

„Grundwassersysteme und Numerik“ Veranstaltung im Modul Hydrosystemanalyse

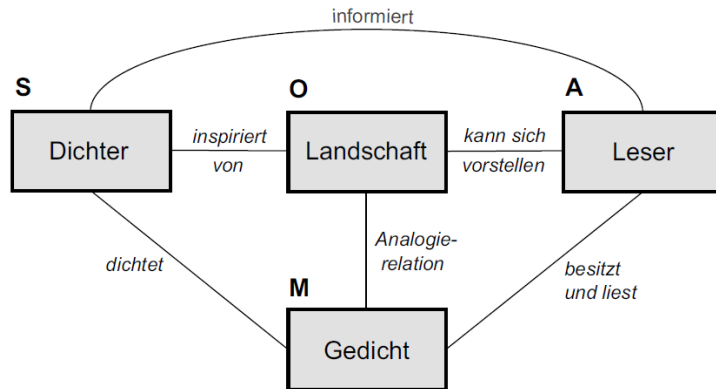
- Strömungsgleichungen der Grundwasserhydraulik

Prof. Dr. Olaf Kolditz
Dr. Erik Nixdorf

07.05.2021

■ Modelltheorie

- „*Modell ist stets Modell-wovon-wozu-für wen.*“



Peters, 1998

■ Mathematische Modelle zur Grundwassermodellierung

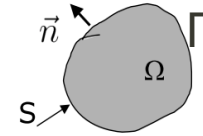
| Hauptprozess | Abhängige Variable | Anwendungsabhängige Komponenten |
|----------------|---|---|
| Strömung | Fluiddruck, Standrohrspiegelhöhe, Grundwasserflurabstand Sättigung, ... | Poren/Kluft/Karstaquifere Teilsättigung Einphasen/zweiphasen Strömung Ungespannt/gespannte GWL |
| Wärmetransport | Temperatur, Enthalpie, Innere Energie | Dieselben wie Strömung + Konvektion Wärmeleitung Strahlung |
| Stofftransport | Konzentration | Dieselben wie Strömung + Konvektion Dispersion Reaktion |
| Mechanik | Verformung Spannung | Elastische Medien Plastische Medien Viskoelastische Medien |

- Sie wollen ein numerisches Grundwassermodell nutzen um Fragestellung XYZ per Simulation zu beantworten. Welche/welchen Prozess/Prozesskomponenten, Diskretisierung, Datenbedarf benötigen sie dafür?

Erhaltungsgesetze

- **Numerischen Grundwassermodelle** basieren auf der **Zerlegung** eines Systems in Teilgebiete und der Aufstellung von **Bilanzgleichungen** (partielle Differentialgleichungen) für jedes Gebiet

$$\frac{\partial}{\partial t} \int_{\Omega} S(x, t) dx = - \int_{\Gamma} \langle J(x, t) | n(x) \rangle d\sigma + \int_{\Omega} Q(x, t) dx,$$

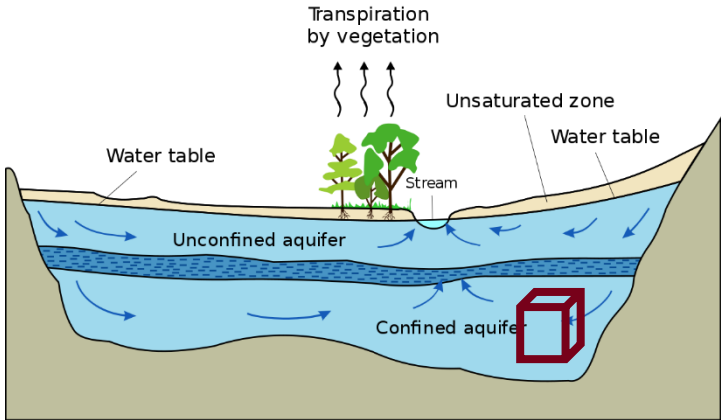






In Worten: $\left\{ \begin{array}{l} \text{Akkumulations} \\ \text{rate für } S \text{ in } \Omega \end{array} \right\} = \left\{ \begin{array}{l} \text{Fluss von } J \text{ in } \Omega \\ \text{durch die} \\ \text{Oberfläche } \Gamma \end{array} \right\} + \left\{ \begin{array}{l} \text{Quellen und} \\ \text{Senken in } \Omega \end{array} \right\}$

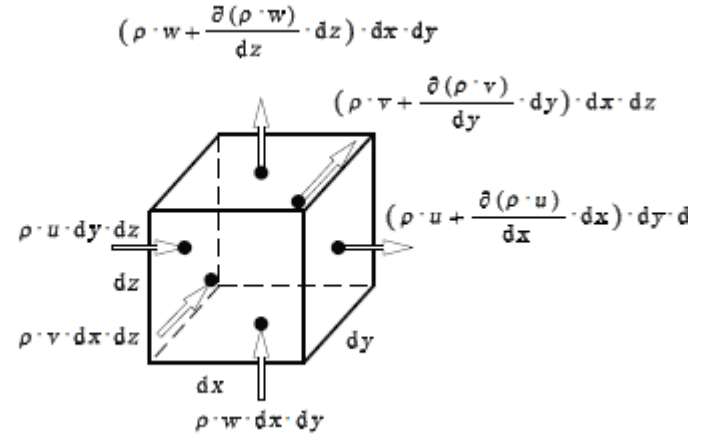
Die Kontinuitätsgleichung kann mit dem Gaußschen Integralsatz hergeleitet werden:

$$\frac{\partial \rho}{\partial t} + \text{div}[\rho v] - Q_m = 0 \quad \text{mit} \quad S = \rho(x, t, p, X, T)$$

Massenerhaltungsgesetz für ein Kontrollvolumen



-  High hydraulic-conductivity aquifer
-  Low hydraulic-conductivity confining unit
-  Very low hydraulic-conductivity bedrock
-  Direction of ground-water flow

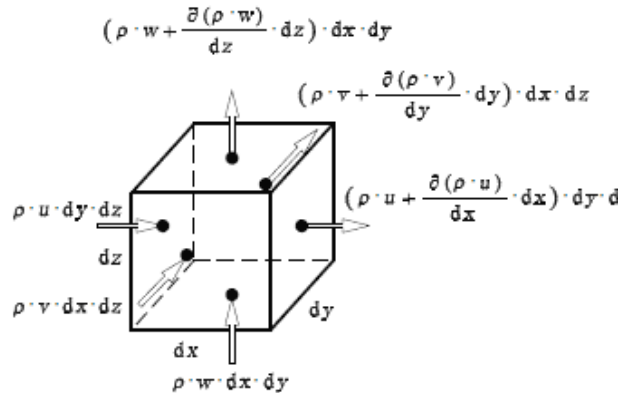


$$\vec{v} = \begin{pmatrix} u \\ v \\ z \end{pmatrix}$$

<https://tinyurl.com/veafz3ch>

Massenerhaltungsgesetz für ein Kontrollvolumen

Änderung der Masse in einem Volumenelement über die Zeit = Σ des einströmenden Massenstroms in das Volumenelement - Σ des ausströmenden Massenstroms aus dem Volumenelement



links: $\dot{m} = \rho \cdot u \cdot dy \cdot dz$

Taylor Reihe

rechts: $\dot{m} = \left(\rho \cdot u + \frac{\delta(\rho \cdot u)}{\delta x} \cdot dx \right) \cdot dy \cdot dz$

Schauen wir uns das ganze Element mit den Kantenlängen dx , dy and dz and dem Volumen $dV = dx \cdot dy \cdot dz$ an

Massenbilanz in einem Kontrollvolumen

- mathematischen Ausdruck für die zeitliche "Änderung der Masse im Volumenelement

$$\frac{\partial \rho}{\partial t} \cdot dx \cdot dy \cdot dz = \left(\rho \cdot u - \left(\rho \cdot u + \frac{\partial(\rho \cdot u)}{\partial x} \cdot dx \right) \right) \cdot dy \cdot dz +$$
$$\left(\rho \cdot v - \left(\rho \cdot v + \frac{\partial(\rho \cdot v)}{\partial y} \cdot dy \right) \right) \cdot dx \cdot dz +$$
$$\left(\rho \cdot w - \left(\rho \cdot w + \frac{\partial(\rho \cdot w)}{\partial z} \cdot dz \right) \right) \cdot dx \cdot dy$$

- Resultiert in:
$$\frac{\partial \rho}{\partial t} + \frac{\partial(\rho \cdot u)}{\partial x} + \frac{\partial(\rho \cdot v)}{\partial y} + \frac{\partial(\rho \cdot w)}{\partial z} = 0$$

- Umschreiben und Quellterme:
$$\frac{\partial \rho}{\partial t} + \operatorname{div}[\rho \mathbf{v}] - Q_m = 0$$

Druckbasierte Gleichung

- Wie definieren wir die Druckabhängigkeiten
- Wie hängt die Geschwindigkeit vom Druck ab?
- Welche Geschwindigkeit meinen wir hier? ~~Relativ-Fluid~~
- Wie ist die Eigenschaften des Korngerüsts und der Körner zu betrachten? → Nur der Porenraumanteil ϕ

$$(1) \quad \frac{\partial \rho_f}{\partial t} + \operatorname{div}[\rho_f \mathbf{v}] - Q_m = 0$$

$$(2) \quad \frac{\partial(\phi \rho_f)}{\partial t} + \operatorname{div}[\phi \rho_f \mathbf{v}_f] - Q_m = 0$$

- Anwendung der Ketten- und Produktregel auf den ersten Term:

$$(3) \quad \frac{\partial(\phi \rho_f)}{\partial t} = \left(\rho_f \frac{\partial \phi}{\partial p} + \phi \frac{\partial \rho_f}{\partial p} \right) \frac{\partial p}{\partial t}$$

Massenänderungsrate durch Porenraumveränderung

Dichteänderung des Wassers

Druckbasierte Gleichung

- (1) in (2)

$$\left(\frac{\partial \phi}{\partial p} + \frac{\phi}{\rho_f} \frac{\partial \rho_f}{\partial p} \right) \frac{\partial p}{\partial t} + \operatorname{div}[\phi \mathbf{v}_f] - \frac{Q_m}{\rho_f} = 0$$

- Der Term in den Klammern wird (in der oberflächennahen Hydrogeologie) oft als Summe zweier Konstanten, der Matrixkompressibilität und der Fluidkompressibilität, gesehen:

$$\left((1 - \phi)\beta_m + \phi\beta_f \right) \frac{\partial p}{\partial t} + \operatorname{div}[\phi \mathbf{v}_f] - \frac{Q_m}{\rho_f} = 0$$

| Rocks | Porosity (%) |
|--------------------------------|---------------------|
| Fractured basalt | 0.05 - 0.50 |
| Karst limestone | 0.05 - 0.50 |
| Sandstone | 0.05 - 0.30 |
| Limestone, dolomite | 0.00 - 0.20 |
| Shale | 0.00 - 0.10 |
| Fractured crystalline rock | 0.00 - 0.10 |
| Dense crystalline rock | 0.00 - 0.05 |
| Unconsolidated Deposits | |
| Gravel | 0.25 - 0.40 |
| Sand | 0.25 - 0.50 |
| Silt | 0.35 - 0.50 |
| Clay | 0.40 - 0.70 |

From groundwatergeek.com

$$\beta_m = (1 - \phi)^{-1} \delta\phi / \delta p$$

$$\beta_f = \rho_f^{-1} \delta\rho_f / \delta p.$$



Druckbasierte Gleichung

$$\left((1 - \phi)\beta_m + \phi\beta_f \right) \frac{\partial p}{\partial t} + \operatorname{div}[\phi v_f] - \frac{Q_m}{\rho_f} = 0$$

- Der Term in den Klammern ist gleich dem Speicherkoeffizienten geteilt durch die Fluidichte und die Erdbeschleunigung, die zu einer neuen Konstante S' zusammengefasst werden kann:

$$S' \frac{\partial p}{\partial t} + \operatorname{div}[\phi v_f] - Q_V$$

- Schließlich können wir das Darcy-Gesetz anwenden:

$$\phi(v_f - v_s) = -\frac{\kappa}{\mu} \nabla (p + \rho_f g z)$$

$$\Psi = p + \rho_f g z$$

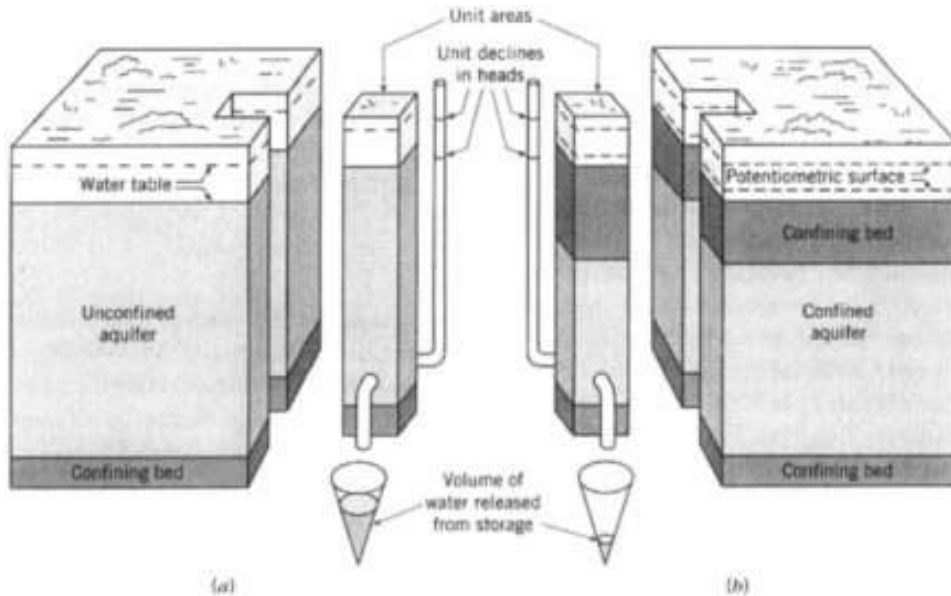
Druckbasierte Gleichung

- Mit $v_s=0$ erhalten wir:

$$\dot{S} \frac{\partial p}{\partial t} - \operatorname{div} \left[\frac{\kappa}{\mu} \operatorname{grad}(p + \rho_f g z) \right] - \frac{Q_p}{\rho_f} = 0$$

- Zwei Fluideigenschaften ρ_f , die Fluidichte und μ , die dynamische Viskosität
- κ ist die intrinsische Permeabilität des porösen Mediums, die raum- und richtungsabhängig ist
- S' ist der zuvor eingeführte Speicherterm, der raumabhängig ist
- Die druckbasierten Grundwassergleichung können für die numerische Modellierung unter hinzuziehen von Rand- und Anfangsbedingungen (**Vorlesung 5**) genutzt werden

Speicherkoeffizient



Values of specific yield, from Johnson (1967)

| Material | Specific Yield (%) | | |
|--------------------------------|--------------------|-----|-----|
| | min | avg | max |
| <i>Unconsolidated deposits</i> | | | |
| Clay | 0 | 2 | 5 |
| Sandy clay (mud) | 3 | 7 | 12 |
| Silt | 3 | 18 | 19 |
| Fine sand | 10 | 21 | 28 |
| Medium sand | 15 | 26 | 32 |
| Coarse sand | 20 | 27 | 35 |
| Gravelly sand | 20 | 25 | 35 |
| Fine gravel | 21 | 25 | 35 |
| Medium gravel | 13 | 23 | 26 |
| Coarse gravel | 12 | 22 | 26 |

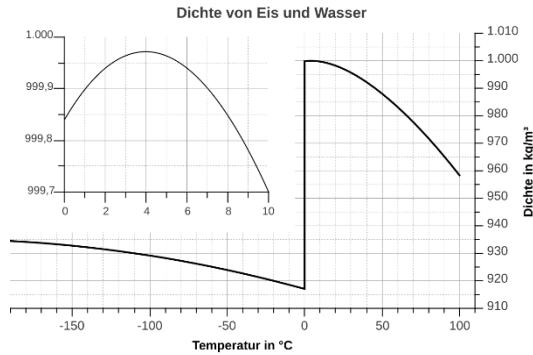
Table 4 Values of specific storage for given values of aquifer compressibility assuming porosity equal to 15 % (After Younger, 1993)

| Typical Lithologies | Aquifer Compressibility (m^2/kg) | Specific Storage (m^3) |
|--|--|-----------------------------------|
| Clay | 10^6 | 9.81×10^3 |
| Silt, fine sand | 10^7 | 9.82×10^4 |
| Medium sand, fine gravel | 10^8 | 9.87×10^5 |
| Coarse sand, medium gravel, highly fissured rock | 10^9 | 1.05×10^6 |
| Coarse gravel, moderately fissured rock | 10^{10} | 1.63×10^6 |
| Unfissured rock | 10^{11} | 7.46×10^7 |

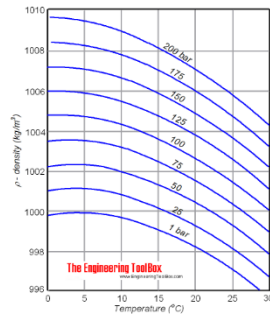
ungespannt

gespannt

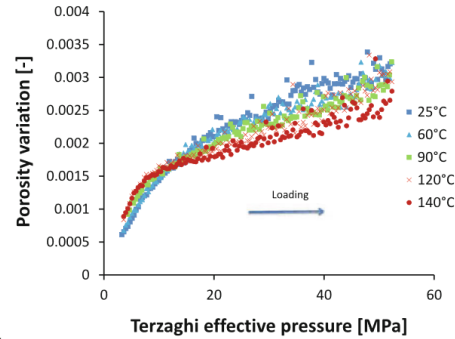
Koeffizientendiskussion



Temperaturabhängigkeit der Wasserdichte
(Wikipedia)



Druckabhängigkeit der Wasserdichte



Druckabhängigkeit der Porosität in Sandstein (Hassan et al, 2014)

Table 1
Porosity Models in Select GSFs

| GSF code | Porosity model | Matrix compressibility |
|--|--|--|
| FEHM (Zyvoloski et al, 2011) | $\phi = \phi_0 + \beta_m (P - P_0)$ | $\beta_m^* = d\phi / dP$ |
| PFLOTTRAN (Lichtner et al, 2015) | $\phi = 1 - (1 - \phi_0) e^{-\beta_m (P - P_0)}$ | $\beta_m = (1 - \phi)^{-1} (d\phi / dP)$ |
| STOMP ^a (White & Oostrom, 2000) | $\phi = 1 - (1 - \phi_0) e^{-\beta_m (P - P_0)}$ | $\beta_m = (1 - \phi)^{-1} (d\phi / dP)$ |
| ECLIPSE ^b (Espeveld, 2015; Pettersen, 2006) | $\phi = \phi_0 e^{\beta_m (P - P_0)}$ | $\beta_m^* = \phi^{-1} (d\phi / dP)$ |
| BOAST ^c (Fanchi et al, 1982) | $\phi = \phi_0 e^{\beta_m (P - P_0)}$ | $\beta_m^* = \phi^{-1} (d\phi / dP)$ |
| TOUGH2 ^{b,d} (Pruess et al, 1999) | $\phi = \phi_0 e^{\beta_m (P - P_0)}$ | $\beta_m^* = \phi^{-1} (d\phi / dP)$ |

^aCompressibility is calculated from specific storage.

^bPorosity model is available, but it is unclear if it is the default.

^cBOAST has β_m^* as part of the total compressibility.

^dAssumes isothermal conditions.

Implementation im Code (Birdsell et al, 2014)

Vertical, drained compressibilities^[5]

| Material | β (m ² /N or Pa ⁻¹) |
|---|--|
| Plastic clay | $2 \times 10^{-6} - 2.6 \times 10^{-7}$ |
| Stiff clay | $2.6 \times 10^{-7} - 1.3 \times 10^{-7}$ |
| Medium-hard clay | $1.3 \times 10^{-7} - 6.9 \times 10^{-8}$ |
| Loose sand | $1 \times 10^{-7} - 5.2 \times 10^{-8}$ |
| Dense sand | $2 \times 10^{-8} - 1.3 \times 10^{-8}$ |
| Dense, sandy gravel | $1 \times 10^{-8} - 5.2 \times 10^{-9}$ |
| Ethyl alcohol ^[6] | 1.1×10^{-9} |
| Carbon disulfide ^[6] | 9.3×10^{-10} |
| Rock, fissured | $6.9 \times 10^{-10} - 3.3 \times 10^{-10}$ |
| Water at 25 °C (undrained) ^[7] | 4.6×10^{-10} |
| Rock, sound | $< 3.3 \times 10^{-10}$ |
| Glycerine ^[6] | 2.1×10^{-10} |
| Mercury ^[6] | 3.7×10^{-11} |

Potentialbasierte Form

▪ Hydraulisches Potential: $H = \frac{p}{\rho_f g} + z$

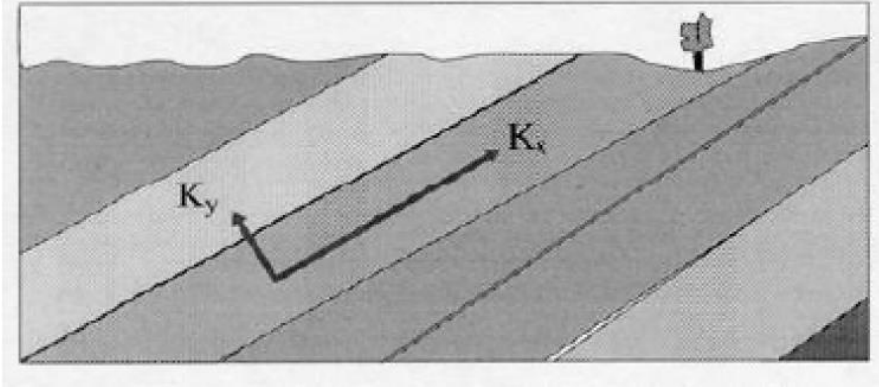
▪ Hydraulische Leitfähigkeit: $K = \frac{\kappa g \rho_f}{\mu}$

▪ Speicherkoeffizient $\hat{S} = \frac{S}{g \rho_f}$

- Potential-basierte Form für Strömung durch ein anisotropes gesättigtes poröses Medium:

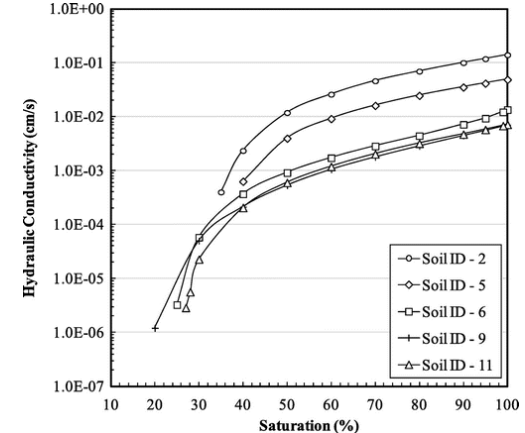
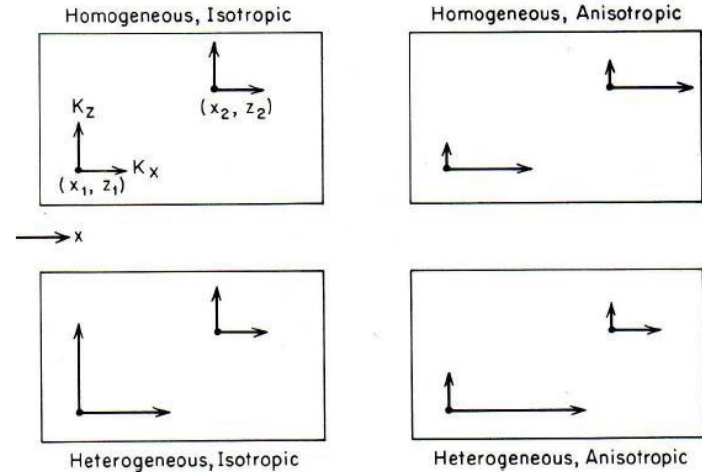
$$S \frac{\partial H}{\partial t} - \operatorname{div}[K \operatorname{grad} H] - Q_V = 0$$

Hydraulische Leitfähigkeit



- Hydraulische Leitfähigkeit ist abhängig von Strömungsrichtung, Aquifertyp und Sättigung
- Für isotrope, homogene Bedingungen gilt:

$$S \frac{\partial H}{\partial t} - K \Delta H - Q_V = 0$$



<https://tinyurl.com/k4pz8m86>

Lösungen mit reduzierter Dimensionalität

- Integration über die Tiefe (z-Richtung) führt zur zweidimensionalen Grundwassergleichung ($\delta h / \delta z = 0$, $\delta K / \delta z = 0$)

$$S \frac{\partial H}{\partial t} - \operatorname{div}[KM \operatorname{grad} H] - Q_V = 0$$

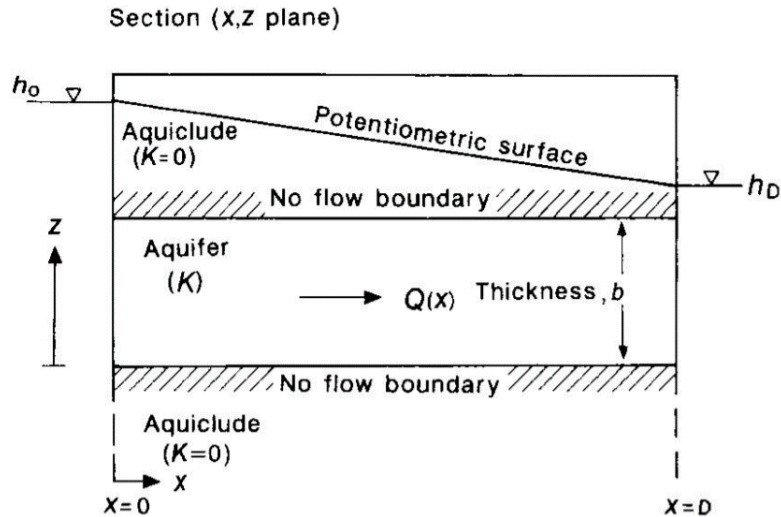
Gespannt, linear

$$S_y \frac{\partial H}{\partial t} - \operatorname{div}[KH \operatorname{grad} H] - Q_V = 0$$

Ungespannt, nichtlinear

- Das Produkt aus Hydraulischer Leitfähigkeit (K) und Aquifermächtigkeit (M) wird auch als Transmissivität (T) bezeichnet
- Beachten sie, S, ist der spezifische Speicherkoeffizient und S_y der „specific yield“, ~ effektive Porosität

Einfache Lösungen, Beispiel



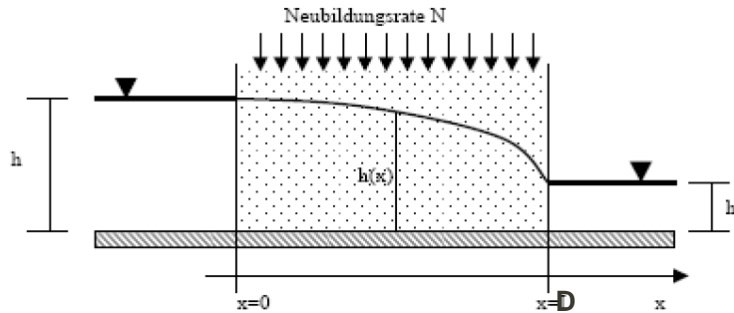
~~$$S \frac{\delta H}{\delta t} - \text{div}[KM \text{grad } H] - Q_V = 0$$~~



$$h(x) = \frac{h_D - h_0}{D} x + h_0$$

- Gespannter Aquifer ohne Neubildung und zeitliche Änderungen

Einfache Lösungen, Beispiel



$$h(x=0) = h_0$$
$$h(x=L) = h_L$$

- Ungespannter Aquifer mit Grundwasserneubildung

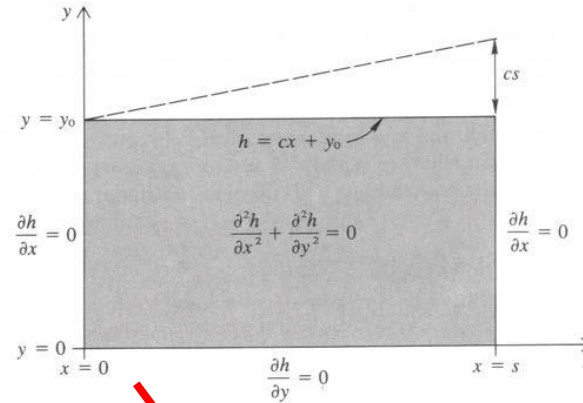
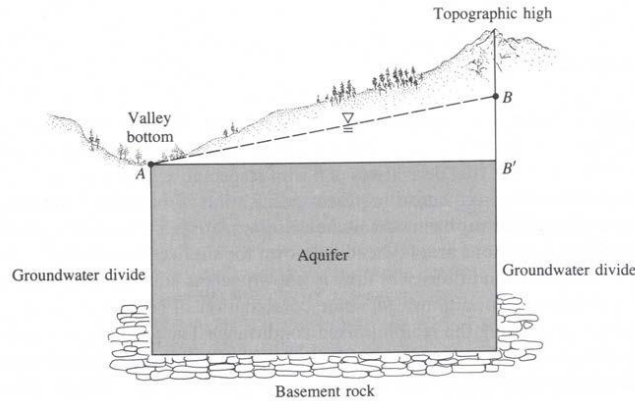
$$S_y \frac{\delta H}{\delta t} - \text{div}[KH \text{grad } H] - Q_V = 0$$



$$h^2(x) = \frac{h_D^2 - h_0^2}{D} x + h_0^2 + \frac{N}{K} x(D - x)$$

Einfache Lösungen, Beispiel

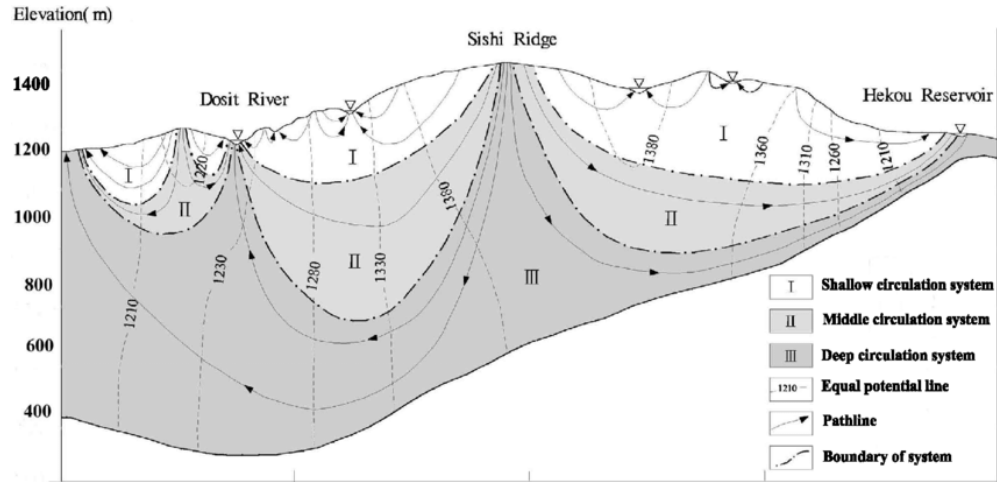
- Gespannter 2D Aquifer zwischen zwei Wasserscheiden (Toth Strömung)



~~$$S_y \frac{\delta H}{\delta t} - \text{div}[KH \text{grad } H] - Q_V = 0$$~~

$$h(x, y) = y_0 + \frac{cs}{2} - \frac{4cs}{\pi^2} \sum_{m=0}^{\infty} \frac{\cos[(2m+1)\pi x / s] \cosh[(2m+1)\pi y / s]}{(2m+1)^2 \cosh[(2m+1)\pi y_0 / s]}$$

Einfache Lösungen Beispiele



<https://tinyurl.com/y289htxz>

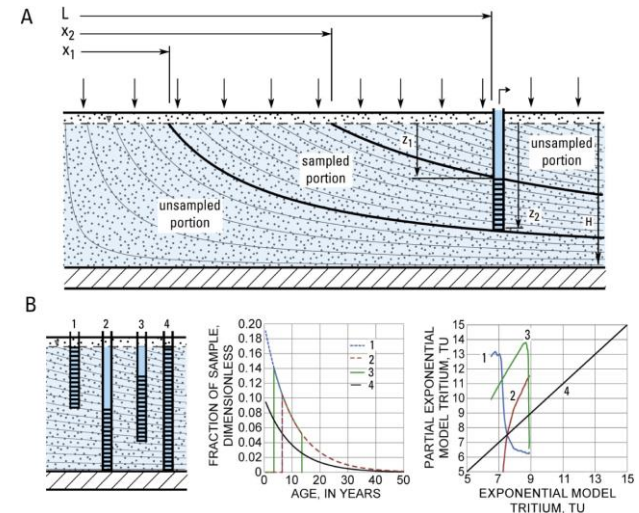
Handkalkulationen im 21. Jahrhundert, wozu?

- Benchmarking von numerischen mathematischen Modellen
- Vermeidung unnötiger Komplexität (Transient, 3D, etc)
- Abschätzung Parametersensitivitäten und Unsicherheiten
- Schärfen der „Modellierintuition“ (Haitjema, 2006)

A homogeneous aquifer with constant thickness (H), and porosity (ϕ), and uniform recharge rate (r) has the following depth-dependent age relation (Vogel, 1967):

$$T(z) = -\frac{H\phi}{r} \ln\left(\frac{H-z}{H}\right) \quad (3)$$

$$\tau_s = \tau_{aq} = \left(\frac{H\phi}{r}\right)$$



Jurgens et al 2016; Vogel 1967

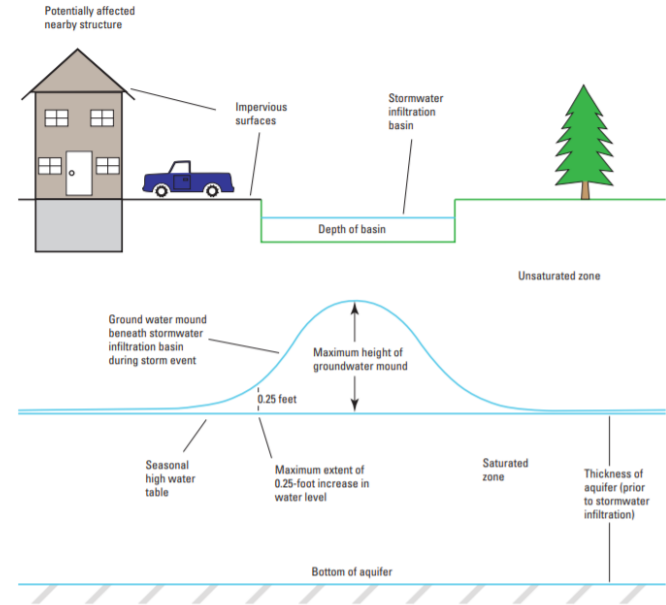
Faustregeln numerische Modellierung

- Fennemore and Hantzche (1983)

$$z_m = IC \left(\frac{L}{4} \right)^n \left(\frac{1}{K\bar{h}} \right)^{0.5n} \left(\frac{t}{S_y} \right)^{1-0.5n}$$

- Haitjema (1995)
$$\Delta h = \frac{RL^2}{mkb}$$
- Erkenntnis für die Modellierung:

- Kalibrierung auf Wasserstände ergibt nur Aussagen über das Verhältnis Neubildung/Transmissivität
- Kalibrierung ist insensitive für hohe Transmissivitäten und im Umfeld von Randbedingungen
- **Viele Weitere “Faustregeln” sind ableitbar!!!**



Grundwasserhügel