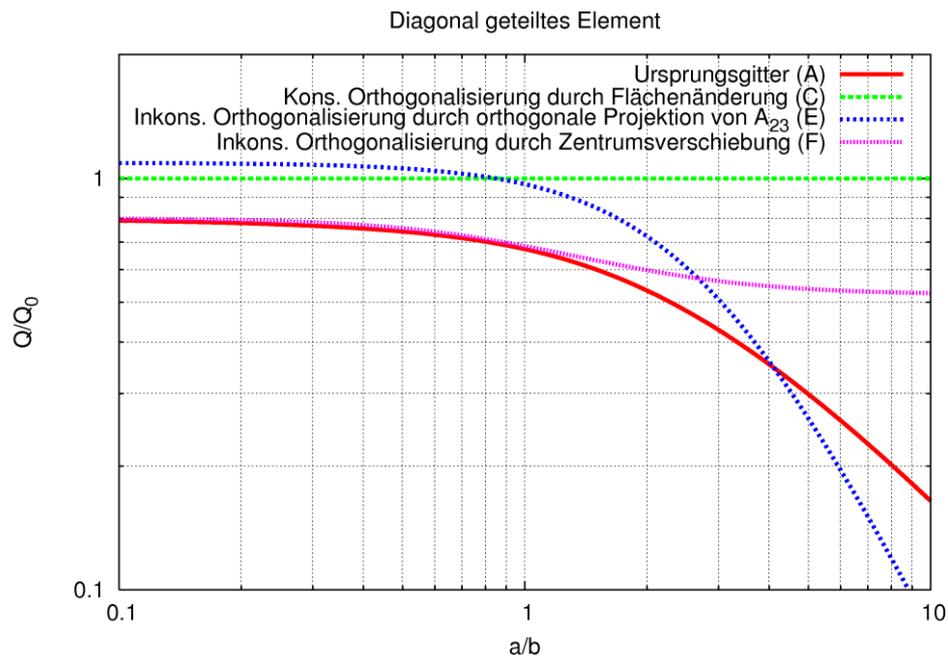


Abb. 2.2: Relativer Fluss bei einem diagonal geteilten Element

Die beobachteten Fehler bei der Strömungsberechnung resultieren offenbar aus der Winkelabweichung der Zentrumsverbindungen von den Normalenvektoren der Interfaceflächen. Dennoch lässt sich, wie Abb. 2.3 zeigt, aus dem maximal auftretenden Winkel zwischen einer Zentrumsverbindung und einer Flächennormalen α_{\max} nicht unmittelbar auf den auftretenden Fehler schließen. So sinkt im Falle des Ursprungsgitters der Absolutbetrag des relativen Flusses mit abnehmendem Verhältnis a/b – und damit der Fehler –, obwohl der maximal auftretende Winkel α_{\max} deutlich ansteigt.

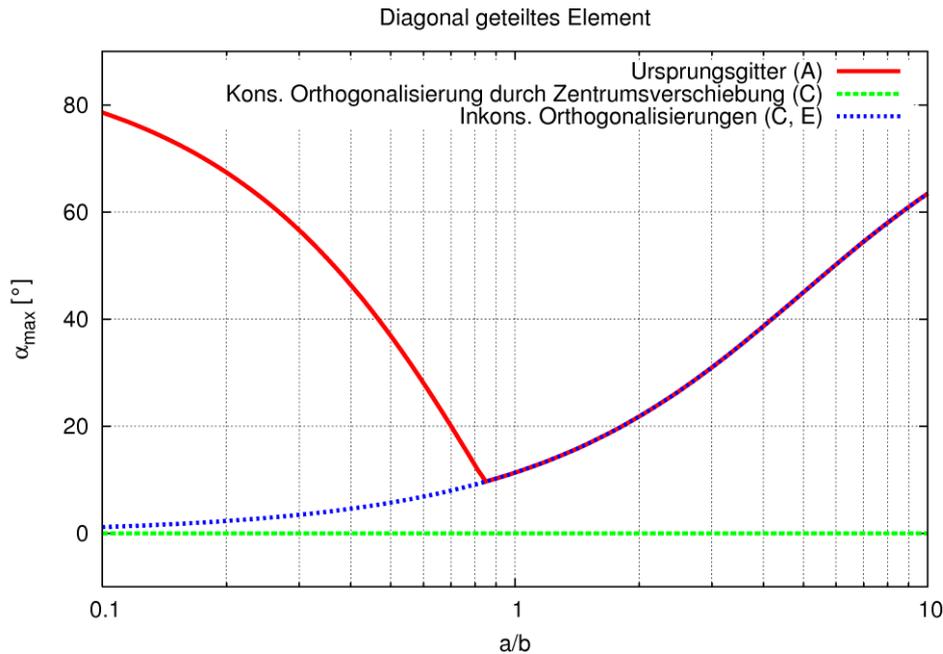


Abb. 2.3: Maximaler Winkel zwischen Zentrumsverbindungen und zugehörigen Flächennormalen

2.3 Geschertes Blockgitter

Im Anschluss soll das Verhalten zweier gescherter Blöcke betrachtet werden, als Ausschnitt eines zweidimensionalen gescherten Blockgitters. Aus Symmetriegründen wird nur eine Strömungsrichtung betrachtet. Die beiden Blöcke besitzen die Kantenlängen a und b , wobei die Kanten den Winkel $90^\circ - \alpha$ einschließen (Abb. 2.4). Es wird die Orthogonalisierung durch Flächenprojektion und durch individuelle Zentrumsverschiebung betrachtet.

Die Orthogonalisierung durch Flächenprojektion ist in Bezug auf das dargestellte Gitter konsistent. Sie ist auch bei Erweiterung des vorgestellten Gitters zu einem ausgedehnten 2-dimensionalen Blockgitter konsistent, da es ein zugehöriges Gitter gibt, zu dem die modifizierten Interface-Flächen passen, nämlich dasjenige Gitter, das bei Rücknahmen der Scherung ($\alpha = 0$) entsteht.

Bei der Orthogonalisierung durch individuelle Zentrumsverschiebung gemäß Abb. 2.4-D wird jedes Zentrum für jede Elementverbindung unterschiedlich verschoben, so dass es sich nicht um ein konsistentes Orthogonalisierungsverfahren handelt. Der Referenz-Darcy-Versuch bezieht sich auf die alten Zentrumslagen.

Grundsätzlich ist es auch möglich, durch die abgebildete Zentrumsverschiebung eine konsistente Orthogonalisierung zu erreichen. In diesem Fall müsste das Gitter wieder zu einem rechtwinkligen Blockgitter zurückgeschert werden, und der Referenz-Darcy-Versuch müsste sich auf die neuen Zentrumslagen beziehen. Wegen der Ähnlichkeit dieses Falles zum Fall „Orthogonalisierung durch Flächenprojektion“ wird er an dieser Stelle nicht berücksichtigt.

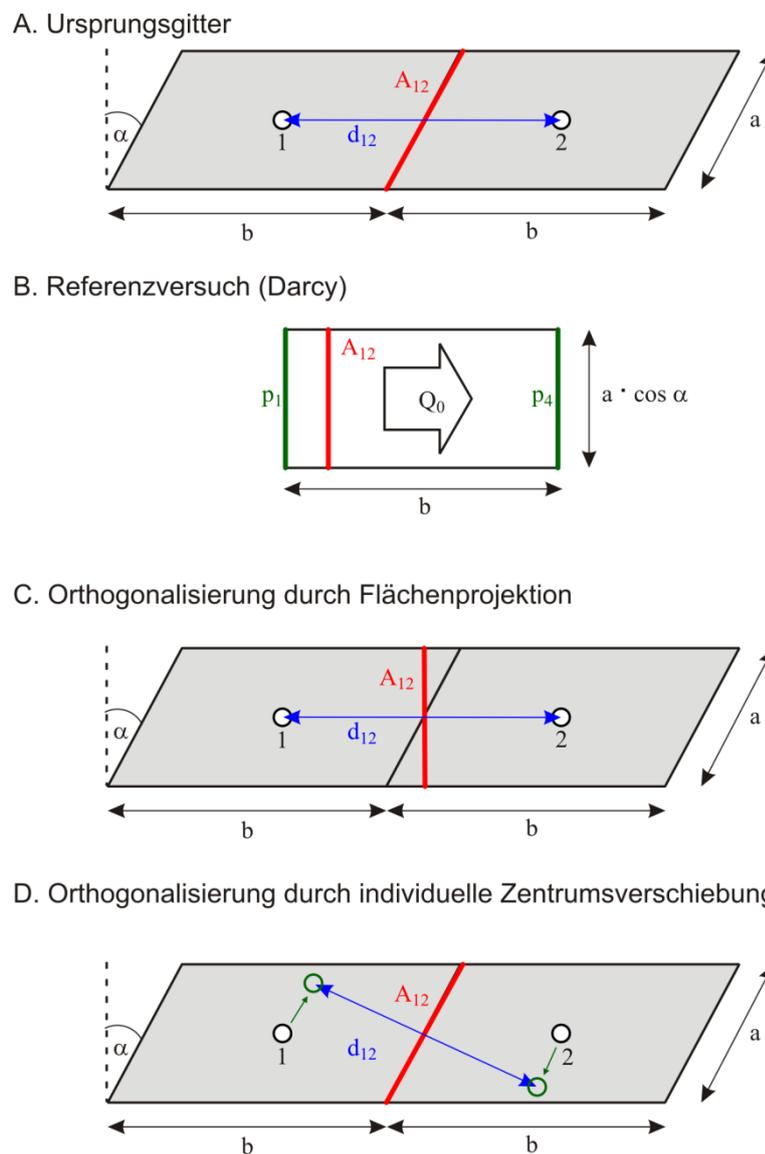


Abb. 2.4 Geschertes Blockgitter als Ausschnitt eines ausgedehnten 2-dimensionalen gescherten Blockgitters

Der Fluss Q zwischen Element 1 und Element 2 beträgt

$$Q = K \cdot A_{12} \frac{P_2 - P_1}{d_{12}}$$

Der Fluss im Referenz-Darcy-Versuch beläuft sich auf

$$Q_0 = c a \cos \alpha \frac{P_2 - P_1}{b}$$

Für das Ursprungsgitter und die beiden in Abb. 2.4 dargestellten Modifikationen ergeben sich die in Tab. 2.2 angegebenen Beziehungen. Diese zeigen, dass der relative Fluss bei dem Ursprungsgitter $1/\cos \alpha$ und bei inkonsistenter Orthogonalisierung durch individuelle Zentrumsverschiebung $1/\cos^2 \alpha$ beträgt, d.h. dass TOUGH2 für $90^\circ > \alpha > 0$ einen Fehler bei der Strömungsberechnung macht. Eine vollständige Fehlerkorrektur mit $Q/Q_0 = 1$ ist aber durch konsistente Orthogonalisierung möglich. Alle auftretenden Fehler sind nur vom Verzerrungswinkel α abhängig und nicht von den Kantenlängen a oder b .

Tab. 2.2: Zentrumsabstände, Interfaceflächen und Fehler für das gescherte Blockgitter

Ursprungsgitter (A)
$d_{12} = b$ $A_{12} = a \cdot c$ $\Rightarrow \frac{Q}{Q_0} = \frac{1}{\cos \alpha}$
Konsistente Orthogonalisierung durch Flächenprojektion (C)
$d_{12} = b$ $A_{12} = c a \cdot \cos \alpha$ $\Rightarrow \frac{Q}{Q_0} = 1$
Inkonsistente Orthogonalisierung durch individuelle Zentrumsverschiebung (F)
$d_{12} = b \cdot \cos \alpha$ $A_{12} = a \cdot c$ $\Rightarrow \frac{Q}{Q_0} = \frac{1}{\cos^2 \alpha}$

2.4 Konsistent orthogonalisierte Verfeinerungselemente

2.4.1 Keilelement und Pyramidenelement

Mit Hilfe der in Abb. 2.5 dargestellten, zusammengesetzten Elemente, die „Keilelement“ und „Pyramidenelement“ genannt werden sollen, lassen sich konforme Rechteckgitter verfeinern. Aus dem in Abb. 2.5-A dargestellten Keilelement, das sich aus drei Keilen zusammensetzt, lässt sich gemäß Abb. 2.6 eine eindimensionale Verfeinerung eines Halbraumes erreichen („Keilplatte“). Durch Verwendung zweier solcher, um 90° gegeneinander verdrehter Platten erhalte man eine zweidimensionale Gitterverfeinerung des Halbraumes.

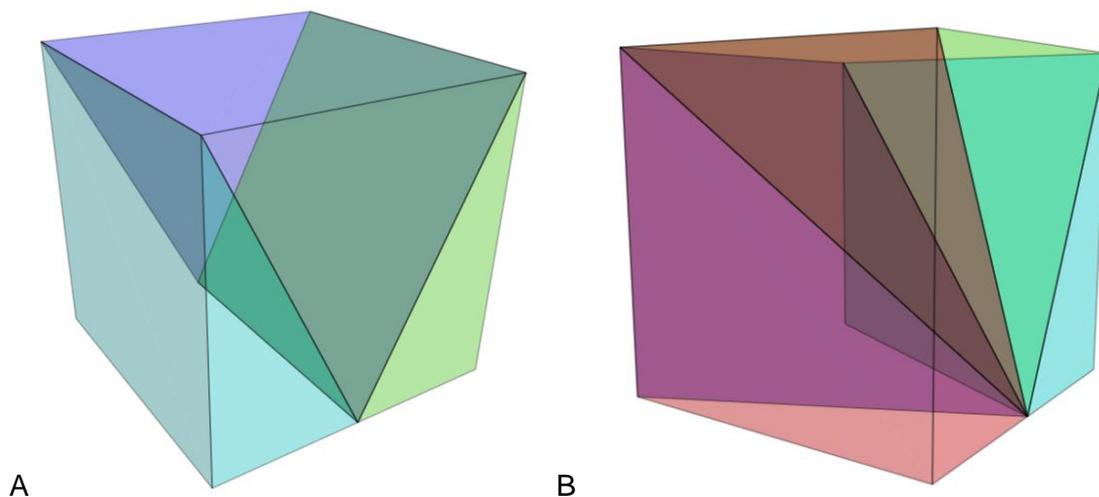


Abb. 2.5: Verfeinerungselemente für Rechteckgitter

Das Verfeinerungselement A besteht aus 3 keilförmigen Elementen („Keilelement“), das rechte aus 4 Pyramiden mit einer gemeinsamen Spitze („Pyramidenelement“).

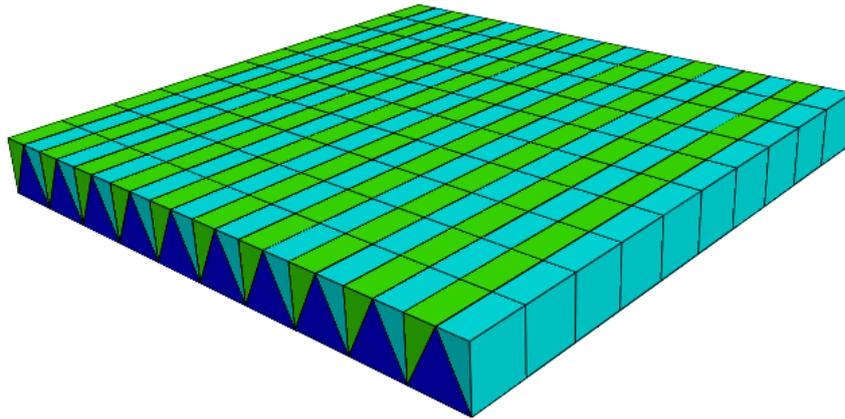


Abb. 2.6: Element zur eindimensionalen Gitterverfeinerung eines Halbraums („Keilplatte“)

Schließt man wie in Abb. 2.7-A gezeigt, vier Keilplatten zusammen, ist eine eindimensionale Verfeinerung in einem geschlossenen Gebiet möglich. Die fehlenden Verbindungsstücke werden durch Säulen aus Pyramidenelementen (Abb. 2.7-B) gebildet.

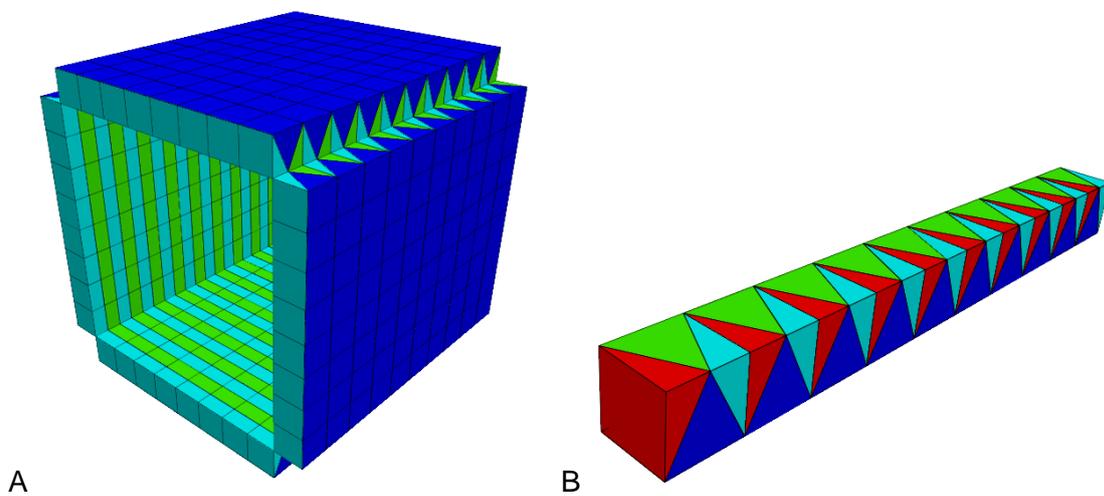


Abb. 2.7: Elemente zur eindimensionalen Gitterverfeinerung in einem geschlossenen Gebiet

Für Schließung der Lücken zwischen den Verfeinerungsflächen (A) sind Säulen aus Pyramidenelementen (B) erforderlich.

Als Ergebnis erhält man eine geschlossene Röhre (Abb. 2.8-A). Schachtelt man drei Röhren jeweils um 90° verdreht ineinander, so ist eine dreidimensionale Verfeinerung in einem geschlossenen Gebiet möglich (Abb. 2.8-B).

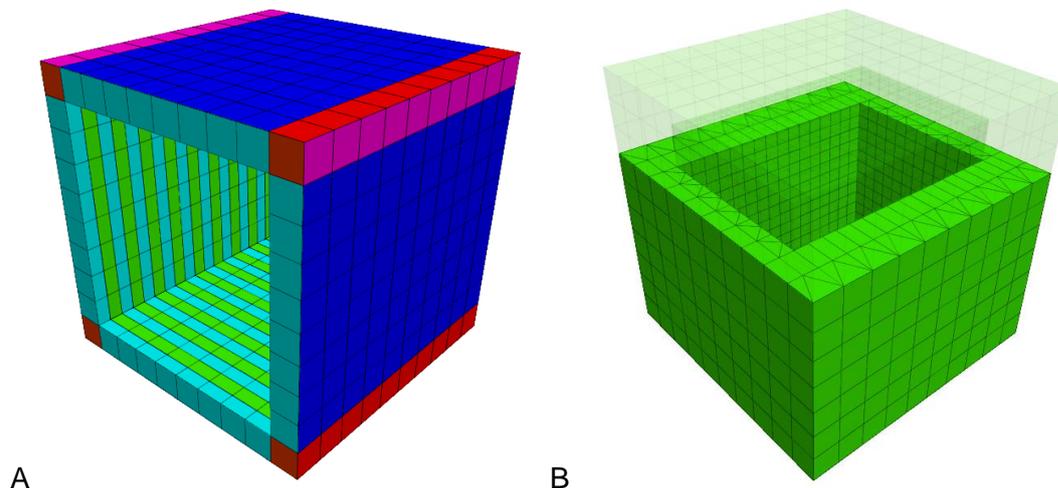


Abb. 2.8: Dreidimensionale Gitterverfeinerung in einem geschlossenen Gebiet

Die dreidimensionale Verfeinerung (B) lässt sich durch Schachtelung dreier eindimensionaler Gitterverfeinerungen (A) erreichen.

Für das Keil- und das Pyramidenelement wird in den nachfolgenden Abschnitten eine Möglichkeit der konsistenten Orthogonalisierung vorgestellt. Es soll zunächst durch analytische Lösung der Fluss- und Bilanzgleichungen gezeigt werden, dass hierdurch eine vollständige Fehlerkorrektur erreicht wird. Anschließend erfolgt eine numerische Überprüfung dieses Befundes mit TOUGH2 anhand des in Abb. 2.8-B gezeigten Elementes.

2.4.2 Konsistente Orthogonalisierung

Abb. 2.9 zeigt eine konsistente Orthogonalisierung der Verfeinerungselemente durch Verschiebung der Elementzentren. Hierdurch stehen alle Elementverbindungen senkrecht auf den Interfaces, vorausgesetzt, dass die sich möglicherweise anschließenden Nachbarelemente Rechteck-, Keil- oder Pyramidenelemente sind.

Bezeichnet man die Abmessungen der Verfeinerungselemente in x-, y- und z-Richtung (Abb. 2.9) mit a , b und c , so lauten die neuen Zentrumspositionen beim Keilelement in Bezug auf die jeweils vordere, linke, untere Ecke

$$\begin{pmatrix} a/4 \\ b/2 \\ c/2 \end{pmatrix} \text{ für den linken unteren Keil,}$$

$$\begin{pmatrix} \frac{3}{4}a \\ b/2 \\ c/2 \end{pmatrix} \text{ für den rechten unteren Keil,}$$

$$\begin{pmatrix} a/2 \\ b/2 \\ \frac{c}{2} + \frac{a^2}{8c} \end{pmatrix} \text{ für den mittleren Keil,}$$

und beim Pyramidenelement

$$\begin{pmatrix} a/4 \\ b/2 \\ c/2 \end{pmatrix} \text{ für die linke Pyramide,}$$

$$\begin{pmatrix} \frac{3}{4}a \\ b/2 \\ c/2 \end{pmatrix} \text{ für die rechte Pyramide,}$$

$$\begin{pmatrix} a/2 \\ b/2 \\ \frac{c}{2} + \frac{a^2}{8c} \end{pmatrix} \text{ für die obere Pyramide,}$$

$$\begin{pmatrix} a/2 \\ \frac{b}{2} + \frac{a^2}{8b} \\ c/2 \end{pmatrix} \text{ für die untere Pyramide.}$$

2.4.3 Durchströmung des Keilelementes

Zur Berechnung der Durchströmung des Keilelementes wird dieses gemäß Abb. 2.10 mit Randlelementen versehen. Es werden zwei Konstellationen betrachtet, bei denen das Keilelement einmal in z-Richtung und einmal in x-Richtung durchströmt wird (zur Definition der Richtungen siehe Abb. 2.9). Bei der Durchströmung in y-Richtung (die dann zwischen zwei Keilelementen stattfindet) ist wegen der Linearität der Fließwege die Äquivalenz zum Referenz-Darcy-Versuch leicht zu erkennen. Dieser Fall wird daher nicht betrachtet.

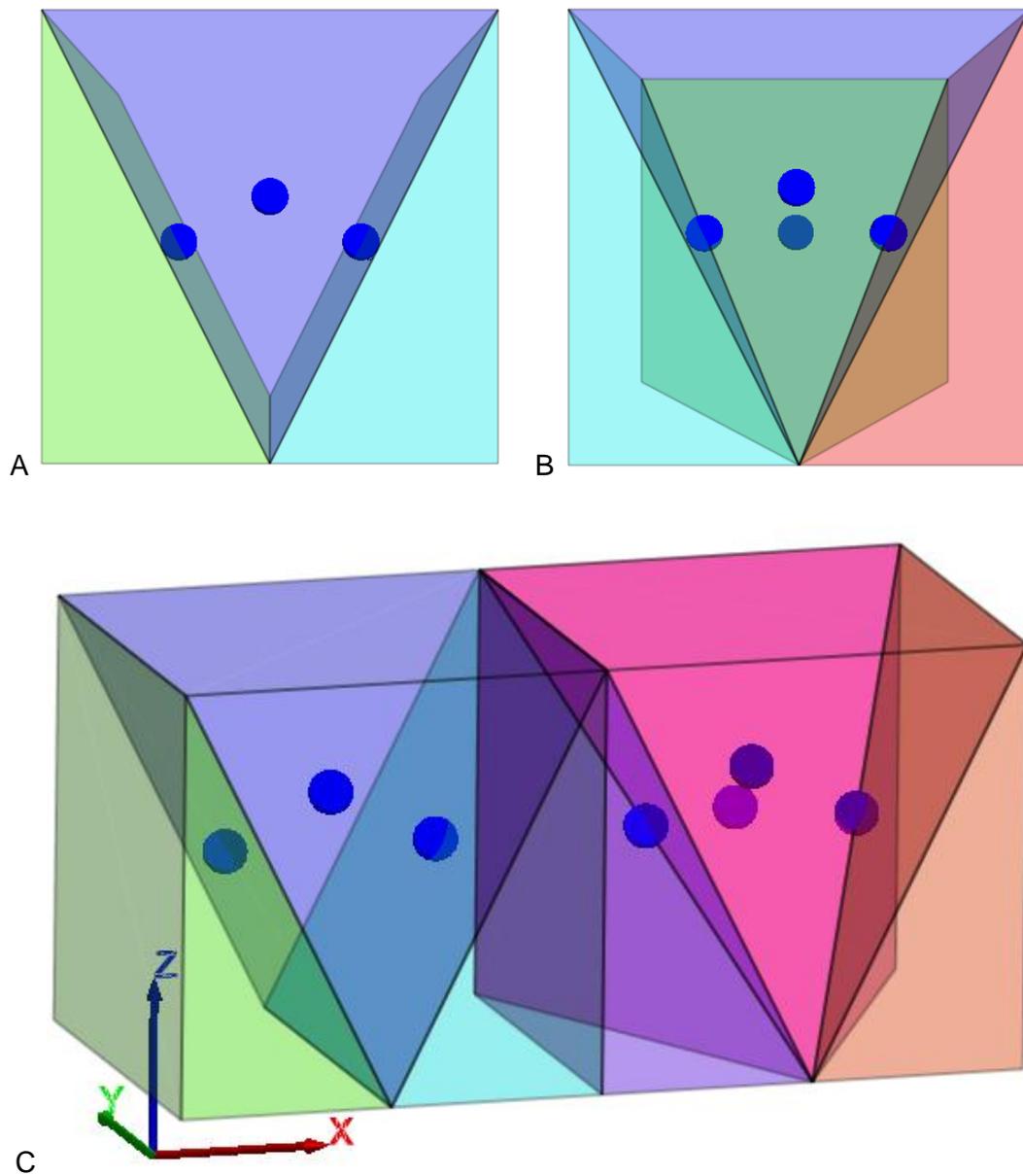


Abb. 2.9: Konsistente Orthogonalisierung der Verfeinerungselemente

Die Kantenlängen a , b und c der Elemente werden in Richtung der x -, y - bzw. z -Achse bemessen.

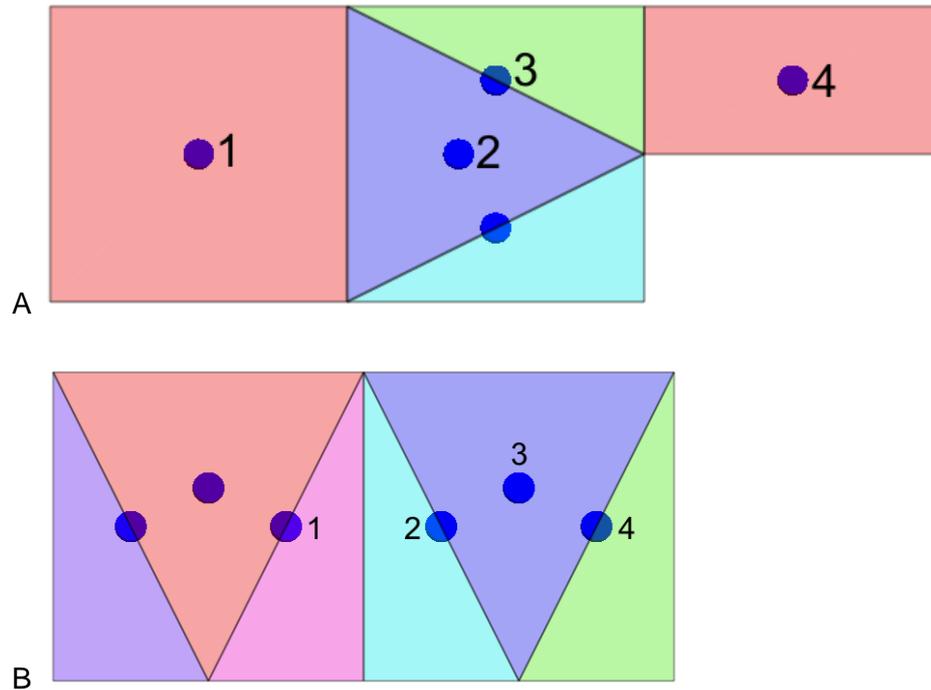


Abb. 2.10: Keilelement mit Randelementen für die Strömungsberechnung

Durchströmung in Richtung der z-Achse (Fall A) und der x-Achse (Fall B) eines Keilelementes. Die Konfigurationen lassen sich im Falle einer Ebene von Verfeinerungselementen gemäß Abb. 2.6 als Strömung senkrecht und parallel zu dieser Ebene verstehen.

Durchströmung in z-Richtung (Fall A)

Mit den in Abb. 2.10-A gezeigten Elementnummerierungen beträgt der Fluss bei Durchströmung in Richtung der z-Achse des Keilelementes

$$Q = \frac{K \cdot (P_4 - P_1)}{\frac{d_{12}}{A_{12}} + \frac{d_{23}}{2 \cdot A_{23}} + \frac{d_{34}}{2 \cdot A_{34}}}, \quad (2.8)$$

wobei davon ausgegangen wird, dass unterhalb von Element 4 ein gleichartiges Element liegt und der Einstrom in diese beiden Elemente gleich ist. Im Referenz-Darcy-Versuch, der zwischen den Zentren der Randelemente aufgespannt wird, beträgt der Fluss

$$Q_0 = K \cdot b \cdot a \frac{P_4 - P_1}{2c}.$$

Die Flächen zwischen den einzelnen Elementen sind

$$A_{12} = a \cdot b, \quad A_{23} = b \sqrt{\frac{a^2}{4} + c^2}, \quad A_{34} = \frac{ab}{2}.$$

Beim Ursprungsgitter gelten für die Flächen und Zentrumsabstände

$$d_{12} = \frac{5}{6}c, \quad d_{23} = \frac{\sqrt{a^2+c^2}}{3}, \quad d_{34} = \sqrt{\left(\frac{5 \cdot c}{6}\right)^2 + \left(\frac{a}{12}\right)^2}$$

während bei konsistenter Orthogonalisierung durch Zentrumsverschiebung

$$d_{12} = c - \frac{a^2}{8 \cdot c}, \quad d_{23} = \frac{a}{8 \cdot c} \cdot \sqrt{a^2 + 4 \cdot c^2}, \quad d_{34} = c$$

gilt.

Aus den Gleichungen ergibt sich für das gewählte Orthogonalisierungsverfahren

$$\frac{Q}{Q_0} = 1,$$

es entsteht also kein Fehler. Abb. 2.11 zeigt den relativen Fluss, der durch Verwendung des Ursprungsgitters entsteht. Man erkennt ein rasches Ansteigen des Absolutbetrages des relativen Flusses bei Seitenverhältnissen $a/b > 1$.

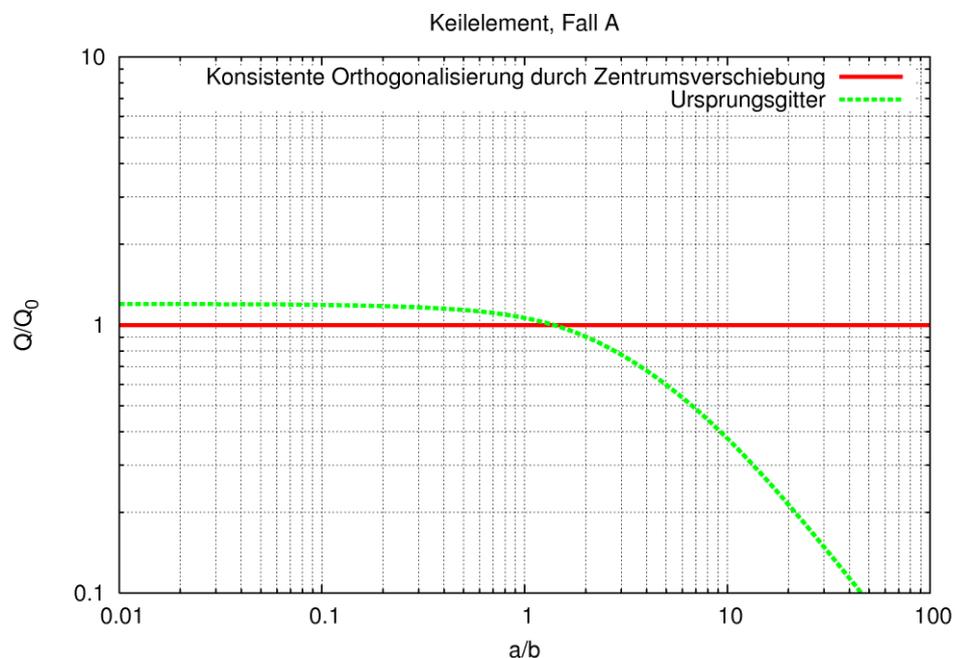


Abb. 2.11 Relativer Fluss bei Durchströmung des Keilelementes in z-Richtung (Fall A)

Durchströmung in x-Richtung (Fall B)

Bei Durchströmung in x-Richtung des Keilelementes beträgt der Fluss

$$Q = \frac{K \cdot (P_4 - P_1)}{\frac{d_{12}}{A_{12}} + \frac{d_{23}}{A_{23}} + \frac{d_{34}}{A_{34}}}$$

im Referenz-Darcy-Versuch

$$Q_0 = K \cdot c \cdot b \cdot \frac{P_4 - P_1}{a}$$

Für die Interfaceflächen gilt

$$A_{12} = b \cdot c, A_{23} = A_{34} = b \sqrt{\frac{a^2}{4} + c^2}$$

Für das Ursprungsgitter ergeben sich für die Zentrumsabstände

$$d_{12} = \frac{1 \cdot a}{3}, d_{23} = d_{34} = \frac{\sqrt{a^2 + b^2}}{3}$$

während diese bei konsistenter Orthogonalisierung

$$d_{12} = \frac{a}{2}, d_{23} = d_{34} = \frac{a}{8 \cdot c} \cdot \sqrt{a^2 + 4 \cdot c^2}$$

betragen. Aus den Gleichungen für die konsistente Orthogonalisierung lässt sich

$$\frac{Q}{Q_0} = 1$$

ableiten. Der Durchfluss im Ursprungsgitter ist hingegen fehlerbehaftet (Abb. 2.12).

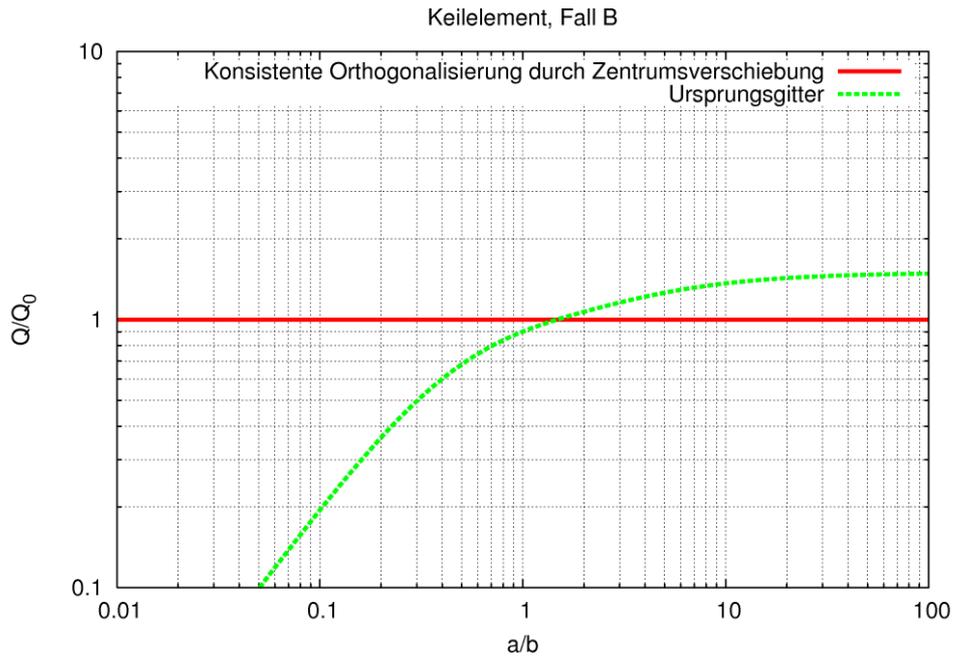


Abb. 2.12 Relativer Fluss bei Durchströmung des Keilelementes in x-Richtung (Fall B)

2.4.4 Durchströmung des Pyramidenelementes

Das Verhalten des Pyramidenelementes wird durch Anfügen benachbarter Rechteckelemente untersucht (Abb. 2.13). Aufgrund der Symmetrie des Pyramidenelementes sind nur zwei Strömungsrichtungen zu untersuchen.

Durchströmung in x-Richtung (Fall A)

Entsprechend der in Abb. 2.13-A gezeigten Elementnummerierung beträgt der Fluss von Element 1 zu Element 6

$$Q = \frac{K \cdot (P_6 - P_1)}{\frac{d_{12}}{A_{12}} + \frac{d_{56}}{A_{56}} + \frac{1}{\left(\frac{A_{23}}{d_{23} + d_{35}} + \frac{A_{24}}{d_{24} + d_{45}}\right)}}$$

Im Referenz-Darcy-Versuch beträgt der Fluss

$$Q_0 = c b \frac{P_4 - P_1}{2a}.$$

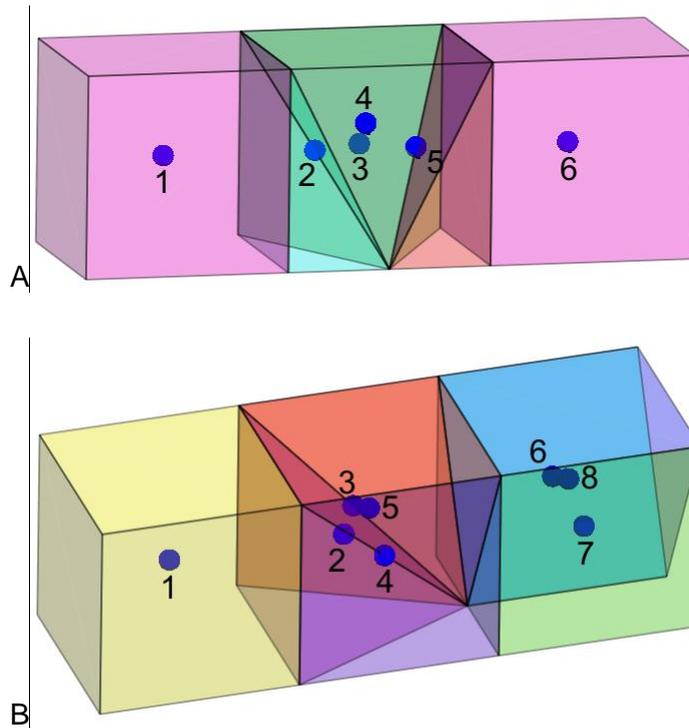


Abb. 2.13: Pyramidenelemente mit Randelementen für die Strömungsberechnung

A: Durchströmung in Richtung der x-Achse. B: Durchströmung in Richtung der z-Achse.
(Entspricht Durchströmung in Richtung der y-Achse).

Für die Interfaceflächen gilt

$$A_{12} = A_{56} = c \cdot b, A_{23} = A_{35} = \frac{c \cdot \sqrt{b^2 + \frac{a^2}{4}}}{2}, A_{24} = A_{45} = \frac{b \cdot \sqrt{c^2 + \frac{a^2}{4}}}{2}.$$

Beim Ursprungsgitter belaufen sich die Zentrumsabstände auf

$$d_{12} = d_{56} = \frac{3 \cdot a}{4}, d_{23} = d_{35} = \sqrt{\frac{a^2}{16} + \frac{b^2}{64}}, d_{24} = d_{45} = \sqrt{\frac{a^2}{16} + \frac{c^2}{64}}.$$

Bei konsistenter Orthogonalisierung durch Zentrumsverschiebung erhält man dagegen

$$d_{12} = d_{56} = \frac{3 \cdot a}{4}, d_{23} = d_{35} = \sqrt{\frac{a^2}{16} + \frac{a^4}{64 \cdot b^2}}, d_{24} = d_{45} = \sqrt{\frac{a^2}{16} + \frac{a^4}{64 \cdot c^2}}.$$

Aus den Gleichungen für die konsistente Orthogonalisierung ergibt sich keinerlei Abweichung vom Referenz-Darcy-Versuch, also

$$\frac{Q}{Q_0} = 1.$$

Wie Abb. 2.14 zeigt, treten jedoch Abweichungen beim Ursprungsgitter auf.

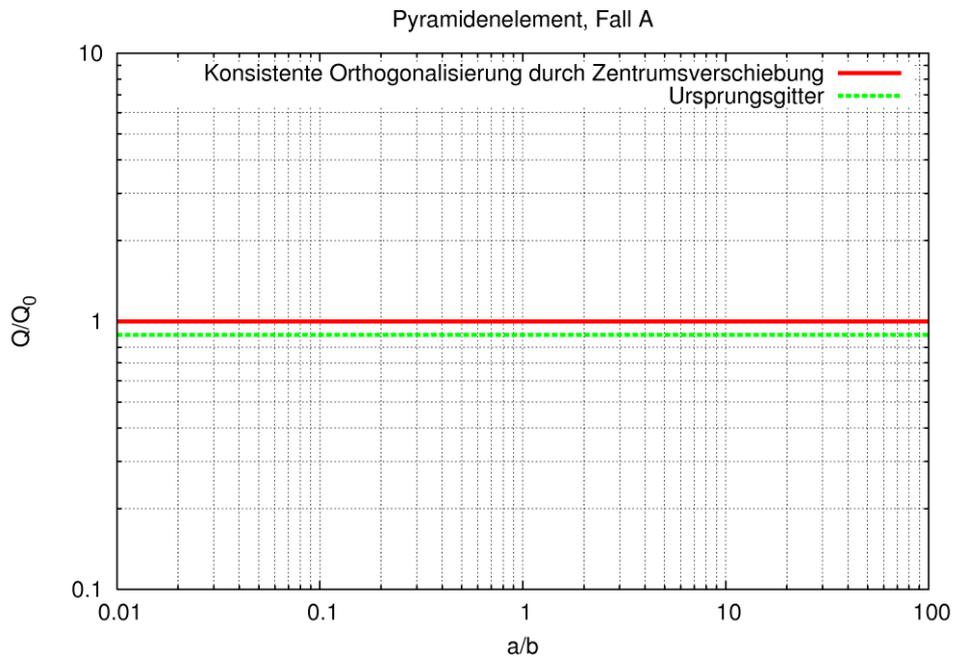


Abb. 2.14 Relativer Fluss bei Durchströmung des Pyramidenelementes in x-Richtung (Fall A)

Durchströmung in z-Richtung (Fall B)

Die Elemente seien wie in Abb. 2.13-B nummeriert. An den Zentren der Elemente 6, 7 und 8 sollen die gleichen Drücke herrschen ($P_{6,7,8} := P_6 = P_7 = P_8$). Hiermit ergibt sich für den Fluss

$$Q = \frac{K \cdot (P_{6,7,8} - P_1)}{\frac{d_{12}}{A_{12}} + \left(\frac{1}{\frac{d_{23}}{A_{23}} + \frac{d_{36}}{A_{36}}} + \frac{1}{\frac{d_{24}}{A_{24}} + \frac{d_{47}}{A_{47}}} + \frac{1}{\frac{d_{25}}{A_{25}} + \frac{d_{58}}{A_{58}}} \right)} \quad (2.9)$$

Der Fluss durch den Referenz-Darcy-Versuch beträgt

$$Q_0 = K \cdot a \cdot c \frac{P_{6,7,8} - P_1}{2b}$$

Für die Flächen zwischen den Einzelementen ergibt sich

$$A_{12} = a \cdot c, A_{23} = A_{24} = \frac{c \cdot \sqrt{b^2 + \frac{a^2}{4}}}{2}, A_{25} = \frac{a \cdot \sqrt{c^2 + b^2}}{2}, A_{36} = A_{47} = \frac{a \cdot c}{4}, A_{58} = \frac{a \cdot c}{2}.$$

Beim Ursprungsgitter betragen die Zentrumsabstände

$$d_{12} = \sqrt{\left(\frac{c^2}{36} + \frac{b^2}{4}\right)^2}, \quad d_{23} = d_{24} = \sqrt{\frac{a^2}{9} + b^2},$$

$$d_{25} = \sqrt{\frac{c^2}{9} + b^2}, \quad d_{36} = d_{47} = d_{58} = \frac{7 \cdot b}{6}$$

und bei konsistenter Orthogonalisierung

$$d_{12} = \sqrt{\left(\frac{a^2}{8 \cdot b} - b\right)^2}, \quad d_{23} = d_{24} = \sqrt{\frac{a^2}{16} + \frac{a^4}{64 \cdot b^2}},$$

$$d_{25} = \sqrt{\frac{a^4}{64 \cdot c^2} + \frac{a^4}{64 \cdot b^2}}, \quad d_{36} = d_{47} = d_{58} = b.$$

Wie bereits bei der Durchströmung in x-Richtung konnte beim orthogonalisierten Gitter auch bei der Durchströmung in y- und z-Richtung kein Fehler gefunden werden (Abb. 2.15). Mit Ursprungsgitter treten hingegen Fehler auf.

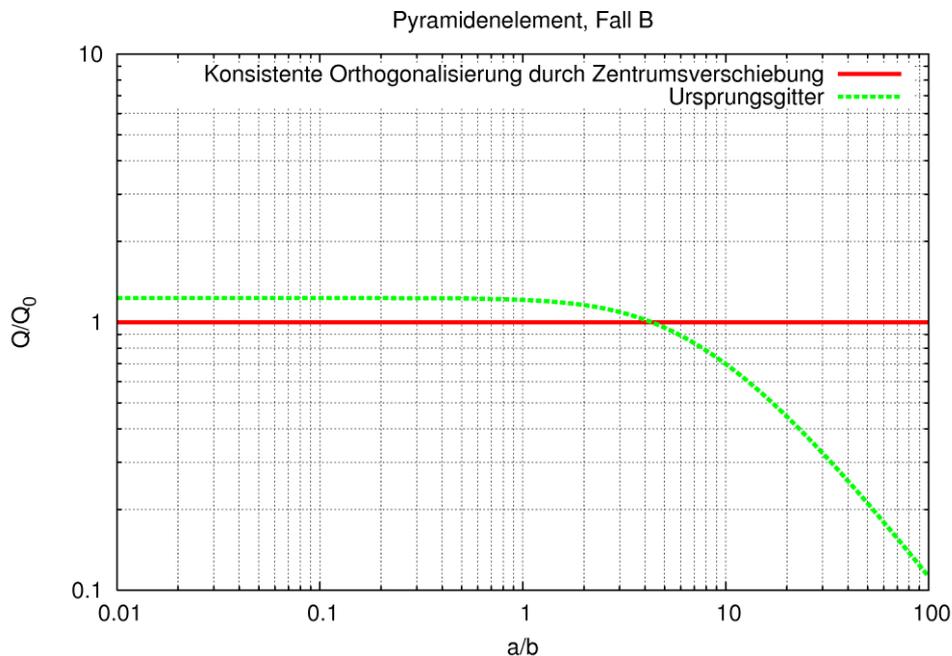


Abb. 2.15 Relativer Fluss bei Durchströmung des Pyramidenelementes in z-Richtung (Fall B)

3 Numerische Analysen

3.1 Gitterkonvertierung

Für die Generierung konformer Gitter für Simulationen mit TOUGH2 wurde im Vorhaben 3609R03210 ein Werkzeug zur Konvertierung von FLAC3D-Gittern in TOUGH2-Gitter entwickelt. Eine Ableitung von TOUGH2-Gittern aus FLAC3D-Gittern wird auch im Rahmen der im gleichen Vorhaben weiterentwickelten TOUGH2-FLAC3D-Kopplung benötigt. Das Konvertierungswerkzeug wurde in der FLAC3D-internen Programmiersprache FISH implementiert.

Nach der Erzeugung eines FLAC3D-Gitters aus sogenannten „Zonen“, erfolgt die Konvertierung der FLAC3D-Zonen in TOUGH2-Elemente durch die neu entwickelte FISH-Routine `makeToughGrid (meshfilename, gmvflag)`. Der Parameter `meshfilename` bezeichnet hierbei die generierende MESH-Datei für TOUGH2, `gmvflag = 1` gibt an, ob Zusatzgitterinformationen für das TOUGH2-Postprocessing mit `tough2gmv` (siehe /NAV 08/) ausgegeben werden sollen. Falls nicht, wird `gmvflag = 0` gesetzt.

TOUGH2 kennt sogenannte inaktive Elemente, mit denen feste Randbedingungen eingeführt werden können. Elemente werden inaktiv, indem entweder ihr Volumen = 0 oder aber auf einen sehr hohen Wert (z. B. $1E+80$) gesetzt wird. Dem Konvertierungsprogramm `makeToughGrid` werden diese Informationen mit der Gruppenzuordnung der Zonen übergeben. (Diese entsprechen einem Materialnamen). Der FLAC3D-Gruppenname einer Zone wird einem TOUGH2-Materialtyp (im Eingabeblock „ROCKS“) gleichgesetzt. Soll ein Element inaktiv gesetzt werden, kann hinter den Materialnamen entweder der Zusatz „#VINF“ oder „#V0“ angefügt werden, der dazu führt, dass dem betreffenden Material entweder ein Volumen von $1E+80$ m³ bzw. 0 m³ zugewiesen wird.

Zur Generierung des Keil- und Pyramidenelementes wurden eigene FISH-Funktionen entwickelt. Die von diesen Funktionen erzeugten Objekte setzen sich aus mehreren Einzelementen (Keile oder Pyramiden) zusammen, die mit Hilfe des Gruppennamens eindeutig gekennzeichnet werden. Diese Kennzeichnung ist notwendig, damit `makeToughGrid` zur konsistenten Orthogonalisierung die richtigen elementspezifischen Korrekturverfahren anwenden kann. Bei dem Keilelement werden an den Gruppenna-

men der drei enthaltenen Keile die Zusätze „#3w1“, „#3w2“ bzw. „#3w3“ angehängt. Beim Pyramidenelement, das sich aus vier Pyramiden zusammensetzt, sind es die Zusätze „#4p1“, „#4p2“, „#4p3“ bzw. „#4p4“.

Die Orthogonalisierung für diese Elemente erfolgt durch Zentrumsverschiebung. Aus den verschobenen Zentren werden für jedes verbundene Elementpaar die Zentrumsabstände zum gemeinsamen Interface D1 und D2 berechnet. Diese Information ist im CONNE-Block von TOUGH2 enthalten. (Dem ELEM-Block, der elementspezifische Angaben enthält, werden weiterhin die wahren Element- bzw. Zonenzentren übergeben.)

Die Werte für D1 und D2 werden so gesetzt, dass $D1+D2$ dem Abstand der korrigierten Zentren entspricht. In der Regel bezeichnen D1 und D2 die Abstände der Elementzentren zum Durchstichpunkt der Zentrumsverbindung durch die Interface-Fläche. Wenn jedoch ein Zentrum derart verschoben wird, dass sich hierdurch negative Abstände ergäben, so wird der Abstand dieses Elementes auf 0 gesetzt und der Abstand des anderen Elementes auf die Zentrumsabstände.

3.2 Modellbeschreibung

Mit Hilfe numerischer Simulationen erfolgt eine Fehlerbetrachtung für ein Gebiet mit einer komplexen Konstellation von Verfeinerungselementen, die eine lokale Gebietsverfeinerung erlauben (siehe Abb. 2.8-B). Das Modellgebiet wurde aus einem Block aus $22 \times 20 \times 20$ Elementen entwickelt, dessen Zentrum verfeinert wurde (Abb. 3.1). An den in Abb. 3.1 gelb und rot eingefärbten Elementflächen werden hydraulische Festpotenziale angesetzt.

Die Permeabilität wird für alle Elemente auf $1.0E-10 \text{ m}^2$ gesetzt, die Porosität auf 0.1. Am linken Rand wird ein Druck von 1.22 MPa vorgegeben, am rechten Rand ein Druck von 1.01 MPa. Hierdurch entsteht ein Druckgefälle von 0.21 MPa über das gesamte Gebiet, so dass im Ursprungsblock bei stationärer Strömung ein Druckgefälle von 0.01 MPa in x-Richtung zwischen den Elementzentren zu erwarten wäre (22 Elemente in x-Richtung). Der mittlere Druck liegt deutlich über dem Gesamt-druckgefälle, so dass die Kompressibilität des Wassers keine größere Rolle spielen dürfte.

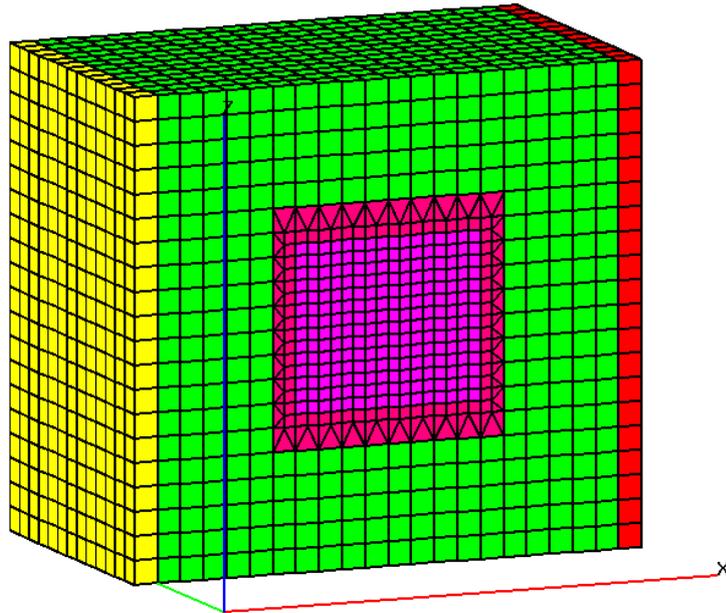


Abb. 3.1: Schnitt durch das kubische Modellgebiet mit zentraler Gitterverfeinerung

Auf den Elementen am linken und rechten Rand (gelb und rot) werden die Druckrandbedingungen aufgebracht.

3.3 Codemodifikationen

Durch die korrigierten Zentrumslagen können Zentren auf Interface-Flächen zu liegen kommen. Dies führt in TOUGH2 zu Problemen, die Codemodifikationen erfordern.

Fälle, in denen das Elementzentrum auf der Interfacefläche liegt (und in denen somit der Zentrumsabstand zum Interface 0 ist) haben in TOUGH2 eine bestimmte Bedeutung. TOUGH2 geht davon aus, dass es sich in solchen Fällen um ein inaktives Element handelt und ignoriert daher sowohl bei der Bestimmung der intrinsischen Permeabilität und der relativen Permeabilität am Interface die Eigenschaften dieses Elementes. Dieses Verhalten wurde im Code ausgeschaltet.

Bei Verwendung des harmonischen Mittels für die Permeabilitäten oder Mobilitäten am Interface wichtet TOUGH2 entsprechend der Zentrumsabstände zum Interface. Dies führt im Falle von verschobenen Zentrumslagen zu einer fehlerhaften Wichtung. Die Abstandswichtung wurde im Code deshalb durch eine Volumenwichtung ersetzt.

3.4 Einphasenströmung

Zunächst erfolgte eine Strömungssimulation mit vollständiger Wassersättigung der Poren. Abb. 3.2 zeigt die errechnete stationäre Druckverteilung über das Gebiet. Es ist keine nennenswerte Störung des Druckfeldes durch das Verfeinerungsgebiet zu erkennen. In Abb. 3.3 sind die Drücke in der 6. Elementebene (in Richtung der x-Achse gezählt) dargestellt, welche unmittelbar vor dem Verfeinerungsgebiet liegt. Hier betragen die Drücke $1.170.000 \text{ Pa} \pm 1 \text{ Pa}$ was bei einem Druckgefälle von 10.000 Pa pro Element einen ausreichend kleinen Fehler anzeigt.

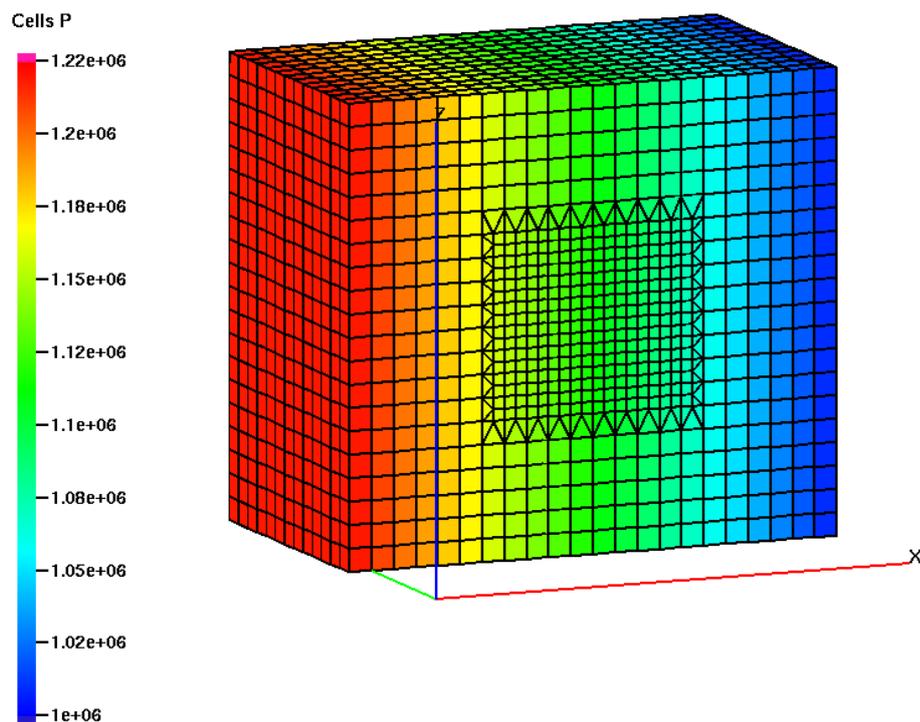


Abb. 3.2: Druckverteilung bei stationärer Strömung

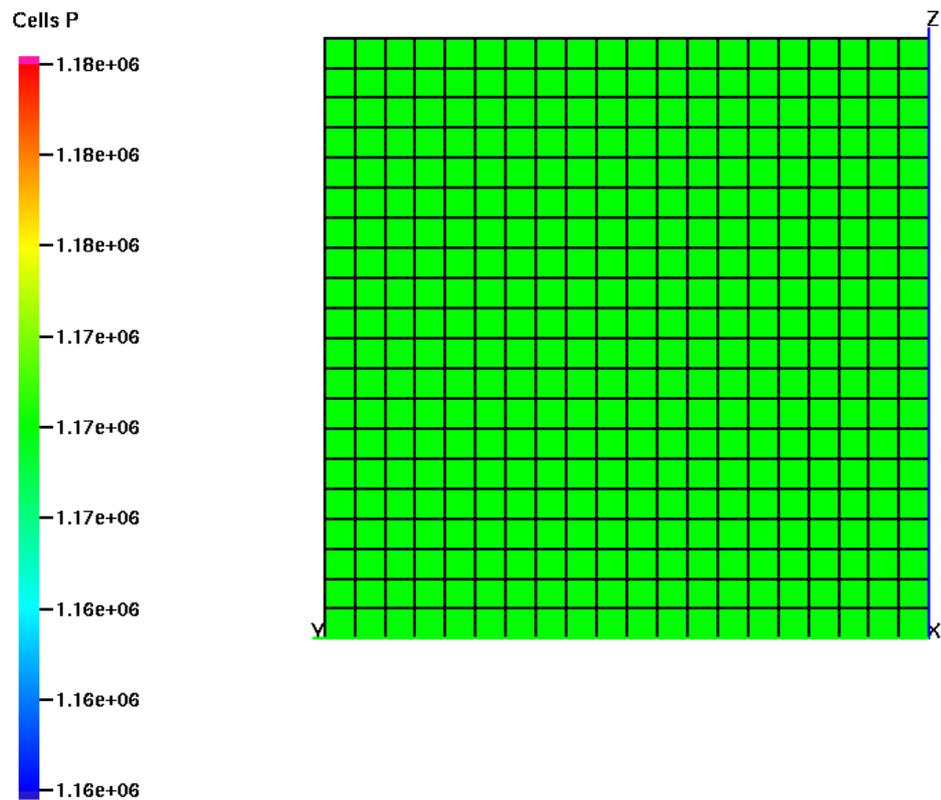


Abb. 3.3: Druckverteilung auf der y-z-Ebene unmittelbar vor dem verfeinerten Gebiet (in Strömungsrichtung) im Fall der Einphasenströmung

3.5 Zweiphasenströmung

In diesem Rechenfall wurde der Einstrom von Wasser in ein anfänglich gasgesättigtes Gebiet simuliert. Hierzu wurde der linke Festpotenzialrand auf eine geringe Gassättigung von 0,001 gesetzt. Das restliche Gebiet erhielt eine hohe Anfangsgassättigung von 0,999. Die initiale Druckverteilung im Gebiet entspricht derjenigen des vorherigen Rechenfalls. Die Permeabilitäten wurden einheitlich auf $1E-17 \text{ m}^2$ gesetzt.

Abb. 3.4 zeigt die Gassättigung in einem x-y-Schnitt $5,62037E+08$ Sekunden nach Simulationsbeginn. Die Phasenfront liegt zu diesem Zeitpunkt innerhalb des verfeinerten Gebietes. Abb. 3.5 zeigt die zugehörige Druckverteilung.

In Abb. 3.6 ist die Druckverteilung auf der y-z-Ebene unmittelbar vor dem verfeinerten Gebiet dargestellt (angeströmte Seite). Die Drücke in dieser Ebene belaufen sich auf $1.290.850 \text{ Pa} \pm 40.250 \text{ Pa}$, d.h., dass eine Druckvariation von ca. 3 % vorliegt. Die Druckvariation ist größer als im einphasigen Fall. Im einphasigen Fall ist allerdings wegen der Stationarität des Problems und der Konstanz des Druckgradienten auch nicht mit einem Einfluss der Diskretisierung auf die Druckverteilung zu rechnen.

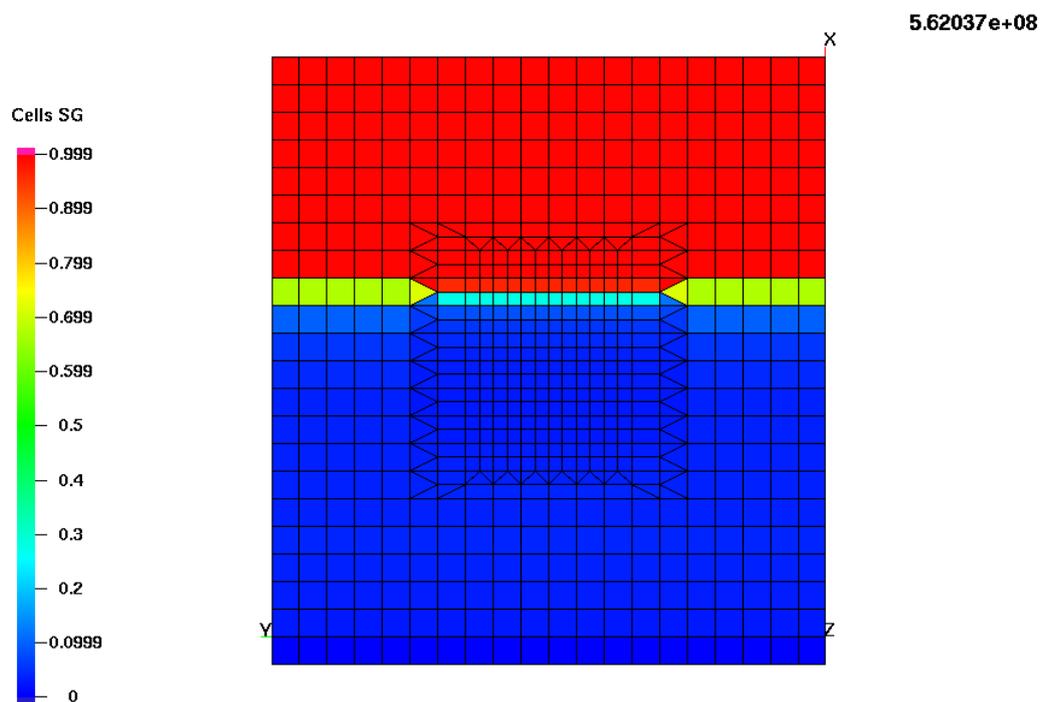


Abb. 3.4: Verteilung der Gassättigung nach $5,62037E+08$ Sekunden im Fall der Zweiphasenströmung

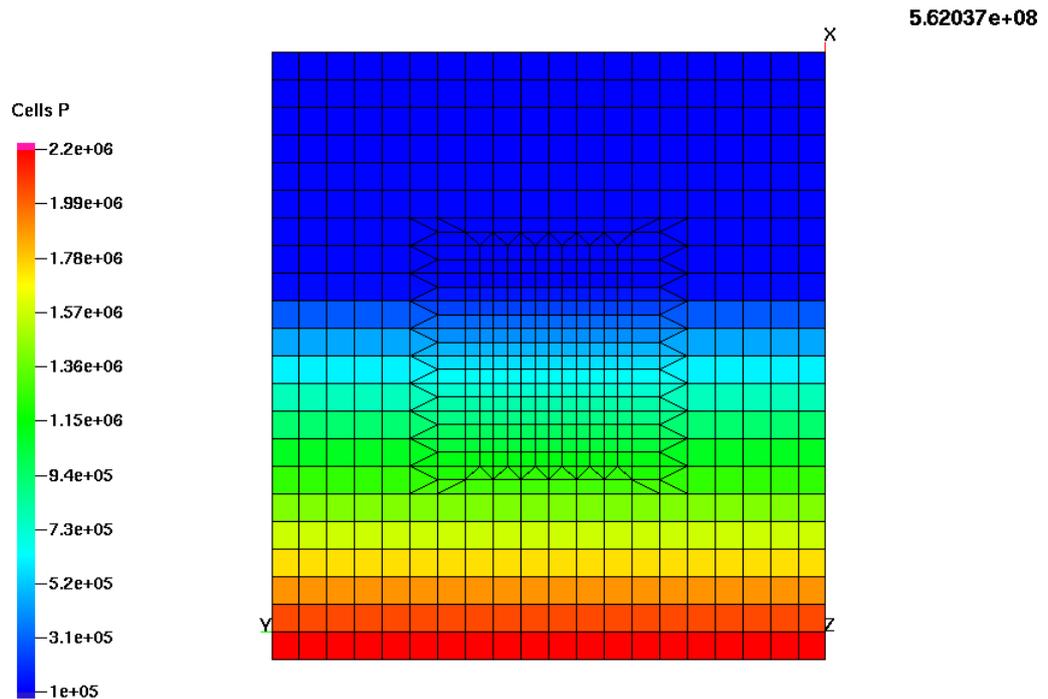


Abb. 3.5: Druckverteilung nach $5,62037E+08$ Sekunden im Fall der Zweiphasenströmung

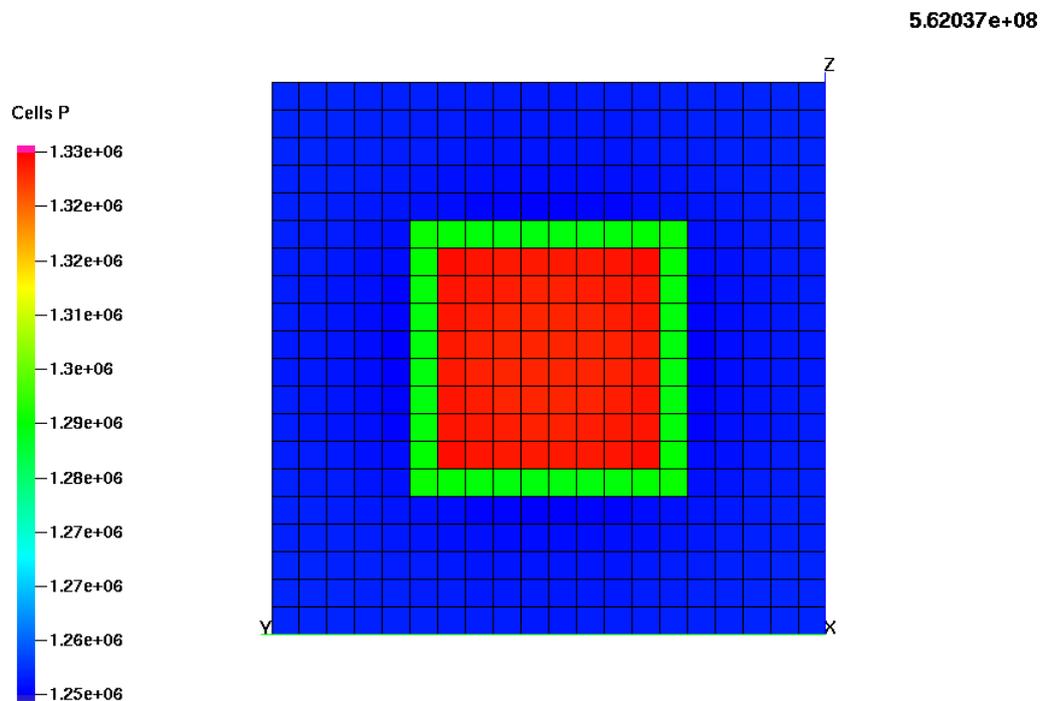


Abb. 3.6: Druckverteilung auf der y-z-Ebene unmittelbar vor dem verfeinerten Gebiet (in Strömungsrichtung) nach $5,62037E+08$ Sekunden im Fall der Zweiphasenströmung

4 Schlussfolgerungen

Die Untersuchungen zeigen, dass die Verwendung nicht-kartesischer konformer Gitter in TOUGH2 im Allgemeinen zu Fehlern bei der Strömungsberechnung führt. Das Verfahren der konsistenten Orthogonalisierung, bei dem die Interface-Flächen und die Zentrumsabstände zum Interface so modifiziert werden,

- dass es ein zugehöriges konformes Gitter mit diesen Gitterdaten gibt und
- für alle Elementverbindungen dieses Gitters Orthogonalität erzeugt wird,

führte in allen aufgezeigten Fällen zur vollständigen Fehlerkorrektur. Dies betrifft auch die zwei in diesem Vorhaben entwickelten Elementstrukturen („Keilelement“ und „Pyramidenelement“), mit denen konforme Blockgitter verfeinert werden können. Wie die Betrachtung inkonsistenter Orthogonalisierungsverfahren zeigte, genügt eine Orthogonalisierung der Zentrumsverbindungen und Interface-Flächen alleine nicht zur Fehlerkorrektur.

Zur Verwendung nicht-kartesischer Gitter in TOUGH2 wurde ein Gitterkonverter entwickelt, der FLAC3D-Gitter in TOUGH2-Gitter umwandelt. Der Konverter wurde in der FLAC3D-internen Programmiersprache FISH implementiert. Der Konverter beinhaltet Elementtyp-spezifische Orthogonalisierungsverfahren zur Korrektur von Fehlern bei der Strömungsberechnung. Zur Verwendung des korrigierten Gitters in TOUGH2 sind allerdings Modifikationen des Codes in Hinblick auf die angewendeten Wichtungungsverfahren erforderlich.

Mit den entwickelten Elementstrukturen zur Gitterverfeinerung wurde ein kubisches Gebiet lokal verfeinert. Das ein- und zweiphasige Strömungsverhalten dieses Gebietes wurde numerisch mit TOUGH2 untersucht. Bei konsistenter Orthogonalisierung des Gitters entstand im Fall der einphasigen Durchströmung ein vernachlässigbar kleiner Fehler bei der Strömungsberechnung. Im zweiphasigen Fall wurde ein kleiner Fehler im Bereich einiger Prozent festgestellt, der durch das spezifische Verhalten der Verfeinerungselemente, aber auch durch die Instationarität der Strömung und die heterogene Diskretisierung des Gebiets verursacht sein könnte.

Insgesamt zeigt sich, dass der Code TOUGH2 grundsätzlich auch mit nicht-kartesischen Gittern arbeiten kann, sofern passende Orthogonalisierungsverfahren zur Fehlerkorrektur angewendet werden.

Literaturverzeichnis

- /NAV 08/ M. Navarro (ed.), B. Baltés, T. Beuth, G. Bracke, H. Fischer, K. Fischer-Appelt, S. Hotzel, V. Javeri, A. Kindt, L. Lambers, J. Larue, B. McStocker, U. Oppermann, E. Schrödl: Verfolgung und Bewertung der Fortentwicklung des Standes von Wissenschaft und Technik beim Nachweis der Langzeitsicherheit von Endlagern, Abschlussbericht zum Vorhaben SR 2548. Gesellschaft für Anlagen- und Reaktorsicherheit (GRS) mbH, GRS - A – 3418, November 2008.
- /PRU 99/ Pruess, K., Oldenburg, C. und Moridis, G., TOUGH2 User's Guide, Version 2.0, Paper LBNL-43134, Lawrence Berkeley National Laboratory: Berkeley. pp. 198. 1999.

Abbildungsverzeichnis

Abb. 2.1:	Diagonal geteiltes Element: Definition und Modifikationen.....	6
Abb. 2.2:	Relativer Fluss bei einem diagonal geteilten Element.....	11
Abb. 2.3:	Maximaler Winkel zwischen Zentrumsverbindungen und zugehörigen Flächennormalen.....	12
Abb. 2.4	Geschertes Blockgitter als Ausschnitt eines ausgedehnten 2- dimensionalen gescherten Blockgitters.....	13
Abb. 2.5:	Verfeinerungselemente für Rechteckgitter.....	15
Abb. 2.6:	Element zur eindimensionalen Gitterverfeinerung eines Halbraums („Keilplatte“).	16
Abb. 2.7:	Elemente zur eindimensionalen Gitterverfeinerung in einem geschlossenen Gebiet.....	16
Abb. 2.8:	Dreidimensionale Gitterverfeinerung in einem geschlossenen Gebiet.....	17
Abb. 2.9:	Konsistente Orthogonalisierung der Verfeinerungselemente.....	19
Abb. 2.10:	Keilelement mit Randelementen für die Strömungsberechnung.....	20
Abb. 2.11	Relativer Fluss bei Durchströmung des Keilelementes in z-Richtung (Fall A).....	21
Abb. 2.12	Relativer Fluss bei Durchströmung des Keilelementes in x-Richtung (Fall B).....	23
Abb. 2.13:	Pyramidenelemente mit Randelementen für die Strömungsberechnung.....	24
Abb. 2.14	Relativer Fluss bei Durchströmung des Pyramidenelementes in x- Richtung (Fall A).....	25
Abb. 2.15	Relativer Fluss bei Durchströmung des Pyramidenelementes in z- Richtung (Fall B).....	26

Abb. 3.1:	Schnitt durch das kubische Modellgebiet mit zentraler Gitterverfeinerung	29
Abb. 3.2:	Druckverteilung bei stationärer Strömung	30
Abb. 3.3:	Druckverteilung auf der y-z-Ebene unmittelbar vor dem verfeinerten Gebiet (in Strömungsrichtung) im Fall der Einphasenströmung	31
Abb. 3.4:	Verteilung der Gassättigung nach 5,62037E+08 Sekunden im Fall der Zweiphasenströmung	32
Abb. 3.5:	Druckverteilung nach 5,62037E+08 Sekunden im Fall der Zweiphasenströmung	33
Abb. 3.6:	Druckverteilung auf der y-z-Ebene unmittelbar vor dem verfeinerten Gebiet (in Strömungsrichtung) nach 5,62037E+08 Sekunden im Fall der Zweiphasenströmung	33

Tabellenverzeichnis

Tab. 2.1: Zentrumsabstände und Interfaceflächen für das diagonal geteilte Element	10
Tab. 2.2: Zentrumsabstände, Interfaceflächen und Fehler für das gescherte Blockgitter.....	14