

# GIESSENER GEOLOGISCHE SCHRIFTEN

Beiträge zur Geologie, Angewandten Geologie, Mineralogie, Petrologie, Geochemie  
Contributions to Geology, Applied Geology, Mineralogy, Petrology, Geochemistry

Herausgegeben von K. Knoblich und G. Strübel

Schriftleitung W. Blind, K. Knoblich, G. Strübel

---

Nr. 43

## Entwicklung, Validierung und Anwendung eines dreidimensionalen, strömungsgekoppelten finite Differenzen Wärmetransportmodells

Dirk R. Brehm



LENZ - VERLAG · GIESSEN

D 26

Die vorliegende Arbeit wurde als Dissertation zur Erlangung des Doktorgrades der Naturwissenschaften, Fachbereich Geowissenschaften und Geographie der Justus-Liebig-Universität Giessen angenommen.

Anschrift des Verfassers:

Dr. Dirk R. Brehm  
Institut für angewandte Geowissenschaften  
Diezstraße 15  
D-6300 Giessen

Anschrift der Schriftleitung:

GIESSENER GEOLOGISCHE SCHRIFTEN  
c/o Institut für angewandte Geowissenschaften  
Diezstraße 15  
D-6300 GIESSEN

ISSN 0340 - 0654

COPYRIGHT © 1989 by LENZ-VERLAG-GIESSEN

DRUCK: FOTO-DRUCK LENZ · 6300 Giessen · Tel. 0641/76026

## Inhaltsverzeichnis

Vorwort .....	i
Kurzfassung .....	ii
Abstract .....	iii
Nomenklatur .....	iv
Liste der Abbildungen .....	vii
Liste der Tabellen .....	xii
<b>1 Einleitung .....</b>	<b>1</b>
1.1 Problemstellung .....	2
1.2 Bisherige Arbeiten .....	3
<b>2 Numerische Grundlagen .....</b>	<b>5</b>
2.1 Strömungsberechnung .....	5
2.2 Mechanismen des Wärmetransports .....	6
2.2.1 Konduktion .....	6
2.2.2 Strahlung .....	8
2.2.3 Konvektion .....	8
2.3 Konvektion und Diffusion .....	9
2.4 Diffusion und Dispersion in porösen Medien .....	11
2.5 Phasenwechsel von Wasser .....	12
<b>3 Numerische Behandlung der Gleichungen .....</b>	<b>15</b>
3.1 Konstruktion der finiten Differenzen Approximation ...	16
3.1.1 Der Explizit-Ansatz .....	17
3.1.2 Der Implizit-Ansatz .....	19
3.1.3 Der Crank-Nicolson-Ansatz .....	19

3.2	Möglichkeiten der Diskretisierung	20	6.3	Temperaturprognose in große Tiefen	79
3.3	Die Diskretisierungsgleichungen	22	<b>7</b>	<b>Diskussion</b>	<b>82</b>
3.4	Iterative Lösungsverfahren	29	<b>8</b>	<b>Literatur</b>	<b>84</b>
3.5	Der Thomas-Algorithmus	37		Anhang 1: Physikalische Eigenschaften	A.1.1
3.6	Behandlung der Randbedingungen	39		Anhang 2: Diagramme der Schwalbacher Kalibrierungsläufe	A.2.1
<b>4</b>	<b>Programmentwicklung</b>	<b>41</b>			
<b>5</b>	<b>Validierung des Modells</b>	<b>44</b>			
5.1	Konduktiver Wärmetransport	44			
5.2	Instationärer, eindimensionaler Wärmetransport	45			
5.3	Eindimensionales Konvektionsproblem	47			
5.4	Brunnenabsenkung (Theis-Problem)	49			
5.5	Testsimulation eines Stufenpumpversuches	51			
5.6	Leakage aus einem Oberflächengewässer	54			
<b>6</b>	<b>Anwendung</b>	<b>58</b>			
6.1	Die Forschungsanlage Schwalbach	58			
6.1.1	Beschreibung der Anlage	58			
6.1.2	Diskretisierung	60			
6.1.3	Wärmeentzug mit quasikonstanter Soletemperatur	61			
6.1.4	Wärmetransport im Boden	66			
6.2	Die Erdsondenanlage Göttingen	69			
6.2.1	Beschreibung der Anlage	69			
6.2.2	Diskretisierung	70			
6.2.3	Wärmentzug mit konstanter Bohrlochtemperatur	73			
6.2.4	Wärmentzug mit konstanter Entzugsleistung	76			

## Vorwort

Die Anregung zu der vorliegenden Arbeit verdanke ich Herrn Prof. Dr. K. Knoblich, der auch durch eine Vielzahl von Ratschlägen die theoretische Entwicklung des Programmes erleichterte. Ferner gewährte er mir, als sein wissenschaftlicher Mitarbeiter am Institut für Angewandte Geowissenschaften der Justus-Liebig-Universität Gießen, sehr viel Freiraum für die Fertigstellung der Arbeit.

Den Herrn Prof. Dr. U. Haack, Institut für Geowissenschaften und Lithosphärenforschung, und Prof. Dr. H. Wilhelm, Geophysikalisches Institut der Universität Fridericiana Karlsruhe, danke ich für ihr Interesse und die bereitwillige Übernahme des Korreferats.

Der Helmut Hund GmbH und dem Bundesminister für Forschung und Technologie (BMFT) gebührt große Anerkennung für die finanzielle und materielle Unterstützung, die die Durchführung der vorliegenden Untersuchungen überhaupt erst ermöglichte.

Herrn Dipl.-Geol. B. Sanner, Helmut Hund GmbH, sei für die gute Zusammenarbeit im Rahmen des geförderten Forschungsprojektes gedankt.

Mein Kollege, Herr Dipl.-Geol. M. Einig, erleichterte mir durch die vielen Diskussionen und Tips den Einstieg in die für Geologen etwas ungewohnte Materie der numerischen Methoden des Massen- und Stofftransports.

Dem Hochschulrechenzentrum Gießen schulde ich Dank für die zur Verfügung gestellte Rechenzeit sowie die Benutzung der Peripheriegeräte. Seine Mitarbeiter erleichterten mir mit vielen wertvollen Tips und Tricks den Umgang mit dem Großrechner *CDC 860*.

Bei Herrn Dr. Benzler, Fa. Mettler - Gießen, möchte ich mich für die Durchführung der temperaturabhängigen Wärmekapazitätsmessungen bedanken.

## Kurzfassung

Die vorliegende Arbeit beschreibt die Entwicklung, Validierung und Kalibrierung eines dreidimensionalen, numerischen Modells zur Simulation des instationären Fluid- und Wärmetransports in gesättigten, heterogenen, porösen Medien. Mit diesem Modell sollte der Prozess der Wärmeübertragung im Erdreich, wie er durch den Betrieb von Wärmepumpenanlagen mit vertikalen Erdkollektoren angeregt wird, näher untersucht sowie Möglichkeiten und Grenzen derartiger Systeme aufgezeigt werden. Darüber hinaus werden Simulationsläufe für die Prognose des in größeren Tiefen ( $> 1000\text{m}$ ) herrschenden Temperaturfeldes sowie für den konduktiven Wärmetransport in der ungesättigten Bodenzone vorgestellt.

Das vorliegende finite Differenzenmodell, ein modular aufgebautes FORTRAN77 Computer-Programm, löst simultan die Strömungsgleichung und die konduktiv-konvektive Wärmetransportgleichung durch Einsatz zweier alternativer Iterationsverfahren. Es können jedoch auch Teilaspekte wie Grundwasserströmung oder rein konduktiver Wärmetransport simuliert werden.

## Abstract

This paper describes the development, validation and calibration of a three-dimensional numerical model which enables the simulation of transient mass and heat transfer in saturated heterogenous porous media. The major purpose was to get a better impression of heat transfer process in the surrounding of vertical earth heat exchangers which are used as a heat source for heat pumps. Additionally some sample computations dealing with forecasting the temperature field in great depth ( $> 1000\text{m}$ ) and the pure conductive heat transfer in soils are presented.

The modular FORTRAN77-computer code solves simultaneously the Darcy - equation and the conductive-convective heat transfer equation with two alternative iteration schemes. The code can also be used as a ground-water model or simple conductive heat transfer model.

# Nomenklatur

## Lateinische Symbole

$a$	Koeffizienten des linearen Gleichungssystems
$A$	Fläche, $[L^2]$
$b$	Quelltermkoeffizient
$bo$	Basis des Aquifers, $[L]$
$C$	Wärmekapazität, $[L^2 t^{-2} T^{-1}]$
$C_e$	Wärmekapazität von Eis, $[L^2 t^{-2} T^{-1}]$
$C_{eff}$	effektive Wärmekapazität, $[L^2 t^{-2} T^{-1}]$
$C_g$	Wärmekapazität von Gestein, $[L^2 t^{-2} T^{-1}]$
$C_l$	Wärmekapazität von Luft, $[L^2 t^{-2} T^{-1}]$
$C_w$	Wärmekapazität von Wasser, $[L^2 t^{-2} T^{-1}]$
$Co_i$	Courant-Zahl in $i$ -Richtung, $[-]$
$D_i$	Diffusionskoeffizient in $i$ -Richtung, $[M^2 t^{-1}]$
$e$	Basis der Exponentialfunktion, 2.7182818...
$F_i$	Konvektionskoeffizient in $i$ -Richtung, $[M^2 t^{-1}]$
$g$	Erdbeschleunigung, $[L t^{-2}]$
$h$	Piezometerhöhe, $[L]$
$h_0$	Ausgangspiezometerhöhe, $[L]$
$H_f$	Schmelzenthalpie von Wasser, $[L^2 t^{-2}]$
$k_f$	isotrope hydraulische Leitfähigkeit, $[L t^{-1}]$
$k_{xx}$	hydraulische Leitfähigkeit in $X$ - Richtung, $[L t^{-1}]$
$k_{yy}$	hydraulische Leitfähigkeit in $Y$ - Richtung, $[L t^{-1}]$
$k_{zz}$	hydraulische Leitfähigkeit in $Z$ - Richtung, $[L t^{-1}]$
$K$	Wärmeleitfähigkeit, $[ML t^{-3} T^{-1}]$
$K_o$	Wärmeleitfähigkeit bei einer bekannten Temperatur, $[ML t^{-3} T^{-1}]$
$K_e$	Wärmeleitfähigkeit von Eis, $[ML t^{-3} T^{-1}]$
$K_{eff}$	effektive Wärmeleitfähigkeit, $[ML t^{-3} T^{-1}]$
$K_g$	Wärmeleitfähigkeit von Gestein, $[ML t^{-3} T^{-1}]$
$K_{korr}$	temperaturkorrigierte Wärmeleitfähigkeit, $[ML t^{-3} T^{-1}]$
$K_l$	Wärmeleitfähigkeit von Luft, $[ML t^{-3} T^{-1}]$
$K_{nm}$	Wärmeleitfähigkeit von Nichtmetallen, $[ML t^{-3} T^{-1}]$
$K_p$	Wärmeleitfähigkeit der Porenraumfüllung, $[ML t^{-3} T^{-1}]$
$K_w$	Wärmeleitfähigkeit von Wasser, $[ML t^{-3} T^{-1}]$
$K_{xx}$	effektive Wärmeleitfähigkeit in $X$ - Richtung, $[ML t^{-3} T^{-1}]$

$K_{yy}$	effektive Wärmeleitfähigkeit in $Y$ - Richtung, $[ML t^{-3} T^{-1}]$
$K_{zz}$	effektive Wärmeleitfähigkeit in $Z$ - Richtung, $[ML t^{-3} T^{-1}]$
$m$	Mächtigkeit, $[L]$
$J$	Wärmestrom, $[M L^2 t^{-3}]$
$Pe$	Peclet - Zahl, $[-]$
$Pr$	Prandtl - Zahl, $Pr = \mu_{dyn} C / K$ , $[-]$
$q''$	Wärmestromdichte, $[M t^{-3}]$
$q_x$	Volumenstrom in $X$ - Richtung, $[L^3 t^{-1}]$
$q_y$	Volumenstrom in $Y$ - Richtung, $[L^3 t^{-1}]$
$q_z$	Volumenstrom in $Z$ - Richtung, $[L^3 t^{-1}]$
$Q_e$	Entnahme oder Zugabe von Energie, $[ML^{-1} t^{-3}]$
$Q_{rad}$	radiogene Wärmeproduktion, $[ML^{-1} t^{-3}]$
$Q_w$	Entnahme oder Zugabe von Wasser, $[L^3 t^{-1}]$
$r$	radiale Entfernung vom Entnahmehrunden, $[L]$
$R_w$	Wärmewiderstand, $[M^{-1} L^{-2} t^3 T]$
$Re$	Reynolds-Zahl, $Re = v \delta x \rho / \mu_{dyn}$ , $[-]$
$S_s$	spezifischer Speicherkoeffizient, $[L^{-1}]$
$S'$	dimensionsloser Speicherkoeffizient, $[-]$
$T$	Temperatur, $[T]$
$T_0$	Ausgangstemperatur, $[T]$
$T_f$	Ausgangstemperatur, $[T]$
$T^*$	Temperatur des vorausgegangenen Zeitschrittes, $[T]$
$t$	Zeit, $[t]$
$v_a$	Abstandsgeschwindigkeit, $[L t^{-1}]$
$v_f$	Filtergeschwindigkeit, $[L t^{-1}]$
$v_x$	Filtergeschwindigkeit in $X$ - Richtung, $[L t^{-1}]$
$v_y$	Filtergeschwindigkeit in $Y$ - Richtung, $[L t^{-1}]$
$v_z$	Filtergeschwindigkeit in $Z$ - Richtung, $[L t^{-1}]$
$X_e$	Volumenanteil des gefrorenen Wassers, $[-]$
$X_w$	Volumenanteil des ungefrorenen Wassers, $[-]$
$z$	Tiefe, $[L]$

## Griechische Symbole

$\alpha$	Wichtungsfaktor zwischen Explizit- und Implizitverfahren, $[-]$
$\alpha_T$	Temperaturleitwert, $[L^2 t^{-1}]$
$\beta_i$	Teilfeld des Thomas-Algorithmus
$\gamma_i$	Teilfeld des Thomas-Algorithmus

$\Gamma_i$	Wärmediffusion in $i$ -Richtung, $[L^2 t^{-1}]$
$\kappa$	intrinsische Leitfähigkeit, $[L^2]$
$\mu_{dyn}$	dynamische Viskosität, $[MLt^{-1}]$
$\mu_{kin}$	kinematische Viskosität, $[L^2 t^{-1}]$
$\rho$	Dichte, $[ML^{-3}]$
$\rho_e$	Dichte von Eis, $[ML^{-3}]$
$\rho_{eff}$	effektive Dichte, $[ML^{-3}]$
$\rho_g$	Dichte von Gestein, $[ML^{-3}]$
$\rho_l$	Dichte von Luft, $[ML^{-3}]$
$\rho_w$	Dichte von Wasser, $[ML^{-3}]$
$\tau$	thermische Relaxationszeit, $[t]$
$\phi$	unbekannte Zielgröße (Temperatur, Piezometerhöhe ...)
$\Phi_g$	Gesamtporenraum, $[-]$
$\Phi_n$	durchflußwirksamer Porenraum, $[-]$
$\Psi$	Wassersättigungsgrad des Porenraumes, $[-]$
$\Omega$	Relaxationsfaktor, $[-]$

### Indizes

$E, e$	Osten
$I, i$	Index der $X$ - Richtung
$J, j$	Index der $Y$ - Richtung
$K, k$	Index der $Z$ - Richtung
$nb$	Sammelindex aller Nachbarknoten des Knotens $P$
$N, n$	Norden
$O, o$	Oben
$P$	eindimensionaler Index des Knotens $(i, j, k)$
$S, s$	Süden
$U, u$	Unten
$W, w$	Westen

### Liste der Abbildungen

1	Verlauf der Funktion $A( Pe )$ für die in Tab. 1 aufgeführten Verfahren .....	10
2	Beginn der Phasenumwandlung von Wasser; hier bei $0\text{ }^\circ\text{C}$ . ....	13
3	Berechnete Wärmekapazität von teilgefrorenem Wasser; die Ordinate wurde aus Gründen der Übersichtlichkeit logarithmisch dargestellt .....	15
4	Knotenzentrierte Anordnung der Zellengrenzen; die Bezeichnungen beziehen sich auf die im Programm verwandten Variablennamen	21
5	Zellenzentrierte Anordnung der Knoten; die Bezeichnungen beziehen sich auf die im Programm verwandten Variablennamen .....	22
6	Knotenindizierung der Schicht $k$ .....	23
7	Fluß durch eine dreidimensionale finite Differenzen Zelle .....	23
8	Indizierung der sechs Nachbarn des Knotens $P$ .....	24
9	Flußdiagramm der Gauss-Seidel-Iteration .....	30
10	Flußdiagramm des IADI-Verfahrens .....	32
11	Stationärer Wärmefluß durch eine Hochofenwand .....	45
12	Konduktiver Wärmetransport in dem beschriebenen Gesteinskörper. Die durchgezogenen Linien markieren die oben beschriebene analytische Lösung, die Symbole das Simulationsergebnis von TRADIKON-3D. ....	47
13	Vergleich der analytischen mit der numerischen Lösung des Konvektionsproblemes .....	48
14	Zeit-Absenkungskurve des numerischen und analytischen Ansatzes	51
15	Eingangsdaten und Diskretisierung der Simulation des Stufenpumpversuches .....	52

16	TRADIKON-3D Simulation des Stufenpumpversuches	53	32	Gemessener Temperaturverlauf in der Bohrung B1, November / Dezember 1987	72
17	ASM Simulation des Stufenpumpversuches	54	33	Geglätteter Temperaturverlauf in den Bohrungen B1 - B6, 1. Betriebsjahr	73
18	Diskretisierung des ungespannten Aquifers	55	34	Geglätteter Temperaturverlauf in den Bohrungen B1 - B6, 3. Betriebsjahr	74
19	TRADIKON-3D Simulation der Leakage aus einem Oberflächengewässer	56	35	Geglätteter Temperaturverlauf in den Bohrungen B1 - B6, 7. Betriebsjahr	74
20	Lageplan der Erdsondenforschungsanlage Schwalbach im November 1987	59	36	Geglätteter Temperaturverlauf in den Bohrungen B1 - B6 über 7 Betriebsjahre	75
21	Lage der Bohrungen in dem finite Differenzen Raster	60	37	Numerische Approximation der verbleibenden Temperaturabsenkung bei vorgegebener Bohrlochtemperatur	75
22	Temperaturentwicklung in der Entzugsbohrung Z	61	38	Geglätteter Temperaturverlauf in den Bohrungen B1 - B6, 1. Betriebsjahr	76
23	Gemessene Regeneration der Erdoberflächentemperaturen nach 31-tägigem Wärmeentzug.	62	39	Geglätteter Temperaturverlauf in den Bohrungen B1 - B6, 3. Betriebsjahr	77
24	Temperaturerniedrigung in Bohrung 2/0	63	40	Geglätteter Temperaturverlauf in den Bohrungen B1 - B6, 7. Betriebsjahr	77
25	Temperaturerniedrigung in Bohrung 4/0	63	41	Geglätteter Temperaturverlauf in den Bohrungen B1 - B6 über 7 Betriebsjahre	78
26	Rein konduktiv berechnete Regeneration nach 31-tägigem Wärmeentzug (Datensatz 7, Tab. 5)	64	42	Numerische Approximation der verbleibenden Temperaturabsenkung bei vorgegebener Entzugsleistung	79
27	Durch die Schmelzenthalpie des Wassers hervorgerufene Verzögerung der Temperaturregeneration in der Entzugsbohrung.	65	43	Eindimensionale Temperaturberechnung mit druck- und temperaturabhängiger Wärmeleitfähigkeit	80
28	Gemessene Temperaturen in den obersten 0.5 Meter des Schwalbacher Bodenprofils	67	A.1.1	Temperaturabhängigkeit der Dichte von luftfreiem Wasser bei 760 Torr	A.1.2
29	Simulierte Temperaturen in den obersten 0.5 Meter des Schwalbacher Bodenprofils	69	A.1.2	Temperaturabhängigkeit der Wärmeleitfähigkeit von Wasser für die Verfahren nach NEISS(1982) und TOULIKAN(1970)	A.1.3
30	Lageplan der Erdsondenanlage Göttingen	70			
31	Ausschnitt der Diskretisierung der Erdsondenanlage Göttingen; die Distanz zu den Modellrändern beträgt an jeder Seite etwa 33 Meter (jeweils 7 Knotenreihen)	71			



A.1.3	Temperaturabhängigkeit der Wärmekapazität von Wasser ...	A.1.4	A.2.4	Berechnete Regeneration nach 31-tägigem Wärmeentzug (Datensatz 4, Tab. 5) .....	A.2.3
A.1.4	Temperaturabhängigkeit der kinematischen Viskosität .....	A.1.4	A.2.5	Berechnete Regeneration nach 31-tägigem Wärmeentzug (Datensatz 5, Tab. 5) .....	A.2.3
A.1.5	Abhängigkeit der Wärmeleitfähigkeit des Eises von der Temperatur, nach NEISS(1982) .....	A.1.6	A.2.6	Berechnete Regeneration nach 31-tägigem Wärmeentzug (Datensatz 6, Tab. 5) .....	A.2.4
A.1.6	Temperaturkorrektur der Wärmeleitfähigkeit nach dem exponentiellen Ansatz .....	A.1.9	A.2.7	Berechnete Regeneration nach 31-tägigem Wärmeentzug (Datensatz 7, Tab. 5) .....	A.2.4
A.1.7	Temperaturkorrektur der Wärmeleitfähigkeit nach dem polynomischen Ansatz .....	A.1.10	A.2.8	Berechnete Regeneration nach 31-tägigem Wärmeentzug (Datensatz 8, Tab. 5) .....	A.2.5
A.1.8	Temperaturabhängigkeit der Wärmeleitfähigkeit von Granit und ihre numerische Approximation .....	A.1.11	A.2.9	Berechnete Regeneration nach 31-tägigem Wärmeentzug (Datensatz 9, Tab. 5) .....	A.2.5
A.1.9	Druck- und Temperaturabhängigkeit der Wärmeleitfähigkeit von Amphibolit. ....	A.1.12	A.2.10	Berechnete Regeneration in Bohrung Z nach 31-tägigem Wärmeentzug (alle Datensätze) .....	A.2.6
A.1.10	Druck- und Temperaturabhängigkeit der Wärmeleitfähigkeit von Disthen-Sillimanit-Gneis. ....	A.1.12			
A.1.11	Näherungsverfahren zur Bestimmung der effektiven Wärmeleitfähigkeit nach /210/ .....	A.1.13			
A.1.12	Einfluß der Porenraumverteilung auf die effektive Wärmeleitfähigkeit nach /210/ im Vergleich zum gewichteten arithmetischen Mittel .....	A.1.14			
A.1.13	Temperaturabhängigkeit der Wärmekapazität einiger paläozoischer Sedimentgesteine, Messungen mit dem METTLER Thermoanalytensystem TA3000 .....	A.1.15			
A.2.1	Berechnete Regeneration nach 31-tägigem Wärmeentzug (Datensatz 1, Tab. 5) .....	A.2.1			
A.2.2	Berechnete Regeneration nach 31-tägigem Wärmeentzug (Datensatz 2, Tab. 5) .....	A.2.2			
A.2.3	Berechnete Regeneration nach 31-tägigem Wärmeentzug (Datensatz 3, Tab. 5) .....	A.2.2			

## Liste der Tabellen

1	Die Wichtungsfunktion $A( Pe )$ für die verschiedene Verfahren nach /151/. . . . .	9
2	Absenkung ( $h_0 - h$ ) in Meter für $r = 100m$ . . . . .	50
3	Piezometerhöhen in Meter über NN zu ausgewählten Zeitpunkten	53
4	Berechnete Piezometerhöhen zweier Knoten in Meter ü. NN . . . .	56
5	Eingangsparameter der 9 Kalibrierungsläufe . . . . .	65
A.1.1	Wärmeleitfähigkeiten wichtiger Erguß- und Tiefengesteine . . .	A.1.7
A.1.2	Wärmeleitfähigkeiten wichtiger metamorpher Gesteine . . . . .	A.1.8
A.1.3	Wärmeleitfähigkeiten wichtiger Sedimentgesteine . . . . .	A.1.8
A.1.4	Wärmekapazitäten wichtiger Erguß- und Tiefengesteine . . . .	A.1.16
A.1.5	Wärmekapazitäten wichtiger metamorpher Gesteine . . . . .	A.1.16
A.1.6	Wärmekapazitäten wichtiger Sedimentgesteine . . . . .	A.1.17
A.1.7	Wärmeproduktion verschiedener Gesteine . . . . .	A.1.18

## 1 Einleitung

Die Verknappung der fossilen Brennstoffträger, wachsendes Umweltbewußtsein und nicht zuletzt ökonomische Gesichtspunkte haben in den beiden letzten Jahrzehnten zu einer Vielfalt von Forschungsaktivitäten geführt, die vorhandenen Energiereserven so umweltschonend wie möglich zu nutzen. Dabei wurden große Fortschritte in der besonders umweltfreundlichen Nutzung der Wind- und Solarenergie erzielt. Dennoch können diese Techniken in den dichtbesiedelten Industrieländern mit ihrem hohen Energieverbrauch nur mittelfristig die bisherigen Verfahren ersetzen, sodaß z.B. die Stromerzeugung aus Atomenergie und Kohle noch bis in das nächste Jahrtausend von großer Bedeutung sein wird. Die zunehmende Luftverschmutzung und die damit verbundene Gefahr einer globalen Klimakatastrophe drängt zum Handeln. Auf dem häuslichen Sektor existiert neben den Solarkollektoren bereits eine Technik, mit der man die Verbrennung von fossilen Brennstoffen stark einschränken oder gar vermeiden kann - die erdgekoppelte Wärmepumpe. Mit einer solchen Anlage wird den obersten 20 bis 100m der Erdkruste Wärmeenergie entzogen, die dann in komprimierter Form zur Warmwasserbereitung und Beheizung von Gebäuden dienen kann.

Da Erdsondenwärmepumpenanlagen ein geschlossenes System darstellen, ist auch erdseitig eine gute Umweltverträglichkeit gewährleistet. Speziell in Ballungsräumen mit ihren anthropogen z.T. erheblich erwärmten Grundwasserleitern wäre schon aus wasserhygienischen Gründen der Betrieb solcher Anlagen geradezu wünschenswert, /82/,/89/. Elektrisch angetriebene Wärmepumpenanlagen sind jedoch unter dem Aspekt des Primärenergieverhältnisses nur dann sinnvoll, wenn ihre Leistungszahl, der Quotient aus der an das Heizungssystem abgegebenen und investierten Energie, den Wert von 3 nach Möglichkeit überschreitet. Für die Leistungszahl sind neben rein technischen Aspekten wie der Auslegung des Heizungssystems und der Anlagensteuerung vor allem die Eigenschaften des Entzugsmediums verantwortlich. Wichtige physikalische Parameter sind hierbei:

- die unbeeinflusste Erdreichtemperatur
- die Wärmeleitfähigkeit des Gesteins oder Bodens
- die Wärmekapazität des Gesteins oder Bodens
- der Anteil des Porenraumes und sein Wassersättigungsgrad
- eventuell das Vorhandensein von fließendem Grundwasser

- die Eigenschaften des Hinterfüllmaterials

Da man aus Kostengründen und z.T. aus räumlichen Beschränkungen geneigt ist, die vertikalen Wärmetauscher so eng nebeneinander wie möglich zu placieren und die insgesamt einzubauende Sondenlänge zu minimieren, sind für ein optimales Anlagenlayout stets Berechnungen des erdseitigen Wärmetransports erforderlich.

Speziell für überschlägige Berechnungen existieren bereits eine Reihe von PC-Programmen, durch deren Einsatz man den Einfluß der Wärmetauscherschlänge, des Rückfüllmaterials, der thermischen Eigenschaften des Gesteins usw. auf die zu erwartende Entzugsleistung abschätzen kann /62/. Der Vorteil dieser Programme liegt in ihrer einfachen Handhabung und hohen Rechengeschwindigkeit. Da sie jedoch durchwegs auf analytischen Lösungen basieren, lassen sich nur relative einfache Symmetrien und Randbedingungen mit ihnen lösen.

Das hier vorgestellte numerische Modell eignet sich wegen der sehr aufwendigen Datenvorbereitung und dem z.T. immensen Rechenzeitbedarf weniger für den Installateurbetrieb, es stellt vielmehr ein Instrument für Parameterstudien an den in die Berechnung einfließenden physikalischen Größen dar.

### 1.1 Problemstellung

Der erste Teil der vorliegenden Arbeit beschreibt die Entwicklung eines dreidimensionalen, strömungsgekoppelten Wärmetransportmodells auf Basis der finiten Differenzen. Dieses Modell sollte in der Lage sein, den über Erdwärmetauscher angeregten Wärmetransport im Erdreich unter Berücksichtigung des strömenden Grundwassers und des möglichen Phasenwechsels von Wasser hinreichend genau nachzubilden. Strömungsteil und Wärmetransportteil des Programms wurde getrennt von einander gegen analytische Lösungen validiert. Ferner dienten Vergleichssimulationen mit anderen Modellen zur Validierung gegenüber Problemstellungen, zu denen keine analytischen Lösungen existieren.

Im zweiten Teil sollten eine Reihe von Simulationsläufen Aufschluß darüber geben, welche physikalischen Parameter von maßgeblicher Bedeutung für die oben geschilderte Problematik des Wärmeentzugs sind. Ferner werden Simulationsergebnisse des Modells zum rein konduktiven Wärmetransport in Böden und zur Temperaturprognose in übertiefen Bohrungen vorgestellt.

### 1.2 Bisherige Arbeiten

Die zum Thema Erdsondenwärmepumpenanlagen und Erdwärmespeicherung in Aquiferen existierende Literatur ist, obwohl es sich hierbei noch um eine vergleichsweise junge Technologie handelt, bereits sehr umfangreich /31/. Einen sehr guten Überblick über die Entwicklungsstufen des oben beschriebenen Systems erhält man von /16/.

Die zur Problematik des Wärmetransportes im Erdreich bereits existierenden Computermodelle kann man in zwei Gruppen einteilen: Die erste Gruppe verfügt in der Regel über einen relativ einfachen — meist rein konduktiven — Wärmetransportteil. Allerdings können mit dieser Kategorie von Programmen meistens auch die Wärmetransportvorgänge innerhalb des Wärmetauschers und vom Wärmetauscher zum Entzugsmedium behandelt werden. Ferner gestatten diese Modelle oft auch die Wahl zwischen unterschiedlichen Koordinatensystemen (kartesisch, radial, zylindrisch, sphärisch ...).

Die zweite Kategorie von Programmen behandelt mehr allgemein den Wärme- bzw. Stofftransport in porösen Aquiferen. Eine nahezu vollständige Übersicht der zu dieser Gruppe gehörigen Modelle sowie eine kurze Beschreibung des jeweiligen Leistungsumfanges wird durch /10/, /212/ und /99/ vorgestellt.

Der bei weitem überwiegende Teil der allgemein zugänglichen Programme letzterer Kategorie stammt aus den Vereinigten Staaten von Amerika, und hier im besonderen vom U. S. Geological Survey. Dies hängt zum einen damit zusammen, daß in den USA die Infiltration von Kühlwasser und flüssigen Industrieabfällen in tiefe Porenwasserleiter intensiv diskutiert wurde und noch wird. Ferner wurde nahezu die gesamte Pionierarbeit auf dem Sektor der Modellierung hydrologischer Fragestellungen dort geleistet. Zum anderen wird speziell in Europa bei der Veröffentlichung derartiger Programme wesentlich restriktiver verfahren.

Da jedoch nach intensiver Literaturrecherche keines der allgemein verfügbaren Programme in der Lage zu sein schien, die geschilderte Problematik vollständig zu lösen, bestand nur die Möglichkeit, entweder ein vorhandenes Programm um die fehlenden Aspekte zu ergänzen oder ein komplett neues Modell zu schreiben. Der Autor entschied sich für eine Neuentwicklung, weil sie zum einen dem besseren Verständnis der zu behandelnden Materie diene und zum anderen nur sehr wenige als Quellentext verfügbare Programme so strukturiert sind, daß sich

Erweiterungen leicht integrieren lassen, /132/,/209/. Das im folgenden vorgestellte Wärmetransportmodell trägt den Namen TRADIKON-3D, der als Kürzel für Transport von Wärme durch Diffusion und Konvektion in 3 Dimensionen steht.

## 2 Numerische Grundlagen

### 2.1 Die Grundwasserströmungsgleichung

Das durch ein dreidimensionales, poröses Medium fließende Grundwasser läßt sich nach /19/ berechnen:

$$\nabla^2 h = \frac{S_s}{k_f} \frac{\delta h}{\delta t} \quad (2.00)$$

wobei:

$h$	Piezometerhöhe, $[L]$
$S_s$	spezifischer Speicherkoeffizient, $[L^{-1}]$
$k_f$	hydraulische Leitfähigkeit, $[Lt^{-1}]$

Bei anisotropen und heterogenen Verhältnissen und nach Einführung des Quelltermes ändert sich Gl.(2.00) zu:

$$\nabla \left( k_{ij} \frac{\delta h}{\delta_j} \right) = S_s \frac{\delta h}{\delta t} + Q_w \quad (2.01)$$

$Q_w$  stellt den Volumenstrom pro Einheitsvolumen dar. Nimmt man ferner an, daß die Achsen des kartesischen Koordinatensystems mit den Achsen der Anisotropie zusammen fallen, so schreibt sich Gl.(2.01) in expandierter Form:

$$\frac{\delta}{\delta x} \left( k_{xx} \frac{\delta h}{\delta x} \right) + \frac{\delta}{\delta y} \left( k_{yy} \frac{\delta h}{\delta y} \right) + \frac{\delta}{\delta z} \left( k_{zz} \frac{\delta h}{\delta z} \right) - Q_w = S_s \frac{\delta h}{\delta t} \quad (2.02)$$

wobei  $k_{xx}$ ,  $k_{yy}$  und  $k_{zz}$  die Hauptkomponenten des hydraulischen Leitfähigkeitstensors mit der Einheit  $[Lt^{-1}]$  repräsentieren

In dreidimensionalen finiten Differenzen Modellen diskretisiert man gewöhnlich unterschiedliche hydraulische Stockwerke durch eine lagenweise Anordnung von Knoten, /132/,/200/. Multipliziert man eine derartige Einheit mit ihrer Mächtigkeit  $m$ , so erhält nach Gl.(2.02):

$$\frac{\delta}{\delta x} \left( T_{xx} \frac{\delta h}{\delta x} \right) + \frac{\delta}{\delta y} \left( T_{yy} \frac{\delta h}{\delta y} \right) + \frac{\delta}{\delta z} \left( mk_{zz} \frac{\delta h}{\delta z} \right) - mQ_w = S' \frac{\delta h}{\delta t} \quad (2.03)$$

wobei  $T_{xx}$  und  $T_{yy}$  die Hauptkomponenten des Transmissivitätstensors mit  $[L^2t^{-1}]$  darstellen und  $S'$  für den dimensionslosen Speicherkoeffizienten steht. Die Darcy- oder Filtergeschwindigkeit  $v_f$  kann bei bekannter Piezometerhöhenverteilung wie folgt berechnet werden:

$$v_f = k_f \frac{\delta h}{\delta x_i} \quad (2.04)$$

und die Abstandsgeschwindigkeit  $v_a$  nach:

$$v_a = \frac{v_f}{\Phi_n} \quad (2.05)$$

## 2.2 Mechanismen des Wärmetransports

Wärme wird als Energie, die unter einem Temperaturgradienten transportiert wird, definiert. Sie fließt von Regionen höherer Temperatur in Gebiete niedriger Temperatur. Man unterscheidet drei verschiedene Arten des Wärmetransports - Konduktion, Strahlung und Konvektion.

### 2.2.1 Konduktion

Konduktion oder Wärmeleitung findet innerhalb eines Körpers mit Bereichen unterschiedlicher Temperatur oder zwischen zwei unterschiedlichen Körpern, die in Kontakt miteinander stehen und unterschiedlich temperiert sind, stets entlang des Temperaturgefälles statt. Der physikalische Vorgang der Konduktion spielt sich im molekularen Bereich ab und umfaßt die Übertragung von Energie höherenergetischer Moleküle auf solche, die sich auf einem niedrigeren Energieniveau befinden. Makroskopisch betrachtet ist der Wärmefluß  $q''$  pro Flächeneinheit proportional zum Temperaturgradienten, sodaß man nach dem Fourier Gesetz der Wärmeleitung formulieren kann:

$$q'' = -K \frac{dT}{dx} \quad (2.06)$$

Die Proportionalitätskonstante  $K$  wird als Wärmeleitfähigkeitskonstante oder auch kurz als Wärmeleitfähigkeit bezeichnet. Sie ist eine materialspezifische Größe und in der Regel temperaturabhängig. In Kristallen kann

die Wärmeleitfähigkeit für verschiedene kristallographische Richtungen unterschiedliche Werte annehmen, d.h.  $K$  wird zum Tensor (*K-Elipsoid*), /38/. Das negative Vorzeichen in (2.06) resultiert aus der Tatsache, daß die Wärme in Richtung des Temperaturgradienten übertragen wird. Berücksichtigt man, daß es sich beim Wärmefluß um einen dreidimensionalen Vorgang handelt, so kann man das *Fourier Gesetz* auch allgemeiner formulieren mit

$$q'' = -K \nabla T \quad (2.07)$$

wobei  $\nabla$  für den dreidimensionalen Laplace- Operator steht und es sich bei  $T$  um das skalare Temperaturfeld handelt. Betrachtet man den eindimensionalen Wärmefluß senkrecht durch eine ebene Wand in der Richtung  $x$ , so liefert die Integration von Gl.(2.06):

$$J = \frac{KA}{\delta x} (T_2 - T_1) \quad (2.08)$$

wobei  $\delta x$  die Wandstärke,  $T_1$  und  $T_2$  die Temperatur an den beiden Rändern und  $J$  nach  $q'' = J/A$  den Wärmefluß durch eine Fläche bezeichnet. Durch Umformung von Gl.(2.08) und Definition erhält man in Anlehnung an das Ohmsche Gesetz nach:

$$R_w = \frac{\delta x}{KA} \quad (2.09)$$

den Wärmewiderstand. Man kann somit auch formulieren:

$$J = \frac{T_2 - T_1}{\Delta x / KA} = \frac{T_2 - T_1}{R_w} = \frac{\text{thermische Potentialdifferenz}}{\text{thermischer Widerstand}} \quad (2.10)$$

Neben den erwähnten Größen existiert eine weitere, die in enger Beziehung zur Wärmeleitfähigkeit steht und als Temperatur-Leitwert oder thermische Diffusivität  $\alpha_T$  bezeichnet wird.

$$\alpha_T = \frac{K}{\rho c} \quad (2.11)$$

Hierbei steht  $c$  für die spezifische Wärmekapazität und  $\rho$  für die Dichte des betreffenden Körpers oder Stoffes. Der Temperaturleitwert bestimmt die Zeit, die zum Abbau eines Temperaturgefälles über eine Strecke  $d$  benötigt wird. Die thermische Relaxationszeit  $\tau$  berechnet sich somit nach:

$$\tau = \frac{d^2 \rho c}{K} \quad (2.12)$$

Bei vielen Wärmeleitungsprozessen ist die Temperatur nicht konstant, d.h. es fließt in ein Volumenelement mehr Wärme hinein als durch die Ränder entweichen kann. Die Nettobilanz wird durch die Divergenz der Wärmestromdichte beschrieben. Man formuliert daher die allgemeine Wärmeleitungsgleichung nach:

$$\frac{\delta T}{\delta t} = \frac{K}{\rho c} \operatorname{div} \operatorname{grad} T = \frac{K}{\rho c} \nabla^2 T \quad (2.13)$$

### 2.2.2 Strahlung

Thermische- oder auch Infrarot-Strahlung ist eine elektromagnetische Strahlung, die prinzipiell von jedem Körper als Folge der Wärmebewegung emittiert wird. Sie besitzt also dieselbe Natur wie sichtbares Licht, Röntgen-Strahlen oder Radiowellen. Der Unterschied besteht nur in ihrer Wellenlänge und der Quelle ihrer Entstehung. Während die Wärmeleitung an die Präsenz von Materie gebunden ist, breitet sich thermische Strahlung im Vakuum am besten aus. Für das hier betrachtete Medium und den dazugehörigen Temperaturbereich kann der Wärmetransport über Strahlung als bedeutungslos eingeschätzt werden.

### 2.2.3 Konvektion

Nimmt man an, daß ein strömendes Fluid keine Wärmeleitfähigkeit besitzt, so hat die rein konvektive Wärmetransportgleichung die Form:

$$-\rho_w C_w q \nabla T + Q_e = \rho_w C_w \frac{\delta T}{\delta t} \quad (2.14)$$

Strömt dieses Fluid durch ein nichtwärmeleitendes poröses Medium mit einer Porosität  $\Phi$ , dann erweitert sich Gl.(2.14) zu

$$-\rho_w C_w q \nabla T + Q_e = [\rho_w \Phi C_w + \rho_g (1 - \Phi) C_g] \frac{\delta T}{\delta t} \quad (2.15)$$

Nimmt man schließlich an, daß der Wärmetransport sowohl konduktiv als auch konvektiv erfolgt und das Fluid sich im Temperaturgleichgewicht mit dem durchströmten Medium befindet, so schreibt man:

$$\nabla \cdot (K \nabla T) - \rho_w C_w q \nabla T + Q_e = [\rho_w \Phi C_w + \rho_g (1 - \Phi) C_g] \frac{\delta T}{\delta t} \quad (2.16)$$

oder in expandierter Form, wenn die Komponenten des Leitfähigkeitstensors parallel zu den Achsen des kartesischen Koordinatensystems verlaufen:

$$\begin{aligned} & \frac{\delta}{\delta x} \left( K_{xx} \frac{\delta T}{\delta x} \right) + \frac{\delta}{\delta y} \left( K_{yy} \frac{\delta T}{\delta y} \right) + \frac{\delta}{\delta z} \left( K_{zz} \frac{\delta T}{\delta z} \right) - \\ & \rho_w q_x C_w \frac{\delta T}{\delta x} - \rho_w q_y C_w \frac{\delta T}{\delta y} - \rho_w q_z C_w \frac{\delta T}{\delta z} + Q_e = \\ & [\rho_w \Phi C_w + \rho_g (1 - \Phi) C_g] \frac{\delta T}{\delta t} \end{aligned} \quad (2.17)$$

## 2.3 Konvektion und Diffusion

Der Diffusions- und Konvektionsterm wird numerisch als eine untrennbar mit einander verknüpfte Einheit behandelt. Gemäß /151/ stehen für eine solche Verfahrensweise mehrere Methoden zur Auswahl. Die Grundidee ist die, daß man in Abhängigkeit der lokalen Peclet-Zahl, Konvektion und Diffusion unterschiedlich gewichtet addiert, als einen Term auffaßt. Die dimensionslose Peclet-Zahl  $Pe$  stellt das Produkt aus Reynolds-Zahl  $Re$  und Prandtl-Zahl  $Pr$  bzw. den Quotienten aus Konvektions- und Diffusionskoeffizienten dar. TRADIKON-3D bietet der Vollständigkeit halber die Möglichkeit, alternativ eine der fünf bekannten Wichtungsfunktionen zu berücksichtigen:

Tab. 1: Die Wichtungsfunktion  $A(|Pe|)$  für die verschiedene Verfahren nach /151/.

Verfahren	Formel für $A( Pe )$	Referenz
Zentrale Differenzen	$1 - 0.5  Pe $	
Upwind-Schema	1	COURANT (1952)
Hybrid-Schema	$AMAX[0, 1 - 0.5 Pe ]$	SPALDING (1972)
Power-Law-Schema	$AMAX[0, (1 - 0.1 Pe )^5]$	PATANKAR (1979)
Exponential-Schema	$ Pe  / (e^{ Pe } - 1)$	PATANKAR (1980)

Hierbei bedeuten  $|Pe|$  den Absolutbetrag der Peclet-Zahl und die aus der Programmiersprache FORTRAN stammende Funktion *AMAX1* die größte Zahl der in dem darauffolgenden Klammerausdruck aufgeführten Argumente. Alle Verfahren führen bei kleinen Peclet-Zahlen, d.h.  $|Pe| < 2$ , zu physikalisch realistischen Ergebnissen. Da die Peclet-Zahl auch eine Funktion des Knotenabstandes ist und man aus Gründen der Ökonomie nicht beliebig fein diskretisieren kann, sollte dem Exponential- oder dem Power-Law-Schema der Vorzug eingeräumt werden, /151/.

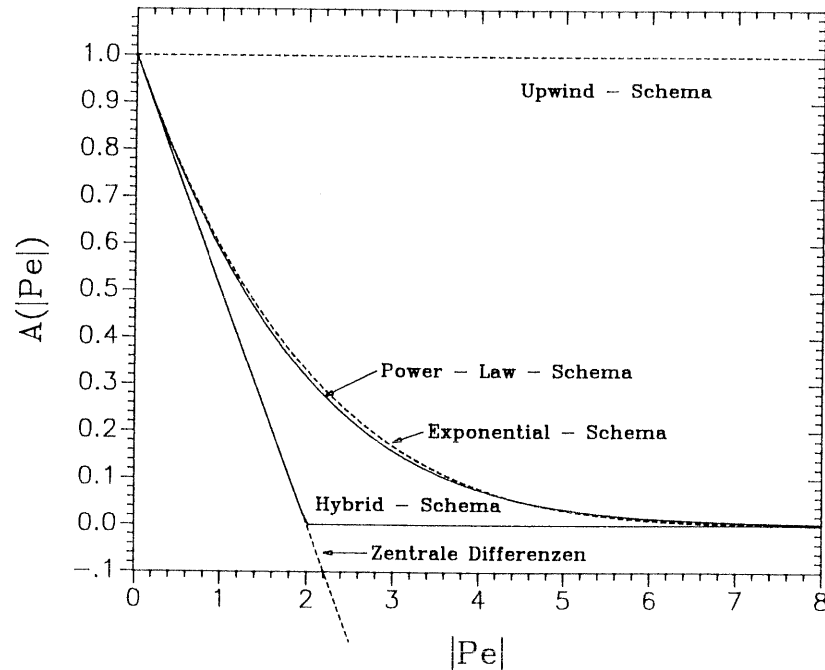


Abb. 1: Verlauf der Funktion  $A(|Pe|)$  für die in Tab. 1 aufgeführten Verfahren

Ein speziell bei der Simulation von Schadstofftransportvorgängen auftretender, unangenehmer Begleiteffekt ist das Phänomen der *numerischen Dispersion*, /106/, auch *falsche Diffusion*, /151/, genannt. Sie läßt sich besonders gut bei der Simulation der Ausbreitung eines diffusions- und dispersionsfreien Tracers diagonal durch ein finites Differenzen Raster beobachten.

Dadurch, daß der somit nur rein konvektiv erfolgende Transport verfahrensbedingt nur senkrecht zu den Zellengrenzflächen des Rasters erfolgen kann, kommt es zu einer unrealistischen Aufspreizung der Schadstoffahne, deren Ausmaß seinerseits eine Funktion der Gitter-Peclet-Zahl ist. Bei den hier betrachteten Vorgängen des Wärmetransportes in porösen Medien tritt der Effekt der numerischen Dispersion nur bei sehr hohen Fließgeschwindigkeiten auf. Sofern man in solchen Fällen Kenntnis von dem Strömungsfeld hat, kann er durch eine parallel zur Fließrichtung verlaufenden Orientierung einer Achse des finiten Differenzen - Koordinatensystems minimiert werden.

## 2.4 Diffusion und Dispersion in porösen Medien

Eine Flüssigkeit bewegt sich in porösen oder klüftigen Medien auf tortuosen Bahnen. Die daraus resultierende makroskopische Vermischung der Flüssigkeit wird als mechanische Dispersion bezeichnet. Dieser Vorgang unterscheidet sich von der molekularen Diffusion, die eine mikroskopische Natur besitzt. Der gesamte Dispersionsvorgang spaltet sich also in eine molekulare Diffusion und eine mechanische Dispersion auf.

Für einen nichtisothermalen Fließvorgang in einem porösen Medium mit einem gegebenen Konzentrationsgradienten läßt sich der effektive hydrodynamische Dispersionskoeffizient  $D_e$  und der effektive thermische Dispersionskoeffizient  $K_e$  beschreiben mit

$$D_e = D_o + D' \quad \text{bzw.} \quad K_e = K + K' \quad (2.18)$$

Hierbei bedeuten  $D_o$  und  $D'$  die Massendiffusions- und Massendispersionskoeffizienten,  $K$  und  $K'$  die thermische Leitfähigkeit bzw. den thermischen Dispersionskoeffizienten des flüssigkeitsgefüllten Mediums.

Der Dispersionsvorgang besitzt eine anisotrope Natur, wobei der longitudinale Dispersionskoeffizient  $D_L$  meist ein bis zwei Größenordnungen über dem transversalen Dispersionskoeffizienten  $D_T$  liegt, /19/,/180/.

Die Korrelationsgleichung für den longitudinalen Massendispersionskoeffizienten läßt sich nach /41/ folgendermaßen formulieren:

$$\frac{D'_L}{D_o} = C_1 (Pe)^m \quad (2.19)$$

mit  $C_1 = 0.5$  und  $1 < m < 1.2$  für  $Pe < 10^2$  bzw.  $C_1 = 1.8$  und  $m = 1$  für  $10^2 < Pe < 10^5$ .  $Pe$  entspricht hierbei der molekularen Peclet-Zahl

für den Massentransport mit  $Pe = vd/D_o$ ,  $d$  = Korndurchmesser,  $v$  = Darcy-Geschwindigkeit und  $D_o$  = Massendiffusionskoeffizient.

Es bestehen zwei Hauptunterschiede zwischen dem thermischen Dispersionskoeffizienten und dem Massendispersionskoeffizienten: Erstens erfolgt der Transport von Wärme in porösen Medien auch — in der Regel sogar zum deutlich überwiegenden Anteil — über die Gesteinsmatrix während dies beim Massentransport nicht möglich ist und zweitens rangiert der thermische Diffusionskoeffizient etwa drei Größenordnungen über dem Massendiffusionskoeffizienten, /19/.

Während selbst bei sehr kleinen Fließgeschwindigkeiten Massendispersions-effekte außerordentlich wichtig sind, spielen thermische Dispersionsvorgänge bei kleinen Fließgeschwindigkeiten keine Rolle. Deswegen wird in der vorliegenden Arbeit die thermische Dispersion vernachlässigt.

## 2.5 Phasenwechsel von Wasser

Da das hier vorgestellte Modell in der Lage sein sollte, die Betriebsbedingungen einer Erdsondenwärmepumpenanlage so wirklichkeitsnah wie möglich zu simulieren, kam der Phasenumwandlung des im Boden oder Gestein enthaltenen Wassers eine gewisse Bedeutung zu. Bei der Phasenumwandlung von Wasser in Eis wird eine Wärmeenergie von  $6030 \text{ kJ/mol}$  oder  $3.336 \cdot 10^5 \text{ J/kg}$  freigesetzt, eine Energie, die ausreicht, eine entsprechende Stoffmenge Wasser von  $0$  auf etwa  $78 \text{ }^\circ\text{C}$  zu erwärmen. Unter Laborbedingungen gefriert reines Wasser erst, wenn diese Energie, die sogenannte Schmelzwärme oder -enthalpie, aufgezehrt wurde. Derartige Bedingungen lassen sich durch einen isothermalen Algorithmus simulieren, bei dem die Temperatur des betreffenden Knotens solange konstant gehalten wird, bis die Nettobilanz aller zu- und abgeflossenen Energieströme zur Regeneration (beim Auftauen) oder zum Aufzehren (beim Gefrieren) der Schmelzenthalpie ausgereicht hat.

Bei der Berechnung eines instationären Temperaturfeldes erhält man durch die Anwendung des obigen Verfahrens stets einen plateauartigen Temperaturverlauf, der sich jedoch beim Gefrieren von Böden nicht beobachten läßt. Dafür sind eine Vielzahl von Gründen verantwortlich von denen hier nur einige erwähnt werden:

- Porenwasser ist stets, wenn auch in unterschiedlichem Maße, mineralisiert, was zu einer Schmelzpunktniedrigung führt

- der Schmelzpunkt des Porenwassers ist abhängig vom Wassergehalt des Bodens, /145/
- der Boden weist eine Vielzahl von unterschiedlich großen Poren auf, in denen das darin enthaltene Wasser bei unterschiedlichen Temperaturen gefriert; das Haftwasser gefriert z.T. erst deutlich unterhalb von  $-10 \text{ }^\circ\text{C}$
- das nicht drainierbare Porenvolumen gestattet nur eine eingeschränkte Seitenausdehnung des beim Gefrieren sein Volumen vergrößernden Wassers; dies führt zu einer Druckerhöhung und damit zu einer Schmelzpunktniedrigung.

Ausgehend von der Überlegung, daß eine relativ einfache  $e$ -Funktion in der Lage sein müßte, die mit abnehmender Temperatur allmählich stattfindende Umwandlung von Wasser in Eis hinreichend exakt nachzubilden, wurde das im Folgenden diskutierte Verfahren entwickelt:

Grundvoraussetzung ist zunächst eine möglichst genaue Kenntnis von dem Zweiphasendiagramm (Wasser/Eis) des zu berechnenden Entzugsmediums.

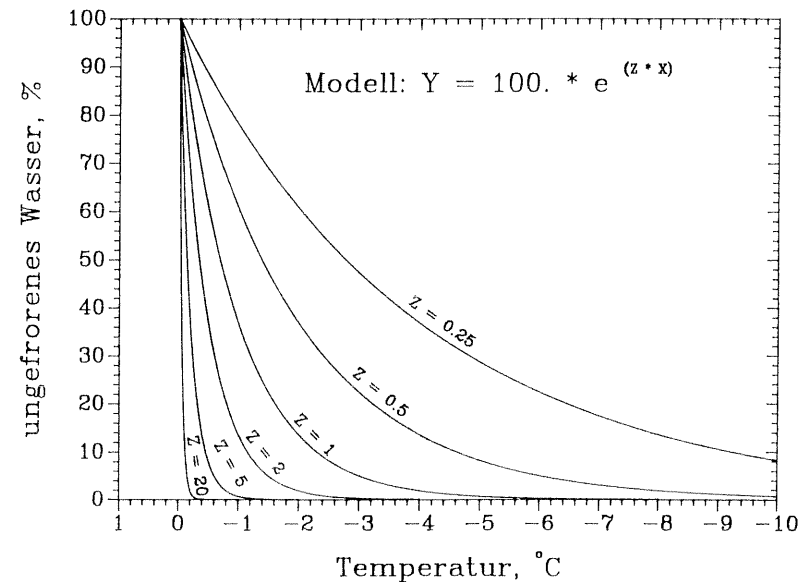


Abb. 2: Beginn der Phasenumwandlung von Wasser; hier bei  $0 \text{ }^\circ\text{C}$ .



Die in Abb. 2 dargestellten Kurvenscharen markieren den Anteil des noch ungefrorenen Wassers. Die Kurven mit  $Z = 1$  bis  $Z = 0.25$  könnten auf einen tonig-schluffigen Boden zutreffen, während die Kurven mit  $Z = 20$  bis  $Z = 2$  für ein eher grobklastisches Material der Kies- bis Sandfraktion sprechen. Die in der Literatur, /64/, dokumentierten Gefrierversuche an Böden scheinen diese Annahme zu bestätigen.

Rechnet man nun die Schmelzenthalpie des noch verbleibenden, ungefrorenen Wassers gemäß:

$$C = C_w * X_w + C_e * X_e + \frac{1}{\Delta T} \int_T^{T+\Delta T} \Delta H_f \frac{\delta x_u}{\delta T} dT \quad (2.17)$$

wobei:

$C_w, C_e$	Wärmekapazität von Wasser und Eis
$X_w, X_e$	Volumenanteile von Wasser und Eis
$H_f$	Schmelzwärme pro Masseneinheit des noch ungefrorenen Wassers
$\delta x_u$	Änderung des Volumenanteils von ungefrorenem Wasser über das Temperaturintervall $\Delta T$

auf die Wärmekapazität des Wasser um, so resultieren die in Abb. 3 dargestellten Kurvenscharen.

Im Modell wird nun so verfahren, daß bei ablaufendem Phasenwechsel nicht nur die Temperatur des betreffenden Knotens sondern auch der Anteil des ungefrorenen Wassers und damit die effektive Wärmekapazität iterativ bestimmt werden muß. Dabei darf die maximale Änderung des Volumenanteils von ungefrorenem Wasser ein bestimmtes Maß nicht überschreiten, da es sonst zu erheblichen Berechnungsfehlern kommt.

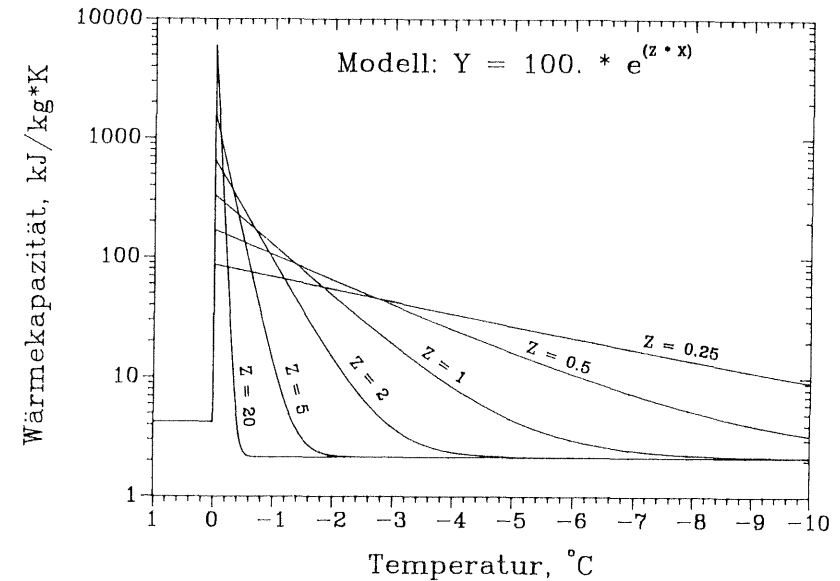


Abb. 3: Berechnete Wärmekapazität von teilgefrorenem Wasser; die Ordinate wurde aus Gründen der Übersichtlichkeit logarithmisch dargestellt.

### 3 Numerische Behandlung der Gleichungen

Aufgrund der Komplexität der physikalischen Phänomene, die beim Wärmetransport im Erdreich wirksam sind, lassen sich für deren Berechnung nur unter sehr starken Vereinfachungen analytische Lösungen herleiten. Man ist also auf ein leistungsfähiges numerisches Verfahren angewiesen, das in der Lage sein muß, auch komplizierte Anfangs- und Randbedingungen zu bewältigen. Die gebräuchlichsten numerischen Verfahren zur Berechnung der Strömung und des Stofftransportes in Aquiferen sind:

- die finiten Differenzen (FD)
- die finiten Elemente (FE)

Da diese Verfahren speziell bei der Lösung der Transportgleichung einige Nachteile aufweisen (numerische Dispersion, Oszillationen, ...) haben sich hier das auf stochastischen Ansätzen beruhende

- "Random - Walk" - Verfahren /161/

und das von der Berechnung von Druckstoßvorgängen her bekannte und speziell für Fälle, in denen der Konvektionsterm überwiegt, entwickelte

- Charakteristiken - Verfahren /111/

fest etabliert. Da bei der hier betrachteten Thematik, anders als bei der numerischen Behandlung von Schadstofftransportvorgängen, das konvektive Glied im Normalfall nicht dominiert, erschien die Methode der finiten Differenzen als eine brauchbare Methode, die oben erwähnten Gleichungen zu lösen.

### 3.1 Konstruktion der finiten Differenzen Approximation

Das am häufigsten eingesetzte Verfahren zur Ableitung finiter Differenzen Gleichungen besteht aus der Approximation der Ableitung der Differenzialgleichung über eine gekappte Taylor-Reihe /167/. Für eine Funktion  $f(x)$  hat diese Reihenentwicklung in der positiven  $X$ -Richtung die Form:

$$f(x + \Delta x) = f(x) + \Delta x \frac{df}{dx} + \frac{(\Delta x)^2}{2!} \frac{d^2 f}{dx^2} + \frac{(\Delta x)^3}{3!} \frac{d^3 f}{dx^3} + \dots \quad (3.00)$$

Durch Auflösen nach  $df/dx$  erhält man:

$$\frac{df}{dx} = \frac{f(x + \Delta x) - f(x)}{\Delta x} + \Theta(\Delta x) \quad (3.01)$$

wobei  $\Theta(\Delta x)$  den verbleibenden Term der Serie darstellt. Schneidet man diesen Term ab, so resultiert mit:

$$\frac{df}{dx} \approx \frac{f(x + \Delta x) - f(x)}{\Delta x} \quad (3.02)$$

der vordere Differenzenquotient. In ähnlicher Weise erhält man für die negative  $X$ -Richtung die Taylor Reihe:

$$f(x - \Delta x) = f(x) - \Delta x \frac{df}{dx} + \frac{(\Delta x)^2}{2!} \frac{d^2 f}{dx^2} - \frac{(\Delta x)^3}{3!} \frac{d^3 f}{dx^3} + \dots \quad (3.03)$$

Durch Auflösen nach  $df/dx$  erhält man unter Vernachlässigung von  $\Theta(\Delta x)$  :

$$\frac{df}{dx} \approx \frac{f(x - \Delta x) - f(x)}{\Delta x} \quad (3.04)$$

den hinteren Differenzenquotienten. Subtrahiert man (3.03) von (3.00), so ist das Ergebnis:

$$f(x + \Delta x) - f(x - \Delta x) = 2\Delta x \frac{df}{dx} + \frac{2(\Delta x)^3}{3!} \frac{d^3 f}{dx^3} + \dots \quad (3.05)$$

Schneidet man die Taylor Reihen jeweils nach dem dritten Term ab, so kann aus (3.05) die zentrale Differenzen Approximation:

$$\frac{df}{dx} \approx \frac{f(x + \Delta x) - f(x - \Delta x)}{2\Delta x} \quad (3.06)$$

abgeleitet werden. Um eine Näherung für die zweite Ableitung von  $f$  zu erhalten, werden die Gleichungen (3.00) und (3.03) addiert:

$$f(x + \Delta x) - f(x - \Delta x) = 2f(x) + \frac{2(\Delta x)^2}{2!} \frac{d^2 f}{dx^2} + \Theta((\Delta x)^4) \quad (3.07)$$

Die gewünschte Approximation resultiert mit einem Fehler von  $\Theta((\Delta x)^2)$ :

$$\frac{d^2 f}{dx^2} \approx \frac{f(x + \Delta x) - 2f(x) + f(x - \Delta x)}{(\Delta x)^2} \quad (3.08)$$

#### 3.1.1 Der Explizit-Ansatz

Angewandt auf ein eindimensionales Randwertproblem kann man nun schreiben:

$$\frac{u_i^{j+1} - u_i^j}{\Delta t} + \Theta(\Delta t) = \frac{u_{i+1}^j - 2u_i^j + u_{i-1}^j}{(\Delta x)^2} + \Theta((\Delta x)^2) \quad (3.09)$$

Unter Vernachlässigung der Terme  $\Theta(\Delta t)$  und  $\Theta((\Delta x)^2)$  ergibt sich:

$$\frac{u_i^{j+1} - u_i^j}{\Delta t} = \frac{u_{i+1}^j - 2u_i^j + u_{i-1}^j}{(\Delta x)^2} \quad (3.10)$$

Das Symbol  $j$  bezeichnet den Zeitschrittindex und  $i$  den Ortsindex. Nach  $u_i^{j+1}$  aufgelöst erhält man:

$$u_i^{j+1} = u_i^j + \frac{\Delta t}{(\Delta x)^2} (u_{i+1}^j - 2u_i^j + u_{i-1}^j) \quad (3.11)$$

Demnach werden die neuen Werte von  $u_i$  ausschließlich aus solchen des vorherigen Zeitschrittes berechnet. Diese explizite Formulierung wird in der Literatur bisweilen auch als Vorwärtsdifferenzen - Verfahren bezeichnet. Es erfordert einen minimalen Aufwand an Rechenoperationen und Speicherplatz, hat aber den Nachteil, daß eine bestimmte Zeitschrittlänge nicht überschritten werden darf. Bei der Berechnung des instationären, konduktiven Wärmetransports darf z.B. das folgende Kriterium nicht verletzt werden /151/:

$$\Delta t < \frac{\rho c (\Delta x)^2}{2K} \quad (3.12)$$

Für die zweidimensionale Strömungsberechnung lautet das Stabilitätskriterium, /106/:

$$\frac{T_{xy}}{S} \left( \frac{\Delta t}{\Delta x^2} + \frac{\Delta t}{\Delta y^2} \right) \leq \frac{1}{2} \quad (3.13)$$

bzw.:

$$\Delta t \leq \frac{S}{2T_{xy} \left( \frac{1}{\Delta x^2} + \frac{1}{\Delta y^2} \right)} \quad (3.14)$$

Bei der konvektiv-diffunden Wärmetransportberechnung muß zusätzlich noch das Courant-Kriterium erfüllt sein:

$$Co_x = \left| \frac{\Delta t v_x}{\Delta x} \right| \leq 1 \quad (3.15a)$$

$$Co_y = \left| \frac{\Delta t v_y}{\Delta y} \right| \leq 1 \quad (3.15b)$$

$$Co_z = \left| \frac{\Delta t v_z}{\Delta z} \right| \leq 1 \quad (3.15c)$$

$Co$  steht hierbei für die *Courant - Zahl*. Dieses Kriterium besagt, daß auf konvektiven Wege nicht mehr Wärmeenergie — oder Schadstoffmenge — eine Zelle über den Zeitschritt  $[t, t + \Delta t]$  verlassen darf, als zu Beginn dieses Zeitschrittes in der betreffenden Zelle gespeichert war.

Diese Einschränkungen bezüglich der Wahl von  $\Delta t$  führt bei vielen Anwendungen zu unrealistisch kleinen Zeitschrittlängen und damit zu einem enormen Rechenaufwand.

### 3.1.2 Der Implizit-Ansatz

Bei der impliziten Approximation, auch Rückwärtsdifferenzen - Verfahren genannt, schreibt man:

$$\frac{u_i^{j+1} - u_i^j}{\Delta t} = \frac{u_{i+1}^{j+1} - 2u_i^{j+1} + u_{i-1}^{j+1}}{(\Delta x)^2} \quad (3.16)$$

oder aufgelöst nach  $u_i^{j+1}$ :

$$u_i^{j+1} = \frac{u_i^j + \frac{\Delta t}{(\Delta x)^2} (u_{i+1}^{j+1} + u_{i-1}^{j+1})}{1 + 2\Delta t / (\Delta x)^2} \quad (3.17)$$

Der Hauptvorteil des Implizit-Verfahrens ist darin zu sehen, daß es für beliebige Zeitschrittängen — im Gegensatz zum Explizit-Verfahren — stabil bleibt, /167/. Mit dem Implizit-Ansatz steht ein Verfahren zur Verfügung, mit dem man die Zeitschrittlänge  $\Delta t$  unabhängig von der Maschenweite des finiten Differenzenrasters wählen kann. Da jedoch die Geschwindigkeit, mit der eine finiten Differenzen Approximation zur Konvergenz führt, auch von dem Rundungsfehler abhängt, gibt es eine weitere Verbesserung — den Crank-Nicolson-Ansatz, /53/.

### 3.1.3 Der Crank-Nicolson Ansatz

Nach den Gleichungen (3.01) bzw. (3.04), den Näherungen für  $\delta x / \delta t$  über den vorderen bzw. hinteren Differenzenquotienten, beträgt der Rundungsfehler jeweils  $\Theta(\Delta t)$ , nach (3.08) für den zentralen Differenzenquotienten jedoch nur  $\Theta((\Delta t)^2)$ . Die einfachste Integration des zentralen Differenzenquotienten, bei der die Zeitschritte  $[t - \Delta t, t]$  und  $[t, t + \Delta t]$  die Ableitung nach der Zeit ersetzen, führt zu der Näherung:

$$\frac{u_i^{j+1} - u_i^{j-1}}{2\Delta t} = \frac{u_{i+1}^j - 2u_i^j + u_{i-1}^j}{(\delta x)^2} \quad (3.18)$$

Dieses Verfahren neigt allerdings sehr schnell zur Instabilität, weshalb es auch nicht eingesetzt werden sollte. Diesen Mangel kann jedoch umgehen, indem man für den Zeitschritt  $j + 1/2$  die zentrale Differenzen Approximation  $(u_i^{j+1} - u_i^j) / \Delta t$  einführt. Dies läßt sich durch eine gewichtete

Mittelung der Näherung von  $\delta^2 u / \delta x^2$  für die Zeitschritte  $j$  und  $j + 1$  bewerkstelligen. Bezeichnet man den Wichtungsfaktor mit  $\alpha$ , wobei  $0 \leq \alpha \leq 1$ , so kann man wiederum durch Anwendung der Taylor Reihenentwicklung unter Vernachlässigung des Rundungsfehlers herleiten:

$$\frac{u_i^{j+1} - u_i^j}{\Delta t} = \frac{\alpha(u_{i+1}^{j+1} - 2u_i^{j+1} + u_{i-1}^{j+1}) + (1 - \alpha)(u_{i+1}^j - 2u_i^j + u_{i-1}^j)}{(\Delta x)^2} \quad (3.19)$$

Für  $\alpha = 1/2$  erhält man schließlich die Crank-Nicolson Approximation:

$$\frac{u_i^{j+1} - u_i^j}{\Delta t} = \frac{0.5(u_{i+1}^{j+1} - 2u_i^{j+1} + u_{i-1}^{j+1}) + 0.5(u_{i+1}^j - 2u_i^j + u_{i-1}^j)}{(\Delta x)^2} \quad (3.20)$$

Die explizite Approximation erhält man für  $\alpha = 0$ , die implizite, indem man  $\alpha = 1$  setzt. Abschließend sei noch darauf hingewiesen, daß die Crank-Nicolson Approximation — ebenso wie der Implizit-Ansatz — ungeachtet der gewählten Zeitschrittlänge zwar stabil bleibt, diese Stabilität jedoch noch lange keine Garantie für physikalisch realistische Berechnungsergebnisse bietet /151/, /190/.

### 3.2 Möglichkeiten der Diskretisierung

Das hier beschriebene Modell benutzt kartesische Koordinaten mit einer variablen Diskretisierung aller drei Raumkoordinaten, wobei — je nach Fragestellung — entweder die Knotenpunkte zellenzentriert oder die Zellengrenzen knotenzentriert angeordnet werden können. Zur Veranschaulichung seien in den Abb. 4 und 5 für eine X - Y - Ebene die Anordnungen für eine 10 \* 10 Knoten Diskretisierung aufgezeigt.

Legt man besonders großen Wert darauf, daß die berechneten Temperaturen oder Potentiale gut durch die Knoten repräsentiert werden, empfiehlt sich die Verwendung von zellenzentrierten Knoten. Mit knotenzentrierten Zellengrenzen lassen sich hingegen exaktere Berechnungen der Wärmeübergänge zwischen den Zellen realisieren, /151/. Es gibt verschiedene Möglichkeiten der Knotenindizierung. Bei der eindimensionalen Knotenindizierung werden die Knoten fortlaufend, z.B. von links oben nach rechts unten durchnumeriert. Dieses Verfahren hat Vorteile bezüglich der Rechengeschwindigkeit und einer effizienten Speicherplatzverwaltung, erfordert allerdings einen

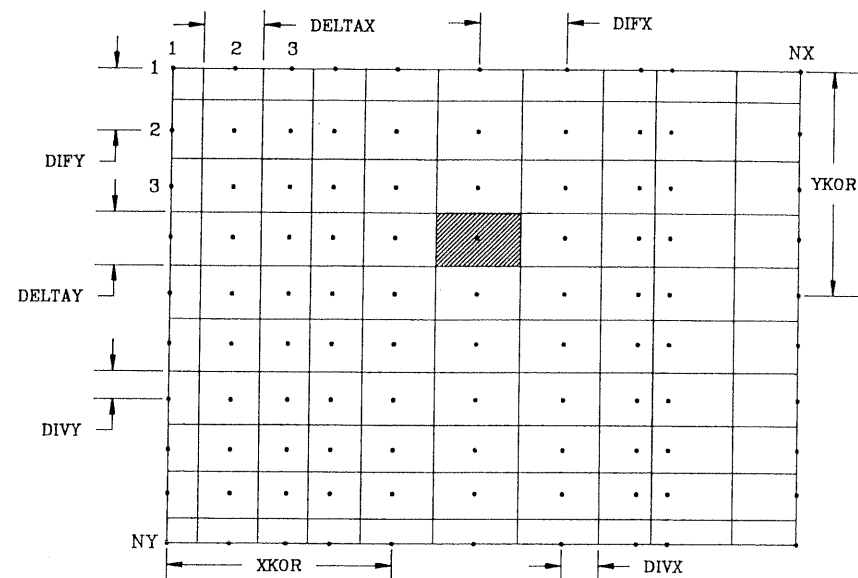


Abb. 4: Knotenzentrierte Anordnung der Zellengrenzen; die Bezeichnungen beziehen sich auf die im Programm verwandten Variablennamen

etwas höheren Programmieraufwand und erschwert außerdem die Fehlersuche während der Programmierphase. Das hier beschriebene Modell benutzt Dreifachindizes, wobei die Numerierung der Knoten entlang eines 180 Grad um die X - Achse auf den Betrachter zugeordneten Koordinatensystems erfolgt.

Vereinbarungsgemäß werden die sechs Grenzflächen der finiten Differenzen Zelle des Knotens  $P_{i,j,k}$  mit "halben" Indizes, nämlich  $(i - 1/2, j, k)$ ,  $(i + 1/2, j, k)$ ,  $(i, j - 1/2, k)$ ,  $(i, j + 1/2, k)$ ,  $(i, j, k - 1/2)$  und  $(i, j, k + 1/2)$ , versehen. Sämtliche Flüsse  $J$ , sowohl Fluid- als auch Wärme fluß, durch diese Zellengrenzen werden analog indiziert.

Alle Eigenschaften, die sich auf die Zellengrenzflächen beziehen, werden aus dem gewichteten, harmonischen Mittel der Eigenschaften zweier Nachbarzellen berechnet. So gilt z.B. für die hydraulische Leitfähigkeit der

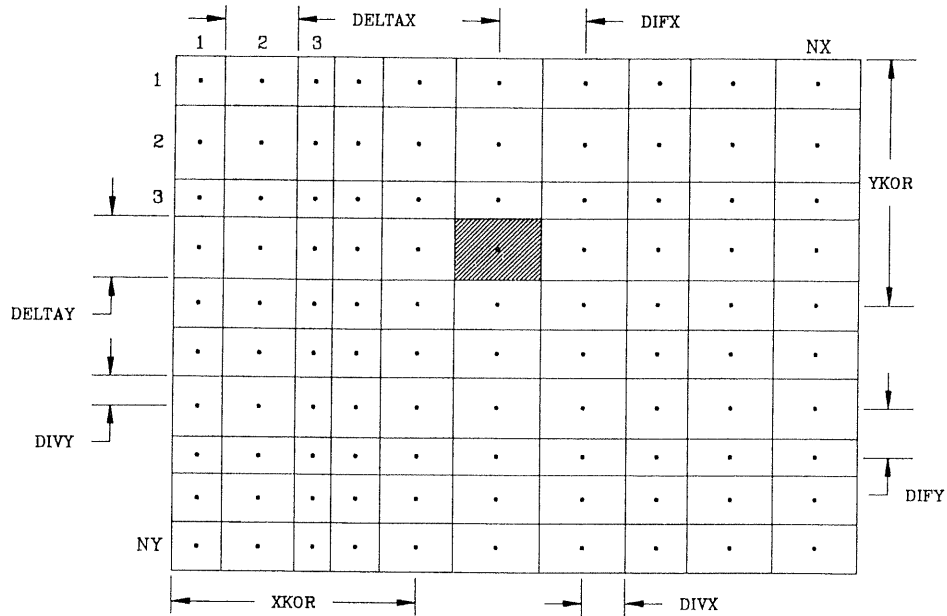


Abb. 5: Zellenzentrierte Anordnung der Knoten; die Bezeichnungen beziehen sich auf die im Programm verwandten Variablennamen

Zellengrenzfläche  $(i + 1/2, j, k)$ :

$$(k_{xx})_{i+1/2,j,k} = \frac{(k_{xx})_{i,j,k} (k_{xx})_{i+1,j,k} (\delta x_i + \delta x_{i+1})}{(k_{xx})_{i,j,k} \delta x_i + (k_{xx})_{i+1,j,k} \delta x_{i+1}} \quad (3.20)$$

wobei  $\delta x_i$  und  $\delta x_{i+1}$  den Strecken von den Knoten zur betreffenden Zellengrenzfläche entsprechen. Dieses Verfahren bietet gegenüber dem arithmetischen Mittel den Vorteil, daß z.B. zwischen einer durchlässigen Zelle und einer nichtleitenden Zelle kein Fluß erfolgen kann.

### 3.3 Die Diskretisierungsgleichungen

Bei der Formulierung der gesuchten Diskretisierungsgleichungen erschien es ratsam, für die Nachbarkoeffizienten eine aus der angelsächsischen Literatur, /151/, /190/ bekannte Indizierung einzuführen. Im dreidimensionalen Fall hat jeder Knoten  $P$ , abgesehen davon, daß er an den Rändern

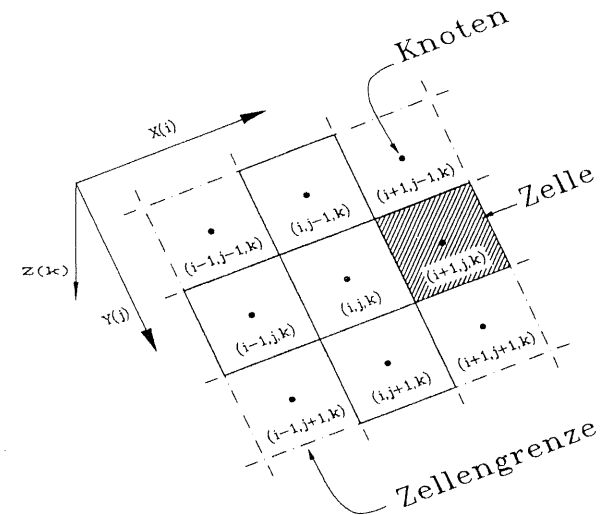


Abb. 6: Knotenindizierung der Schicht  $k$

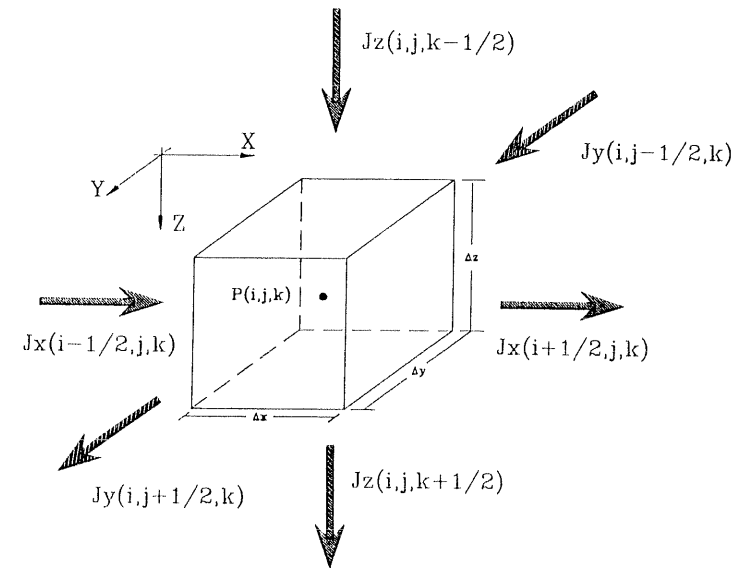


Abb. 7: Fluß durch eine dreidimensionale finite Differenzen Zelle

oder Eckpunkten des Modellquaders liegt, sechs Nachbarn. Den vier Nachbarn in der horizontalen Ebene werden in Analogie zu den Himmelsrichtungen einer Kompassrose je nach der Lage zum Knoten  $P$  die Indizes  $N$  (Norden),  $S$  (Süden),  $E$  (Osten) und  $W$  (Westen) zugeordnet. Die restli-

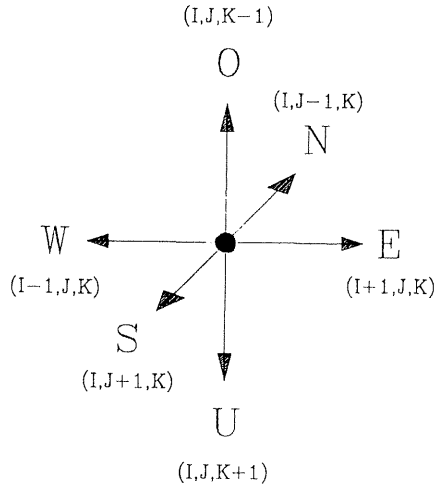


Abb. 8: Indizierung der sechs Nachbarn des Knotens  $P$

chen beiden Knoten erhalten dann die Indizes  $O$  (Oben) und  $U$  (unten).

Die für den Knoten  $P$  aufzulösende Diskretisierungsgleichung des konduktiv - konvektiven Wärmetransportes hat gemäß /151/ die Form:

$$a_P T_P = a_E T_E + a_W T_W + a_N T_N + a_S T_S + a_O T_O + a_U T_U + b \quad (3.21)$$

oder:

$$T_P = \frac{a_E T_E + a_W T_W + a_N T_N + a_S T_S + a_O T_O + a_U T_U + b}{a_P} \quad (3.22)$$

wobei:

$$a_W = D_w A(|Pe_w|) + [F_w, 0] \quad (3.22a)$$

$$a_E = D_e A(|Pe_e|) + [-F_e, 0] \quad (3.22b)$$

$$a_N = D_n A(|Pe_n|) + [F_n, 0] \quad (3.22c)$$

$$a_S = D_s A(|Pe_s|) + [-F_s, 0] \quad (3.22d)$$

$$a_O = D_o A(|Pe_o|) + [F_o, 0] \quad (3.22e)$$

$$a_U = D_u A(|Pe_u|) + [-F_u, 0] \quad (3.22f)$$

$$a_P^0 = \frac{\rho_P \Delta x \Delta y \Delta z}{\Delta t} \quad (3.23)$$

$$b = Q_e \Delta x \Delta y \Delta z + a_P^0 T_P \quad (3.24)$$

$$a_P = a_E + a_W + a_N + a_S + a_O + a_U + a_P^0 \quad (3.25)$$

Die Diffusions- und Konvektionskoeffizienten werden wie folgt definiert:

$$F_w = (\rho v_x)_w \Delta y \Delta z \quad D_w = \frac{\Gamma_w \Delta y \Delta z}{(\delta x)_w} \quad (3.26a)$$

$$F_e = (\rho v_x)_e \Delta y \Delta z \quad D_e = \frac{\Gamma_e \Delta y \Delta z}{(\delta x)_e} \quad (3.26b)$$

$$F_n = (\rho v_y)_n \Delta x \Delta z \quad D_n = \frac{\Gamma_n \Delta x \Delta z}{(\delta y)_n} \quad (3.26c)$$

$$F_s = (\rho v_y)_s \Delta x \Delta z \quad D_s = \frac{\Gamma_s \Delta x \Delta z}{(\delta y)_s} \quad (3.26d)$$

$$F_o = (\rho v_z)_o \Delta x \Delta y \quad D_o = \frac{\Gamma_o \Delta x \Delta y}{(\delta z)_o} \quad (3.26e)$$

$$F_u = (\rho v_z)_u \Delta x \Delta y \quad D_u = \frac{\Gamma_u \Delta x \Delta y}{(\delta z)_u} \quad (3.26f)$$

wobei die dimensionslosen Peclet-Zahlen aus dem Quotienten des konvektiven und diffundiven Gliedes hervorgehen:

$$Pe_e = \frac{F_e}{D_e} \quad Pe_w = \frac{F_w}{D_w} \quad (3.27a)$$

$$Pe_n = \frac{F_n}{D_n} \quad Pe_s = \frac{F_s}{D_s} \quad (3.27b)$$

$$Pe_o = \frac{F_o}{D_o} \quad Pe_u = \frac{F_u}{D_u} \quad (3.27c)$$

Die Funktion  $A(|Pe|)$  kann Tabelle 1 entnommen werden. Die für den Knoten  $P$  aufzulösende Diskretisierungsgleichung der Strömungsberechnung hat die Form:

$$a_P h_P = a_E h_E + a_W h_W + a_N h_N + a_S h_S + a_O h_O + a_U h_U + b \quad (3.28)$$

oder:

$$h_P = \frac{a_E h_E + a_W h_W + a_N h_N + a_S h_S + a_O h_O + a_U h_U + b}{a_P} \quad (3.29)$$

wobei

$$a_w = T x_w \frac{\Delta y \Delta z}{(\delta x)_w} \quad (3.30a)$$

$$a_e = T x_e \frac{\Delta y \Delta z}{(\delta x)_e} \quad (3.30b)$$

$$a_n = T y_n \frac{\Delta x \Delta z}{(\delta y)_n} \quad (3.30c)$$

$$a_s = T y_s \frac{\Delta x \Delta z}{(\delta y)_s} \quad (3.30b)$$

$$a_o = m k z_o \frac{\Delta x \Delta y}{(\delta z)_o} \quad (3.30e)$$

$$a_u = m k z_u \frac{\Delta x \Delta y}{(\delta z)_u} \quad (3.30f)$$

$$a_P^0 = \frac{S' \Delta x \Delta y}{\Delta t} \quad (3.31)$$

$$b = Q_w + a_P^0 h_P \quad (3.32)$$

$$a_P = a_E + a_W + a_N + a_S + a_O + a_U + a_P^0 \quad (3.33)$$

wobei  $m$  der Mächtigkeit der zu berechnenden hydraulischen Einheit entspricht. Die lokalen Transmissivitäten  $T_i$  werden aus dem Produkt des geometrischen Mittels der aktuellen Aquifermächtigkeiten zweier benachbarter Knoten und der entsprechenden Grenzflächenleitfähigkeit ermittelt, /106/. Bei äquidistanten Knotenabständen liest sich dieses Berechnungsschema z.B. für die östliche Zellengrenzfläche, des Knotens  $P_{i,j,k}$  mit der Aquiferbasis  $bo_{i,j,k}$ :

$$T x_e = k x_e \sqrt{(h_{i,j,k} - bo_{i,j,k}) (h_{i+1,j,k} - bo_{i+1,j,k})} \quad (3.34)$$

Die hydraulische Grenzflächenleitfähigkeit  $k x_e$  wird durch das harmonische Mittel der Leitfähigkeiten der entsprechenden Nachbarknoten berechnet:

$$k x_e = \frac{2 k x_{i,j,k} k x_{i+1,j,k}}{k x_{i,j,k} + k x_{i+1,j,k}} \quad (3.35)$$

Bei der Diskretisierung nichtäquidistanter Knoten verkompliziert sich das Verfahren ein wenig. Nimmt man an,  $\delta x_{i_e}$  sei der Abstand des Knotens  $P_{i,j,k}$  zu seiner östlichen Grenzfläche und  $\delta x_e$  der Abstand zu seinem östlichen Nachbarknoten  $P_{i+1,j,k}$ , dann kann mit

$$f_e \equiv \frac{\delta x_{i_e}}{\delta x_e} \quad (3.36)$$

der Grenzflächenwichtungsfaktor definiert werden. Die Gleichungen (3.34) und (3.35) modifizieren sich dann zu

$$T x_e = k x_e (h_{i,j,k} - bo_{i,j,k})^{f_e} (h_{i+1,j,k} - bo_{i+1,j,k})^{(1-f_e)} \quad (3.37)$$

bzw.

$$k x_e = \frac{k x_{i,j,k} k_{i+1,j,k}}{(1-f_e) k x_{i,j,k} + f_e k x_{i+1,j,k}} \quad (3.38)$$

oder

$$k x_e = \left( \frac{1-f_e}{k x_{i,j,k}} + \frac{f_e}{k x_{i+1,j,k}} \right)^{-1} \quad (3.39)$$

Die für den Konvektionsterm der Wärmetransportberechnung benötigten lokalen Fließgeschwindigkeiten können auf zweierlei Wegen — entweder für die Knoten oder für die Zellengrenzflächen — über eine explizite finite Differenzen Form berechnet werden, /111/. Die Filtergeschwindigkeit in  $X$ -Richtung am Knoten  $P_{i,j,k}$  berechnet man wie folgt:

$$(v_x)_{i,j,k} = (k_{xx})_{i,j,k} \frac{h_{i-1,j,k} - h_{i+1,j,k}}{\delta x_w + \delta x_e} \quad (3.40)$$

$\delta x_w$  und  $\delta x_e$  bedeuten hierbei die Entfernung des Knotens  $P_{i,j,k}$  zu seinem westlichen bzw. östlichen Nachbarn. Für die Filtergeschwindigkeit an der östlichen Grenzfläche des selben Knotens schreibt man:

$$(v_x)_{i+1/2,j,k} = (k_{xx})_{i+1/2,j,k} \frac{h_{i,j,k} - h_{i+1,j,k}}{\delta x_e} \quad (3.41)$$

Wie man erkennt, wird bei äquidistanten Knotenabständen in Gl. (3.40) die Filtergeschwindigkeit über den doppelten Knotenabstand integriert, was gegenüber Gl. (3.41), in die nur der einfache Knotenabstand einfließt, eine gewisse Ungenauigkeit in sich birgt. In dem hier beschriebenen Modell werden daher die Konvektionskoeffizienten über Grenzflächenfiltergeschwindigkeiten berechnet.

### 3.4 Iterative Lösungsverfahren

Bei den iterativen Lösungsverfahren von finiten Differenzen Gleichungen unterscheidet man "Punkt - für - Punkt" und "Linie - für - Linie" Methoden. Das einfachste "Punkt - für - Punkt" - Verfahren ist die Gauss - Seidel - Iteration, bei der für jeden Knoten der Reihe nach die Differenzgleichung gelöst wird. Für die gesuchte Zielgröße  $\phi_P$  hat diese Gleichung die Form:

$$a_P \phi_P = a_E \phi_E + a_W \phi_W + a_N \phi_N + a_S \phi_S + a_O \phi_O + a_U \phi_U + b \quad (3.42)$$

oder kürzer:

$$a_P \phi_P = \sum a_{nb} \phi_{nb} + b \quad (3.43)$$

Hierbei steht  $nb$  für alle Nachbarindizes des Knotens  $P$  und  $b$  für den Quellen-/Senkenterm. Löst man (3.43) nach  $\phi_P$  auf, so erhält man:

$$\phi_P = \frac{\sum a_{nb} \phi_{nb}^* + b}{a_P} \quad (3.44)$$

Bei  $\phi_{nb}^*$  handelt es sich um die Nachbarwerte von  $\phi_P$ , die entweder bereits berechnet wurden oder noch berechnet werden müssen. Insgesamt wird bei diesem Verfahren immer nur ein Set von den unbekanntem Zielgrößen im Arbeitsspeicher des Rechners gehalten. Bei der iterativen Lösung algebraischer Gleichungen oder der numerischen Behandlung von Nichtlinearitäten kann es bisweilen wünschenswert sein, die maximalen Änderungen pro Iterationsschritt zu vergrößern bzw. zu limitieren. Im ersten Fall kann der Rechenaufwand erheblich reduziert werden, da das Verfahren rascher konvergiert, und im zweiten Fall kann man Oszillationen unterdrücken und damit ein Kollabieren der Iteration verhindern. Einen solchen Effekt erreicht man durch die Einführung eines Relaxationsfaktors.  $\phi_P^0$  sei nun die bereits im vorherigen Iterationsschritt berechnete Zielgröße am Punkt  $P$ . Die Addition und gleichzeitige Subtraktion von  $\phi_P^0$  zur rechten Seite von Gleichung (3.44) führt zu

$$\phi_P = \phi_P^0 + \left( \frac{\sum a_{nb} \phi_{nb} + b}{a_P} - \phi_P^0 \right) \quad (3.45)$$



Die maximalen Änderungen pro Iterationsschritt lassen sich durch die Modifikation von Gleichung (3.45) vergrößern oder limitieren.

$$\phi_P = \phi_P^0 + \Omega \left( \frac{\sum a_{nb} \phi_{nb} + b}{a_P} - \phi_P^0 \right) \quad (3.46)$$

oder

$$\frac{a_P}{\Omega} \phi_P = \sum a_{nb} \phi_{nb} + b + (1 - \Omega) \frac{a_P}{\Omega} \phi_P^0 \quad (3.47)$$

Der Relaxationsfaktor  $\Omega$  kann Werte zwischen 0 und 2 annehmen. Bei  $0 < \Omega < 1$  spricht man von Unterrelaxation und analog, bei  $1 < \Omega < 2$ , von Überrelaxation. In der angelsächsischen Literatur wird die Überrelaxation in Verbindung mit dem Gauss-Seidel Verfahren auch als **S**uccessive **O**ver **R**elaxation (SOR) bezeichnet. Das Gauss-Seidel-Verfahren läßt sich programmtechnisch sehr einfach realisieren, hat jedoch den Nachteil, daß es relativ langsam konvergiert. Ein Grund für die langsame Konvergenz ist, daß der Informationsgehalt der Randbedingungen nur schrittweise in das Innere des Modellareals transferiert wird.

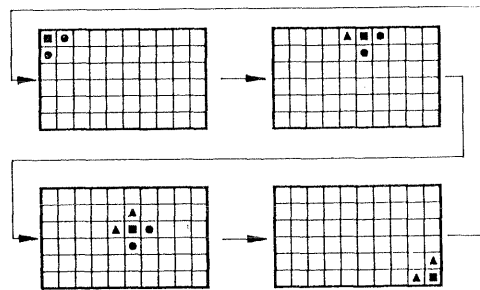


Abb. 9: Flußdiagramm der Gauss-Seidel-Iteration

Das zweidimensionale finite Differenzen Raster in Abb. 9 stellt das unvollständige Flußdiagramm eines Gauss-Seidel-Iterationsschrittes dar. Die Quadrate markieren die aktuell zu berechnenden Knoten, die Dreiecke bereits berechnete und die Kreise die aus dem vorherigen Iterationsschritt bekannten oder anfänglich vorbesetzten Knoten. Dadurch, daß die Knoten des linken, oberen Teiles des Rasters in der hier dargestellten Reihenfolge stets zuerst innerhalb eines Iterationsschrittes gelöst werden,

können aus völlig symmetrischen Problemen asymmetrischen Lösungen hervorgehen. Diesen unerwünschten Effekt kann man durch alternierende Iterationsrichtungen unterdrücken. Man beginnt in umgekehrter Richtung die Iteration dort, wo man die vorherige beendet hat.

Der Nachteil des langsamen Transports der Randinformationen in das Innere des Modellareals wird von dem "Linie-für-Linie" Verfahren dadurch umgangen, daß hier alle Knoten einer Reihe in einem Schritt mit ihren Nachbarn ins Bilanzgleichgewicht gebracht werden.

Bei den "Linie-für-Linie" Verfahren unterteilt man in einige Varianten, die sich in ihrer Effizienz nur gering unterscheiden:

1. **Line - Successive - Over - Relaxation (LSOR)**  
BJORDAMMAN & COATS(1969)
2. **Sliced - Successive - Over - Relaxation (SSOR)**  
PEACEMAN (1977)
3. **Line - Successive - Over - Relaxation with additive Corrections (LSORC)**, PEACEMAN (1977)
4. **Iterative - Alternating - Direction - Implizit (IADI)**  
DOUGLAS & RACHFORD (1956)
5. **Strongly - Implizit - Procedure (SIP)**  
STONE (1969)

Abb. 10 gibt für ein zweidimensionales Knotenraster das Flußdiagramm des IADI-Verfahrens wieder.

Da in dem hier beschriebenen Modell neben der Gauss-Seidel-Iteration das IADI-Verfahren eingesetzt wurde, sei es an dieser Stelle etwas näher beschrieben. Die Grundidee ist die, tridiagonale Koeffizientenmatrizen zu generieren, die mit Hilfe des äußerst effizienten Thomas-Algorithmus (vergl. Kap. 3.5) direkt gelöst werden können. Ein solches Matrixgleichungssystem hat die Form

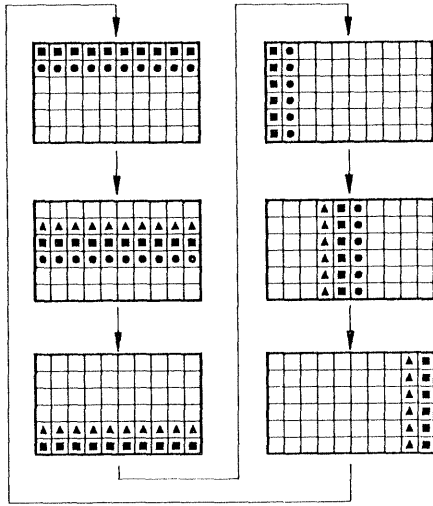


Abb. 10: Flußdiagramm des IADI-Verfahrens

$$\begin{bmatrix} b_1 & c_1 & & & & \\ a_2 & b_2 & c_2 & & & \\ & \ddots & \ddots & \ddots & & \\ & & a_{N-1} & b_{N-1} & c_{N-1} & \\ & & & a_N & b_N & \end{bmatrix} \begin{bmatrix} u_1 \\ u_2 \\ \vdots \\ u_{N-1} \\ u_N \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} d_1 \\ d_2 \\ \vdots \\ d_{N-1} \\ d_N \end{bmatrix}.$$

Im dreidimensionalen Fall gliedert sich somit jeder Iterationsschritt in drei Teilschritte, die  $X$ -, die  $Y$ - und die  $Z$ -Schleife. In der  $X$ -Schleife werden alle von Westen nach Osten verlaufenden Knotenreihen der Reihe nach berechnet, bei der  $Y$ -Schleife alle von Norden nach Süden verlaufenden und bei der  $Z$ -Schleife schließlich alle Knotenreihen, die sich von Oben nach Unten erstrecken. Sofern die nichtdiagonalen Komponenten des hydraulischen Leitfähigkeitstensors Null sind, setzt sich die Koeffizientenmatrix der Strömungsberechnung wie folgt zusammen:

$$(a_W)_{i,j,k} = T x_{i-1/2,j,k} \frac{\Delta y_j \Delta z_k}{(\delta x_i)_w} \quad (3.48a)$$

$$(a_E)_{i,j,k} = T x_{i+1/2,j,k} \frac{\Delta y_j \Delta z_k}{(\delta x_i)_e} \quad (3.48b)$$

$$(a_N)_{i,j,k} = T y_{i,j-1/2,k} \frac{\Delta x_i \Delta z_k}{(\delta y_j)_n} \quad (3.48c)$$

$$(a_S)_{i,j,k} = T y_{i,j+1/2,k} \frac{\Delta x_i \Delta z_k}{(\delta y_j)_s} \quad (3.48d)$$

$$(a_o)_{i,j,k} = m_k k z_{i,j,k-1/2} \frac{\Delta x_i \Delta y_j}{(\delta z_k)_o} \quad (3.48e)$$

$$(a_u)_{i,j,k} = m_k k z_{i,j,k+1/2} \frac{\Delta x_i \Delta y_j}{(\delta z_k)_u} \quad (3.48f)$$

für die  $X$ -Schleife schreibt man:

$$a_i = -(a_w)_{i,j,k}$$

$$b_i = (a_w)_{i,j,k} + (a_e)_{i,j,k} + (a_n)_{i,j,k} + (a_s)_{i,j,k} + (a_o)_{i,j,k} + (a_u)_{i,j,k}$$

$$+ \Delta x_i \Delta y_j \frac{S'}{\Delta t}$$

$$c_i = -(a_e)_{i,j,k}$$

$$d_i = (a_n)_{i,j,k} h_{i,j-1,k} + (a_s)_{i,j,k} h_{i,j+1,k} + (a_o)_{i,j,k} h_{i,j,k-1} + (a_u)_{i,j,k} h_{i,j,k+1}$$

$$+ m_k (Q_w)_{i,j,k} + \Delta x_i \Delta y_j \frac{S'}{\Delta t} h_{i,j,k}^0$$

$$u_i = h_{i,j,k}$$

analog die  $Y$ -Schleife:

$$a_j = -(a_n)_{i,j,k}$$

$$b_j = (a_w)_{i,j,k} + (a_e)_{i,j,k} + (a_n)_{i,j,k} + (a_s)_{i,j,k} + (a_o)_{i,j,k} + (a_u)_{i,j,k}$$

$$+ \Delta x_i \Delta y_j \frac{S'}{\Delta t}$$

$$c_j = -(a_s)_{i,j,k}$$

$$d_j = (a_w)_{i,j,k} h_{i-1,j,k} + (a_e)_{i,j,k} h_{i+1,j,k} + (a_o)_{i,j,k} h_{i,j,k-1} + (a_u)_{i,j,k} h_{i,j,k+1}$$

$$+ m_k (Q_w)_{i,j,k} + \Delta x_i \Delta y_j \frac{S'}{\Delta t} h_{i,j,k}^0$$

$$u_j = h_{i,j,k}$$

und schließlich die  $Z$ -Schleife:

$$a_k = -(a_o)_{i,j,k}$$

$$b_k = (a_w)_{i,j,k} + (a_e)_{i,j,k} + (a_n)_{i,j,k} + (a_s)_{i,j,k} + (a_o)_{i,j,k} + (a_u)_{i,j,k}$$

$$+\Delta x_i \Delta y_j \frac{S'}{\Delta t}$$

$$c_k = -(a_u)_{i,j,k}$$

$$d_k = (a_w)_{i,j,k} h_{i-1,j,k} + (a_e)_{i,j,k} h_{i+1,j,k} + (a_n)_{i,j,k} h_{i,j-1,k} + (a_s)_{i,j,k} h_{i,j+1,k}$$

$$+m_k(Q_w)_{i,j,k} + \Delta x_i \Delta y_j \frac{S'}{\Delta t} h_{i,j,k}^0$$

$$u_k = h_{i,j,k}$$

Nimmt man an, daß die nichtdiagonalen Komponenten des Wärmeleitfähigkeitstensors ebenfalls Null sind, setzt sich die Koeffizientenmatrix der diffundiv - konvektiven Wärmetransportberechnung in analoger Weise zusammen.

$$(a_e)_{i,j,k} = (D_e)_{i,j,k} A(|(Pe_e)_{i,j,k}|) + [(F_e)_{i,j,k}] \quad (3.49a)$$

$$(a_w)_{i,j,k} = (D_w)_{i,j,k} A(|(Pe_w)_{i,j,k}|) + [(F_w)_{i,j,k}] \quad (3.49b)$$

$$(a_n)_{i,j,k} = (D_n)_{i,j,k} A(|(Pe_n)_{i,j,k}|) + [(F_n)_{i,j,k}] \quad (3.49c)$$

$$(a_s)_{i,j,k} = (D_s)_{i,j,k} A(|(Pe_s)_{i,j,k}|) + [(F_s)_{i,j,k}] \quad (3.49d)$$

$$(a_o)_{i,j,k} = (D_o)_{i,j,k} A(|(Pe_o)_{i,j,k}|) + [(F_o)_{i,j,k}] \quad (3.49e)$$

$$(a_u)_{i,j,k} = (D_u)_{i,j,k} A(|(Pe_u)_{i,j,k}|) + [(F_u)_{i,j,k}] \quad (3.49f)$$

Die Diffusions- und Konvektionskoeffizienten —  $D_{nb}$  bzw.  $F_{nb}$  — sowie die lokalen Peclet-Zahlen  $Pe_{nb}$  werden hierbei nach den Gleichungen (3.26a-f) bzw. (3.27a-c) berechnet. Die Schleifengleichungen lauten somit:

$X$ -Schleife:

$$a_i = -(a_w)_{i,j,k}$$

$$b_i = (a_w)_{i,j,k} + (a_e)_{i,j,k} + (a_n)_{i,j,k} + (a_s)_{i,j,k} + (a_o)_{i,j,k} + (a_u)_{i,j,k}$$

$$+\Delta x_i \Delta y_j \Delta z_k \frac{(\rho_{eff})_{i,j,k}}{\Delta t}$$

$$c_i = -(a_e)_{i,j,k}$$

$$d_i = (a_n)_{i,j,k} T_{i,j-1,k} + (a_s)_{i,j,k} T_{i,j+1,k} + (a_o)_{i,j,k} T_{i,j,k-1} + (a_u)_{i,j,k} T_{i,j,k+1}$$

$$+\frac{(Q_e)_{i,j,k}}{(C_{eff})_{i,j,k}} + \Delta x_i \Delta y_j \Delta z_k \frac{(\rho_{eff})_{i,j,k}}{\Delta t} T_{i,j,k}^0$$

$$u_i = T_{i,j,k}$$

$Y$ -Schleife:

$$a_j = -(a_n)_{i,j,k}$$

$$b_j = (a_w)_{i,j,k} + (a_e)_{i,j,k} + (a_n)_{i,j,k} + (a_s)_{i,j,k} + (a_o)_{i,j,k} + (a_u)_{i,j,k}$$

$$+\Delta x_i \Delta y_j \Delta z_k \frac{(\rho_{eff})_{i,j,k}}{\Delta t}$$

$$c_j = -(a_s)_{i,j,k}$$

$$d_j = (a_w)_{i,j,k} T_{i-1,j,k} + (a_e)_{i,j,k} T_{i+1,j,k} + (a_o)_{i,j,k} T_{i,j,k-1} + (a_u)_{i,j,k} T_{i,j,k+1}$$

$$+\frac{(Q_e)_{i,j,k}}{(C_{eff})_{i,j,k}} + \Delta x_i \Delta y_j \Delta z_k \frac{(\rho_{eff})_{i,j,k}}{\Delta t} T_{i,j,k}^0$$

$$u_j = T_{i,j,k}$$

$Z$ -Schleife:

$$a_k = -(a_o)_{i,j,k}$$

$$b_k = (a_w)_{i,j,k} + (a_e)_{i,j,k} + (a_n)_{i,j,k} + (a_s)_{i,j,k} + (a_o)_{i,j,k} + (a_u)_{i,j,k}$$

$$+\Delta x_i \Delta y_j \Delta z_k \frac{(\rho_{eff})_{i,j,k}}{\Delta t}$$

$$c_k = -(a_u)_{i,j,k}$$

$$d_k = (a_w)_{i,j,k} T_{i-1,j,k} + (a_e)_{i,j,k} T_{i+1,j,k} + (a_n)_{i,j,k} T_{i,j-1,k} + (a_s)_{i,j,k} T_{i,j+1,k}$$

$$+\frac{(Q_e)_{i,j,k}}{(C_{eff})_{i,j,k}} + \Delta x_i \Delta y_j \Delta z_k \frac{(\rho_{eff})_{i,j,k}}{\Delta t} T_{i,j,k}^0$$

$$u_k = T_{i,j,k}$$

wobei:

$$(C_{eff})_{i,j,k} = (\Phi_g)_{i,j,k} \Psi_k C_w + \left(1 - (\Phi_g)_{i,j,k}\right) (C_g)_{i,j,k} \quad (3.50)$$

bzw. beim Gefrieren von Wasser:

$$(C_{eff})_{i,j,k} = (\Phi_g)_{i,j,k} \Psi_k \left( (X_e)_{i,j,k} C_e + (X_w)_{i,j,k} C_w \right) + \left(1 - (\Phi_g)_{i,j,k}\right) (C_g)_{i,j,k} \quad (3.51)$$

und

$$(\rho_{eff})_{i,j,k} = (\Phi_g)_{i,j,k} \Psi_k \rho_w + \left(1 - (\Phi_g)_{i,j,k}\right) (\rho_g)_{i,j,k} \quad (3.52)$$

bzw. beim Gefrieren von Wasser:

$$(\rho_{eff})_{i,j,k} = (\Phi_g)_{i,j,k} \Psi_k \left( (X_e)_{i,j,k} \rho_e + (X_w)_{i,j,k} \rho_w \right) + \left(1 - (\Phi_g)_{i,j,k}\right) (\rho_g)_{i,j,k} \quad (3.53)$$

Analog zur Gauss-Seidel-Iteration kann das IADI-Verfahren durch die Einführung eines Relaxationsfaktors zum LSOR-Verfahren modifiziert werden. Nachdem durch Anwendung des Thomas-Algorithmus das Feld der gesuchten Zielgrößen  $u_i$  berechnet wurde, kann man durch Wiedereinsetzen in das Ausgangsfeld z.B. für die  $X$ -Schleife der Temperaturberechnung schreiben:

$$T_{i,j,k} = T_{i,j,k}^0 + \Omega (u_i - T_{i,j,k}^0) \quad (3.54)$$

bzw. für die Strömungsberechnung:

$$h_{i,j,k} = h_{i,j,k}^0 + \Omega (u_i - h_{i,j,k}^0) \quad (3.55)$$

$T^0$  und  $h^0$  bedeuten hierbei die Temperaturen bzw. Piezometerhöhen des vorausgegangenen Iterationsschrittes. Bei linearen Problemen bewirkt ein Relaxationsfaktor von  $1 < \Omega < 2$  eine raschere Konvergenz, während sich bei nichtlinearen Problemen mit  $0 < \Omega < 1$  Oszillationen unterdrücken lassen.

### 3.5 Der Thomas Algorithmus

Viele effiziente, numerische Verfahren generieren Gleichungssysteme mit tridiagonalen Matrizen, /172/. Ein typisches Beispiel für eine solche Matrixgleichung hat die Form:

$$[A]\{u\} = \{d\} \quad (3.56)$$

wobei:

$$A = \begin{bmatrix} b_1 & c_1 & & & \\ a_2 & b_2 & c_2 & & \\ & \ddots & \ddots & \ddots & \\ & & a_{N-1} & b_{N-1} & c_{N-1} \\ & & & a_N & b_N \end{bmatrix},$$

$$\{u\} = \begin{Bmatrix} u_1 \\ u_2 \\ \vdots \\ u_{N-1} \\ u_N \end{Bmatrix}, \quad \{d\} = \begin{Bmatrix} d_1 \\ d_2 \\ \vdots \\ d_{N-1} \\ d_N \end{Bmatrix},$$

oder ausgeschrieben:

$$\begin{bmatrix} b_1 & c_1 & & & \\ a_2 & b_2 & c_2 & & \\ & \ddots & \ddots & \ddots & \\ & & a_{N-1} & b_{N-1} & c_{N-1} \\ & & & a_N & b_N \end{bmatrix} \begin{Bmatrix} u_1 \\ u_2 \\ \vdots \\ u_{N-1} \\ u_N \end{Bmatrix} = \begin{Bmatrix} d_1 \\ d_2 \\ \vdots \\ d_{N-1} \\ d_N \end{Bmatrix}$$

Die Matrix  $[A]$  enthält die Koeffizienten des linearen Gleichungssystems, der Vektor  $\{u\}$  die gesuchten Zielgrößen, (Piezometerhöhen, Temperaturen, Konzentrationen etc.) und der Vektor  $\{d\}$  die bekannten Eingangsparameter. Der Thomas Algorithmus leitet sich aus der Zerlegung der Koeffizientenmatrix in eine obere und eine untere Dreiecksmatrix ab, sodaß

$$[A] = [L][U] \quad (3.57)$$

wobei  $[L]$  und  $[U]$  wie folgt definiert werden:

$$[L] = \begin{bmatrix} \beta_1 & & & & & \\ a_2 & \beta_2 & & & & \\ & \ddots & \ddots & & & \\ & & a_{N-1} & \beta_{N-1} & & \\ & & & a_N & \beta_N & \end{bmatrix}$$

und

$$[U] = \begin{bmatrix} 1 & \gamma_1 & & & & \\ & 1 & \gamma_2 & & & \\ & & \ddots & \ddots & & \\ & & & 1 & \gamma_{N-1} & \\ & & & & 1 & \end{bmatrix},$$

Durch Multiplikation der unteren Matrix mit der oberen und durch Gleichsetzen der Elemente der Produktmatrix mit der Koeffizientenmatrix erhält man folgende Beziehungen:

$$\begin{aligned} \beta_1 &= b_1 \\ \gamma_i &= \frac{c_i}{\beta_i} \quad i = 1, 2, \dots, N-1 \\ \beta_i &= b_i - a_i \gamma_{i-1} \quad i = 2, 3, \dots, N \end{aligned}$$

Gleichung (3.56) kann man somit auch schreiben:

$$[L][U]\{u\} = \{d\}$$

oder

$$[L]\{s\} = \{d\}$$

wobei  $\{s\}$  einen vorübergehend unbekanntes Vektor darstellt, der wie folgt definiert ist:

$$\{s\} = [U]\{u\}$$

Die Elemente von  $\{s\}$  können durch Auflösen der Gleichung  $[L]\{s\} = \{d\}$  bestimmt werden. Hierbei ergeben sich folgende Beziehungen:

$$\begin{aligned} s_1 &= \frac{d_1}{\beta_1} \\ s_i &= \frac{(d_i - a_i s_{i-1})}{\beta_i}, \quad i = 2, 3, \dots, N \end{aligned}$$

Mit dem nun bekannten Vektor  $\{s\}$  wird durch rückwärtiges Einsetzen der gesuchte Vektor  $\{u\}$  ermittelt. Dies geschieht durch folgende Beziehungen:

$$\begin{aligned} u_n &= s_N \\ u_i &= s_i - \gamma_i u_{i+1}, \quad i = N-1, N-2, \dots, 1 \end{aligned}$$

Noch einmal zusammengefaßt gliedert sich das Berechnungsverfahren in zwei Schritte: zunächst werden die Felder  $\beta_i$  und  $s_i$  berechnet, die darauf - im zweiten Schritt - durch rückwärtiges Einsetzen die unbekanntes Zielgrößen liefern. Der Thomas Algorithmus stellt für den eindimensionalen Fall einen direkten Gleichungslöser dar, er kann aber auch sehr effizient für mehrdimensionale Anwendungen, z.B. in Verbindung mit der iterativen ADI - Methode von /57/ eingesetzt werden.

### 3.6 Behandlung der Randbedingungen

Bei der numerischen Behandlung von partiellen Differentialgleichungen unterscheidet man drei Arten von Randbedingungen:

- Randbedingungen 1. Art - z.B. bekannte Piezometerhöhen, Temperaturen etc.
- Randbedingungen 2. Art - gegebener Randzufluß - z.B. basaler Wärmefluß, bekannter Zu- und Abstrom von Grundwasser über die Modellränder
- Randbedingungen 3. Art, die eine Kombination aus 1. und 2. darstellen, d.h. der Randzufluß hängt von der gesuchten Zielgröße ab

Diese Randbedingungen können in finiten Differenzen Modellen auf sehr vielfältige Weise gelöst werden. Ein häufig eingesetztes Verfahren besteht aus der Generierung virtueller Knotenreihen an den Rändern des Modellareals, kurz *Superposition* genannt. Undurchlässige Ränder lassen sich hierbei durch die Spiegelung der vorletzten Knotenreihe über den Rand auf die virtuelle Knotenreihe realisieren. Randbedingungen zweiter Art werden durch eine 180°- Rotation der vorletzten Knotenreihe um den Modellrand gewährleistet.

Die Superposition virtueller Knotenreihen hat den Vorteil, daß man z.B. für die Simulation eines völlig symmetrischen Absenkungstrichters eines Brunnens bei kartesischer Diskretisierung nur einen Quadranten zu berechnen braucht, (vergl. Kap 5.4). Speziell im dreidimensionalen Fall benötigt man dafür jedoch eine große Anzahl zusätzlicher Knoten, was auf Computern mit eingeschränktem Kernspeicher zu untragbaren Beschränkungen bezüglich der Diskretisierung führen kann. In dem hier vorgestellten Modell werden die Randbedingungen daher wie folgt behandelt. Alle Modellränder werden als wasser- und energieundurchlässig betrachtet. Randbedingungen 1. Art werden in der GAUSS-SEIDEL-Iteration als gelöste Knotengleichung betrachtet, beim IADI-Verfahren wird den Zellen der betreffenden Knoten eine quasiunendliche Speicherkapazität<sup>1</sup> zugeordnet. Der Vollständigkeit halber sei an dieser Stelle erwähnt, daß man zur Lösung der in Kap. 3.3 beschriebenen Gleichungssysteme wenigstens einen Knoten, für den die Randbedingung der 1. Art erfüllt ist, benötigt. Bekannte Randzuflüsse, also Randbedingungen 2. Art, werden in beiden Iterationsverfahren dem Quellen/Senkenterm des betreffenden Knotens beaufschlagt. Randbedingungen der 3. Kategorie können mit der hier beschriebenen Programmversion noch nicht behandelt werden, sie lassen sich jedoch relativ einfach in das Modell einbauen.

---

<sup>1</sup> bei der Strömungsberechnung wird diesen Knoten ein Speicherkoeffizient von  $S > 10^{20}$  zugeordnet, bei der Wärmetransportberechnung werden  $\rho$  und  $C$  auf  $> 10^{20}$  gesetzt

## 4 Programmentwicklung

Die numerische Behandlung der den Prozess der Strömung und des Wärmetransportes beschreibenden partiellen Differentialgleichungen kann je nach Anzahl der Knoten und Zeitschritte in eine außerordentlich rechenintensiven Prozedur ausarten. Man ist daher bei der Modellentwicklung auf eine Programmiersprache angewiesen, die einerseits weite Verbreitung hat, d.h. auch auf Workstations und Großrechnern einsetzbar ist, andererseits aber auch über ein reichhaltiges Angebot vordefinierter Funktionen verfügt. Daher fiel die Wahl auf die Programmiersprache FORTRAN77. Da kein Modell so komplex ist, daß es nicht doch noch um den einen oder anderen Aspekt erweitert werden könnte, bot sich ein modulares Konzept an. So besteht TRADIKON-3D aus einem Hauptprogramm, das lediglich die Aufgabe hat, die Aufrufe der 62 Unterprogramme zu koordinieren und für eine problemabhängige Programmsteuerung zu sorgen. Eine Reihe von Eingabeoptionen erlaubt es, die Problemlösung, sofern physikalisch statthaft, zu vereinfachen und somit die Rechenzeit zu verkürzen.

Reine Konduktionsprobleme und Diffusions-Konvektionsprobleme können z.B. getrennt voneinander behandelt werden. Bei der Berechnung des Wärmetransportes in Gesteinen mit stagnierenden Grundwasserständen kann z.B. die Lösung des Konvektionstermes entfallen, was die Rechenzeit spürbar verkürzt. Ferner läßt sich die Strömungsberechnung vollständig abkoppeln, etwa für den Fall, daß man eine ausreichend genaue Kenntnis von den Fließverhältnissen hat. Über die Auswirkungen des Wärmetransports auf das Strömungsfeld können dann naturgemäß keinerlei Aussagen mehr getroffen werden. Schließlich kann das Programm als eigenständiges — zugegebenermaßen einfaches — Grundwassermodell eingesetzt werden.

Die wichtigsten physikalischen Vereinfachungen des Modells seien an dieser Stelle noch einmal kurz zusammengefaßt:

- das Grundwasser strömt laminar, sodaß die Gültigkeit des Darcy - Gesetzes gewährleistet ist
- die Gesteinsmatrix befindet sich im Temperaturgleichgewicht mit dem strömenden Fluid, /131/
- Wärmetransport durch Strahlung wird vernachlässigt

- das strömende Grundwasser besitzt eine konstante Dichte und ist inkompressibel
- der konvektive Teil des Wärmetransports geht frei von thermischer Dispersion vonstatten, /41/
- Feuchtigkeitsmigration in der ungesättigten Bodenzone in Richtung einer Eisfront oder — bei höheren Temperaturen — entlang des thermischen Gradienten wird aufgeklammert
- die Richtungen der hydraulischen und thermischen Anisotropie verlaufen parallel zu den Achsen des kartesischen Koordinatensystems
- die Wärmekapazität von Wasser und Gestein ist konstant

Das Programm ist so konzipiert, daß folgende physikalische Eingangsparameter für *jeden* Knoten variabel eingegeben werden können:

- Temperatur
- Zufuhr bzw. Entzug von Wärme
- isotrope Wärmeleitfähigkeit des Gesteins
- Wärmekapazität des Gesteins
- Dichte des Gesteins
- Fließgeschwindigkeit in  $X, Y$  und  $Z$ -Richtung
- Piezometerhöhe
- Zugabe bzw. Entnahme von Wasser
- hydraulische Leitfähigkeit in  $X, Y$  und  $Z$ -Richtung
- durchflußwirksame oder drainierbare Porosität
- Gesamtporosität
- Speicherkoeffizient

Die Anisotropie der Wärmeleitfähigkeit des Gesteins kann nur über Anisotropiefaktoren, die dann jedoch für das gesamte Modellareal Gültigkeit besitzen müssen, berücksichtigt werden.

$$K_{xx} = aK_{isotrop} \quad (4.00a)$$

$$K_{yy} = bK_{isotrop} \quad (4.00b)$$

$$K_{zz} = cK_{isotrop} \quad (4.00c)$$

wobei  $a, b$  und  $c$  die Anisotropiefaktoren darstellen. Folgende Eingangsparameter werden Schicht für Schicht erfragt:

- Wassersättigungsgrad
- Schmelztemperatur von Wasser
- Gefrierkurve des Bodens

Zeitlich variable Eingangsparameter, wie z.B. schwankende Förderraten eines Brunnens oder vorgegebene Soletemperaturen im Wärmetauscherkreislauf, können über eine zusätzliche Eingabedatei in die laufende Simulation mit einbezogen werden. Ferner verfügt TRADIKON-3D über eine "Warmstart" - Routine, die es gestattet, mit den Ergebnissen einer vorherigen Simulation einen weiteren Simulationslauf zu starten. Diese Option kann z.B. für die Berechnung der Anfangsbedingungen einer instationären Simulation eingesetzt werden. Da bei aktivierter "Warmstart" - Routine parallel zu jeder Ergebnisausgabe das aktuelle Temperatur- bzw. Strömungsfeld auf eine Datei geschrieben wird, kann man auch nach Systemabstürzen die Simulation fortsetzen.

## 5 Validierung des Modells

### 5.1 Konduktiver Wärmetransport

Die einfachste Form der Validierung stellt die Berechnung des eindimensionalen, stationären Wärmeflusses dar, /167/. Eine gedachte Hochofenwand verfüge über folgenden Aufbau:

Schamotte	$dx_1 = 0.30m;$	$K_1 = 3.2 W/mK$
Isolation	$dx_2 = 0.18m;$	$K_2 = 0.1 W/mK$
Ziegel	$dx_3 = 0.27m;$	$K_3 = 0.9 W/mK$

Die Temperatur  $T_1$  an der Oberfläche der Innenwand eines Hochofens betrage konstant  $950\text{ }^\circ C$ , die der Außenwand konstant  $50\text{ }^\circ C$  ( $T_4$ ). Gesucht sind die Temperaturen  $T_2$  und  $T_3$  an der Grenze Schamotte/Isolation bzw. Isolation/Ziegel unter der Voraussetzung, daß sich ein stationärer Wärmefluß eingestellt hat.

#### Analytische Lösung:

Der Wärmefluß durch die Hochofenwand des oben beschriebenen Aufbaus beträgt nach

$$J = \frac{A(T_1 - T_4)}{dx_1/K_1 + dx_2/K_2 + dx_3/K_3} = 410.26 \text{ Watt}$$

Für  $T_2$  gilt:

$$T_2 = T_1 - \frac{Jdx_1}{K_1A} = 911.54\text{ }^\circ C$$

Für  $T_3$  gilt:

$$T_3 = T_2 - \frac{Jdx_2}{K_2A} = 173.08\text{ }^\circ C$$

#### Finite Differenzen Simulation:

Bei der Berechnung des stationären, rein konduktiven Wärmeflusses wird in Analogie zum Speicherkoeffizienten bei der Strömungsberechnung die Dichte und Wärmekapazität des Transportmediums auf Null gesetzt.

Ferner entfällt die Lösung des Konvektionsterms. Die TRADIKON - Simulation ergab mit dem Gauss-Seidel-Verfahren nach 90 Iterationen (SOR,  $\Omega = 1.88$ ) bei einem Iterationskriterium von  $10^{-2}\text{ }^\circ C$  Temperaturen von  $T_2 = 911.34\text{ }^\circ C$  und  $T_3 = 173.26\text{ }^\circ C$ . Die geringen Abweichungen von der analytischen Lösung müssen auf die relativ grobe Diskretisierung (11 Knoten) und Rundungsfehler zurückgeführt werden.

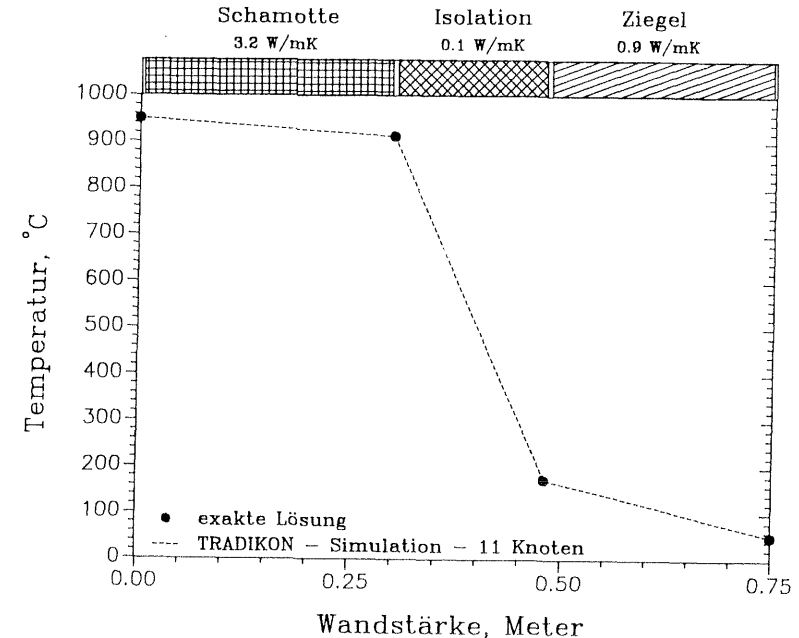


Abb. 11: Stationärer Wärmefluß durch eine Hochofenwand

### 5.2 Instationärer, eindimensionaler Wärmetransport

Der instationäre, eindimensionale Wärmetransport durch ein isotropes Medium mit dem Temperaturleitwert  $\alpha_T$  läßt sich mit der Differentialgleichung:

$$\frac{\delta T}{\delta t} = \alpha_T \frac{\delta^2 T}{\delta x^2} \quad (5.00)$$

berechnen. Handelt es sich um ein homogen temperiertes Medium, das man schlagartig an dem einen Ende abkühlt und dann auf einem konstanten



Temperaturniveau hält, so läßt sich mit Hilfe der komplementären Fehlerfunktion  $erfc(x)$  eine sehr gute Näherung erzielen. Das im folgenden vorgestellte Rechenbeispiel wurde /8/ entnommen.  $T_1$  sei die Ausgangstemperatur und  $T_0$  die plötzlich an dem einen Ende induzierte Temperatur. Die Randbedingungen sollen somit lauten:

$$t = 0; \quad x \geq 0; \quad T = T_1$$

$$t > 0; \quad x = 0; \quad T = T_0$$

Das eindimensionale Temperaturfeld unter den gegebenen Bedingungen läßt sich nach

$$\frac{(T - T_0)}{(T_0 - T_1)} = erfc\left(\frac{x}{2\sqrt{\alpha_T t}}\right) \quad (5.01)$$

wobei:

$$erfc(x) = \left(\frac{2}{\sqrt{\pi}}\right) \int_x^\infty e^{-t^2} dt \quad (5.02)$$

mit:

$$erfc(x) = 1 - erf(x) \quad (5.03)$$

berechnen. Die Fehlerfunktion kann durch ein numerisches Näherungsverfahren abgeschätzt werden, /1/

$$erf(x) = 1 - \frac{1}{(1 + a_1x + a_2x^2 + \dots + a_6x^6)^{16}} + E(x) \quad (5.04)$$

mit:

$$\begin{aligned} a_1 &= 0.0705230784 & a_4 &= 0.0001520143 \\ a_2 &= 0.0422820123 & a_5 &= 0.0002765672 \\ a_3 &= 0.0092705272 & a_6 &= 0.0000430638 \end{aligned}$$

$$E(x) < 3 \cdot 10^{-7}$$

Ein Gesteinskörper verfüge über eine Dichte  $\rho_g = 2600 \text{ kg/m}^3$ , eine spezifische Wärmekapazität  $c_g = 850 \text{ J/kgK}$  und eine Wärmeleitfähigkeit  $K_{eff} = 3.0 \text{ W/mK}$ . Daraus ergibt sich nach Gl. (2.10) ein Temperaturleitwert von  $\alpha_T = 0.78 \text{ m}^2/\text{s}$ . Gesucht werden die Temperaturprofile nach 0.25, 0.5, 1, 2, 4 und 8 Tagen bis in eine Tiefe von 1.8 m, die sich ausbilden,

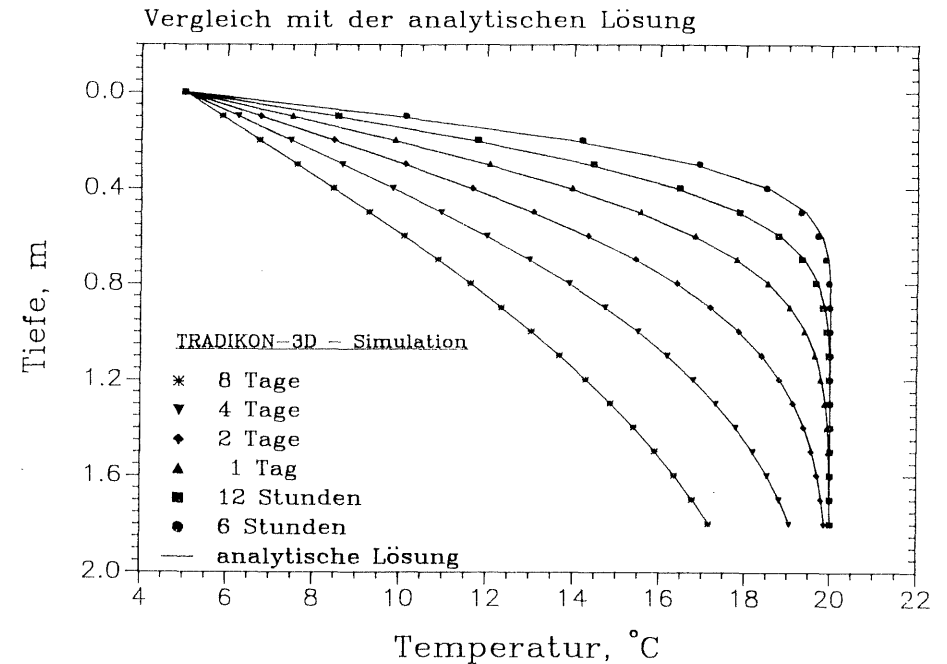


Abb. 12: Konduktiver Wärmetransport in dem beschriebenen Gesteinskörper. Die durchgezogenen Linien markieren die oben beschriebene analytische Lösung, die Symbole das Simulationsergebnis mit TRADIKON-3D.

wenn man den ursprünglich  $20 \text{ }^\circ\text{C}$  warmen Körper schlagartig an dem einen Ende auf  $5 \text{ }^\circ\text{C}$  abkühlt.

Die Ergebnisse des analytischen Ansatzes decken sich nahezu exakt mit denen der numerischen Simulation.

### 5.3 Eindimensionales Konvektionsproblem

Die numerische Behandlung des Konvektionstermes konnte durch folgendes Beispiel sehr einfach auf ihre Genauigkeit überprüft werden. Nimmt man von zwei benachbarten Zellen an, daß sie ausschließlich über ihre gemeinsame Grenzfläche Kontakt mit der jeweils anderen Zelle haben und der Wärmefluß durch sie hindurch ausschließlich auf konvektivem Wege erfolgt, das strömende Medium also keine Wärmeleitfähigkeit besitzt, so

läßt sich der instationäre Wärmetransport nach /24/ durch die Beziehung (5.05) berechnen.

$$T_2 = (T_I - T_1)e^{\frac{qt}{\rho v}} + T_1 \quad (5.05)$$

Hierbei bedeutet  $T_I$  die Ausgangstemperatur von Zelle 2. Sind die beiden Zellen 1 und 2 mit 100 bzw. 200 °C temperiert und erfolgt von Zelle 1 nach Zelle 2 ein konstanter Massenfluß von  $10^{-3} \text{ kg/s}$ , so ergibt sich der in Abb. 13 dargestellte Temperaturverlauf.

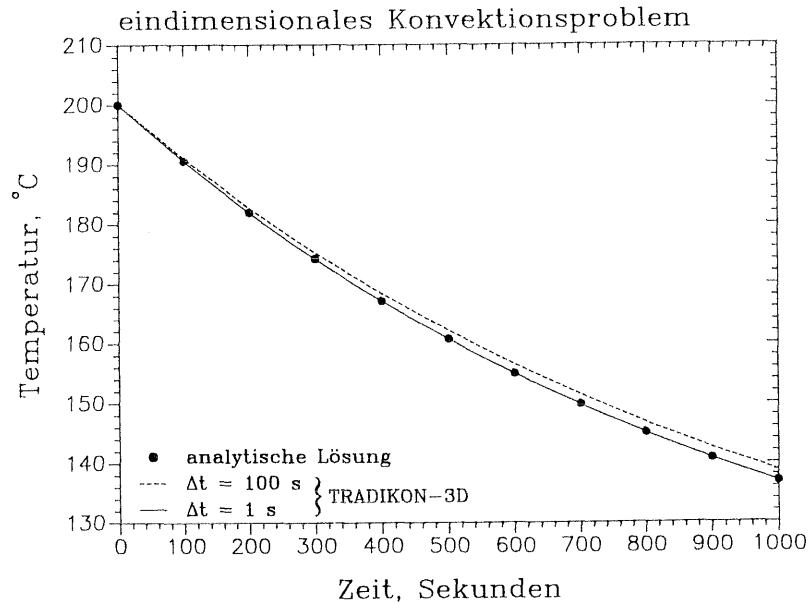


Abb. 13: Vergleich der analytischen mit der numerischen Lösung des Konvektionsproblems

Mit zunehmender Zeitschrittlänge (> 10 Sekunden) kommt es zu einer deutlichen Abweichung von der analytischen Lösung. Bei einer Zeitschrittlänge von einer Sekunde lagen die Temperaturänderungen pro Zeitschritt bei etwa 0.1 °C und der maximale Berechnungsfehler bei 0.002 °C

#### 5.4 Brunnenabsenkung (Theis - Problem)

Die instationäre Absenkung einer Piezometerhöhe durch den Betrieb eines Brunnens in einem unendlich begrenzten, gespannten Aquifer mit ursprünglich horizontaler Erstreckung der piezometrischen Oberfläche läßt sich nach THEIS(1935) durch die folgende Beziehung ermitteln:

$$h_o - h = \frac{Q}{4\pi T} W(u) \quad (5.06)$$

wobei:

$$W(u) = \int_u^\infty \frac{e^{-u}}{u} du \quad (5.07)$$

und

$$u = \frac{r^2 S}{4Tt} \quad (5.08)$$

$W(u)$  wird hierbei als *Brunnenfunktion* (well function) bezeichnet und ist in den einschlägigen Standardwerken der Hydrogeologie, z. B. /131/, in Form von Tabellenwerten erhältlich. Rechnerisch ermitteln läßt sich diese Funktion durch eine polynomische Approximation, wie sie z.B. /92/ vorschlug:

Für  $0 \leq u \leq 1$  gilt:

$$W(u) = -\ln u + C_0 + C_1 u + C_2 u^2 + C_3 u^3 + C_4 u^4 + C_5 u^5 \quad (5.09)$$

Für  $0 \leq u < \infty$  gilt:

$$W(u) = \frac{1}{ue^u} \frac{C_6 + C_7 u + u^2}{C_8 + C_9 u + u^2} \quad (5.10)$$

mit:

$$\begin{aligned} C_0 &= -0.57721566 & C_5 &= 0.00107857 \\ C_1 &= 0.99999193 & C_6 &= 0.250621 \\ C_2 &= -0.24991055 & C_7 &= 2.334733 \\ C_3 &= 0.05519968 & C_8 &= 1.681534 \\ C_4 &= -0.00976004 & C_9 &= 3.330657 \end{aligned}$$

WANG & ANDERSON(1982) zogen folgendes Testbeispiel für den Vergleich der numerischen Lösung mit einer analytischen heran: Ein

randlich unbegrenzter, gespannter Aquifer mit einer Transmissivität von  $T = 300 \text{ m}^2/\text{d}$  ( $3.47 \cdot 10^{-3} \text{ m}^2/\text{s}$ ) und einem Speicherkoeffizienten von  $S' = 0.002$  soll über einen Zeitraum von knapp 2 Wochen (13.12 Tage) mit einer Förderrate von  $Q = 2000 \text{ m}^3/\text{d}$  ( $0.0232 \text{ m}^3/\text{s}$ ) bepumpt werden. Gesucht wird die Zeit-Absenkungskurve eines 100 Meter vom Brunnen entfernten Pegels. Die analytische Lösung des Problems wurde gemäß dem oben beschriebenen Verfahren nach /92/ berechnet und den numerischen Lösungen von TRADIKON-3D bzw. WANG & ANDERSON vergleichend gegenübergestellt.

Bei der TRADIKON-Simulation wurde der Aquifer durch ein äquidistantes Raster von  $41 \cdot 41$  Zellen mit einer Kantenlänge von 100 Meter diskretisiert und in dessen Zentrum die Brunnenzelle plaziert (Index 21,21). Als Lösungsschema bot sich ein vollimpliziter Ansatz und ein LSOR - Verfahren mit einem Relaxationsfaktor von 1.2 an. WANG & ANDERSON setzten ein CRANK-NICOLSON Schema in Verbindung mit dem ebenfalls iterativen GAUSS-SEIDEL-Verfahren ein. Bei beiden numerischen Ansätzen betrug die Startzeitschrittlänge 864 Sekunden (0.01 Tage), die nach jedem Zeitschritt um den Faktor 1.5 verlängert wurde.

Tab. 2: Absenkung ( $h_0 - h$ ) in Meter für  $r = 100\text{m}$

Zeit [d]	Theis [m]	TRADIKON [m]	WANG [m]
0.010	0.042	0.064	0.05
0.025	0.211	0.195	-.--
0.047	0.420	0.380	0.41
0.081	0.638	0.595	-.--
0.132	0.856	0.821	0.88
0.208	1.074	1.048	-.--
0.322	1.291	1.273	-.--
0.493	1.508	1.494	1.55
0.749	1.724	1.713	-.--
1.133	1.940	1.930	1.98
1.710	2.156	2.144	-.--
2.575	2.371	2.356	-.--
3.872	2.586	2.566	-.--
5.819	2.802	2.779	2.81
8.738	3.017	3.013	-.--
13.117	3.232	3.294	3.26

Wie man den Tabellenwerten entnehmen kann, stimmen die Ergebnisse der numerischen Simulation recht gut mit denen des analytischen Ansatzes

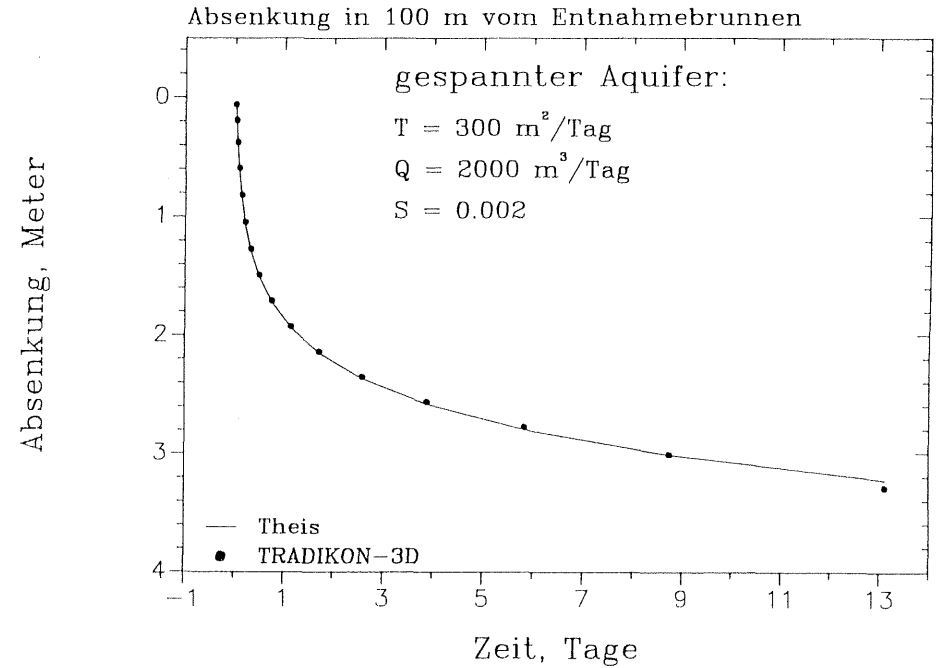


Abb. 14: Zeit-Absenkungskurve des numerischen und analytischen Ansatzes

überein. Lediglich gegen Ende der Simulation kommt es zu einer größeren Abweichung, die sich jedoch damit erklären läßt, daß der sich ausbildende Absenkungstrichter nach etwa 10 Tagen den Modellrand überschreitet und somit die Annahme eines unendlich ausgedehnten Aquifers modelltechnisch nicht mehr erfüllt ist.

### 5.5 Testsimulation eines Stufenpumpversuches

Für Problemstellungen mit zeitlich variablen Randbedingungen lassen sich in der Regel keine oder nur sehr schwer analytische Lösungen finden. Daher sollte eine Vergleichssimulation mit dem Aquifersimulationsmodell ASM von KINZELBACH & RAUSCH (1988) dazu dienen, den Strömungsteil von TRADIKON-3D zu testen. ASM ist ein zweidimensionales Strömungsmodell mit variabler Diskretisierungsmöglichkeit sowohl in Raum und Zeit. Das Programm wurde speziell für den Einsatz auf Personal Computern konzipiert und gestattet dem Benutzer ebenfalls die Wahl zwischen zwei

unterschiedlichen, iterativen Gleichungslösern.

Als Testbeispiel wurde ein ungespannter Aquifer mit einer horizontalen Ausgangspiezometerhöhe von 50 m und folgenden Formationsparametern berechnet:  $k_{xx} = 10^{-4} \text{ m/s}$ , Anisotropiefaktor  $k_{yy}/k_{xx} = 1.3$ , der östliche und westliche Modellrand sollte ein Festpotential repräsentieren, während der nördliche und südliche Modellrand als undurchlässig definiert wurden. Die Aquiferbasis wurde über das gesamte Modellareal mit 0 m definiert. Gesucht wurden über einen Zeitraum von 9 Tagen die Ganglinien zweier Brunnen (I und II) sowie die eines Pegels. Der Brunnen I sollte seine Förderung zu Beginn des 1. Tages mit  $0.01 \text{ m}^3/\text{s}$  aufnehmen und darauffolgend um täglich  $0.01 \text{ m}^3/\text{s}$  gesteigert werden. Der Brunnen II sollte anfänglich  $0.03 \text{ m}^3/\text{s}$  leisten und mit Ablauf des 5. Tages, nachdem er zuvor die gleichen Leistungssteigerungen erfahren hatte, abgeschaltet werden.

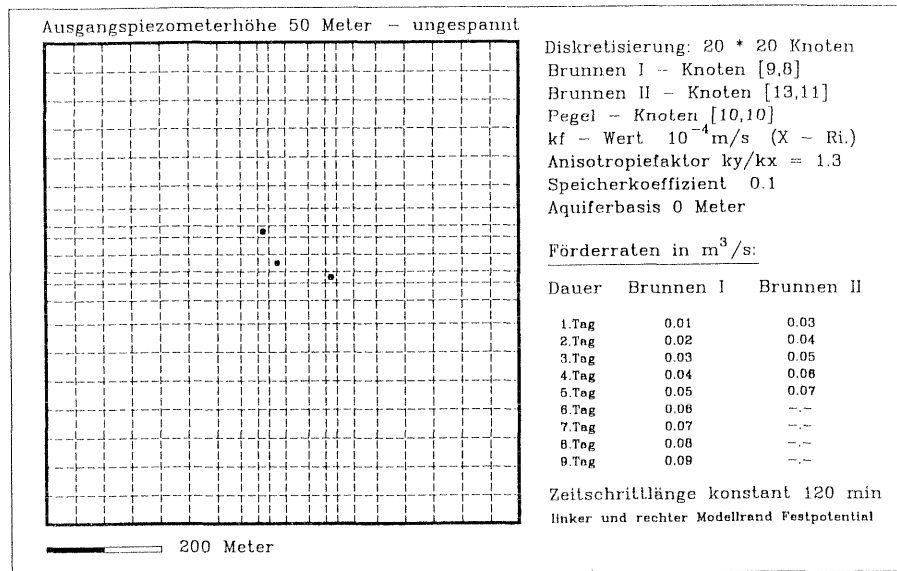


Abb. 15: Eingangsdaten und Diskretisierung der Simulation des Stufenpumpversuches

Die Zeitschrittlänge betrug vereinbarungsgemäß konstant 120 min. Die Lage der Brunnen und des Pegels wird aus Abb. 15 ersichtlich. Das Modellareal wurde mit einem nichtäquidistanten Raster von  $20 * 20$  zellenzentrierten Knoten überzogen, wobei die kleinsten (Brunnen-) Zellen Kantentlängen von 20 Meter und die größten Zellen Kantentlängen von 50 Meter aufwiesen. Als Iterationskriterium wurde eine Differenz von  $\pm 0.001$  Metern vereinbart. Aus den Abbildungen 16 und 17 lassen sich die nahezu deckungsgleichen Verläufe der berechneten Ganglinien ablesen.

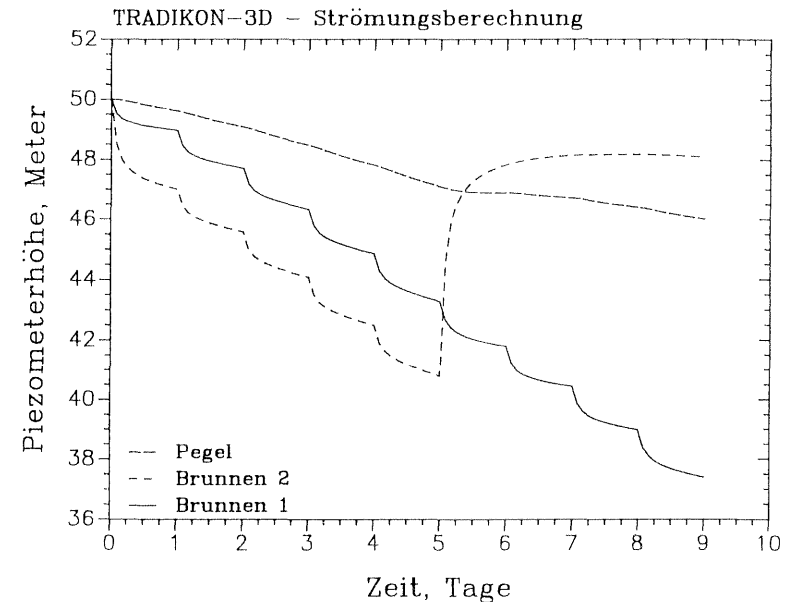


Abb. 16: TRADIKON-3D Simulation des Stufenpumpversuches

Tab. 3: Piezometerhöhen in Meter über NN zu ausgewählten Zeitpunkten nach 5 Tagen:

	ASM	TRADIKON-3D
Brunnen I	43.291	43.257
Brunnen II	40.845	40.781
Pegel	47.087	47.075

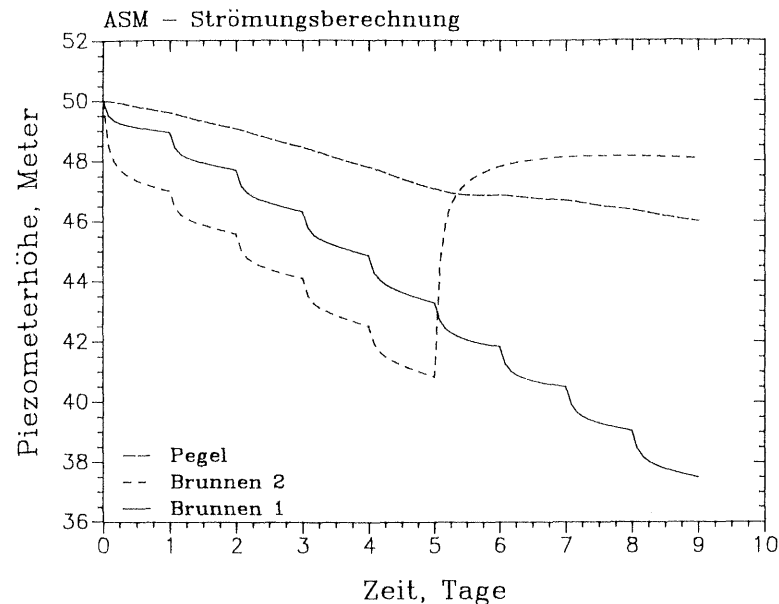


Abb. 17: ASM Simulation des Stufenpumpversuches

nach 9 Tagen:

	ASM	TRADIKON-3D
Brunnen I	37.495	37.376
Brunnen II	48.080	48.075
Pegel	45.993	45.984

Die geringen Abweichungen können u.U. durch die unterschiedlichen Verfahren der Berechnung der Transmissivitäten zwischen den Zellen verursacht sein. Während ASM das einfache geometrische Mittel einsetzt, wird in TRADIKON-3D das gewichtete geometrische Mittel benutzt.

### 5.6 Leakage aus einem Oberflächengewässer

Ein stationärer Lauf sollte Aufschluß über die Richtigkeit der numerischen Behandlung der Leakage aus einem Oberflächengewässer in den darunter liegenden Aquifer liefern. Dazu wurde ein Testbeispiel aus KINZELBACH (1986) S. 80 übernommen, das wie folgt lautet:

Ein isotroper, ungespannter Aquifer mit einer Durchlässigkeit von  $3 \cdot 10^{-4} \text{ m/s}$  sei an seinem Ost- und Westrand durch je ein Festpotential

mit einer Piezometerhöhe von 75 bzw. 80 Meter ü. NN begrenzt. Die Auiferbasis soll bei 10 Meter ü. NN liegen. Der Nord- und Südrand sei als undurchlässiger Rand definiert, dessen Verlauf in Abb. 18 durch den schräg schraffierten Bereich markiert wird.

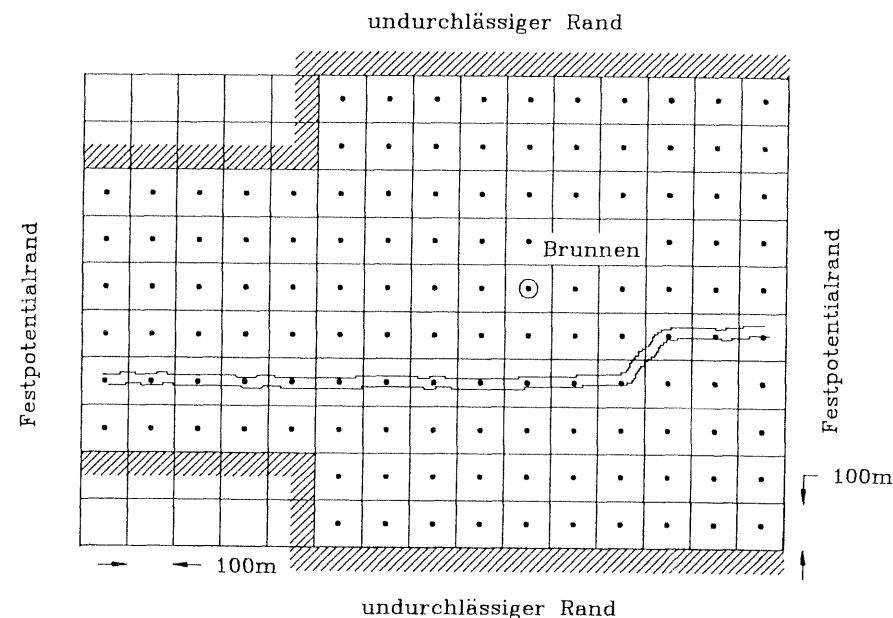


Abb. 18: Diskretisierung des ungespannten Aquifers

Das durch ein äquidistantes Raster von  $15 \cdot 10$  zellenzentrierten Knoten diskretisierte Modellareal wird von Westen nach Osten durch einen Fluß gequert, dessen Sohle vom Westrand mit 79 Meter ü. NN nach Osten auf 72 Meter ü. NN mit einem konstanten Gefälle von etwa 3.5 Promille abtaucht. Die Flußsohle weist in ihrer gesamten Erstreckung einen Leakagefaktor von  $5 \cdot 10^{-6} \text{ s}^{-1}$  auf. Der Wasserspiegel des Flusses soll 3 Meter über seiner Sohle stehen. Ein nördlich des Flusses gelegenes Wasserwerk fördert über einen Brunnen konstant  $0.1 \text{ m}^3/\text{s}$ . Gesucht wird die stationäre Piezometerhöhenverteilung, die sich unter der Annahme einer konstanten Grundwasserneubildungsrate von  $3 \cdot 10^{-9} \text{ m}^3/\text{s}/\text{m}^2$  einstellt.

Testbeispiel aus KINZELBACH (1986) S. 80/3

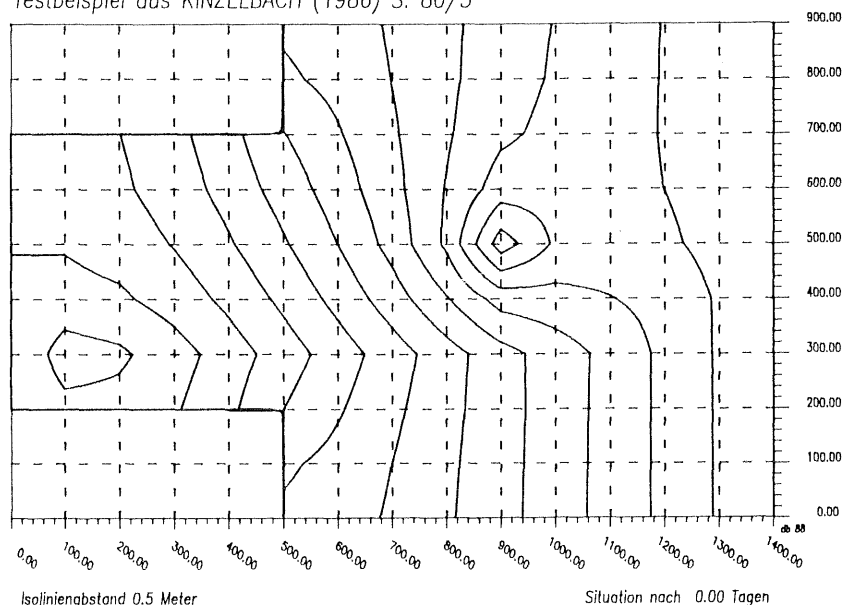


Abb. 19: TRADIKON-3D Simulation der Leakage aus einem Oberflächen-  
gewässer

Aus dem fischgrätenartigen Verlauf der Äquipotentiallinien erkennt man sehr gut, daß der Fluß auf seiner gesamten Länge in den Aquifer infiltriert und ein Großteil des vom Wasserwerk geförderten Wassers somit indirekt dem Fluß entstammt. Der Ergebnisvergleich mit dem Aquifersimulationsmodell ASM von KINZELBACH & RAUSCH (1988) für zwei exemplarische Knoten ergab folgendes Bild:

Tab. 4: Berechnete Piezometerhöhen zweier Knoten in Meter ü. NN

	TRADIKON-3D	ASM
Knoten [10, 5]	74.73	74.74
Knoten [ 2, 7]	80.74	80.74

Diese Knoten repräsentierten zugleich die höchste bzw. niedrigste Piezometerhöhe innerhalb des Modellareals. Bei einem vorgegebenen Abbruchkriterium von  $10^{-3}$  Metern benötigte TRADIKON-3D 8 Iterationen (LSOR,

$\Omega = 1.64$ ) und ASM 14, (IADI). Während die TRADIKON Simulation als dreidimensionaler Lauf gerechnet wurde, verfährt das zweidimensionale Modell ASM so, daß zunächst aus der Potentialdifferenz des Oberflächen-  
gewässers zu dem unterlagernden Aquifer über die Leakagefaktoren eine Sickerwassermenge berechnet wird, die dann den Quellenterm beaufschlagt. Ungeachtet dessen stimmen die Berechnungsergebnisse nahezu exakt überein.

## 6 Anwendung

### 6.1 Die Forschungsanlage Schwalbach

#### 6.1.1 Beschreibung der Anlage

Die etwa 7 km südwestlich der mittelhessischen Stadt Wetzlar gelegene Forschungseinrichtung gestattet den Betrieb von Erdsondenwärmepumpenanlagen unter realitätsnahen Bedingungen. Sie besteht aus zwei Bohrfeldern mit insgesamt 14 Bohrungen und einem Laborgebäude, das die Wärmepumpe sowie die zentrale Datenaufzeichnung beherbergt. Das erste Bohrfeld besteht aus 10 jeweils 50 m tiefen Bohrungen, die radialstrahlig um die zentrale Entzugsbohrung Z angeordnet sind. Während die Bohrungen H1 und H2 hydraulischen Tests und der Entnahme von Grundwasserproben dienen, kann in den übrigen Bohrungen 1/1 bis 5/1 über Meßsonden das aus den Energieentzügen resultierende Temperaturfeld aufgezeichnet werden /175/. In der Entzugsbohrung Z wurden im Laufe eines Forschungsprojektes /176/ unterschiedliche Wärmetauscher, in denen als Wärmeträgerflüssigkeit eine froststabile Sole zirkuliert, getestet.

In die Bohrungen des zweiten Bohrfeldes wurden zu Testzwecken Wärmetauscher eingebracht, in denen das Kältemittel direkt verdampft wird.

Die während der Bohrarbeiten durchhörte Wechselfolge aus Tonschiefer und Grauwacken oberdevonischen bis unterkarbonischen Alters, wird von einer einer 2 m mächtigen Boden- und Fließerdenauflage überdeckt. Die stark tektonisch beanspruchten, paläozoischen Gesteine sind durch junge Hebungsvorgänge des Gebirges geklüftet worden. An geologischen Aufschlüssen der unmittelbaren Umgebung läßt sich eine NW-SE streichende Q-Klüftung und eine variszisch streichende L-Klüftung nachweisen, /175/. Diese Trennflächen stellen zugleich die einzigen wasserwegsam Hohlräume des Untergrundes dar. Im rechtsrheinischen Schiefergebirge betragen die Auflockerungstiefen nur in Ausnahmefällen mehr als 50 m. Der in einer Tiefe von 15 m unter Geländeoberkante angetroffene Grundwasserleiter ist somit als Kluftgrundwasserleiter einzustufen. Aufgrund der exponierten Lage des Standortes auf einem Bergrücken und dem somit geringen hydraulischen Gradienten sind die Grundwasserfließgeschwindigkeiten relativ gering, was durch einen Tracerversuch auch bestätigt werden konnte /175/.

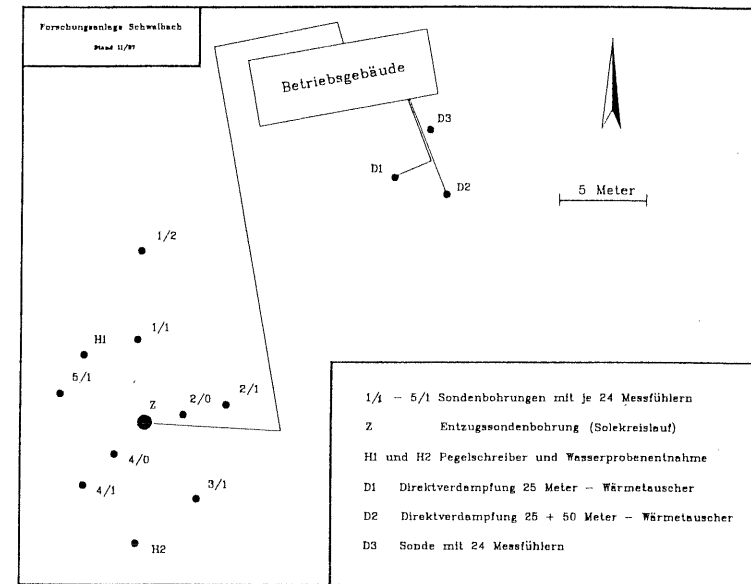


Abb. 20: Lageplan der Erdsondenforschungsanlage Schwalbach im November 1987

Der durch das Wiederanstiegsverfahren nachgewiesenermaßen geringe Speicherkoeffizient des ungespannten Aquifers gilt als Ursache für die relativ hohen jahreszeitlichen Schwankungen des Grundwasserspiegels /175/. Die Transmissivität des Aquifers läßt sich überschlägig mit  $6.4 \cdot 10^{-4} m^2/s$  beziffern, was unter Berücksichtigung einer Aquifermächtigkeit von 36 m einem  $k_f$ -Wert von  $1.8 \cdot 10^{-5} m/s$  entspricht /175/. Die lokale Grundwasserneubildungsrate mit 2 bis  $2.5 l/s/km^2$  darf als typisch für diesen Teil des rheinischen Schiefergebirges gelten und ist somit relativ gering.

Die anstehenden Gesteine verfügen über eine thermische Leitfähigkeit von  $1.5 W/mK$  (Tonschiefer) bis  $3.4 W/mK$  (quarzitische Grauwacke), während die Wärmekapazitäten mit  $800 - 850 J/kgK$  naturgemäß ein wesentlich schmaleres Spektrum aufweisen (vergl. Anhang 1). Die Gesteine verfügen mikroskopisch betrachtet über eine unterschiedlich ausgeprägte Anisotropie ihrer Wärmeleitfähigkeit. Da diese sich jedoch innerhalb der Genauigkeit des eingesetzten Meßgerätes bewegt und die geologischen Lagerungsverhältnisse am Projektstandort als nicht restlos geklärt gelten, wurden den weiter unten beschriebenen Kalibrierungsläufen isotrope Leitfähigkeiten zugrundegelegt.

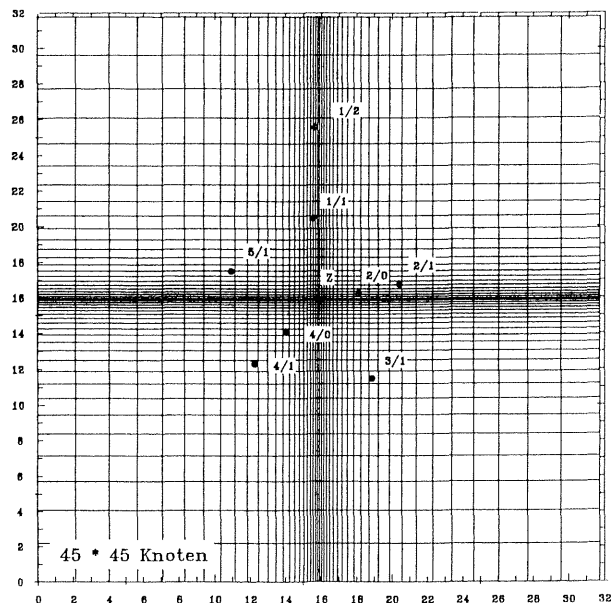


Abb. 21: Lage der Bohrungen in dem finiten Differenzen Raster

Die Anlagenkonzeption gestattet diverse Betriebsmodi der Wärmepumpe /175/. Mehrere Testentzugsläufe mit quasikonstanter Soletemperatur konnten daher dazu herangezogen werden, das Modell auf den Standort zu kalibrieren. Als etwas nachteilig stellte sich dabei jedoch heraus, daß auch relativ weit zurückliegende Wärmeentzüge das Temperaturfeld nachhaltig gestört hatten und somit zu keinem Zeitpunkt, außer zu Beginn des Forschungsvorhabens, stationäre Bedingungen vorlagen. Somit mußten neben den modelltechnisch bedingten Vereinfachungen auch diverse Vereinfachungen bezüglich des Anfangszustandes getroffen werden.

### 6.1.2 Diskretisierung

Da die Wärmetauscherlänge von 50 m etwa eine Größenordnung über dem zu erwartenden Einflußradius einer 4-wöchigen Wärmeentzugsperiode liegt, diente zunächst ein zweidimensionaler Lauf für Parameterstudien an den unterschiedlichen Einflußgrößen. Auf halber Länge des Wärmetauschers ist während eines Energieentzuges geometriebedingt der vertikale Wärmefluß gegenüber dem horizontalen vernachlässigbar. Daher wurde ein Teufenschnitt von 28 m unter GOK durch ein zweidimensionales Raster von 45 \* 45 zellenzentrierten Knoten diskretisiert.

Daß bei der getroffenen Diskretisierung einige Bohrungen nicht im Zentrum ihrer zugehörigen Zellen liegen, wurde bewußt in Kauf genommen, da sich der Lageplan auf die Vermessung an der Geländeoberfläche bezieht und alle Bohrungen, durch Inklinometermessungen nachgewiesen, mehr oder minder von der Lotrechten abweichen, /175/. Derartige Messungen weisen naturgemäß einen gewissen Fehler auf, sodaß eine exakte Diskretisierung innerhalb der vorgegebenen Zellengrößen als nicht realisierbar gelten darf.

### 6.1.3 Wärmeentzug mit quasikonstanter Soletemperatur

Der in den Monaten Juli und August 1988 durchgeführte Wärmeentzugstest mit quasikonstanter Soletemperatur eignete sich für die Kalibrierung des Modells am besten, da nach 31-tägiger Laufzeit der Anlage über einen Zeitraum von mehr als 40 Tagen die Regeneration aufgezeichnet werden konnte.

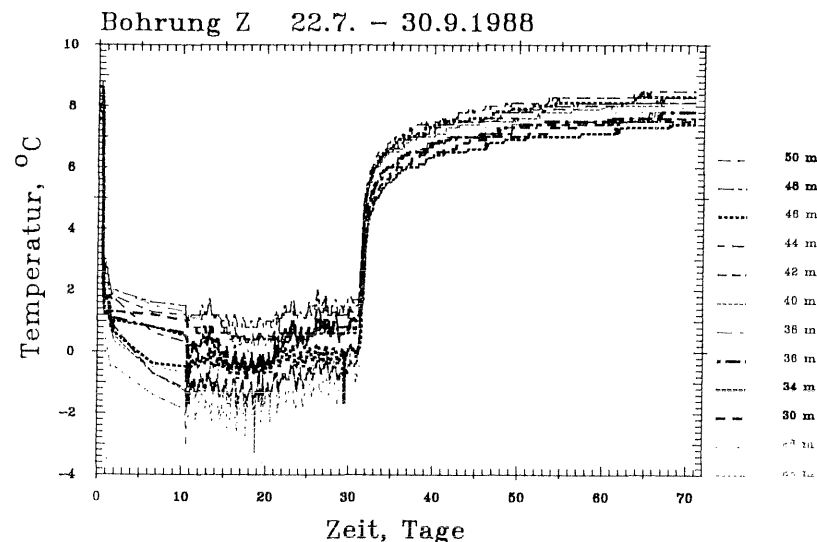


Abb. 22: Temperaturentwicklung in der Entzugsbohrung Z

Da die Meßfühler der Temperatursonde aus technischen Gründen nicht direkt auf den Wärmetauscher aufgeklebt werden konnten, hängen die aufgezeichneten Temperaturen stark von der Entfernung zum Wärmetauscher



ab. Hierin ist die Ursache für die relativ große Temperaturspreizung von etwa 3 K entlang des Bohrloches zu sehen. Vermutlich wiesen einige Fühler auch eine leichte Drift von der Kalibriertemperatur auf. Wie auch immer, ein zu erwartender Effekt kann deutlich registriert werden: Im unteren Bereich des Bohrloches erfolgt die Regeneration des Temperaturfeldes nach Abschalten der Anlage wesentlich spontaner als im darüberliegenden Bereich. Die Ursache hierfür ist im halbkuugelartig auf das Wärmetauscherende gerichteten Wärmefuß zu sehen.

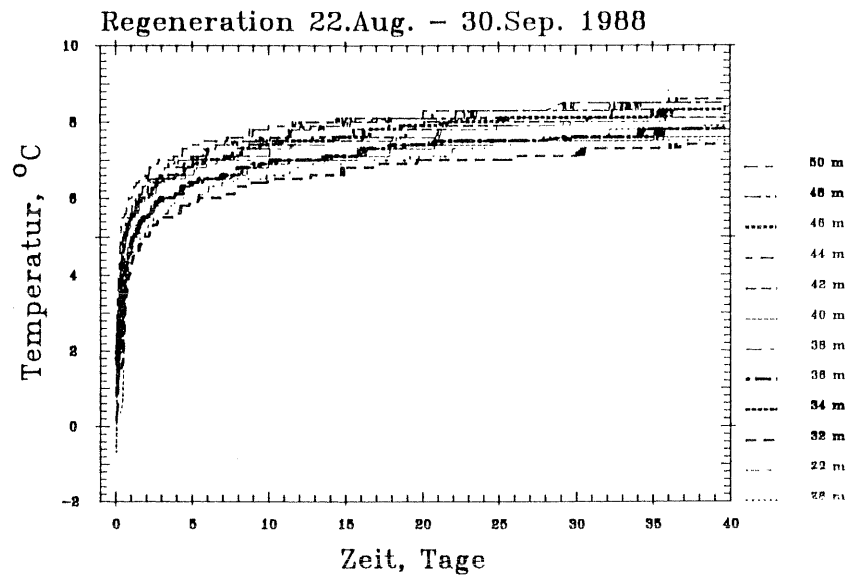


Abb. 23: Gemessene Regeneration der Erdreichtemperaturen nach 31-tägigem Wärmeentzug.

Als Reaktion auf den 31-tägigen Wärmeentzug konnte nur in den Bohrungen 2/0 und 4/0 eine signifikante Temperaturerniedrigung registriert werden. Bei den übrigen Bohrungen reichte die Auflösung der installierten Temperaturfühler von 0.2 K nicht dazu aus, eine eindeutige Reaktion zu messen.

In die TRADIKON-Simulation mußten während der Entzugsperiode die in stündlichen Intervallen gemessenen Daten mit einbezogen werden, da die Soletemperaturen eben doch nur "quasikonstant" gehalten werden konnten. Dazu wurde der zentral gelegene Knoten mit den Indizes (23,23,1) als

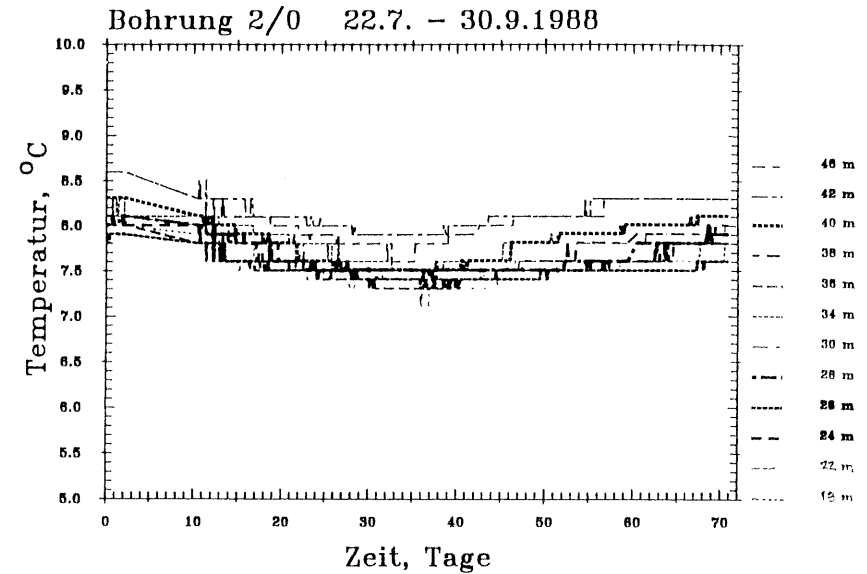


Abb. 24: Temperaturerniedrigung in Bohrung 2/0

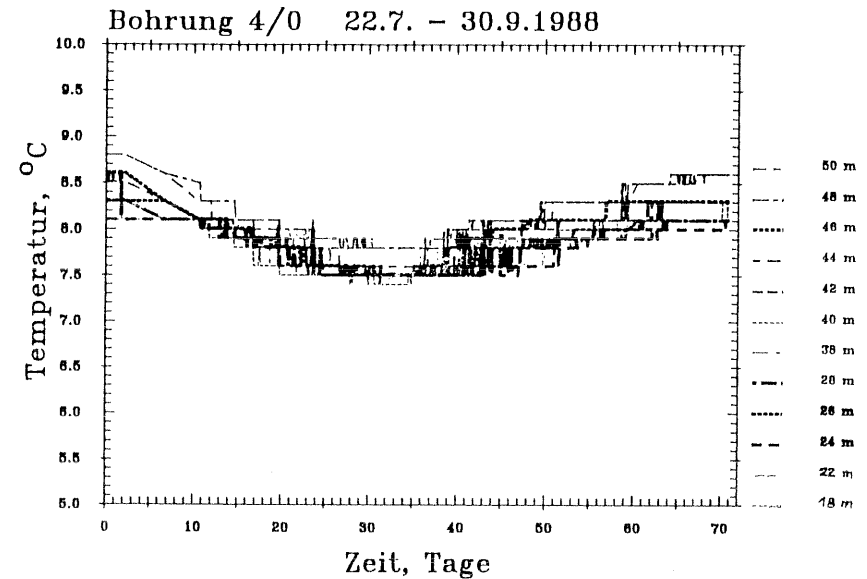


Abb. 25: Temperaturerniedrigung in Bohrung 4/0

Festtemperaturknoten definiert. Nach Abschalten der Wärmepumpe wurde das Datenfile von dem Prozessor entkoppelt und die Temperaturregeneration berechnet. Über den gesamten Simulationszeitraum von 104 Tagen betrug die Zeitschrittlänge konstant 1 Stunde (2500 Zeitschritte). Bereits einer der ersten rein konduktiven Simulationsläufe ergab eine nahezu perfekte Übereinstimmung mit den gemessenen Temperaturwerten.

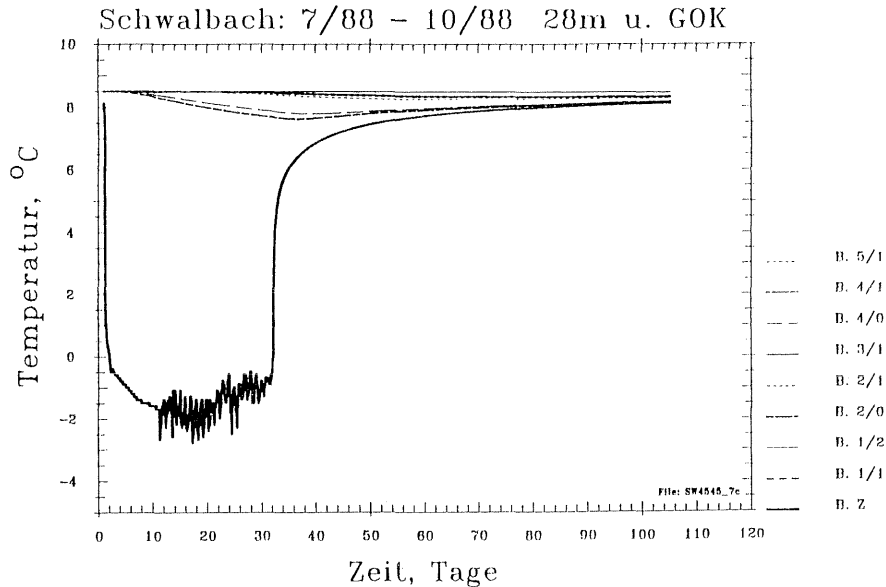


Abb. 26: Rein konduktiv berechnete Regeneration nach 31- tägigem Wärmeentzug (Datensatz 7, Tab. 5)

Bemerkenswert gut war auch die Übereinstimmung in den ersten 24 Stunden nach Abschalten der Anlage. Da sich während des Betriebes der Wärmepumpe die Soletemperatur stets unterhalb des Gefrierpunktes von Wasser lag, mußte sich ein Eispanzer um den Wärmetauscher bilden, der anschließend zu einer verzögerten Regeneration führte. Der in Kap. 2.5 beschriebene Gefrieralgorithmus ist also in der Lage, die gemessenen Vorgänge hinreichend genau zu reproduzieren.

Mit einer Reihe von Simulationsläufen konnte die Bedeutung der in die Berechnung einfließenden physikalischen Parameter abgeschätzt werden. Alle Berechnungen wurden mit dem Großrechner CDC 860 des Hochschulrechenzentrums (HRZ) Gießen durchgeführt, wobei die

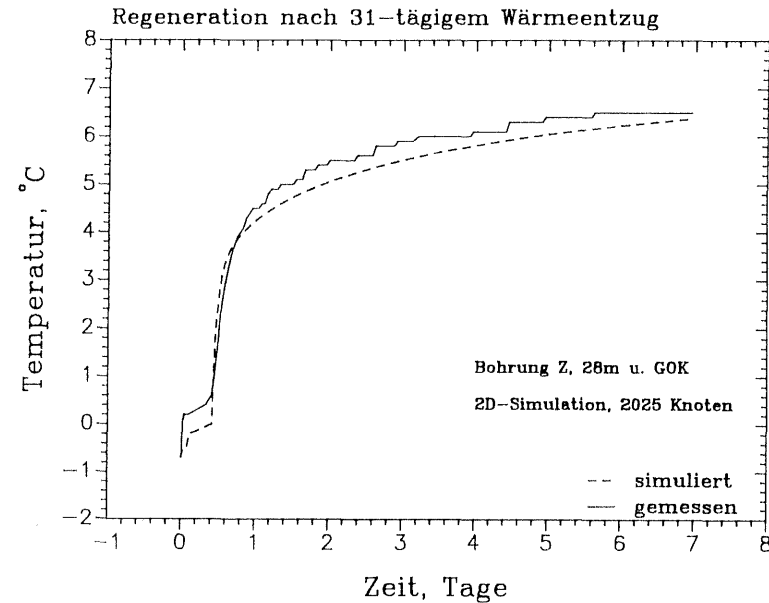


Abb. 27: Durch die Schmelzenthalpie des Wassers hervorgerufene Verzögerung der Temperaturregeneration in der Entzugsbohrung.

pro Simulationslauf benötigte Rechenzeit zwischen 3300 und 6800 CPU-Sekunden schwankte. Die Diagramme der Kalibrierungsläufe können dem Anhang 2 entnommen werden.

Tab. 5: Eingangsparmeter der 9 Kalibrierungsläufe

Parameter\Lauf	1	2	3	4	5	6	7	8	9
Ausgangstemperatur	8.8	8.5	8.5	8.5	8.5	8.5	8.5	8.5	8.5
Wärmeleitfähigkeit des Gesteins	3.0	3.0	3.0	1.5	3.0	3.0	3.0	3.0	3.0
Wärmekapazität des Gesteins	850	850	700	850	850	850	850	850	850
Porosität	3.0	25.0	3.0	3.0	3.0	3.0	3.0	3.0	3.0
Diffusion	+	+	+	+	+	+	+	+	+
Konvektion	-	-	-	-	+	+	+	+	-
Fließgeschwindigkeit	0.0	0.0	0.0	0.0	$5 \cdot 10^{-6}$	$5 \cdot 10^{-7}$	0.0	0.0	0.0
Gefrieralgorithmus	-	-	-	-	-	+	+	+	-

### 6.1.4 Wärmetransport im Boden

Zur Abschätzung der Auswirkungen der Klimafaktoren auf den Wärmehaushalt des Bodens und der ihn unterlagernden Gesteine wurde am Standort der Forschungsanlage ein aufwendiges Meßprogramm gefahren. Neben den stündlichen Niederschlägen wurden die Lufttemperaturen in verschiedenen Höhen über Geländeoberkante (GOK) und die Windgeschwindigkeit in 3 m Höhe registriert, während das zur Messung der Globalstrahlung installierte Sternpyranometer leider keine interpretationswürdigen Daten lieferte. Das resultierende Temperaturfeld konnte in einer 2.4 m tiefen, etwa 1 m von 1/2 entfernten Bohrung beobachtet werden, die in vertikalen Abständen zu je 10 cm mit insgesamt 24 Temperaturmeßsonden bestückt war. Da ja der Schwerpunkt des Forschungsprojektes eindeutig anders akzentuiert war, konnten die folgenden, wichtigen Einflußgrößen nicht untersucht werden:

- Porositäts - Tiefen - Profil
- hydraulische Leitfähigkeit in verschiedenen Tiefen
- Ganglinie des Wassergehaltes in verschiedenen Tiefen
- Feldkapazität in verschiedenen Tiefen
- mineralogische Zusammensetzung des Bodensubstrates
- Höhe und Dauer der Schneebedeckung im Winter
- biogene und chemische Wärmeproduktion im Boden
- Einfluß der Vegetation
- Einfluß der feuchtigkeitsabhängigen Tönung des unbewachsenen Bodens und der damit verbundenen Adsorptionsfähigkeit von Infrarotstrahlung
- Wärmeübergangskoeffizient an der Boden - Luft - Schnittstelle
- und vieles weitere

Da es sich beim diffundiv - konvektiven Wärmetransport in der ungesättigten Bodenzone um einen im höchsten Maße gekoppelten Prozess handelt — der Wasserhaushalt wird von dem herrschenden Temperaturfeld kontrolliert, die diffundiv - konvektive Feuchtigkeitsmigration beeinflusst

den Wärmetransport usw. /66/, /128/, /137/, /157/, /198/ — ist die Kalibrierung eines für den Wärmetransport in der Pedosphäre geeigneten Modells, ohne die oben erwähnten Punkte a priori zum Scheitern verurteilt. Vor diesem Hintergrund ist die nachfolgend vorgestellte, rein konduktive Simulation zu betrachten.

Zunächst wurde eine niederschlagsarme Periode ausgewählt um den Einfluß der Konvektion vernachlässigen zu können. Da sich gleichzeitig große Temperaturvariationen im obersten Bodenkompartment am ehesten für die Kalibrierung des Modells eignen, erschienen die Temperaturkurven des Monats August 1988, in dem nur etwa 12.5 mm Niederschläge fielen, ideal.

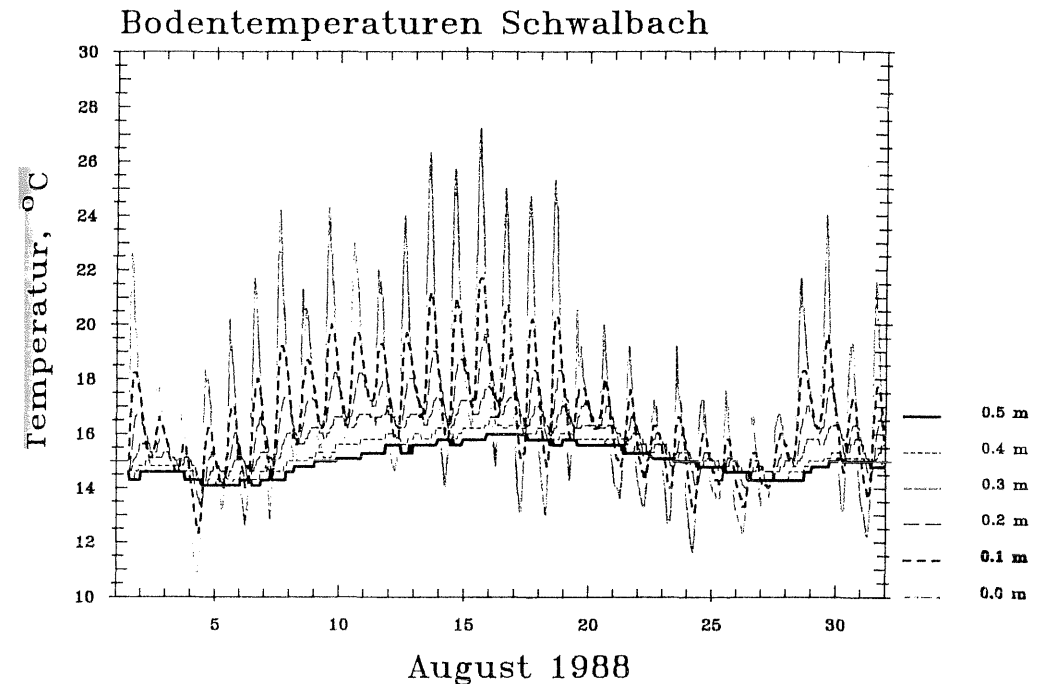


Abb. 28: Gemessene Temperaturen in den obersten 0.5 Meter des Schwalbacher Bodenprofils

Das zu simulierende Boden- und Gesteinsprofil wurde eindimensional durch eine nichtäquidistante Anordnung von 39 zellenzentrierten Knoten

diskretisiert, wobei der unterste Knoten mit einer über die gesamte Simulationsdauer konstanten Temperatur von  $8.8\text{ }^{\circ}\text{C}$  19 Meter unter GOK lag. Die Temperatur des oberen Randkompartiments wurde aus der gemessenen Kurve —  $0.0\text{ m}$  in Abb. 28 — vorgegeben. Die Anfangsbedingungen, die maßgeblich die Qualität der Ergebnisse einer solchen Simulation beeinflussen, ergaben sich aus der stationären Wärmetransportberechnung unter Berücksichtigung aller zu diesem Zeitpunkt bekannten Temperaturen, also auch denen der Bohrung 1/2. Über den gesamten Simulationszeitraum von 31 Tagen betrug die Zeitschrittlänge konstant 60 Minuten. In den selben Intervallen wurden die Temperaturen des obersten Knotens durch die Meßwerte einer externen Datei erneuert. Die thermophysikalischen Eigenschaften des Bodens wurden wie folgt angenommen:

- Wärmekapazität des Festkornes  $850\text{ J/kgK}$
- Wärmeleitfähigkeit:  $0 - 5.5\text{ m}$  u.GOK  $1.8\text{ W/mK}$ ; darunter  $2.0\text{ W/mK}$
- Dichte des Festkornes  $2.65\text{ g/m}^3$

Der Kalibrierungslauf mit der besten Anpassung an die gemessenen Temperaturkurven wies folgende Eingangsparameter auf:

- Gesamtporosität  $\Phi_g$  von  $0.35$  allmählich auf  $0.05$  nach unten hin abnehmend
- Wassersättigungsgrad  $\Psi$  von  $20\%$  auf  $100\%$  nach unten hin zunehmend

Als Kalibriergrößen wurden somit nur die nach /210/ berechneten effektiven Wärmeleitfähigkeiten und die nach Gl. (3.50) berechneten Wärmekapazitäten herangezogen.

Wie aus dem Vergleich der Abb. 28 und 29 deutlich wird, ist die Übereinstimmung der gemessenen mit den berechneten Kurven trotz der starken Vereinfachungen erstaunlich gut. In beiden Fällen paust sich die enorm oszillierende Tagesganglinie je nach Tiefe mehr oder weniger gedämpft und phasenverschoben auf die tieferen Bodenhorizonte durch, bis schließlich bereits  $0.5\text{ m}$  unter GOK nur noch ein Großzyklus erkennbar ist.

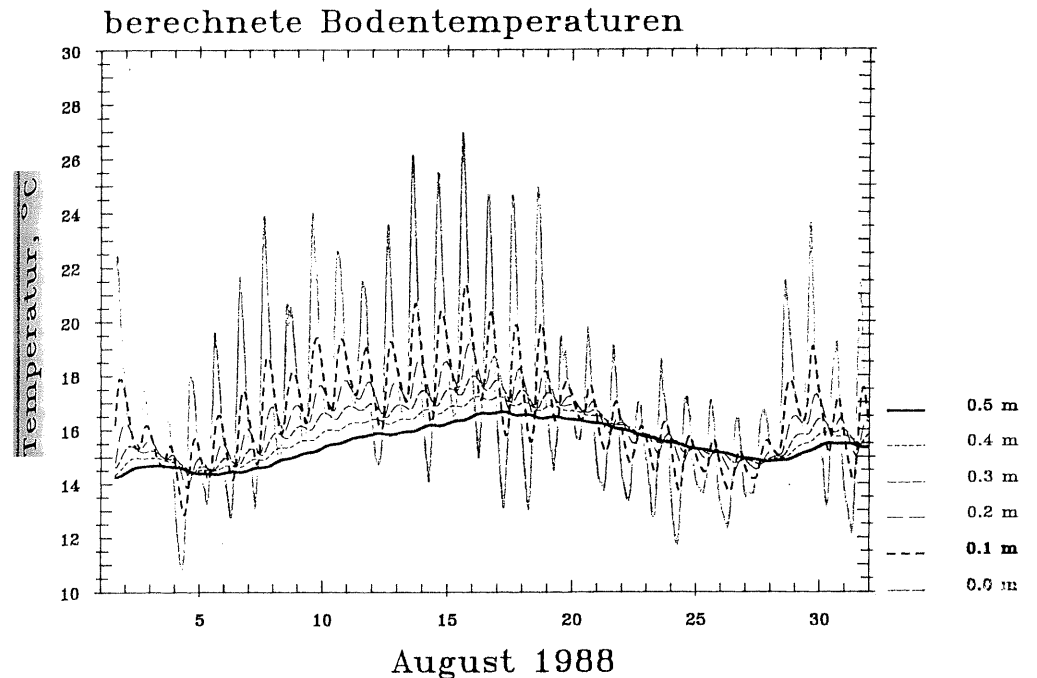


Abb. 29: Simulierte Temperaturen in den obersten 0.5 Meter des Schwalbacher Bodenprofils

## 6.2 Erdsondenanlage Göttingen

### 6.2.1 Beschreibung der Anlage

Die der Beheizung eines Einfamilienhauses dienende Erdsondenwärmepumpenanlage Göttingen besteht aus 6 je  $40\text{ m}$  tiefen Bohrungen und einer Wärmepumpe mit einer Abgabeleistung von  $17\text{ kW}$ . Während der Bohrarbeiten wurden die Ceratitenkalke des oberen Muschelkalkes durchörtert. Für diese Gesteine — im wesentlichen Kalke und Mergel — läßt sich überschlägig eine isotrope Wärmeleitfähigkeit von  $3.4\text{ W/mK}$  und eine Wärmekapazität von  $820\text{ J/kgK}$  abschätzen, (vergl. Anhang 1), während der Gesamtporenraum mit  $5\%$  beziffert wurde. Der Grundwasserflurabstand beträgt aufgrund der exponierten Lage auf einem Bergrücken mehr als die erbohrten  $40\text{ m}$ , weshalb die nachfolgenden Simulationen rein konduktiv

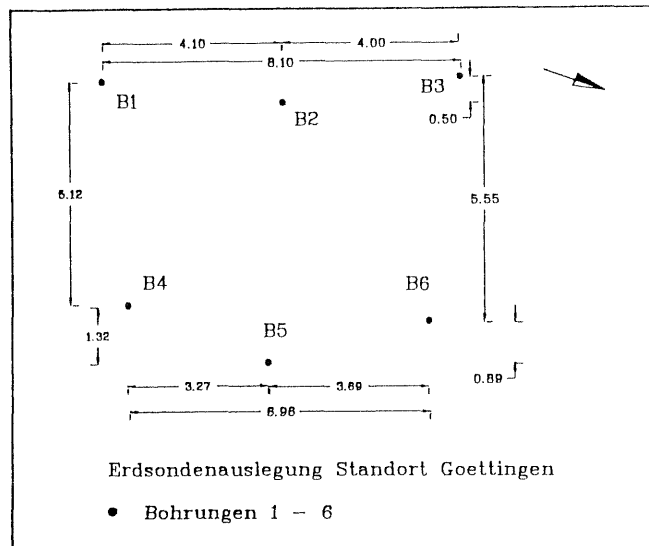


Abb. 30: Lageplan der Erdsondenanlage Göttingen

durchgeführt werden konnten. Die Lage der Bohrungen zueinander geht aus Abb. 30 hervor.

In allen Bohrungen wurden Wärmetauscher installiert, während der Testphase waren jedoch nur die Bohrungen B1, B2, B3, B5 und B6 mit der Wärmepumpenanlage verbunden. Die Beobachtungsbohrung B4 sollte der Aufzeichnung des resultierenden Temperaturfeldes dienen, die installierte Temperatursonde versagte jedoch irreparabel kurze Zeit nach Inbetriebnahme der Anlage. Vor dem Hintergrund, daß somit keine Möglichkeit bestand, das Modell auf den Standort zu kalibrieren, sind die nachfolgend beschriebenen Simulationen zu betrachten.

### 6.2.2 Diskretisierung

Zwei zweidimensionale Simulationen sollten Aufschluß über die mögliche Beeinflussung der Bohrungen untereinander und die Auswirkungen verschiedener Betriebsmodi der Wärmepumpe auf die anschließende Regeneration liefern. Von besonderem Interesse waren auch die langfristigen Auswirkungen der Energieentzüge auf die Erdreichtemperaturen. Dazu wurde

das Areal durch ein sehr feinmaschiges Raster von  $79 * 67$  zellenzentrierte Knoten — insgesamt 5293 — diskretisiert. Die kleinsten Zellen hatten eine Kantenlänge von  $6 \text{ mal } 6 \text{ cm}$  und die Vergrößerung der Kantenlängen zweier benachbarter Zellen betrug maximal 35%. Für die Modellränder wurde über den gesamten Simulationszeitraum eine konstante Temperatur von  $9.0 \text{ } ^\circ\text{C}$  angenommen.

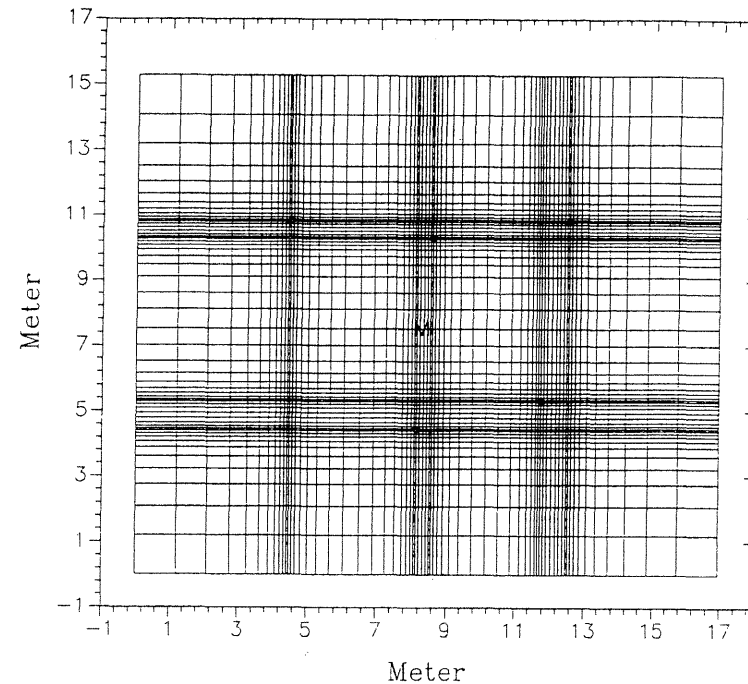


Abb. 31: Ausschnitt der Diskretisierung der Erdsondenanlage Göttingen; die Distanz zu den Modellrändern beträgt an jeder Seite etwa 33 Meter (jeweils 7 Knotenreihen)

Da die Anlage im normalen Heizbetrieb lief, wurden die Betriebszustände der Wärmepumpe primär von den herrschenden Außentemperaturen und der Brauchwasseranforderung kontrolliert. Abb. 32 zeigt exemplarisch die Entwicklung der Erdreichtemperaturen eines 4-wöchigen Zeitraumes der Heizperiode 1987/88 von Bohrung B1. Wie man an dem zackentartigen Temperaturverlauf erkennt, wechseln sich kurzzeitige Wärmeentzüge und länger anhaltende Regenerationsphasen ab.

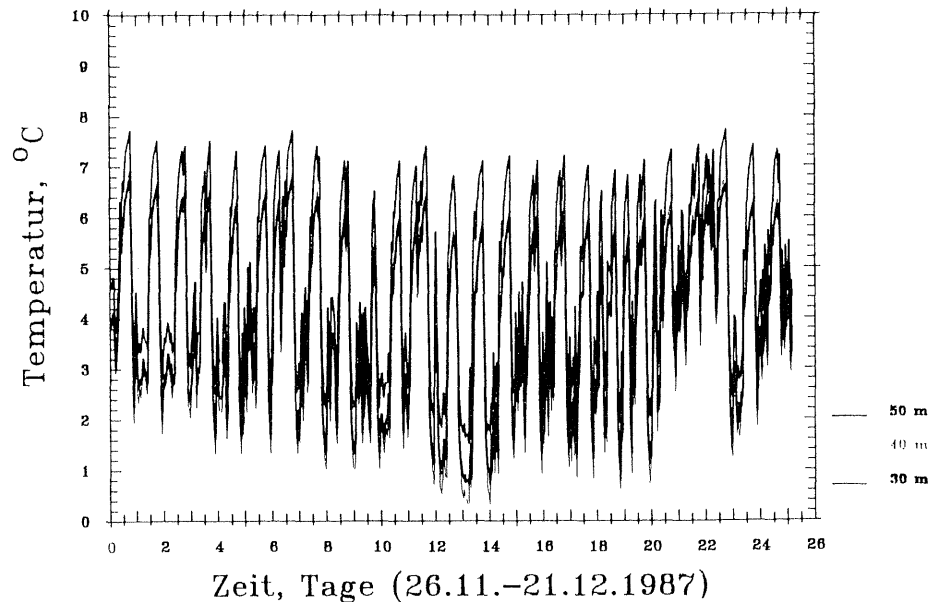


Abb. 32: Gemessener Temperaturverlauf in der Bohrung B1, November / Dezember 1987

Basierend auf der Beobachtung, daß die durchschnittliche Betriebszeit der Wärmepumpe etwa 2000 Stunden im Jahr beträgt und sich dabei die Temperaturen in den Entzugsbohrungen auf etwa  $1^{\circ}\text{C}$  absenken, wurden für beide Simulationen die nachfolgend beschriebenen Vereinfachungen getroffen.

Vom 1.10. - 31.12. (92 Tage) sollte die Anlage täglich 2 mal 4 Stunden, vom 1.1. - 28.2. (59 Tage) 3 mal 4 Stunden und vom 1.3. - 30.4. (61 Tage) 2 mal 4 Stunden pro Tag in Betrieb sein. Daraus ergibt sich an insgesamt 212 Tagen eine jährliche Laufzeit von insgesamt 1932 Stunden.<sup>1</sup> Bei der ersten Simulation wurde die in den Bohrungen während der Betriebsphasen der Wärmepumpe herrschenden Temperaturen mit konstant  $1^{\circ}\text{C}$  fest vorgegeben, bei der zweiten wurden die Entzugsleistungen der Wärmetauscher konstant gehalten.

Diese grobe Vereinfachung ergab sich aus der Notwendigkeit, die

<sup>1</sup> In der Heizperiode 1987/88 betrug die Laufzeit der Wärmepumpe 1920 Stunden, in denen die Anlage dem Erdreich — überschlägig abgeschätzt — insgesamt  $17.4 \text{ MWh}$  Wärmeenergie entzog. Der saisonale Leistungskoeffizient konnte mit 2.53 beziffert werden.

Anzahl der Zeitschritte wegen des enormen Rechenaufwandes zu limitieren. Die Zeitschrittlänge betrug in beiden Läufen über den gesamten Simulationszeitraum von jeweils 7 Jahren konstant 4 Stunden (15330 Zeitschritte). Trotz alledem benötigte der eingesetzte Großrechner *CDC 860* 24 bzw. 28 CPU-Stunden für die Lösung des gestellten Probleme.

### 6.2.3 Wärmentzug mit konstanter Bohrlochtemperatur

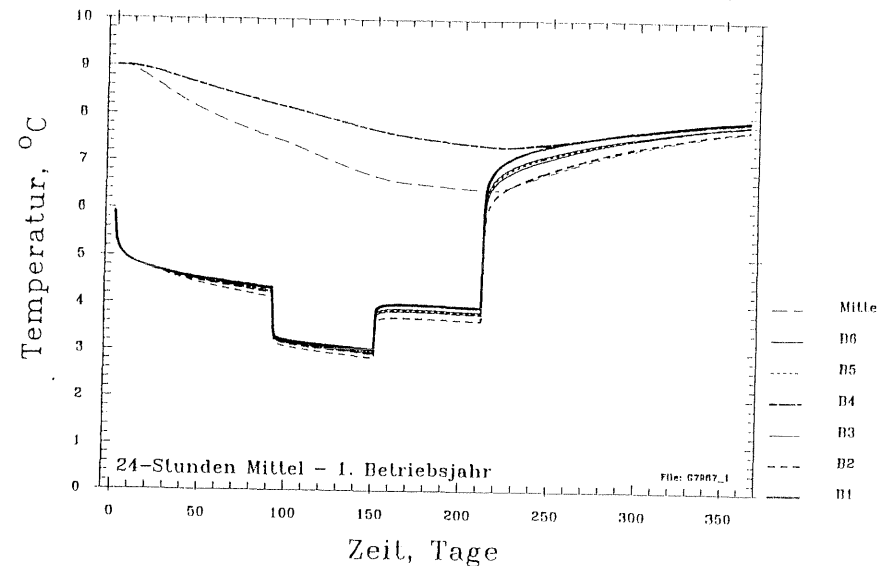


Abb. 33: Geglätteter Temperaturverlauf in den Bohrungen B1 - B6, 1. Betriebsjahr

Die in den Abb. 33 - 36 dargestellten Temperaturverläufe lassen eine asymptotische Abnahme der verbleibenden Temperaturabsenkung erkennen, die sich im Mittel durch die folgende Beziehung recht gut reproduzieren läßt:

$$T = -1.804 \cdot (1 - e^{-0.385 \cdot a}) + 8.378 \quad (6.00)$$

wobei:

$T$

mittlere Temperatur in den Entzugsbohrungen zu Beginn des  $a$ -ten Betriebsjahres unter der Annahme einer gegebenen Bohrlochtemperatur von  $1^{\circ}\text{C}$

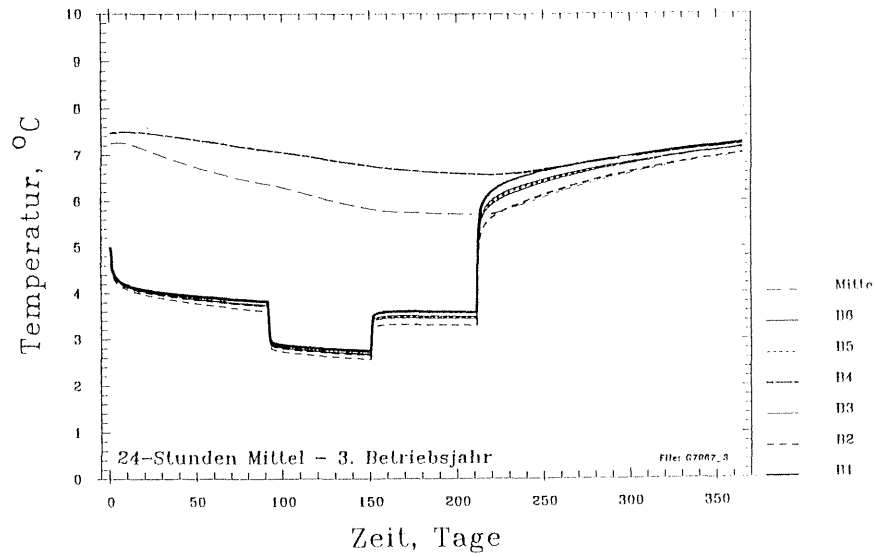


Abb. 34: Geglätteter Temperaturverlauf in den Bohrungen B1 - B6, 3. Betriebsjahr

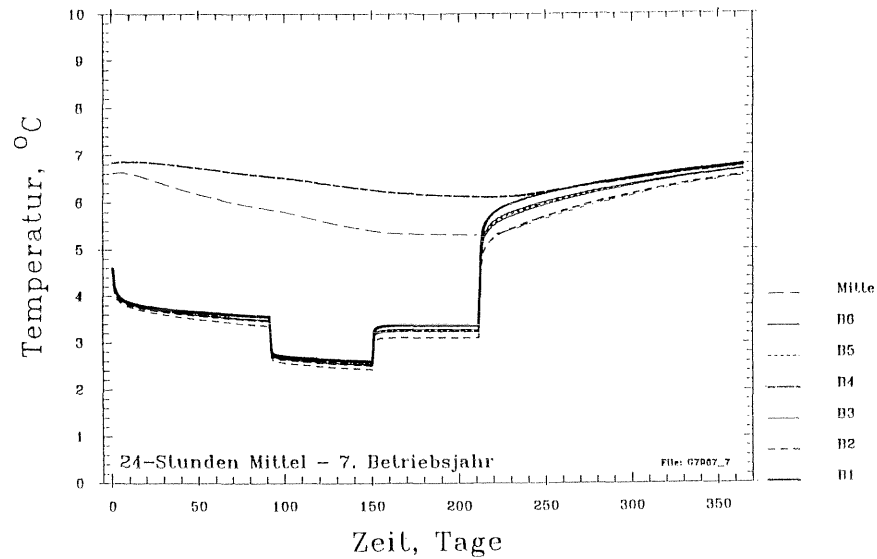


Abb. 35: Geglätteter Temperaturverlauf in den Bohrungen B1 - B6, 7. Betriebsjahr

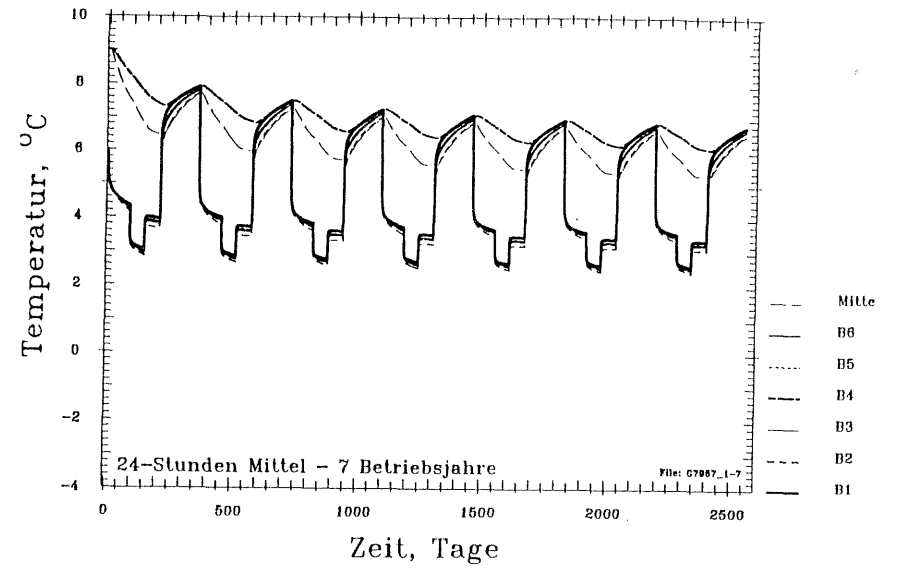


Abb. 36: Geglätteter Temperaturverlauf in den Bohrungen B1 - B6 über 7 Betriebsjahre

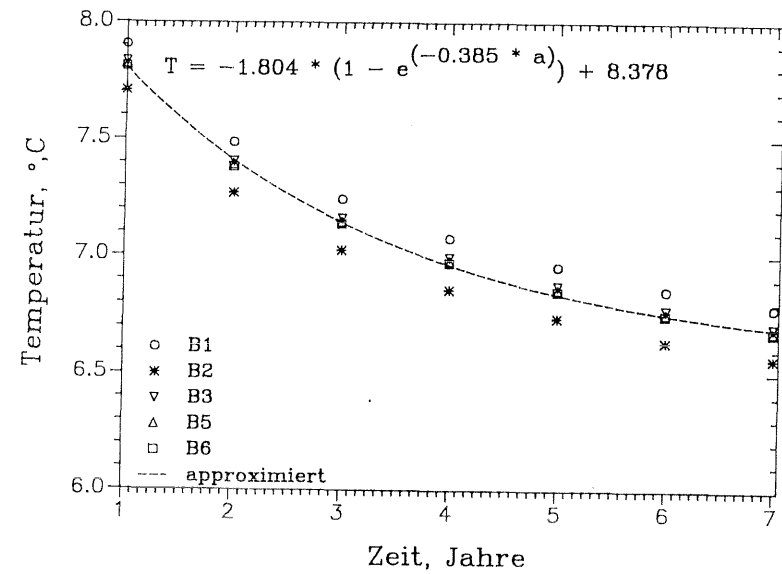


Abb. 37: Numerische Approximation der verbleibenden Temperaturabsenkung bei vorgegebener Bohrlochtemperatur

Demnach würde sich bei einer längerfristigen Prognose eine verbleibende Temperaturabsenkung auf etwa  $6.5\text{ }^{\circ}\text{C}$  —  $-2.5\text{ K}$  von der Ausgangstemperatur von  $9.0\text{ }^{\circ}\text{C}$  gerechnet — einstellen. Bei dieser Betriebsart nimmt zwangsläufig die Entzugsleistung der Anlage analog zur verbleibenden Temperaturabsenkung ab.

### 6.2.4 Wärmentzug mit konstanter Entzugsleistung

Bei der zweiten Simulation wurde in den beschriebenen Zyklen eine konstante Sondenentzugsleistung von  $45.8\text{ W/m}$  vorgegeben. Bei einer Sondenlänge von insgesamt  $200\text{ m}$  und einer Laufzeit der Wärmepumpe von  $1932\text{ h/a}$  ergibt somit eine Einzugsleistung von  $17.7\text{ MWh/a}$ .

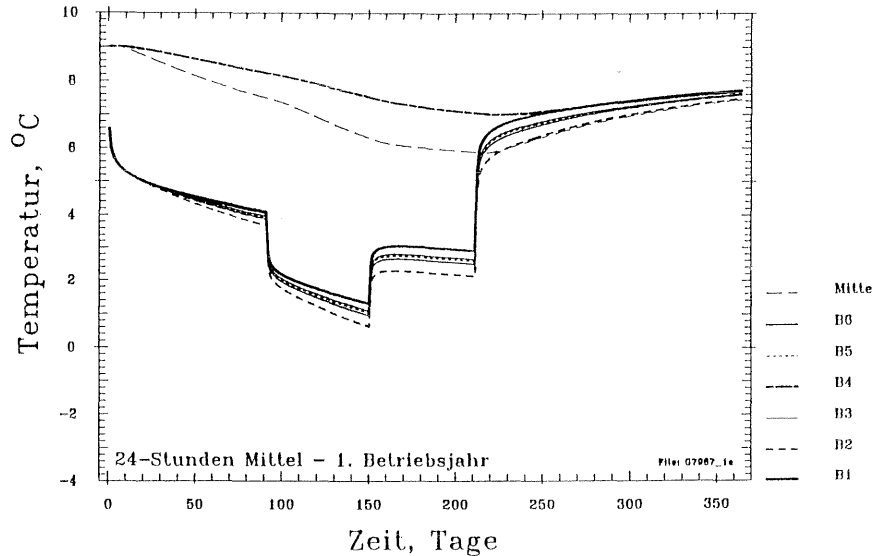


Abb. 38: Geglätteter Temperaturverlauf in den Bohrungen B1 - B6, 1. Betriebsjahr

Auch hier läßt sich für den simulierten Zeitraum eine gute Näherung für die jährlich verbleibende, mittlere Temperaturabsenkung finden:

$$T = 3.182 \cdot (e^{-0.2939 \cdot a}) + 5.205 \quad (6.01)$$

wobei:

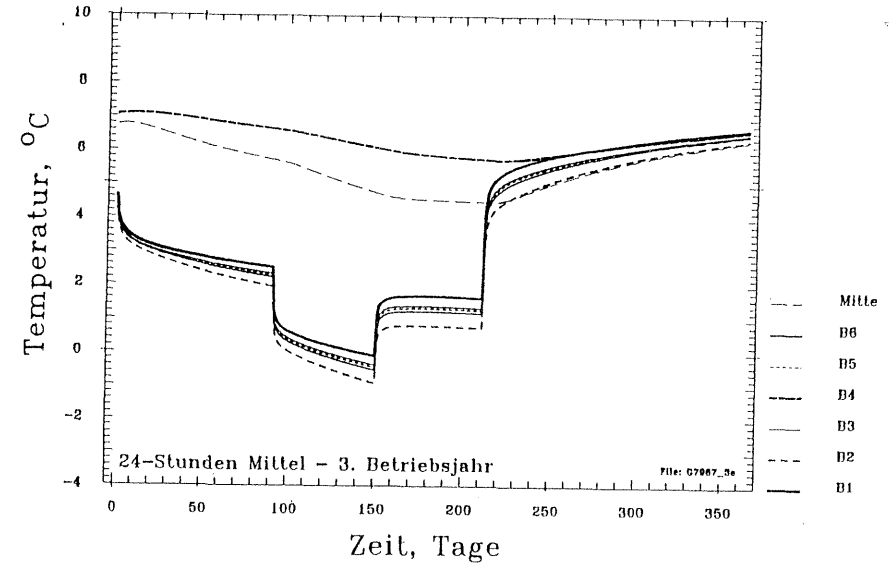


Abb. 39: Geglätteter Temperaturverlauf in den Bohrungen B1 - B6, 3. Betriebsjahr

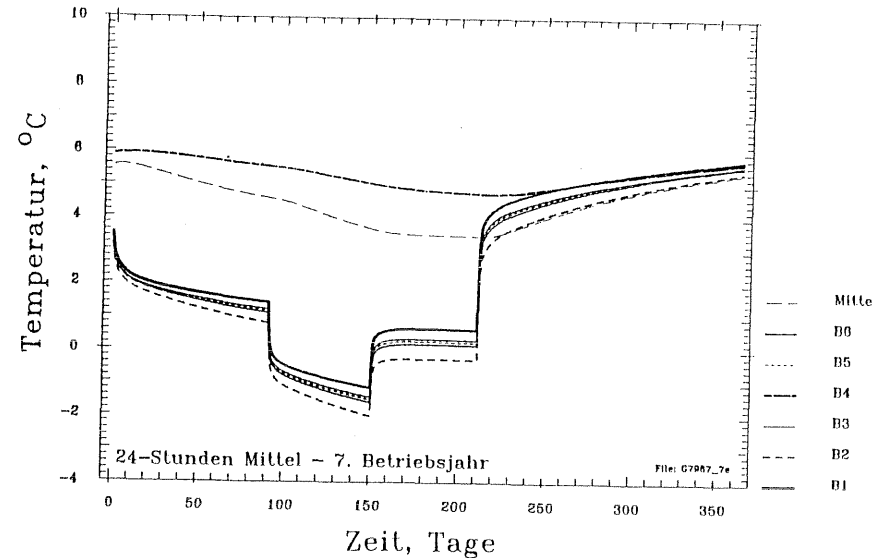


Abb. 40: Geglätteter Temperaturverlauf in den Bohrungen B1 - B6, 7. Betriebsjahr



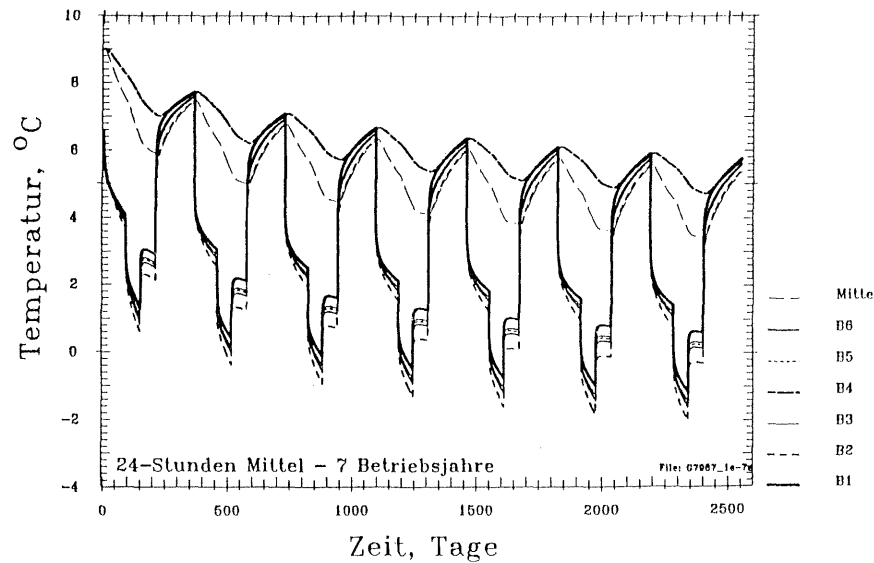


Abb. 41: Geglätteter Temperaturverlauf in den Bohrungen B1 - B6 über 7 Betriebsjahre

$T$  mittlere Temperaturabsenkung in den Entzugsbohrungen zu Beginn des  $a$ -ten Betriebsjahres unter der Annahme einer gegebenen Entzugsleistung von  $45.8 \text{ W/m}$

Da, wie bereits erwähnt, weder eine Möglichkeit bestand, das Modell auf den Standort zu kalibrieren, noch exakte Wärmemengenmessungen an der Anlage vorlagen, muß die Interpretation der Simulationsläufe einige Fragen offen lassen.

Ungeachtet dessen läßt sich aus den Abb. 37 und 42 zumindest ein zu erwartender Effekt deutlich erkennen: Die Temperaturen in der exponiert gelegenen Bohrung B1 regenerieren sich deutlich besser als die der übrigen Bohrungen. Am schlechtesten erfolgt die Regeneration in der zentral gelegenen Bohrung B2, während die Temperaturverläufe in den übrigen Bohrung ein sehr ähnliches Verhalten zeigen.

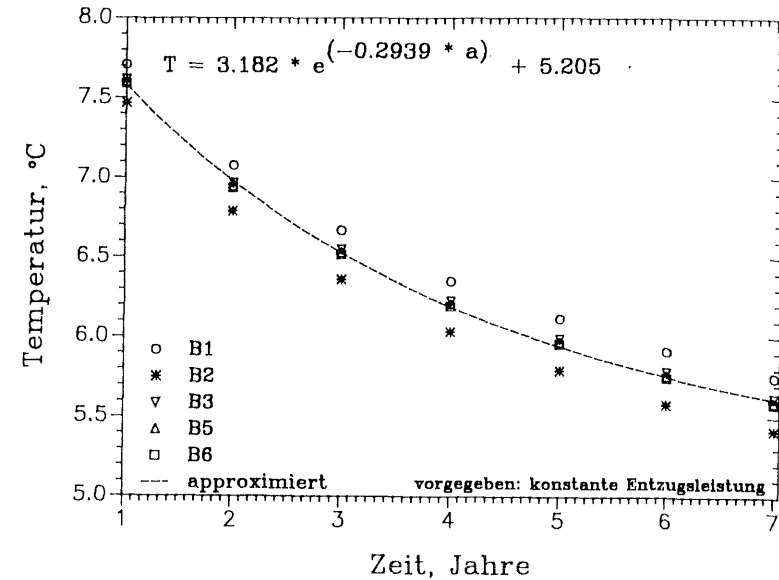


Abb. 42: Numerische Approximation der verbleibenden Temperaturabsenkung bei vorgegebener Entzugsleistung

### 6.3 Temperaturprognose in große Tiefen

Bei der Temperaturprognose für größere Tiefen ( $> 1000 \text{ m}$ ) können die Druck- und Temperaturabhängigkeit der Wärmeleitfähigkeit das Ergebnis einer Berechnung stark beeinflussen. Im Anhang 1 werden verschiedene Korrekturverfahren vorgestellt, mit deren Hilfe man die im Labor gemessenen Abhängigkeiten modelltechnisch berücksichtigen kann. Zur Abschätzung der Auswirkungen der von /91/ ermittelten P/T-Abhängigkeiten von Disthen-Sillimanit-Gneisen und Amphiboliten der Kontinentalen Tiefbohrung (KTB) wurden 3 Testsimulationen durchgeführt. Dabei wurden folgende Vereinfachungen getroffen:

- $K_o = 3.0 \text{ W/mK}$
- basaler Wärmefluß  $100 \text{ mW/m}^2$
- keine interne Wärmeproduktion
- rein konduktiver Wärmetransport

Als obere Randbedingung der eindimensionalen Simulation wurden  $10 \text{ °C}$  vorgegeben. Durch die P/T-abhängige Wärmeleitfähigkeit erhält das

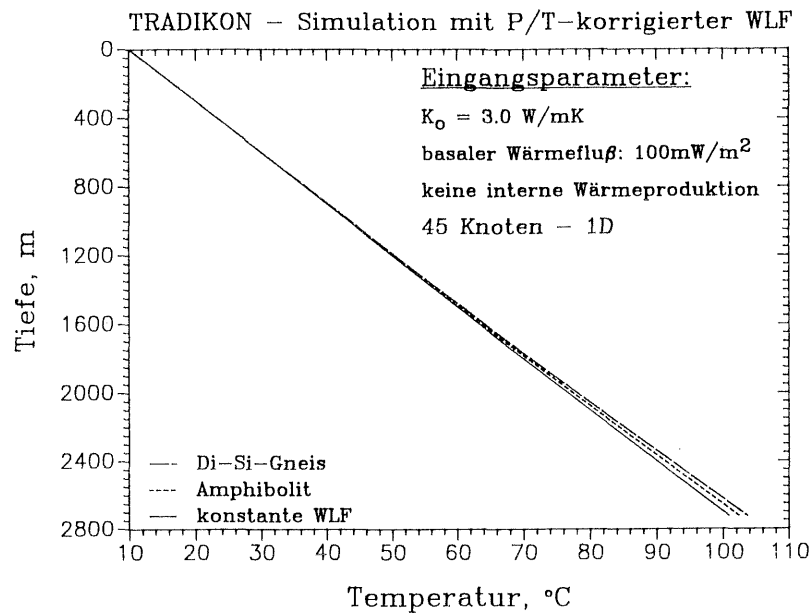


Abb. 43: Eindimensionale Temperaturberechnung mit druck- und temperaturabhängiger Wärmeleitfähigkeit

Problem einen stark nichtlinearen Charakter, sodaß die numerische Lösung nicht nur gegen die gesuchten Temperaturen, sondern auch gegen die sich einstellenden Wärmeleitfähigkeiten konvergieren muß. Die Konvergenz gegen ein Iterationskriterium von  $10^{-4} \text{ K}$  ließ sich nur durch eine kräftige Unterrelaxation ( $\Omega = 0.2$ ) bewerkstelligen, die eine Anzahl 72 (Amphibolit) bzw. 98 (Di-Si-Gneis) Iterationsschritten nach sich zog.

Die Temperaturen in 2725 m Tiefe betragen bei der unkorrigierten Simulation  $100.83 \text{ }^\circ\text{C}$ , bei den korrigierten Simulationen  $102.37$  (Amphibolit) bzw.  $103.65 \text{ }^\circ\text{C}$  (Di-Si-Gneis).

Inwieweit man die oben erwähnten Korrekturverfahren in größere Tiefen projizieren darf, ist ungewiß. Setzt man jedoch die Simulation mit denselben Eingangsparametern bis in eine Tiefe von 10 km fort, so resultieren  $343.31 \text{ }^\circ\text{C}$  für die konstante WLF,  $365.79$  (Amph.) bzw.  $380.66 \text{ }^\circ\text{C}$  (Di-Si-G.) für die P/T-korrigierten Wärmeleitfähigkeiten. Neben

einer möglichst genauen Abschätzung des basalen Wärmeflusses und der internen Wärmeproduktion sind daher vor allem auch die P/T-Abhängigkeiten der WLF für eine möglichst genaue Temperaturprognose in große Tiefen erforderlich.

## 7 Diskussion

Das hier vorgestellte finite Differenzen Wärmetransportmodell hat in der Validierung gegenüber analytischen Lösungen und einem anderen Strömungsmodell gezeigt, daß es unter Beachtung aller Diskretisierungsvorschriften in der Lage ist, den konvektiv-diffunden Wärmetransport sowie die Strömung in einem porösen Medium hinreichend genau zu berechnen.

Bei der Kalibrierung des Modells auf den Standort der Erdsondenforschungsanlage Schwalbach haben sich folgende Ergebnisse herausgestellt:

- der konvektive Anteil des Wärmetransports ist an dem gegebenen Standort aufgrund des geringen hydraulischen Gradientens und der niedrigen durchflußwirksamen Porosität vernachlässigbar
- der relativ simple Gefrieralgorithmus ist in der Lage, den Phasenwechsel von Grundwasser im Erdreich hinreichend genau nachzubilden
- die Regeneration der Erdreichtemperatur in der direkten Sondenumgebung wird bei den gegebenen Wärmeentzugsbedingungen nur einige Stunden nach Abschalten der Anlage durch das Schmelzen von Eis verzögert
- der instationäre Wärmetransport in der ungesättigten Bodenzone läßt sich zumindest in niederschlags- und frostfreien Perioden rein konduktiv berechnen

Zwei zweidimensionale Simulationen der Göttinger Erdsondenanlage haben folgendes ergeben:

- ungeachtet des gewählten Betriebsmodus der Anlage — vorgegebene Bohrlochtemperatur oder Entzugsleistung — wird zwischen zwei Heizperioden das Temperaturfeld nicht mehr vollständig regeneriert
- die verbleibende Temperaturabsenkung läßt über den Simulationszeitraum von jeweils 7 Jahren durch  $e$ -Funktionen berechnen und innerhalb gewisser Schranken auch in die Zukunft extrapolieren
- unter dem Vorbehalt, daß keine Möglichkeit bestand das Modell auf den Standort zu kalibrieren, scheint die Anlage

bei einer vorgegebenen Entzugsleistung von  $17.8 \text{ MWh/a}$  mit 5 Bohrungen etwas unterdimensioniert zu sein — sowohl was die Abstände der Bohrungen untereinander als auch die installierte Sondenlänge betrifft

- letzteres wird dadurch bestätigt, daß nach Beendigung des Versuchsbetriebes der Anlage durch das Einbeziehen der Bohrung *B4* eine spürbare Verbesserung der Leistungszahl eintrat
- ein Hinweis auf den nach den Ergebnissen der Simulation etwas zu dicht gewählten Bohrlochabstand ist die Tatsache, daß am Ende einer Heizperiode die tiefsten Temperaturen im Mittelpunkt des Bohrfeldes angetroffen werden, (in den gezeigten Diagrammen als "Mitte" bezeichnet).

Die Temperaturprognose in größere Tiefen ergab, daß neben einer möglichst genauen Kenntnis der internen Wärmeproduktionsraten und des basalen Wärmeflusses auch eine möglichst gute Abschätzung der Temperaturabhängigkeit der Wärmeleitfähigkeit über das Zutreffen einer Simulation entscheiden kann.

- /001/ ABRAMOWITZ, M. & STEGUN, I. (1964): Handbook of Mathematical Functions.- Applied Mathematics Series, Vol. 55, National Bureau of Standards.
- /002/ ALGAN, U. (1984): Numerical simulation of heat transfer in free surface aquifers.- Ph.D. Thesis, University of Missouri-Rolla.
- /003/ ALGREN, A. B. (1949): Ground temperatures as affected by weather conditions.- ASHVE Transactions, 55; Minneapolis.
- /004/ ANDERSON, J., THUNVIK, R. (1986): Predicting Mass Transport in Discrete Fracture Networks with the Aid of Geometrical Field Data.- Water Resources Research, Vol. 22, No. 13, pp. 1941-1950.
- /005/ ANDERSON, O. & WIBERG, N. (1983): Computer methods for heat storage problems.- Proc. int. conf. subs. heatstorage, Swed. coun. build. res. 1+2: 481-487; Stockholm.
- /006/ ANDERSON, S. (1983): Heat storage in natural ground water basins.- Proc. int. conf. subs. heat storage, Swed. coun. build. res., 1+2: 762-767; Stockholm.
- /007/ ANGEHRN, P., HANKE, J., LYONS, T. C., RAU, W. (1985): Energetische Grundwasserbewirtschaftung im Kanton Nidwalden unter Verwendung des hydrothermischen Grundwasserströmungsmodell HYDOTHERM-2.- Wasser-Energie-Luft, 77: 70-74; Baden.
- /008/ ANLAUF, R., KERSEBAUM, K. C., PING, L. Y., NUSKE-SCHÜLER, A., RICHTER, J., SPRINGOB, G., SYRING, K. M., UTERMANN, J. (1988): Modelle für Prozesse im Boden - Programme und Übungen.- Enke-Verlag; Stuttgart.
- /009/ ATHUR, J., MEIXEL, G. D., SHEN, L. S. (1983): Application of numerical methods for predicting energy transport in earth contact systems.- Applied energy, 13: 121-156.
- /010/ BACHMAT, Y., et al.(1985): Groundwater management: the use of numerical models.- 2nd ed., Water Resource Monograph, American Geophysical Union, Washington.
- /011/ BALADI, J. Y., SCHOENHALS, R. J., AYERS, D. L. (1979): Transient heat and mass transfer in soils.- ASME, 78-HT-31; New York (10017).
- /012/ BALKE, K. D. & WERNER, D. (1975): Der Abkühlungsvorgang bei anthropogen verursachten, positiven Temperaturanomalien im oberflächennahen Grundwasser.- Z. dt. geol. Ges., 126: 385-395; Hannover.
- /013/ BALKE, K. D., (1977), Das Grundwasser als Energieträger.- Brennstoff-Wärme-Kraft, 29; 5: 191-194; Düsseldorf.
- /014/ BALKE, K. D. (1979): Die Abkühlung des Untergrundes beim Betrieb von Grundwasser-Wärmepumpen.- Elektrowärme International, 7: 243-249; Essen.
- /015/ BALKE, K. D., (1981), Möglichkeiten und Grenzen des Einsatzes von Grundwasser-Wärmepumpen und Erdwärmesonden.- Z. dt. geol. Ges., 132: 691-713; Hannover.
- /016/ BALL, A., FISCHER, R., TALBERT, S. (1983): Stat-of-the-Art survey of existing knowledge for the design of ground-source heat pumps.- Ornl/Sub 80-7800/2&06, Battelle Columbus Laboratories; Frankfurt.
- /017/ BATTERMANN, G. (1981): Feldexperimente zur Ausbreitung von Warm- und Kaltwasser im Grundwasserleiter und ihre modellmäßige Erfassung.- Z. dt. geol. Ges., 132: 849-857, 3 Abb.; Hannover.
- /018/ BAU, H. H. (1984): Convective heat losses from a pipe buried in a semi-infinite porous medium.- Int. J. Heat Mass Transfer, Vol.27, No. 11: 2047-2056; Pergamon Press; London.
- /019/ BEAR, J. (1972): Dynamics of fluid in porous media.- American Elsevier; New York.
- /020/ BEAR, J. (1979): Hydraulics of groundwater.- McGraw-Hill Inc.
- /021/ BENNET, J., CLAESSION, J., HELLSTRÖM, G. (1987): Multipole Method to Compute the Conductive Heat Flows to and between Pipes in a Composite Cylinder.- Notes on Heat Transfer 3-87, Dep. of Building Technology and Mathematical Physics Lund.
- /022/ BJORDAMMAN, J., COATS, K. H. (1969): Comparison of alternating-direction and successive over-relaxation techniques in simulation of reservoir fluid flow.-J. Soc. Pet. Eng. 9, pp. 47-58.
- /023/ BLAU, R. v. (1981): Der Einsatz von Grundwasserwärmepumpen in der Schweiz.- Z. dt. geol. Ges. 132: 727-721; Hannover.
- /024/ BODVARSSON, G. S. (1982): Mathematical modeling of the behavior of geothermal systems under exploitation.- Ph. D. thesis, University of California, Berkeley.
- /025/ BODVARSSON, G. S. (1983): Temperature flow statistics and thermodynamics of low-temperature geothermal systems in Iceland.- J. Volcan. Geotherm. Res., 9: 255-280; Amsterdam.
- /026/ BOTHA, J. F., PINDER, G. F. (1983): Fundamental Concepts in the Numerical Solution of Differential Equations.- Wiley & Sons; New York.
- /027/ BOUMA, J., KOPPENOL, A. (1983): Investigation into a complete earth-to-water heat pump system in a single family dwelling focussing on the application of a vertical vertical subsoil heat exchanger.- EUR 8077 BF 1000, Brüssel (CEC).
- /028/ BOURDET, D., GRINGARTEN, A. C. (1980): Determination of fissure volume and block size in fractured reservoirs by type-curve analysis.- SPE 9239, 15 S.; Hannover.

- /029/ BRAM, K. (1979): Heat flow measurements in the FRG.- in: CERMAK, V., RYBACH, L. ed. (1979): Terrestrial Heat Flow in Europe.- Springer, 191-196; Berlin.
- /030/ BREBBIA, C., GRAY, W., PINDER, G. F. (1978): Finite elements in water resources.- Proc. 2. Int. conf. FE in wat. res. Pentech Press; London.
- /031/ BREHM, D., KNOBLICH, K., SANNER, B. (1986): Schrifttum zum Thema Erdwärmepumpen und Erdwärmespeicher.- Z. angew. Geowiss., No. 7, S. 129-142, Gießen.
- /032/ BRISTOW, Q., CONAWAY, J. G. (1984): Temperature gradient measurements in boreholes using low noise high resolution digital techniques.- Current res. Part B, Geol. Surv. od Canada, Paper 84-1B: 101-108; Canada.
- /033/ BUETTNER, K. (1955): Evaluation of soil heat conductivity with cylindrical test bodies.- Trans. Amer. Geophys. Union, 36/5: 831-837.
- /034/ BUNTEBARTH, G. & RUEFF, P. (1988): Laboratory thermal conductivities applied to crustal conditions.- in HANZA, V. M. et al. (eds.) Geothermics and geothermal energy; Sao Paulo.
- /035/ BUNTEBARTH, G. (1980): Geothermie.- Springer, 156 S; Berlin.
- /036/ BUSCHECK, T. A., DOUGHTY, C., TSANG, C. F. (1983): Prediction and Analysis of a Field Experiment on a Multilayered Aquifer Thermal Energy Storage System With Strong Buoncy Flow.- Water Resources Research, Vol. 19, No. 5, pp. 1307-1315.
- /037/ BÜTOW, E. (1981): Modellrechnung zur Ermittlung der Bedingungen für eine Wärmespeicherung in tiefen Grundwasserleitern.- Z. dt. geol. Ges., 132: 839-847, 2 Abb.; Hannover.
- /038/ CARSLAW, H. S., JAEGER, J. C. (1959): Conduction of Heat in Solids.- 2.ed., Oxford University Press.
- /039/ CERMAK, V., RYBACH, L. (1979): Terrestrial heat flow in Europe.- 151 Abb.; Springer-Verlag, Berlin/Heidelberg/New-York.
- /040/ CHARBENEAU, R. J., STREET, R. L. (1979): Modeling Groundwater Flow Fields Containing Point Singularities: Streamlines, Travel Times, and Breakthrough Curves.- Water Resources Research, Vol. 15, No. 6, pp. 1445-1450.
- /041/ CHENG, P., (1985): Geothermal Heat Transfer.- in: ROHSENOW, W. M., HARTNETT, J. P., GANIC, E. N. ed. (1985): Handbook of Heat Transfer Applications.- Chapter 11, 1-53, McGraw-Hill Book Company; New York.
- /042/ CHRISTOPHER, P. & MILLY, D. (1982): Moisture and Heat Transport in Hysteretic Inhomogeneous Porous Media: A Matric Head-Based Formulation and a Numerical Model.- Water Resources Research, Vol. 18, No. 3: 489-498.
- /043/ CLAESSION, J., ESKILSON, P: Thermal Analysis of Heat Extraction Boreholes.- Inst. of Technology, 222-227; Lund.
- /044/ CLAESSION, J., DUNAND, A. (1983): Heat extraction from ground by horizontal pipes - A mathematical analysis.- Swed. coun. build. res.; D1:1983; Stockholm.
- /045/ CLARK, D. (1987): Microcomputer programs for groundwater studies.- Elsevier, Amsterdam.
- /046/ CLARK, J. A., NABOZNY, R. L., HEETDERKS, J. L. (1977): ROCKBED: A computer program for thermal storage.- Annual meeting of int. Solar Energy Society, 17/17-17/21.
- /047/ CLARK, P. A. (1985): Thermal Energy Storage.- in: ROHSENOW, W. M., HARTNETT, J. P., GANIC, E. N. ed. (1985): Handbook of Heat Transfer Applications.- Chapter 8, 1-40, McGraw-Hill Book Company; New York.
- /048/ COATS, K. H. (1977): Geothermal resources modelling.- Paper SPE 6892 52. Tech. conf. of soc. pet. engineers; Denver.
- /049/ CODELL, R. B., KEY, K. T., WHELAN, G. (1982): A Collection of Mathematical Models of Dispersion in Surface Water and Groundwater.- NUREG-0868, U. S. Nuclear Regulatory Commission, Washington.
- /050/ COLLINS, M. W. (1978): Heat transfer by laminar combined convection in a vertical tube-prediction for water.- Heat transfer 1978 v. general papers, National Research Council Canada, 25-29; Ottawa.
- /051/ COMBARNOUS, M. A., BORIES, S. A. (1975): Hydrothermal convection in saturated porous media.- Advances in Hydroscience., Vol. 10, pp 231-307.
- /052/ COURANT, R., ISAACSON, E., REES, M. (1952): On the solution of non-linear hyperbolic differential equations by finite differences.- Comm. Pure Appl. Math., Vol. 5, p. 243.
- /053/ CRANK, J., NICOLSON, P. (1947): A practical method for numerical evaluation of solutions of partial differential equations of the heat conduction type.- Proc. Cambridge Philosophical Society, Vol. 43, Cambridge at the University Press.
- /054/ DELISLE, M. A. G. (1977): Modellrechnungen zur Speicherung von Abwärme im flachen Untergrund.- VDI-Berichte, 288: 55-63; Düsseldorf.

- /055/ DINULESCU, H. A., ECKERT, E. R. G. (1979): Analysis of the one dimensional moisture migration caused by temperature gradients in a porous medium.- Int. J. Heat Mass Transfer, Vol. 23, 1069-1078; Pergamon Press, London.
- /056/ DONEA, J., GIULIANI, S. QUARTAPELLE, L. (1980): Finite element solution to transient convective-conductive heat transfer problems.- Nuclear Eng. Design, 61: 131-141; North Holland Publ. Comp.
- /057/ DOUGLAS, J., RACHFORD, H. H. (1956): On the Numerical Solution of Heat Conduction Problems in Two and Three Space Variables.- Trans. Amer. Math. Soc. 82, 421-439
- /058/ DOUGLAS, J. (1962): Alternating Direction Methods for Three Space Variables.- Numerische Mathematik.
- /059/ EDWARDS, A. L. (1972): TRUMP - A Computer program for transient and steady state temperature distributions in multidimensional systems.- UCRL-24754, Lawrence Livermore Laboratories; Livermore.
- /060/ ESKILSON, P. (1986): Superposition Borehole Model.- Department of Mathematical Physics University of Lund, Box 118, S-221 00, Lund (Schweden).
- /061/ ESKILSON, P. (1987): Thermal Analysis of Heat Extraction Boreholes.- Department of Mathematical Physics University of Lund, Box 118, S-221 00, Lund (Schweden).
- /062/ ESKILSON, P. (1987): PC-programs for Dimensioning of Heat Extraction Boreholes.- Notes on Heat Transfer No. 8.
- /063/ ESKILSON, P. (1988): Simulation model for thermally interacting heat extraction boreholes.- Numerical Heat Transfer, vol. 13, pp. 149-165.
- /064/ FAROUKI, O. T. (1986): Thermal Properties of Soils.- Series on Rock and Soil Mechanics Vol. 11; Trans Tech Publications.
- /065/ FAUST, C. R., MERCER, J. W. (1977): Finite-Difference Model of two-dimensional, single-, and two-phase heat transport in porous medium - version I.- U.S. Geological Survey Open-File Report 77-234.
- /066/ FISCHER, R. (1983): Models of simultaneous heat and moisture transfer in soils.- ORNL/SUB/80-7800/1&06, Battelle columbus laboratories Columbus (Ohio).
- /067/ FOGIEL, M. (1984): The heat transfer problem solver.- Research and Education Association, New York.
- /068/ FREEZE, R. A., CHERRY, J. A. (1979): Groundwater.- Prentice-Hall, Englewood Cliffs/N.J.
- /069/ FRIVIK, P. E., COMINI, G. (1981): Seepage and heat flow in soil freezing.- Journal of Heat Transfer, Vol. 104/323.
- /070/ GABOR, J. D., BOTTERILL, J. S. M. (1985): Heat Transfer in Fluidized and Packed Beds.- in: ROHSENOW, W. M., HARTNETT, J. P., GANIC, E. N. ed. (1985): Handbook of Heat Transfer Applications.- Chapter 6, 1-47, McGraw-Hill Book Company; New York.
- /071/ GANIC, E. N., HARTNETT, J. P., ROHSENOW, W. M. (1985): Basic Concepts of Heat Transfer.- in: ROHSENOW, W. M., HARTNETT, J. P., GANIC, E. N. ed. (1985): Handbook of Heat Transfer Fundamentals.- Chapter 1, 1-42, McGraw-Hill Book Company; New York.
- /072/ GARTLING, D. K., HICKOX, C. E. (1980): MARIAH - A finite element computer program for incompressible porous flow problems.- Rep. SAND79-1623, Sandia National Laboratories.
- /073/ GILBY, D. J., HOPKIRK, R. J. (1985): MC.TRAD-2D: A multiple coordinate computer code for calculation of transport by diffusion in two dimensions.- Technical Report 85-37; NAGRA Baden/Ch.
- /074/ GILLHAM, R. W., SUDICKY, E. A., CHERRY, J. A., FRIND, E. O. (1984): An Advective-Diffusion Concept for Solute Transport in Heterogeneous Unconsolidated Geological Deposits.- Water Resources Research, Vol. 20, No. 3, pp. 369-378.
- /075/ GLATZEL, W. D., HEISE, K. (1980): Wärmepumpen und Grundwasserschutz - Ökologische Auswirkungen von Wärmepumpen mit Wärmeentzug aus Wasser.- Statusseminar Wärmepumpen und Grundwasserschutz, 382; Berlin (Schmidt).
- /076/ GLAUB, J. E. TREZEK, G. (1982): Heat and mass transfer from a moist porous media of large particle size.- ASME, 8 S.; New York.
- /077/ GOLF - RACHT, T. D. van. (1982): Fundamentals of Fractured Reservoir Engineering.- Developments in Petroleum Science, 12, Elsevier Scientific Publishing Company; Amsterdam.
- /078/ GRIETHE, H. P. (1977): Beitrag zur Bestimmung der Wärmetransporteigenschaften von nichtbindigen Böden unter besonderer Berücksichtigung des teilgesättigten Zustandes.- Mitt. Inst. Wasserbau u. Wasserwirtschaft RWTH Aachen.
- /079/ GRINGARTEN, A. C. (1979): Reservoir lifetime and heat recovery in geothermal aquifers used for urban heating.- Pageoph., 117: 297-308; Birkhäuser, Basel.
- /080/ GRINGARTEN, A. C., BOURDET, A. (1980): Determination of fissure volume and block size in fractured reservoirs by type-curve analysis.- SPE 9293 Transact. AIME; Dallas (Soc. Pet. Eng.).
- /081/ GRINGARTEN, A. C., SAUTY, J. (1975): A theoretical study of heat extraction from aquifers with uniform regional flow.- Jour. geophys. Res. 35: 4956-4962; Washington.

- /082/ HEITFELD, K. H., KRAPP, L., WEILER, A. (1981): Temperaturanomalien im Stadtgebiet Duisburg und deren Auswirkung auf Baumaßnahmen der Stadtbahn.- Z. dt. geol. Ges. 132: 779-797, 22 Abb.; Hannover.
- /083/ HELLSTRÖM, G. (1982): Heat Storage in the Ground - Model of duct storage system manual for computer code.- March 1982, Department of mathematical physics, Univ. of Lund.
- /084/ HELLSTRÖM, G. (1983): Comparison between theoretical models and field experiments for ground heat systems.- Proc. int. conf. subs. heat storage, 1: 102-115; Stockholm (Swed. coun. build. res.).
- /085/ HELLSTRÖM, G. (1983): Thermal performance of ground heat exchangers. Analytic formulas.- Inst. of Technology, 239-244; Lund.
- /086/ HOPKIRK, R. J., RYBACH, L. (1986): Erdwärmesonden für Raumheizungen.- Neue Züricher Zeitung, Separatdruck, Nr. 71; Zürich.
- /087/ HORAI, K. (1971): Thermal conductivity of rock-forming minerals.- J. Geophys. Res., Vol. 76, No. 5, p. 1278-1308.
- /088/ HORAI, K., BALDRIDGE, S. (1971): Thermal conductivity of nineteen igneous rocks - Application of the needle probe method to the thermal conductivity of rocks.- Phys. Earth Planet, 5: 151-157; Amsterdam.
- /089/ HÖTZL, H., MAKURAT, A. (1981): Veränderungen der Grundwassertemperaturen unter dicht bebauten Flächen der Stadt Karlsruhe.- Z. dt. geol. Ges., 132: 767-777; Hannover.
- /090/ HOYA, K. (1981): Vorbereitende Untersuchungen zur Grundwasserwärmenutzung in der "Neuen Stadt Wulfen".- Z. dt. geol. Ges., 132: 733-743, 9 Abb.; Hannover.
- /091/ HUENGES, E., BUNTEBARTH, G., ZOTH, G. (1989): Die Wärmestromdichte in der KTB Oberpfalz VB.- Vorabdruck des Posters anlässlich des KTB Kolloquiums Giessen, 15.-17.03.1989.
- /092/ HUNTOON, P. W. (1980): Computationally efficient polynomial approximations used to program the Theis equation.- Groundwater, Vol.18., No. 2, March-April.
- /093/ HUYAKORN, P. S., DOUGHERTY, D. E., FAUST, C. R. (1983): An efficient finite element model for subsurface heat storage.- Proc. int. conf. subs. heat storage, Swed. coun. bild. res., 524-529; Stockholm.
- /094/ HUYAKORN, P. S., SPRINGER, E. P. (1986): A Three-Dimensional Finite-Element Model for Simulating Water Flow in Variably Saturated Porous Media.-Water Resources Research, Vol. 22, No. 13, pp. 1790-1808.
- /095/ INCROPERA, F. P., DeWITT, D. P. (1985): Fundamentals of heat and mass transfer.- John Wiley & Sons; 2nd edition.
- /096/ INGERSOLL, L. ADLER, F., MADISON, W., PLASS, H. J., (1951): Theory of heat exchangers for the heat pump.- , ASHVE Transact., 57.
- /097/ INTERA (1979): Revision of the Documentation for a Model for Calculating Effects of Liquid Waste Disposal in Deep Saline Aquifers.- U.S. Geological Survey Water Resources Investigations 79-96.
- /098/ INTERCOMP (1976): A Model for Calculating Effects of Liquid Waste Disposal in Deep Saline Aquifers.- U.S. Geological Survey Water Resources Investigations 76-61.
- /099/ JAVANDEL, I., DOUGHTY, C., TSANG, C. F. (1984): Groundwater Transport: Handbook of Mathematical Models.- Water Resources Monograph Series 10, American Geophysical Union, Washington.
- /100/ KANGAS, M. T., LUND, P. D. (1987): The simulation of aquifer thermal energy storage systems.- in: LUND, P. ed. (1987): Nordic workshop on computational methods of seasonal storage solar heating systems NBS-workshop, June 12-13,1987
- /101/ KERSTEN, M. (1949): Thermal properties of soil.- Bulletin No. 28, Vol.L11, No 21; Minnesota.
- /102/ KILTY, K., CHAPMAN, D. S. (1980): Convection heat transfer in selected geologic situations.- Groundwater, 18, No. 4, 386-394; Salt Lake City.
- /103/ KINZELBACH, W. (1983): Analytische Lösungen der Schadstofftransportgleichung und ihre Anwendung auf Schadensfälle mit flüchtigen Chlorkohlenwasserstoffen.- In: Mitteilungen des Instituts für Wasserbau, Universität Stuttgart, Heft 54, S. 115-200.
- /104/ KINZELBACH, W., HERZER, J. (1983): Anwendung der Verweilzeitmethode auf die Simulation und Beurteilung von hydraulischen Sanierungsmaßnahmen.- In: Mitteilungen des Instituts für Wasserbau, Universität Stuttgart, Heft 54, S. 201-250.
- /105/ KINZELBACH, W. (1983): Numerische Schadstofftransportmodelle und ihre Anwendung auf einen Schadensfall mit Chlorkohlenwasserstoffen.- In: Mitteilungen des Instituts für Wasserbau, Universität Stuttgart, Heft 54, S. 311-368.
- /106/ KINZELBACH, W. (1986): Groundwater Modelling - An Introduction with Programs in Basic.- Elsevier, Amsterdam.
- /107/ KINZELBACH, W. (1987): Numerische Methoden zur Modellierung des Transports von Schadstoffen im Grundwasser.- Schriftenreihe gwf Wasser - Abwasser; Oldenbourg - Verlag München.
- /108/ KLEY, W., NIESKENS, H. G. (1975): Möglichkeiten der Wärmespeicherung in einem Porengrundwasserleiter und technische Probleme bei der Rückgewinnung der Energie.- Z. dt. geol. Ges., 126: 397-409, 11 Abb.; Hannover.

- /109/ KOBUS, H. (1980): Ausbreitung von abgekühltem Wasser in Grundwasserleitern.- Statusseminar Wärmepumpen und Grundwasserschutz, 35-60; Berlin (Schmidt).
- /110/ KOBUS, H. MEHLHORN, H. (1980): Beeinflussung von Grundwassertemperaturen durch Wärmepumpen.- Gas- und Wasserfach (gwf), 121: 261-268; München.
- /111/ KONIKOW, B. L., BREDEHOEFT, J. D. (1978): Computer model of two-dimensional solute transport and dispersion in groundwater.- Techniques of Water-Resources Investigations of U.S. Geological Survey; Book 7, Chapter C2.
- /112/ KREITH F., RABL, A. (1985): Solar Energy.- in: ROHSENOW, W. M., HARTNETT, J. P., GANIC, E. N. ed. (1985): Handbook of Heat Transfer Applications.- Chapter 7, 1-37, McGraw-Hill Book Company; New York.
- /113/ KROLEWSKI, H. (1981): Technische und energiepolitische Grundlagen der Heranziehung des Grundwassers für Wärmepumpen.- Z. dt. geol. Ges., 132: 681-690, 3 Abb., 3 Tab.; Hannover.
- /114/ KUIPER, L. K. (1985): Documentation of a numerical code for the simulation of variable density ground-water flow in three dimensions.- U.S. Geological Survey Water Resources Investigations Report 84-4302.
- /115/ KÜHN, P., WEGNER, L. (1984): Die Parabel von Sperenberg - Neuinterpretation der Temperaturmessungen in der Bohrung Sperenberg (1871) und Wärmeflußbestimmung.- Zeitschrift f. ang. Geologie, 30: 84-87; Berlin.
- /116/ KUHRWAHL, H. (1979): Technik der Erschließung der Wärmequelle Grundwasser.- Eta, 37/A5, 236-242, .
- /117/ KUSUDA, T., ACHENBACH, P. R. (1965): Earth temperature and thermal diffusivity at selected stations in the United States.- ASHRAE Semiannual Meeting, Jan. 25-28, 1965, No. 1914.
- /118/ KUSUDA, T., (1985): Heat Transfer in Buildings.- in: ROHSENOW, W. M., HARTNETT, J. P., GANIC, E. N. ed. (1985): Handbook of Heat Transfer Applications.- Chapter 9, 1-55, McGraw-Hill Book Company; New York.
- /119/ LAIBL, J. P., BREBBIA, C. A., GRAY, W., PINDER, G. ed. (1984): Finite Elements in Water Resources - Proceedings of the 5th International Conference, Burlington, Vermont, U.S.A, June 1984.- Springer Verlag Berlin.
- /120/ LANDOLT & BÖRNSTEIN (1967): Zahlenwerte und Funktionen aus Physik, Chemie, Astronomie, Geophysik und Technik.- 6. Aufl. Springer Verlag.
- /121/ LAVAL, H., GIULIANI, S., DONEA, J. (1983): Explicit finite element analysis of convective-conductive heat transfer.- 9 S.; Brüssel (CEC).
- /122/ LEWIS, F. M., VOSS, C. I., RUBIN, J. (1986): Numerical Simulation of Advective-Dispersive Multisolute Transport with Sorption Ion Exchange and Equilibrium Chemistry.- U.S. Geological Survey - Water-Resources Investigations Report 86-4022.
- /123/ LEISMANN, H. M., (1987): Berechnung von Ausbreitungsvorgängen im Grundwasser mit der Methode der Finiten Elemente.- Dissertation Universität Karlsruhe.
- /124/ LILEY, P. E. (1985): Thermophysical Properties.- in: ROHSENOW, W. M., HARTNETT, J. P., GANIC, E. N. ed. (1985): Handbook of Heat Transfer Fundamentals.- Chapter 3, 1-135, McGraw-Hill Book Company; New York.
- /125/ LIPPMANN, M. J., TSANG, C. F., WITHERSPOON, P. A. (1977): Analysis of the response of geothermal reservoirs under injection and production procedures, paper SPE 6537, presented at 47th Ann. Calif. Regional Meeting of Soc. Petrol. Eng. of AIME, Bakersfield/CA
- /126/ LOTTNER, V. (1986): Die Nutzung von Erdreich und Grundwasser für saisonale Wärmespeicherung und als ganzjährige Wärmequelle für Wärmepumpenheizung.- Z. angew. Geowiss., No. 7, S. 5-20, Gießen.
- /127/ LUDEWIG, H. (1981): Zur Auswertung von Temperaturmessungen im tiefen Grundwasser.- Z. dt. geol. Ges., 132: 799-809; Hannover.
- /128/ LUIKOV, A. V. (1973): Systems of differential equations of heat and mass transfer in capillary porous bodies.- Int. J. Heat Mass Transfer Vol. 18: 1-14, Pergamon Press; London.
- /129/ LUND, P. D., ÖSTMANN, M. B. (1985): A numerical model for seasonal storage of solar heat in the ground by vertical pipes.- Solar Energy Vol. 34, No. 4/5, pp. 351-366, Pergamon Press, London.
- /130/ LUND, P. ed. (1987): Nordic workshop on computational methods of seasonal storage solar heating systems - NBS - Workshop, June 12-13, 1987, Report TKK-F-A612; Dpmt. Tech. Phys. Helsinki.
- /131/ MARSILY, G. de. (1986): Quantitative Hydrogeology.- Groundwater Hydrology for Engineers; Academic Press, Inc. Orlando.
- /132/ McDONALD, M. G., HARBAUGH, A. W. (1984): A modular three-dimensional finite-difference groundwater flow model.- U.S. Geological Survey - Open File Report 83-875.
- /133/ MEI, V. C., FISCHER, S. (1983): Vertical concentric tube ground coupled heat exchangers. ASHRAE Transact. Pt. 2A + B, DC8308, 89: 391-406.
- /134/ MEI, V. C., FISCHER, S. (1984): A theoretical and experimental analysis of vertical concentric-tube ground-coupled heat exchangers.- ORNL, Contract No. DE-ACO5-84OR21400, 68 S.; Springfield.
- /135/ MEI, V. C. (1986): Horizontal ground-coil heat exchanger theoretical and experimental analysis.- ORNL/CON-193.
- /136/ MILLHONE, J. & WILLIS, E., Ed. (1981): New Energy Conservation Technologies.- IEA, Proceedings of an International Conference Berlin; Berlin (Springer).



- /137/ MILLY, P. C. D. (1982): Moisture and Heat Transport in Hysteretic, Inhomogeneous Porous Media: A Matrix Head-Based Formulation and a Numerical Model.- *Water Resources Research*, Vol. 18, No. 3, pp. 489-498.
- /138/ MOGENSEN, P. (1983): Fluid to duct wall heat transfer in duct system heat storages.- *Proc. int. conf. subs. heat storage*, 652-657; Stockholm, (Swed. coun. build. res.).
- /139/ MOROFSKY, E. (1983): Geotechnical aspects of thermal storage in aquifers.- *Proc. int. conf. subs. heat storage*, 708-717; Stockholm (Swed. coun. build. res.).
- /140/ MOROFSKY, E. L. (1983): Overview of canadian aquifer thermal energy storage field trials.- *Proc. Int. conf. subs. heatstorage*, 1+2: 221-231; Stockholm (Swed. coun. build. res.).
- /141/ MULL, R., BATTERMANN, G., BOOCHS, P. (1979): Ausbreitung von Schadstoffen im Grundwasser.- *DVWK 13. Seminar*.
- /142/ MULL, R. & SCHULZ, H. (1982): Eichung eines Transportmodells zur Beschreibung der Wärmeausbreitung in einem Grundwasserleiter.- *Wasserwirtschaft*, 72.
- /143/ NARASIMHAN, T. N., WHITHERSPOON, P. A. (1976): An integrated finite difference method for analyzing fluid flow in porous media.- *Water resources research*, 12, No. 1: 57-64.
- /144/ NEISS, J., WINTER, E. (1976): Analyse der instationären Wärmeleitung zwischen Wärmetauscherrohren einer Wärmepumpe und dem Erdreich.- *Wärme- u. Stoffübertragung*, 9: 39-48; Berlin (Springer).
- /145/ NEISS, J. (1982): Numerische Simulation des Wärme- und Feuchtetransport und der Eisbildung in Böden.- *Fortschr.-Ber. VDI-Z.*, Reihe 3, Nr. 73
- /146/ NIELSON, D. R., GENUCHTEN, M. TH. VAN, BIGGAR, J. W. (1986): Water Flow and Solute Transport Processes in the Unsaturated Zone.- *Water Resources Research*, Vol. 22, No. 9, pp. 89S-108S.
- /147/ NIEVERGELD, P. G. M., BRUGH, J. H. A. M. v.d., HORST, J. F. v.d., KOPPENOL, A. D. (1980): Investigation on using the earth as a natural heat source for heat pumps.- *EUR 6835 EEN*, 75 S.; Brüssel (CEC).
- /148/ PATANKAR, S. V., SPALDING, D. B. (1972): A Calculation Procedure for Heat, Mass and Momentum Transfer in Three-Dimensional Parabolic Flows.- *Int. J. Heat Mass Transfer*, Vol. 15, pp. 1787-1806, Pergamon Press; London.
- /149/ PATANKAR, S. V., BALIGA, B. R. (1978): A New Finite-Difference Scheme for Parabolic Differential Equations.- *Numer. Heat Transfer*, Vol. 1, pp. 27-37.
- /150/ PATANKAR, S. V. (1979): A calculation procedure for two-dimensional elliptic situations.- *Num. Heat Transfer*.
- /151/ PATANKAR, S. V. (1980): *Numerical heat transfer and fluid flow*.- 197 S. New York (McGraw Hill).
- /152/ PEACEMAN, D. W., RACHFORD, H. H. (1955): The numerical solution of Parabolic and elliptic differential equations.- *J. Soc. Ind. Appl. Math.* 3, 28-41.
- /153/ PEACEMAN, D. W. (1977): *Fundamentals of numerical reservoir simulation*.- Elsevier Amsterdam.
- /154/ PELKA, W. (1983): Numerical method for calculating heat transport in saturated-unsaturated groundwater flow.- *Proc. int. conf. subs. heat stor.*, 469-475; Stockholm (Swed. coun. build. res.).
- /155/ PELKA, W. (1985): Berechnung einer thermischen Anomalie in der Umgebung des Einleitungsbrunnens einer Grundwasser-Wärmepumpe.- *Wasser und Boden*, 4.
- /156/ PELKA, W., DANIELS, H. (1986): Die Berechnung der Wärmeausbreitung im Grundwasser.- *Z. angew. Geowiss.*, No. 7, S. 101-128, Gießen
- /157/ PHILIP, J., VRIES de, D. (1957): Moisture movement in porous materials under temperature gradients.- *Trans. Amer. Geophys. Union*, Vol. 38, No. 2.
- /158/ PINDER, G. F., GRAY, W. G. (1977): *Finite element simulation in surface and subsurface hydrology*.- Academic Press; New York.
- /159/ POSSON, D. R., HEARNE, G. A., TRACY, J. V., FRENZEL, P. F. (1980): A computer program for simulating geohydrolic systems in three dimensions.- *U.S. Geological Survey - Open File Report 80-421*.
- /160/ PRESS, W. H., FLANNERY, B. P., TEUKOLSKY, S. A., VETTERLING, W. T. (1987): *Numerical Recipes - The Art of Scientific Computing*.- Cambridge University Press.
- /161/ PRICKETT, T. A., NAYMIK, T. G., LONNQUIST, C. G. (1981): A "Random-walk" Solute Transport Model for Selected Groundwater Quality Evaluations.- *Illinois state water surv. Bull.*, Dptmt. energy and nat. resour.; Champaign.
- /162/ PRITCHETT, J. W. (1980): *Geothermal reservoirs engineering computer code comparison and validation calculations using MUSHRM and CHARGR geothermal reservoir simulators*.- *System Science and Software SSS-R-81-4749*; San Francisco.

- /163/ RAITHBY, G. D., HOLLANDS, K. G. T. (1985): Natural Convection.- in: ROHSENOW, W. M., HARTNETT, J. P., GANIC, E. N. ed. (1985): Handbook of Heat Transfer Fundamentals.- Chapter 6, 1-94, McGraw-Hill Book Company; New York.
- /164/ RASMUSSEN, R. M., LEVIZZANI, V., PRUPPACHER, H. R. (1982): A numerical study of heat transfer through a fluid layer with recirculating flow between concentric and excentric spheres.- Pure and appl. geophysics, 120: 702-720; Basel.
- /165/ REISENAUER, A. E., KEY, K. T., NARASIMHAN, T. N., NELSON, R. W. (1982): TRUST: A computer program for variably saturated flow in multidimensional, deformable media.- NUREG/CR-2360, PNL-3975, RU, U.S. Nuclear Regulatory Commission; Washington.
- /166/ REED, J. E. (1985): Digital model for simulating steady-state ground-water and heat flow.- U.S. Geological Survey - Water-Resources Investigations Report 85-4248.
- /167/ REMSON, I., HORNBERGER, G. M., MOLZ, F. J. (1971): Numerical Methods in Subsurface Hydrology with an introduction to the finite element method.- Wiley Interscience, New York.
- /168/ ROBINSON, P. C. (1984): Connectivity, Flow and Transport in Network Models of Fractured Media.- Ph. D. thesis Oxford University.
- /169/ ROSENBERG, D. U. von (1969): Methods for the Numerical Solution of Partial Differential Equations.- American Elsevier; New York.
- /170/ ROSS, B., KOPLIK, C. M. (1979): A New Numerical Method for Solving the Solute Transport Equation.- Water Resources Research, Vol. 15, No. 4, pp. 949-955.
- /171/ ROUVE, G., PELKA, W. (1981): Aquifer thermal energy storage: Experimental and theoretical investigations.- Proc. Int. Conf. IEA; Springer, Berlin.
- /172/ RUNCHAL, A. K. (1972): Convergence and Accuracy of Three Finite Difference Schemes for a Two-Dimensional Conduction and Convection Problem.- Int. J. for Numerical Methods in Engineering, Vol. 4, 541-550
- /173/ RYBACH, L. (1973): Wärmeproduktionsbestimmungen an Gesteinen der Schweizer Alpen.- Beiträge zur Geologie der Schweiz, Geotechn. Serie, 51
- /174/ SANFORD, W. E. (1985): A two-constituent solute-transport model for groundwater having variable density.- U.S. Geological Survey - Water-Resources Investigations Report 85-4279.
- /175/ SANNER, B., KNOBLICH, K., BREHM, D., EINIG, M. (1986): Zur geologischen und hydrogeologischen Situation am Standort der Wärmepumpen-Veruchsanlage Schöffengrund-Schwalbach.- Z. angew. Geowiss., No. 7, S. 29-42, Gießen.
- /176/ SANNER, B., BREHM, D., KNOBLICH, K. (1986b): Erstes Betriebsjahr der Erdsonden-Forschungsanlage Schwalbach (1985/1986).- Z. angew. Geowiss., No. 7, S. 43-60, Gießen.
- /177/ SASS, J. H., STONE, C., MONROE, R. J. (1983): Thermal conductivity determination in solid rock - A comparison between a steady-state divided-bar application and a commercial transient line-source device.- Jour. volcan. and geotherm. res., 20.
- /178/ SASS, J. H., LACHENBRUCH, A. H., MONROE, R. J. (1971): Thermal conductivity of rocks from measurements on fragments and its application to heat-flow determination.- Journal of geophysical research, 76, No. 14: 3391-3401.
- /179/ SCHAETZLE, W. (1980): Thermal energy storage in aquifers.- 109 S.; N. Y. (Pergamon).
- /180/ SCHEIDEGGER, A. E. (1974): The physics of flow through porous media.- 3. ed.; University of Toronto Press, Toronto.
- /181/ SCHENK, P. F. (1981): Wärmegewinnung aus dem Grundwasser in Schleswig-Holstein.- Z. dt. geol. Ges., 132: 745-749; Hannover.
- /182/ SCHMIDT, E. (1969): Properties of Water and Steam in SI-Units.- Springer.
- /183/ SCHNEIDER, P. J. (1985): Mathematical Methods.- in: ROHSENOW, W. M., HARTNETT, J. P., GANIC, E. N. ed. (1985): Handbook of Heat Transfer Fundamentals.- Chapter 2, 1-67, McGraw-Hill Book Company; New York.
- /184/ SCHNEIDER, P. J. (1985): Conduction.- in: ROHSENOW, W. M., HARTNETT, J. P., GANIC, E. N. ed. (1985): Handbook of Heat Transfer Fundamentals.- Chapter 4, 1-187, McGraw-Hill Book Company; New York.
- /185/ SCHWANNER, I., HOPKIRK, R. (1982): Die vertikale Erdsonde als Energiebeschaffungssystem.- Studie EPA-Nr. 217. 184; Zürich (Bundesamt f. Energiewirtschaft).
- /186/ SCHWILLE, F., ZAUTER, S. (1981): Grundwassertemperaturmessungen im Einflüßbereich von Oberflächengewässern.- Z. dt. geol. Ges., 132: 751-765, 20 Abb.; Hannover.
- /187/ SMITH, G., YAMAUCHI, T. (1950): Thermal conductivity of soils for design of heat pump installations.- Transact. Am. Soc. Heating Eng., 56: 355-370.
- /188/ SOCHELNIKOV, V. (1981): Convergence of sequential approximations in the integral equation for a heat field in an inhomogeneous medium.- Earth physics, 17: 629-630.
- /189/ SOMMARUGA, C. (1983): High and low enthalpy geothermal resources exploration: models, strategies, and reality.- EUR 8583 EN, 50 S.; Brüssel (CEC).

- /190/ SPALDING, D. B. (1979): A novel finite difference formulation for differential expressions involving both first and second derivatives.- *Int. J. Numer. Methods Engr.*, Vol. 4, 551-559.
- /191/ SPOSITO, G. (1986): The "Physics" of Soil Water Physics.- *Water Resources Research*, Vol. 22, No. 9, pp. 83S-88S.
- /192/ STONE, H. L. (1968): Iterative Solution of Implicit Approximations of Multidimensional Partial Differential Equations.- *SIAM J. Numer. Anal.*, Vol. 5, No. 3.
- /193/ SUN, N.-Z., YEH, W. W.-G. (1983): A Proposed Upstream Weight Numerical Method for Simulating Pollutant Transport in Groundwater.- *Water Resources Research*, Vol. 19, No. 6, pp. 1489-1500.
- /194/ SVEC, O. J. (1985): R & D needs to realize potential of ground heat source systems.- *Proc. 3. Int. Conf. Energy Stor.*; Toronto.
- /195/ SVENSSON, G. (1983): Energy-Geology investigations.- *Proc. Int. conf. subs. heat storage*, 1+2: 29-35; Stockholm (Swed. coun. build. res.).
- /196/ SVENSSON, T. (1983): Swed. research on environmental impact of heat storage and absorption in earth, water and rocks.- *Proc. int. conf. subsurf. heatstor*, 1: 36-41; Stockholm (Swed. coun. build. res.).
- /197/ SYKES, J., LANTZ, R., PAHWA, S., WARD, D. (1982): Numerical simulation of thermal energy storage experiment conducted by Auburn University.- *Ground water*, 20: 569-577; Washington.
- /198/ TAYLOR, G., LUTHIN, J. (1978): A model of coupled heat and moisture transfer during soil freezing.- *Can. Geotech. J.*, 15: 548-555.
- /199/ THEIS, C. V. (1935): The relation between the lowering of the piezometric surface and the rate and duration of discharge of a well using groundwater storage.- *Trans. Am. Geophys. Union, Ann. Meet.*, 16th, 519-524.
- /200/ TORAK, L. J. (1982): Modifications and corrections to the finite-difference model for simulation of three-dimensional ground-water flow.- *U.S. Geological Survey Water Resources Investigations* 82-4025.
- /201/ TORRANCE, K. E. (1985): Numerical Methods in Heat Transfer.- in: ROHSENOW, W. M., HARTNETT, J. P., GANIC, E. N. ed. (1985): *Handbook of Heat Transfer Fundamentals*- Chapter 5, 1-85, McGraw-Hill Book Company; New York.
- /202/ TOULOUKIAN, Y. S., LILEY, P. E., SAXENA, S.C. (1970): Thermophysical properties of matter.- Vol. 3 Thermal conductivity - Nonmetallic liquid and gases. IFI-Plenum Press; New York.
- /203/ TRECOTT, P. C. (1975): Documentation of Finite-Difference Model for Simulation of Three-Dimensional Ground-Water Flow.- *U.S. Geological Survey Open-File Report* 75-438.
- /204/ TRECOTT, P. C., LARSON, S. P. (1976): Documentation of Finite-Difference Model for Simulation of Three-Dimensional Ground-Water Flow.- Supplement to Open-File Report 75-438; U.S. Geological Survey Open-File Report 76-591.
- /205/ TROEDSSON, T. (1983): Ecological effects of soil-heat extraction in soil and vegetation.- *Proc. int. conf. subs. heat storage*, 685-689; Stockholm (Swed. coun. build. res.).
- /206/ TSANG, C. F. (1983): Aquifer storage simulation in theory and practice.- *Proc. int. conf. subs. heat storage*, 1: 116-125; Stockholm (Swed. coun. build. res.).
- /207/ VAIL, L., KINCAID, C. (1983): A simple areal flow model.- *Proc. int. conf. subs. heat storage*, 530-535; Stockholm (Swed. coun. bild. res.).
- /208/ VOIGT, H. HAEFNER, F. (1984): Erkundung und Dimensionierung von Anlagen zur Wärmegewinnung aus Grund- und Tiefenwasser.- *Zeitschrift f. ang. Geologie*, 30: 62-68; Berlin.
- /209/ VOSS, C. I. (1984): A finite-element simulation model for saturated-unsaturated, fluid-density-dependent ground-water flow with energy transport or chemical-reactive single-species solute transport.- *U.S. Geological Survey - Water-Resources Investigations*
- /210/ WALSH, J. B., DECKER, E. R. (1966): Effect of Pressure and Saturating Fluid on the Thermal Conductivity of Compact Rock.- *J. Geophys. Res.*, Vol. 71, No. 12, 3053-3061.
- /211/ WANG, H. F. Y., ANDERSON, M. P. (1982): Introduction to groundwater modeling.- *Freeman and Company*; San Francisco.
- /212/ WANG, H. F. Y., TSANG, C.F., STERBENTZ, R. A. (1983): The State of the Art of Numerical Modeling of Thermohydrologic Flow in Fractured Rock Masses.- *Environ. Geol.*, 4,133 - 199.
- /213/ WERNER, D., BALKE, K. (1977): Die Wärmeausbreitung in der Umgebung eines Kühlwasser-Sickerbrunnens.- *gwf-wasser*, 118: 528-531; München.
- /214/ WIGLEY, T. (1977): WATSPEC: A computer program for determining the equilibrium specification of aqueous solutions.- *Techn. Bull.* 20; Norwich (British geomorph. res. group).
- /215/ WILLHITE, G. P., WAGNER, J., SIMONPIETRI, F., STOKER, J. (1974): Disposal of heat water through ground water system.- *PB-236 302*, Vol. I.: Technical and economic feasibility; Kansas Water Resources Research Institute.
- /216/ WILLHITE, G. P., WAGNER, J. (1974): Disposal of heat water through ground water system.- *PB-236 303*, Vol.II.: User's Manual, Numerical simulation of fluid flow and heat transfer in groundwater system.; Kansas Water Resources Research Institute.

## Anhang 1:

### Physikalische Eigenschaften

#### Wasser:

Molekulargewicht:  $M = 18.0153 \text{ g/mol}$

Dichte:

Die Dichte von Wasser nimmt mit steigender Temperatur ab. Die aus /120/ entnommenen Tabellenwerte lassen sich durch folgende Beziehung approximieren:

$$\rho_w = 0.9998966 + 0.4545388 \cdot 10^{-4} T - 0.7095728 \cdot 10^{-5} T^2 + 0.2760997 \cdot 10^{-7} T^3 \quad [\text{g/cm}^3] \quad (\text{A.1.00})$$

Da im hier hauptsächlich betrachteten Temperaturbereich von 0–15 °C die Dichteunterschiede relativ gering sind, wurde allen Berechnungen eine konstante Dichte von 1000 kg/m<sup>3</sup> zugrunde gelegt. Bei geothermischen Fragestellungen oder z.B. bei der Simulation einer Warmwasserinjektion in einen Aquifer ist die Berücksichtigung der Dichteunterschiede wegen des Effektes der gravitativ bedingten Konvektion zwingend erforderlich.<sup>1</sup>

Wärmeleitfähigkeit:

Über die Temperaturabhängigkeit der Wärmeleitfähigkeit von Wasser werden in der Literatur unterschiedliche Auffassungen vertreten. Nach /202/ läßt sich die Wärmeleitfähigkeit von Wasser durch die folgende Beziehung berechnen:

$$K_w = \frac{-1390.53 + 15.1937 T - 0.0190398 T^2}{4.1868 \cdot 10^{-4}} \quad [\text{W/mK}] \quad (\text{A.1.01})$$

<sup>1</sup> mit dieser Thematik beschäftigen sich eine Reihe von Publikationen, z.B. /2/, /24/, /36/, /46/, /51/, /100/, /102/, /121/, /163/, /165/, /174/, /209/ und /212/

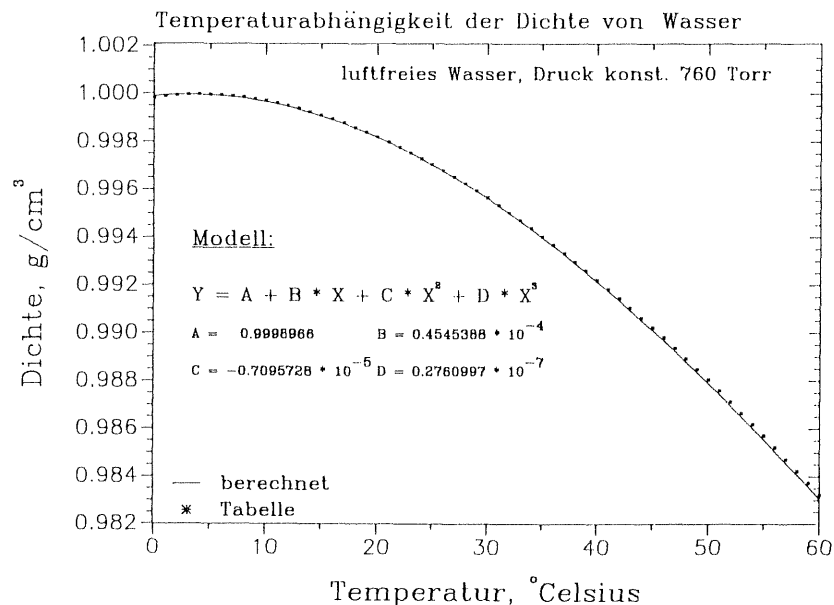


Abb. A.1.1: Temperaturabhängigkeit der Dichte von luftfreiem Wasser bei 760 Torr

wobei  $T$  = Temperatur in  $K$ , während NEISS(1982) für die Tabellenwerte von SCHMIDT(1969) die parabolische Approximation angibt:

$$K_w = 0.569 + 1.88389 \cdot 10^{-3} T - 7.7222 \cdot 10^{-6} T^2 \quad [W/mK] \quad (A.1.02)$$

wobei  $T$  = Temperatur in  $^{\circ}C$ .

Insgesamt sind die temperaturbedingten Änderungen der Leitfähigkeiten relativ gering, sodaß alle Berechnungen mit einer konstanten Leitfähigkeit von  $0.57 W/mK$  durchgeführt wurden.

Wärmekapazität:

Im Temperaturbereich von 0 bis  $20^{\circ}C$  nimmt die Wärmekapazität mit steigender Temperatur ab. Die von /120/ angegebenen Tabellenwerte lassen sich durch folgende Beziehung hinreichend genau reproduzieren:

$$C_w = 4216.9 - 3.209 T + 0.0739 T^2 \quad [J/kgK] \quad (A.1.03)$$

Die temperaturbedingte Variation der Wärmekapazität wird im Modell als vernachlässigbar angesehen, weshalb alle Berechnungsergebnisse auf einem Wert von  $4200 J/kgK$  basieren.

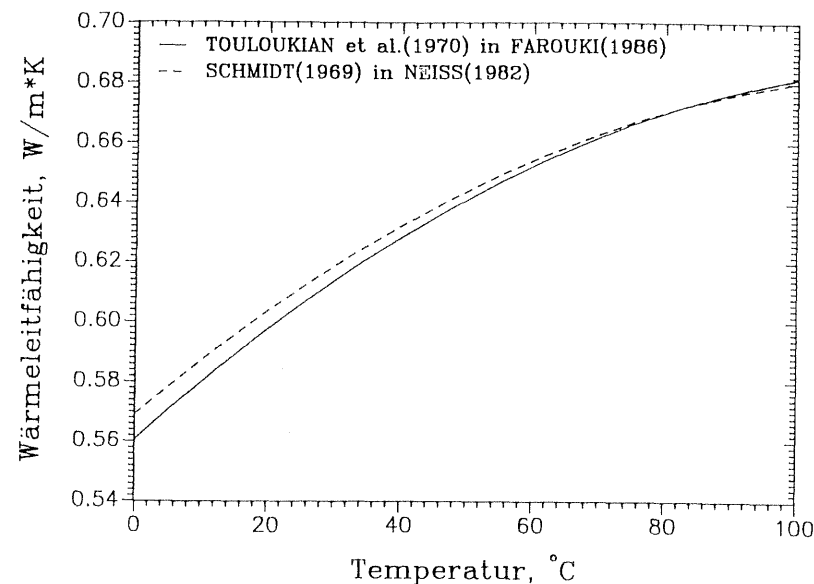


Abb. A.1.2: Temperaturabhängigkeit der Wärmeleitfähigkeit von Wasser für die Verfahren nach NEISS(1982) und TOULIKIAN(1970)

Viskosität:

Die kinematische Viskosität von Wasser ist sehr stark von der Temperatur abhängig. Die Tabellenwerte von /120/ lassen sich durch die folgende Beziehung recht gut reproduzieren:

$$\mu_{kin} = 0.88977 \left( 1 + 1.70623 \cdot e^{-0.03406 T} \right) - 0.635 \quad [mm^2/s] \quad (A.1.04)$$

wobei  $T$  die Temperatur in  $^{\circ}C$ .

Die hydraulische Leitfähigkeit eines porösen Mediums verhält proportional zur Fluidichte und umgekehrtproportional zur Viskosität des durchströmenden Fluids, sodaß die intrinsische Permeabilität  $\kappa$  wie folgt definiert werden kann:

$$\kappa = \frac{\mu_{dyn} k}{\rho g} \quad (A.1.05)$$

Die in Gleichung A.1.04 dargestellte Temperaturabhängigkeit kann im Modell zwar berücksichtigt werden, für die Temperaturbereiche der vorgestellten Simulationen schienen die Änderungen im Vergleich zur

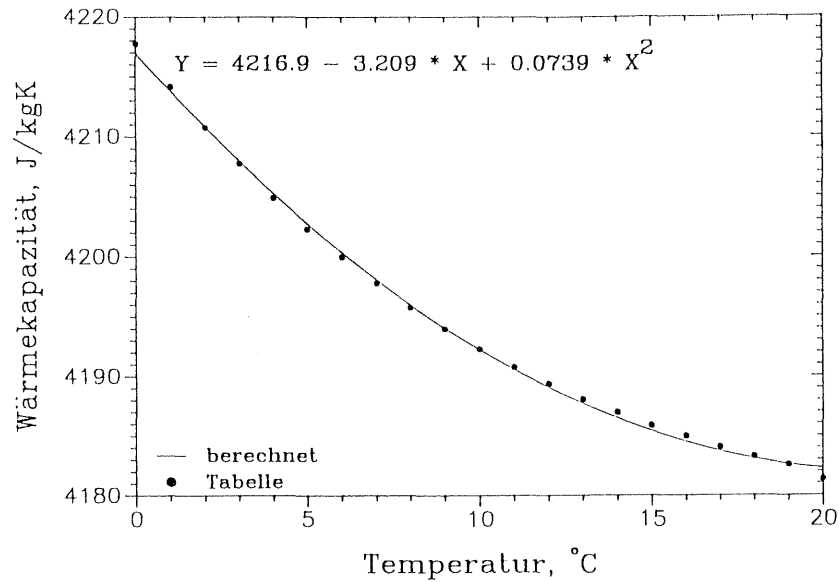


Abb. A.1.3: Temperaturabhängigkeit der Wärmekapazität von Wasser

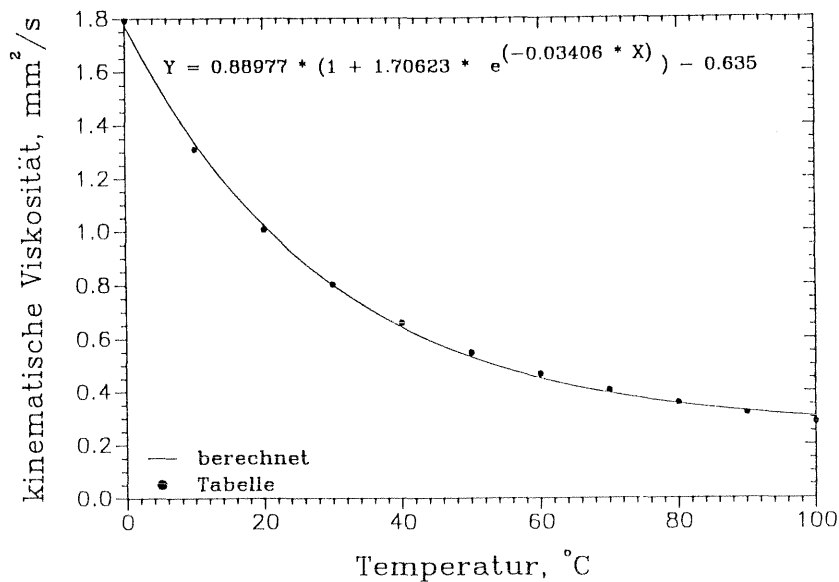


Abb. A.1.4: Temperaturabhängigkeit der kinematischen Viskosität

Genauigkeit, mit der man durch Feld- oder Laborversuche den  $k_f$ -Wert bestimmen kann, zu gering, sodaß generell von einem konstanten Durchlässigkeitsbeiwert ausgegangen wurde.

Schmelzwärme:

Die molare Schmelzwärme von Wasser beträgt etwa  $6030 \text{ J/mol}$ , /120/, oder — unter Berücksichtigung des oben angeführten Molekulargewichtes von Wasser — etwa  $3.336 \cdot 10^5 \text{ J/kg}$

Eis:

Dichte:

Die Abhängigkeit der Dichte des Eises von der Temperatur wurde im Modell vernachlässigt. Ein Wert von  $\rho_e = 917 \text{ kg/m}^3$  erschien hinreichend genau.

Wärmekapazität:

Die Wärmekapazität von Eis läßt sich nach /145/ durch die Beziehung:

$$C_e = 2110 + 7.79 T \quad [\text{J/kgK}] \quad (\text{A.1.06})$$

wobei  $T = \text{Temperatur in } ^\circ\text{C}$ , berechnen. Dieser Ansatz stimmt recht gut mit den Angaben von HODGEMAN(1955)<sup>2</sup> überein:

$$C_e = 2114 + 7.58 T \quad [\text{J/kgK}] \quad (\text{A.1.07})$$

mit  $T = \text{Temperatur in } ^\circ\text{C}$ , überein. Die relativ geringen Änderungen innerhalb des in der vorliegenden Untersuchung betrachteten Temperaturbereiches rechtfertigten jedoch nicht den immensen zusätzlichen Rechenaufwand, sodaß alle Berechnungen mit einer konstanten Wärmekapazität von  $2114 \text{ W/mK}$  durchgeführt wurden.

Wärmeleitfähigkeit:

Die Wärmeleitfähigkeit von vielen kristallinen Nichtmetallen läßt sich durch die Beziehung

$$K_{nm} = \frac{a}{T^n} \quad [\text{W/mK}] \quad (\text{A.1.08})$$

<sup>2</sup> HODGEMAN (1955): Handbook of Chemistry and Physics.

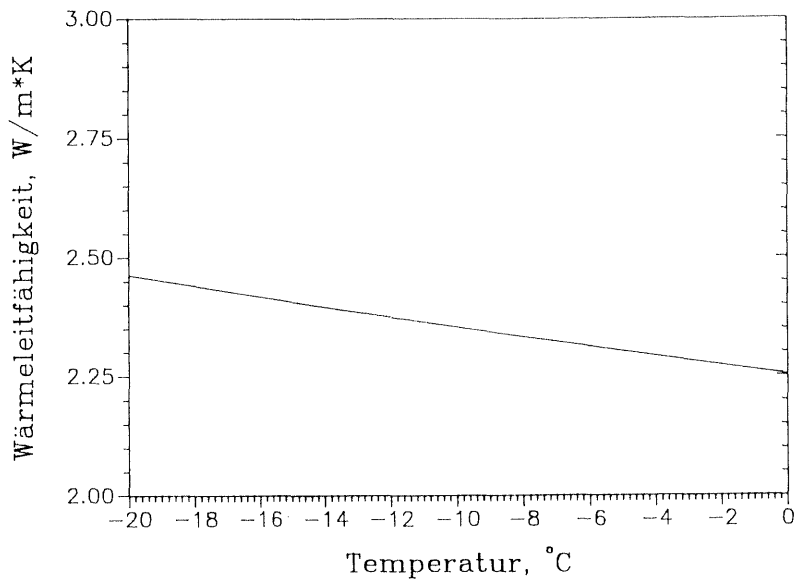


Abb. A.1.5: Abhängigkeit der Wärmeleitfähigkeit des Eises von der Temperatur, nach NEISS(1982)

wobei  $a$  und  $n$  materialspezifische Größen und  $T$  die Temperatur in *Kelvin* bedeuten, abschätzen. Nach /145/ läßt sich demnach für Eis  $a$  mit 1631.24 und  $n$  mit 1.174 beziffern.

CARSLAW & JAEGER (1959), /38/, geben einen Wert von 2.22  $W/mK$  (bei 0 °C) an. Da die Temperaturabhängigkeit innerhalb des betrachteten Temperaturbereiches relativ gering ist, wurde allen Berechnungen ein Wert von 2.25  $W/mK$  zugrundegelegt.

### Gesteine:

#### Wärmeleitfähigkeit

Die an der Erdoberfläche vorkommenden Gesteine weisen sehr unterschiedliche Wärmeleitfähigkeiten auf. Dies hängt bei porenarmen Gesteinen vornehmlich mit den stark variierenden Quarzgehalten zusammen, da Quarz mit 7.7  $W/mK$ , /64/, zu den am besten wärmeleitenden Mineralen gehört. Die Wärmeleitfähigkeit der Gesteine ist sowohl druck- als auch temperaturabhängig, allerdings in so geringem Maße, daß die Änderungen

innerhalb des hier hauptsächlich betrachteten P/T - Bereiches auf dem Niveau der Meßgenauigkeit liegen. Die Erhöhung der Wärmeleitfähigkeit korreliert mit der Temperatur negativ und mit dem Druck positiv, /91/. Speziell die Metamorphite werden durch eine z.T. sehr ausgeprägte Anisotropie der Wärmeleitfähigkeit geprägt, sodaß das Verhältnis parallel/senkrecht zur Foliation gemessener Werte leicht die Zahl 1.5 übersteigen kann. Ungeachtet dessen werden im folgenden einige Literaturwerte für wichtige Magmatite, Metamorphite und Sedimentgesteine zusammengestellt, bei denen die Meßtemperaturen zwischen 0 und 30 °C variierten.

Tab. A.1.1 Wärmeleitfähigkeiten wichtiger Erguß- und Tiefgesteine

Gestein	Wärmeleitfähigkeit [ $W/mK$ ]	Quelle
Granit	2.17-3.43	/A01/
Syenit	1.85	/A01/
Diorit	2.31	/A01/
Anorthosit	1.75	/A01/
Gabbro	2.51	/A01/
Dunit	5.19	/A01/
Porphy	3.34	/A01/
Basalt	1.80-2.17	/A01/
Diabas	2.20	/A01/
Trachyt	2.30	/A01/
Tuffe	0.36	/A01/

Eine sehr detaillierte Beschreibung von Wärmeleitfähigkeitsmessungen an magmatischen Gesteinen mit unterschiedlichen Meßverfahren kann /87/ entnommen werden.

Tab. A.1.2 Wärmeleitfähigkeiten wichtiger metamorpher Gesteine

Gestein	Wärmeleitfähigkeit [W/mK]	Quelle
Gneis	1.80-2.81	/A01/
Gneis	2.30-4.00	/A04/
Metabasite	2.40-2.60	/A04/
Glimmerschiefer	2.93	/A01/
Schiefer	2.05	/A01/
Tonschiefer	0.70-1.70	/A03/
Marmor	2.09-3.22	/A01/
Quarzit	5.74	/A01/

Tab. A.1.3 Wärmeleitfähigkeiten wichtiger Sedimentgesteine

Gestein	Wärmeleitfähigkeit [W/mK]	Quelle
Konglomerat	2.09	/A01/
Sandstein	1.46-4.19	/A01/
Sandstein, trocken	0.88	/A02/
schluffiger Sand	0.69	/A02/
Siltstein	0.68	/A02/
Sand, wasserfrei	0.29	/A01/
Sand, 10% Wasser	1.04	/A01/
Sand, fein, trocken	0.63	/A02/
Sand, grob, trocken	0.55	/A02/
Grauwacke, quarzreich	3.00-3.40	/A03/
Kalkstein, kompakt	2.10-3.35	/A01/
Kalkstein, porös	1.05-2.30	/A01/
Kalkstein, (-)	1.70	/A02/
Dolomit	5.00	/A01/
Mergel	0.92-2.22	/A01/
Tone	0.92-1.84	/A01/
Schieferton	0.59-2.76	/A01/
Lehm, lufttrocken	0.25	/A01/
Lehm, wassergesättigt	0.86	/A01/

/A01/ LANDOLT & BÖRNSTEIN (1967): 6. Auflage, Band III

/A02/ FAROUQ ALI, S. M. (1970): Oil Recovery by Hot Water Flooding.- Producers Publishing Co., Inc. Bradford, PA.

/A03/ unveröffentlichte Messungen am Institut für Angewandte Geowissenschaften der Justus-Liebig-Universität Gießen

/A04/ HUENGES, E. et al. (1989): Geophysik.- in: EMMERMANN, R. et al. (ed.) (1989): KTB-Report 89/2 (in Druck)

Bei bestimmten Fragestellungen kann jedoch die Berücksichtigung der Temperatur und Druckabhängigkeit der Wärmeleitfähigkeit von besonderem Interesse sein. Deshalb wurde eine polynomische, eine exponentielle sowie eine reziproke Korrekturmöglichkeit vorgesehen. Das letztere Verfahren berücksichtigt — im Gegensatz zu den ersten beiden Verfahren — neben der Temperatur auch den Druck, dem ein Gestein ausgesetzt ist:

$$K_{korrr} = K_o a e^{(bT)} + K_o c \quad (A.1.09)$$

$$K_{korrr} = K_o + K_o \left( T \left( a + T(b + Tc) \right) \right) \quad (A.1.10)$$

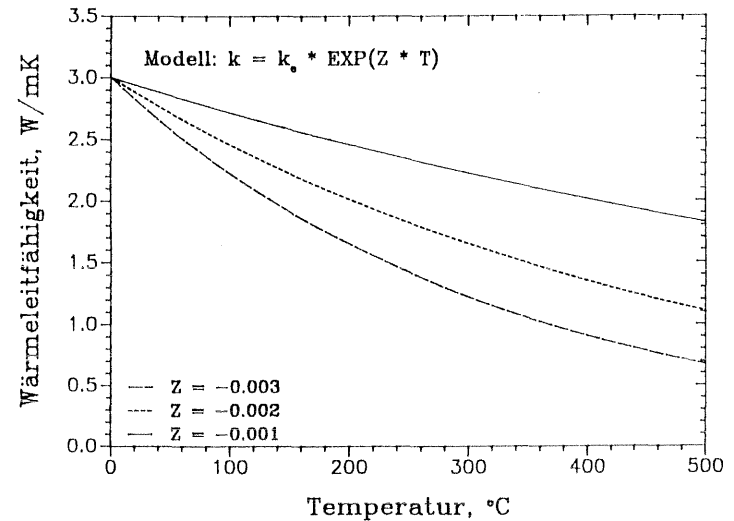


Abb. A.1.6: Temperaturkorrektur der Wärmeleitfähigkeit nach dem exponentiellen Ansatz



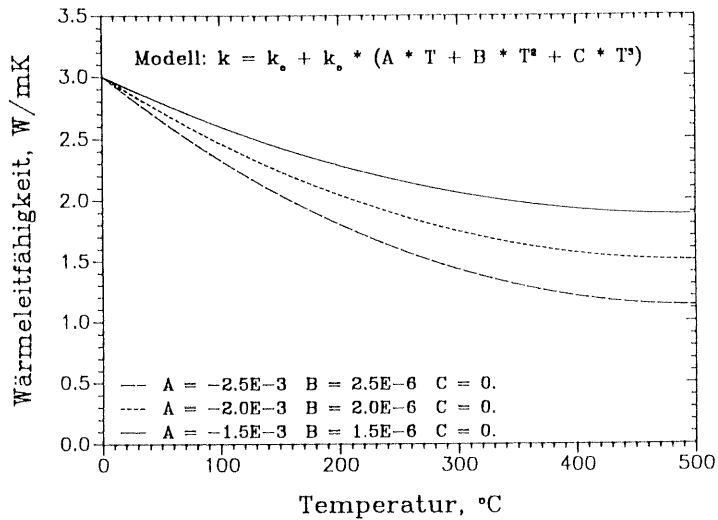


Abb. A.1.7: Temperaturkorrektur der Wärmeleitfähigkeit nach dem polynomi- schen Ansatz

In der Literatur sind sehr wenige Daten über die Temperaturabhängig- keit dokumentiert. LANDOLT & BÖRNSTEIN (1967) publizierten die Wärmeleitfähigkeiten bei unterschiedlichen Temperaturen von einigen Tie- fengesteinen. Für einen Granit lassen sich demnach die beiden Approxima- tionen, wie in Abb. A.1.8 dargestellt, formulieren.

In größeren Tiefen erlangt die Druckabhängigkeit zunehmende Bedeu- tung. Für einen Temperaturbereich bis 200 °C und einen Druck bis 60 MPa (ca. 2200 m) konnten /91/ mit der bei /34/ beschriebenen Apparatur die Wärmeleitfähigkeiten von 18 Amphibolit- und 11 Disthen - Sillimanit - Gneis Proben bestimmen und für die gemessenen Werte folgende numeri- sche Approximation ermitteln:

$$K_{korrr} = \frac{K_o}{1 + K_o \cdot a \cdot (T - 20)} + 0.027 \cdot b \cdot (z - 400) \quad (A.1.11)$$

es bedeuten:

$K_o$	Wärmeleitfähigkeit bei 20 °C und 10 MPa
$z$	Tiefe in m unter Geländeoberkante
$a, b$	materialspezifische Größen

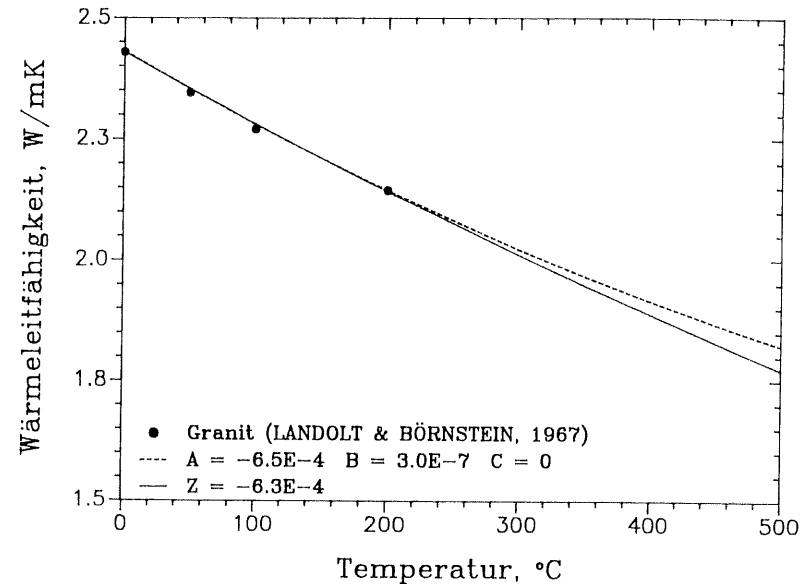


Abb. A.1.8: Temperaturabhängigkeit der Wärmeleitfähigkeit von Granit und ihre numerische Approximation

Nimmt man für einen Amphibolit und einen Disthen-Sillimanit-Gneis eine Wärmeleitfähigkeit (WLF) von jeweils 3 W/mK bei 20 °C und 10 MPa an, so resultieren nach Gl.(A.1.11) die in den Abbildungen A.1.9 und A.1.10 dargestellten Kurven.

### Effektive Wärmeleitfähigkeit

Neben einer möglichst genauen Kenntnis der Wärmeleitfähigkeit des Festkornanteiles benötigt man für die Berechnung des Wärmetransportes in Fest- und Lockergesteinen vor allem auch Informationen über Anteil des Gesamtporenraumes und dessen Verteilung. Zu den beiden letztgenannten Einflußgrößen existieren bereits eine Fülle von Detailuntersuchungen, /64/, /70/, /78/, /101/, /210/, /217/.

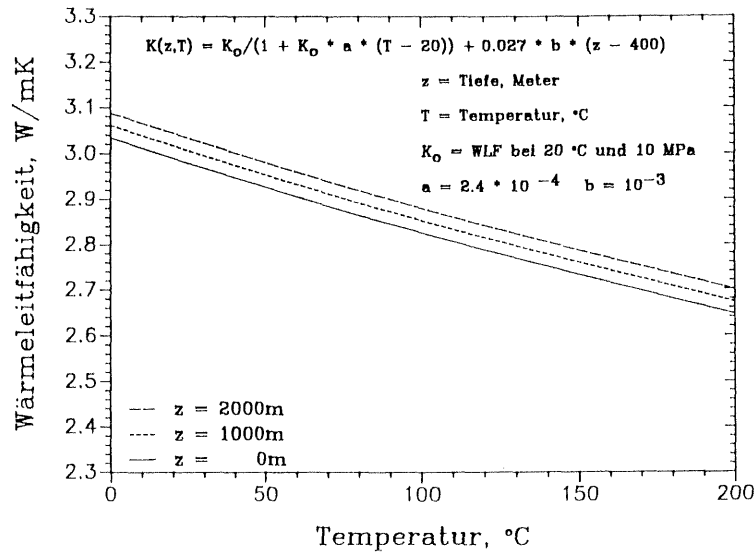


Abb. A.1.9: Druck- und Temperaturabhängigkeit der Wärmeleitfähigkeit von Amphibolit.

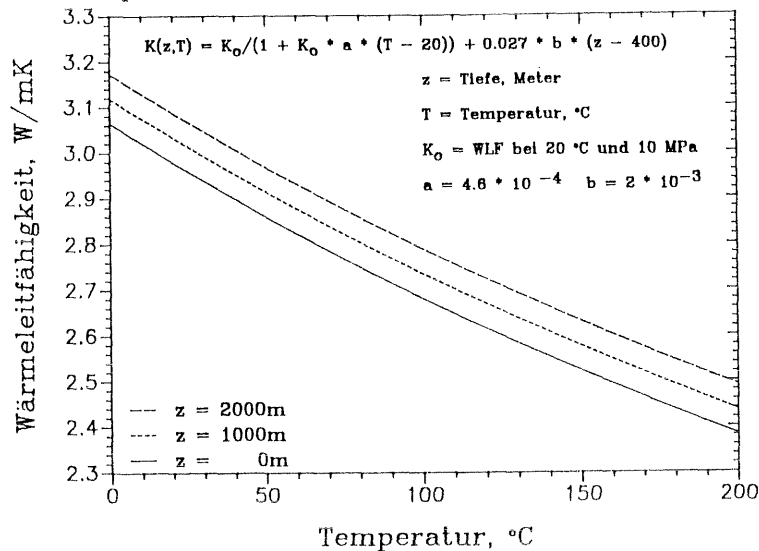


Abb. A.1.10: Druck- und Temperaturabhängigkeit der Wärmeleitfähigkeit von Disthen-Sillimanit-Gneis.

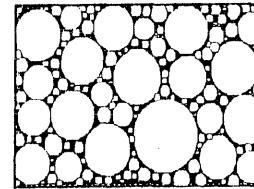
Im hier vorgestellten Modell wurden daher drei Näherungsverfahren zur

Bestimmung der effektiven Wärmeleitfähigkeit berücksichtigt.<sup>3</sup> Bei dem ersten Verfahren werden die Wärmeleitfähigkeiten der Porenraumfüllung und der Gesteinsmatrix,  $K_p$  und  $K_g$ , gewichtet, arithmetisch gemittelt:

$$K_{eff} = (1 - \Phi_g) K_g + \Phi_g K_p \quad (A.1.12)$$

Die beiden von /210/ vorgeschlagenen Verfahren tragen der unterschiedlichen Porenraumverteilung Rechnung. Demnach ist bei der Einfluß der Porenraumfüllung auf die effektive Wärmeleitfähigkeit bei Lockergesteinen, z.B. Kiesen und Sanden, am größten. Bei vielen Festgesteinen liegen die Poren als isolierte Hohlräume vor, sodaß sich die effektive Wärmeleitfähigkeit maßgeblich von der der Gesteinsmatrix ableitet.

Modell 1:



$$K_{eff} = K_g \left[ 1 - \frac{\Phi_g (1 + 2 \frac{K_p}{K_g}) (1 - \frac{K_p}{K_g})}{\Phi_g (1 - \frac{K_p}{K_g}) + 3 \frac{K_p}{K_g}} \right]$$

Modell 2:



$$K_{eff} = K_p \left[ 1 - \frac{3 \Phi_g (1 - \frac{K_p}{K_g})}{2 + \Phi_g + \frac{K_p}{K_g}} \right]$$

Abb. A.1.11: Näherungsverfahren zu Bestimmung der effektiven Wärmeleitfähigkeit nach /210/.

<sup>3</sup> In der Literatur werden natürlich wesentlich mehr Berechnungsverfahren beschrieben. Die meisten Methoden basieren auf — z.T. nicht sehr einfach nachzuvollziehenden — empirischen Annahmen. Der interessierte Leser sei daher auf FAROUKI(1986) verwiesen, der eine nahezu vollständige Übersicht aller dokumentierten Berechnungsmethoden gibt.

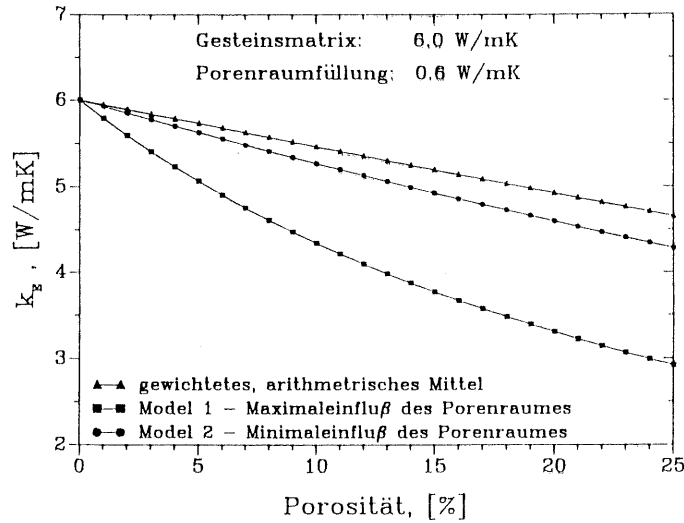


Abb. A.1.12: Einfluß der Porenraumverteilung auf die effektive Wärmeleitfähigkeit nach /210/ im Vergleich zum gewichteten arithmetischen Mittel.

Für den Fall, daß die Porenräume mit einem Zwei- oder Mehrphasengemisch gefüllt sind, wird die Wärmeleitfähigkeit der Porenraumfüllung durch gewichtete Mittelwertbildung berechnet.

Wasser - Luft - Gemisch:

$$K_p = (1 - \Psi)K_l + \Psi K_w \quad (A.1.13)$$

Wasser - Eis - Gemisch:

$$K_p = X_e K_e + X_w K_w \quad (A.1.14)$$

Wasser - Eis - Luft - Gemisch:

$$K_p = (1 - \Psi)K_l + \Psi (X_e K_e + X_w K_w) \quad (A.1.15)$$

### Wärmekapazität:

Betrachtet man lediglich den Kornanteil, so variieren die Wärmekapazitäten der häufigsten Gesteinsarten wesentlich geringer als deren Wärmeleitfähigkeiten. Bei sehr porösen Gesteinen spielt jedoch der Gesamtporenraum und der Wassersättigungsgrad eine entscheidende Rolle, da Wasser über eine etwa 5-fach größere Wärmekapazität verfügt. Die Wärmekapazität der meisten Gesteine korreliert positiv mit der Temperaturerhöhung. An Pulverpräparaten kann mittels eines Thermoanalytensystems die Temperaturabhängigkeit der Wärmekapazität recht genau gemessen werden.

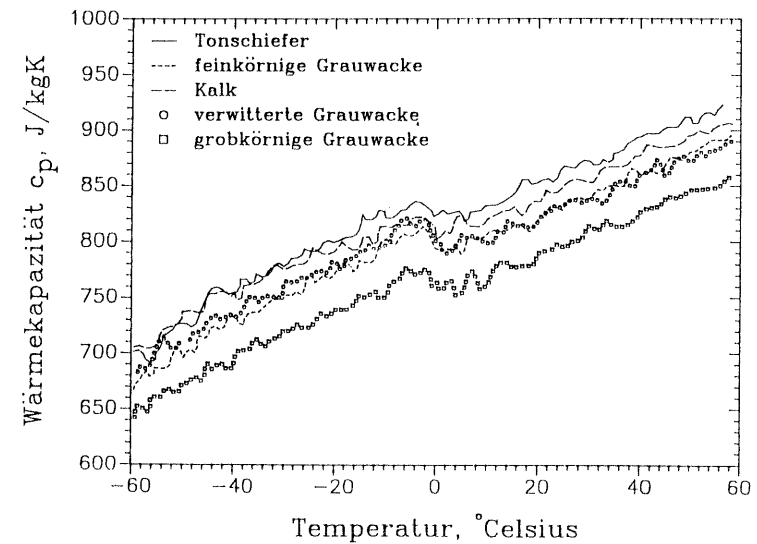


Abb. A.1.13: Temperaturabhängigkeit der Wärmekapazität einiger paläozoischer Sedimentgesteine, Messungen mit dem METTLER Thermoanalytensystem TA3000

Für den in der vorliegenden Arbeit betrachteten Temperaturbereich erschienen die Änderungen im Vergleich zu der Genauigkeit, mit der man den Gesamtporenraum und den Wassersättigungsgrad bestimmen kann, zu gering, sodaß die Wärmekapazität des Gesteins als konstant angenommen wurde. Im folgenden werden für die wichtigsten Magmatite, Metamorphite und Sedimentgesteine die Wärmekapazitäten tabelliert. Die Meßtemperatur beträgt zwischen 0 und 30 °C.

Tab. A.1.4 Wärmekapazitäten wichtiger Erguß- und Tiefengesteine

<i>Gestein</i>	<i>Wärmekapazität [J/kgK]</i>	<i>Quelle</i>
Granit	800-816	/A01/
Syenit	831	/A01/
Diorit	810	/A01/
Gabbro	720 <sup>4</sup>	/A01/
Porphyr	825	/A01/
Basalt	858	/A01/
Diabas	700	/A01/
Trachyt	870	/A01/
Tuffe	1240	/A01/

Tab. A.1.5 Wärmekapazitäten wichtiger metamorpher Gesteine

<i>Gestein</i>	<i>Wärmekapazität [J/kgK]</i>	<i>Quelle</i>
Gneis	820-895	/A01/
Schiefer	707	/A01/
Tonschiefer	835	/A03/
Marmor	750	/A01/
Quarzit	700	/A01/

<sup>4</sup> aus dem Mineralbestand berechnet

Tab. A.1.6 Wärmekapazitäten wichtiger Sedimentgesteine

<i>Gestein</i>	<i>Wärmekapazität [J/kgK]</i>	<i>Quelle</i>
Konglomerat	875	/A01/
Sandstein	866	/A01/
Sandstein, trocken	766	/A02/
schluffiger Sand	846	/A02/
Siltstein	854	/A02/
Sand, 100 °C getrocknet	850	/A01/
Sand, luftgetrocknet	873	/A01/
Sand, fein, trocken	766	/A02/
Sand, grob, trocken	766	/A02/
Grauwacke, feinkörnig	790	/A03/
Grauwacke, grobkörnig	770	/A03/
Grauwacke, verwittert	800	/A03/
Massenkalk	820	/A01/
Kalkstein	908	/A01/
Kalkstein, (-)	846	/A02/
Mergel	866	/A01/
Tone	800	/A01/
Torf, 100 °C getrocknet	2123	/A01/
Torf, lufttrocken	2215	/A01/

/A01/ LANDOLT & BÖRNSTEIN (1967): 6. Auflage, Band III

/A02/ FAROUQ ALI, S. M. (1970): Oil Recovery by Hot Water Flooding.- Producers Publishing Co., Inc. Bradford, PA.

/A03/ Messungen mit dem Thermoanalysensystem TA3000 der Firma Mettler, Gießen, vergl. Abb. A.1.13.

Sind die Wärmekapazität des Festkornanteiles des Gesteins, der Gesamtporenraum und der Wassersättigungsgrad bekannt, so kann man die effektive Wärmekapazität wie folgt berechnen:

$$C_{eff} = \Phi_g \left( (1 - \Psi)C_l + \Psi (X_e C_e + X_w C_w) \right) + (1 - \Phi_g) C_g \quad (A.1.16)$$

## Wärmeproduktion

Durch den Zerfall radioaktiver Elemente und chemische Reaktionen produzieren bis auf wenige Ausnahmen nahezu alle Gesteine Wärme. Die Wärme radiogenen Ursprungs läßt sich nach RYBACH (1973), /173/, überschlägig aus den Konzentrationen der radioaktiven Isotope der Elemente U, Th<sup>5</sup> und K<sup>6</sup> nach:

$$Q_{rad} = (0.178C_U + 0.193C_{Th} + 0.262C_K) \cdot 0.133\rho_g, \quad [\mu W/m^3] \quad (A.1.17)$$

abschätzen. Während für die Temperaturprognose in größere Tiefen — Beispiel KTB — eine gute Vorstellung über die Wärmeproduktionsraten maßgeblich für die Qualität des Berechnungsergebnisses ist, kann man diesen Effekt bei der Kalkulation des Temperaturfeldes der obersten 100 m der Erdkruste vernachlässigen.

Tab. A.1.7 Wärmeproduktion verschiedener Gesteine

Gestein	Wärmeproduktion [ $\mu W/m^3$ ]	Quelle
Gneis	1.21-1.45	/A01/
Amphibolit	0.37	/A01/
Granit	6-9	/A02/
/A01/	internes Arbeitspapier der Arge 4 des Kontinentalen Tiefbohrprogrammes: Prof. Dr. Hänel, KTB	
/A02/	Falkenstein - Granit/Oberpfalz, persönliche Mitteilung von Dr. Huenges, KTB-Feldlabor	

<sup>5</sup> U und Th in ppm

<sup>6</sup> als Gesamtkalium in Prozent

## Anhang 2:

### Diagramme der Schwalbacher Kalibrierungsläufe

Die folgenden Diagramme präsentieren die Ergebnisse der Schwalbacher Kalibrierungsläufe, die zugleich eine Parameterstudie über die in die Berechnung einfließenden, physikalischen Größen darstellen. Die berechnete Regeneration erfolgte erwartungsgemäß bei einer Wärmeleitfähigkeit von  $1.5 W/mK$  am langsamsten und einer Fließgeschwindigkeit von  $5 \cdot 10^{-6} m/s$ <sup>1</sup> am schnellsten. Bei allen Simulationsläufen mit Konvektion wurde eine konstante, auf den Modellostern (vergl. Kap. 3.3) gerichtete Grundwasserfließrichtung angenommen.

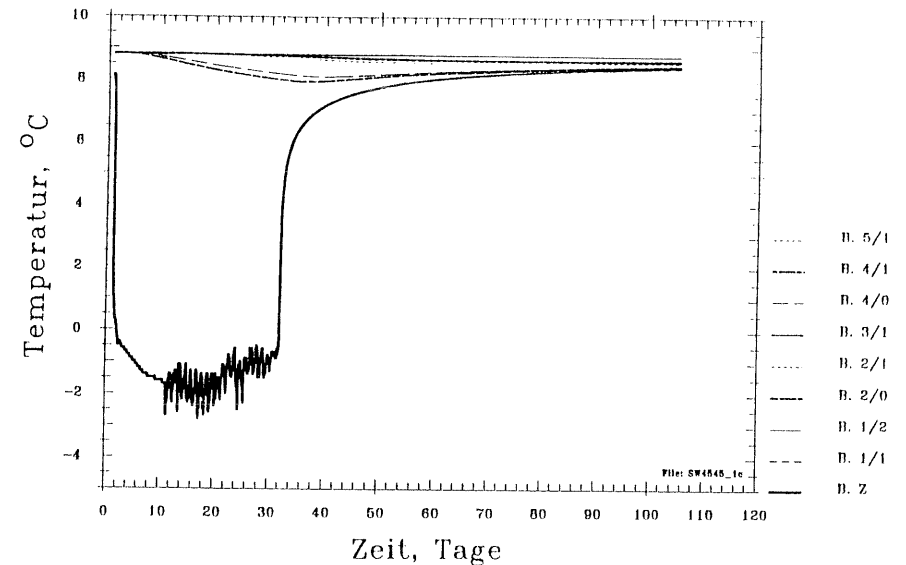


Abb. A.2.1: Berechnete Regeneration nach 31-tägigem Wärmeentzug (Datensatz 1, Tab. 5)

<sup>1</sup> entspricht bei einer durchflußwirksamen Porosität von 3 % einer Abstandsgeschwindigkeit von  $14.4 m/d$

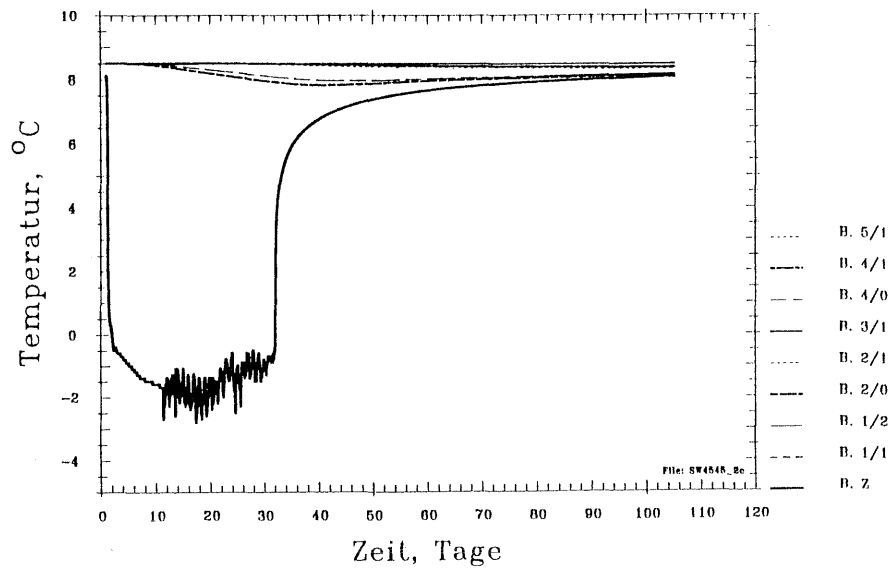


Abb. A.2.2: Berechnete Regeneration nach 31-tägigem Wärmeentzug (Datensatz 2, Tab. 5)

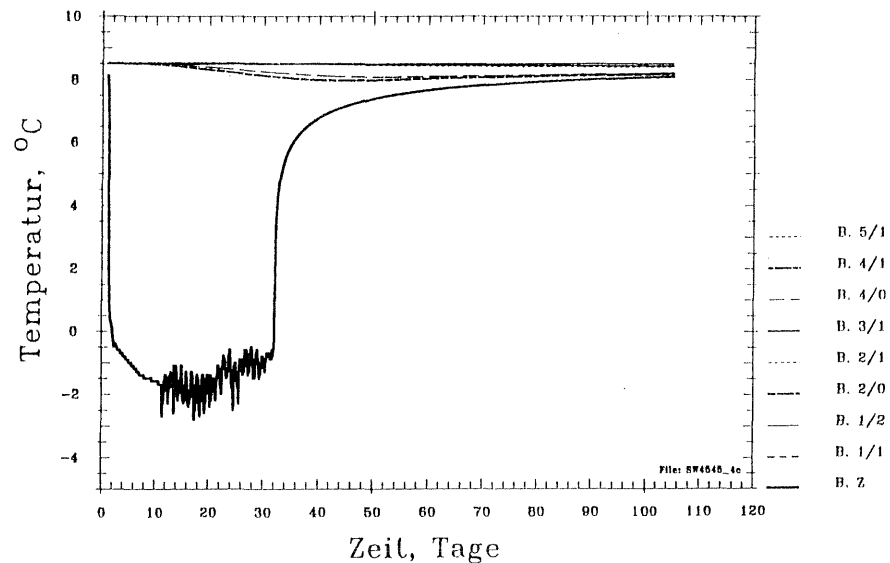


Abb. A.2.4: Berechnete Regeneration nach 31-tägigem Wärmeentzug (Datensatz 4, Tab. 5)

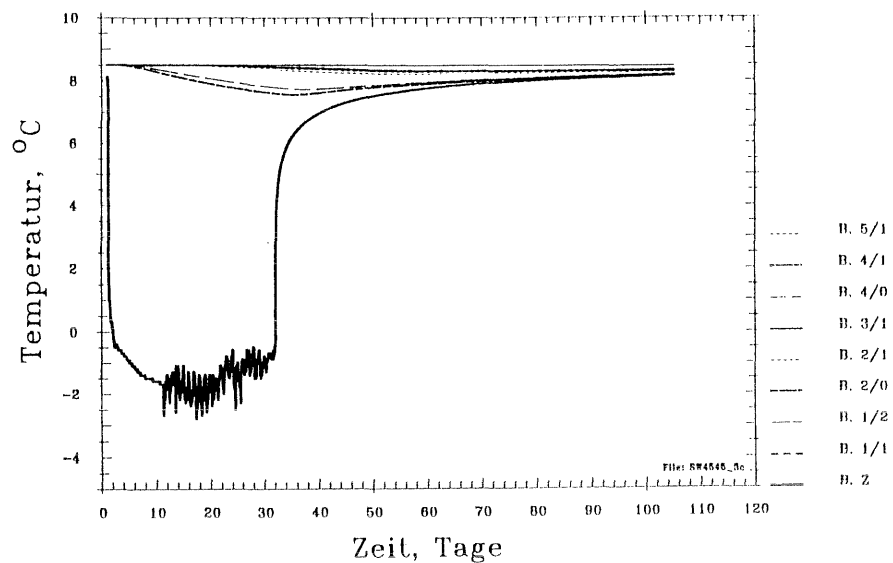


Abb. A.2.3: Berechnete Regeneration nach 31-tägigem Wärmeentzug (Datensatz 3, Tab. 5)

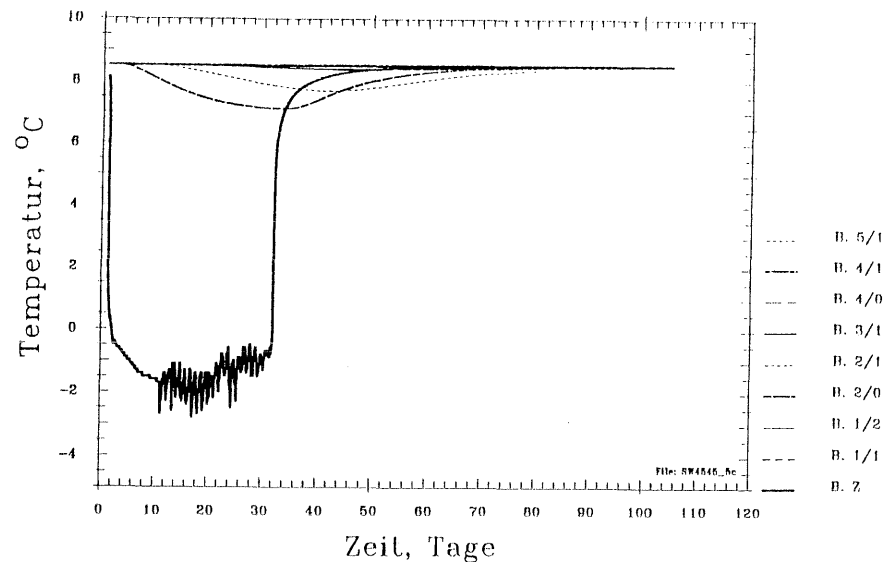


Abb. A.2.5: Berechnete Regeneration nach 31-tägigem Wärmeentzug (Datensatz 5, Tab. 5)

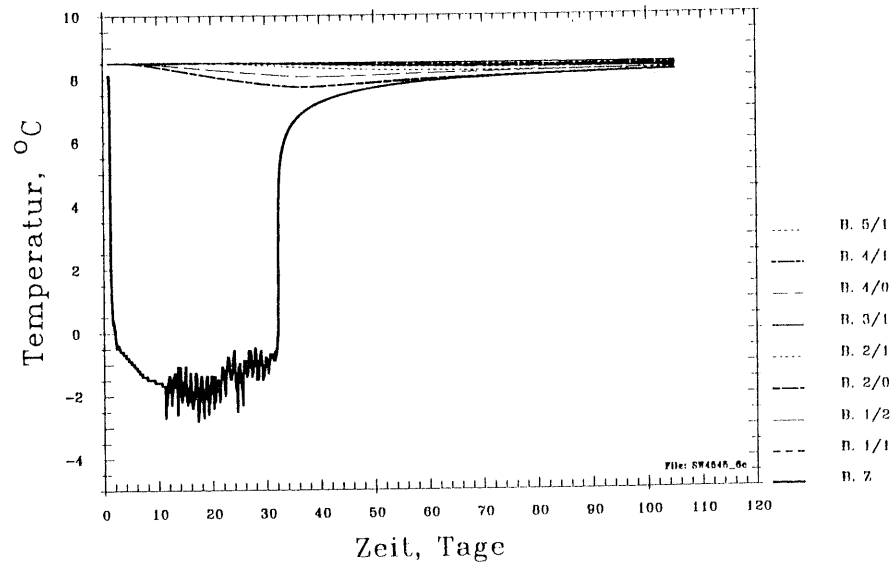


Abb. A.2.6: Berechnete Regeneration nach 31-tägigem Wärmeentzug (Datensatz 6, Tab. 5)

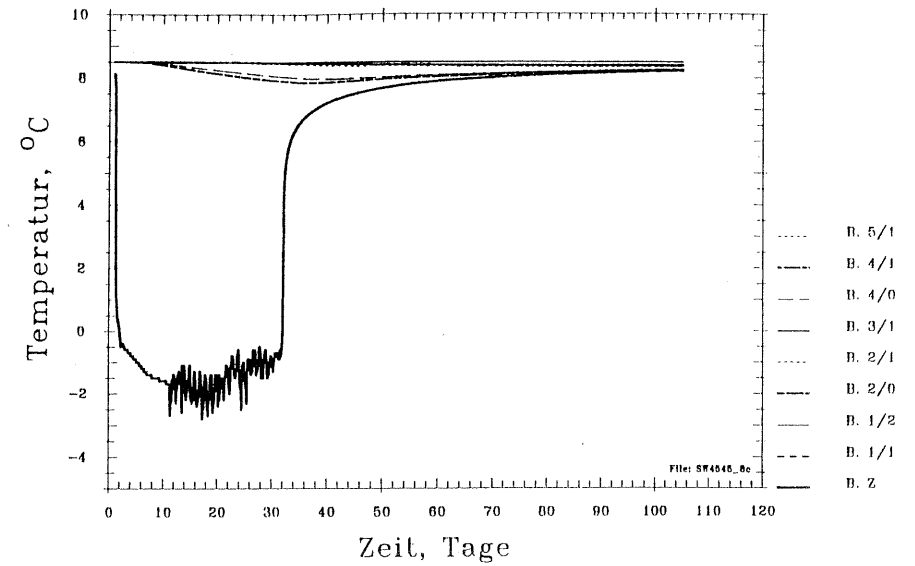


Abb. A.2.8: Berechnete Regeneration nach 31-tägigem Wärmeentzug (Datensatz 8, Tab. 5)

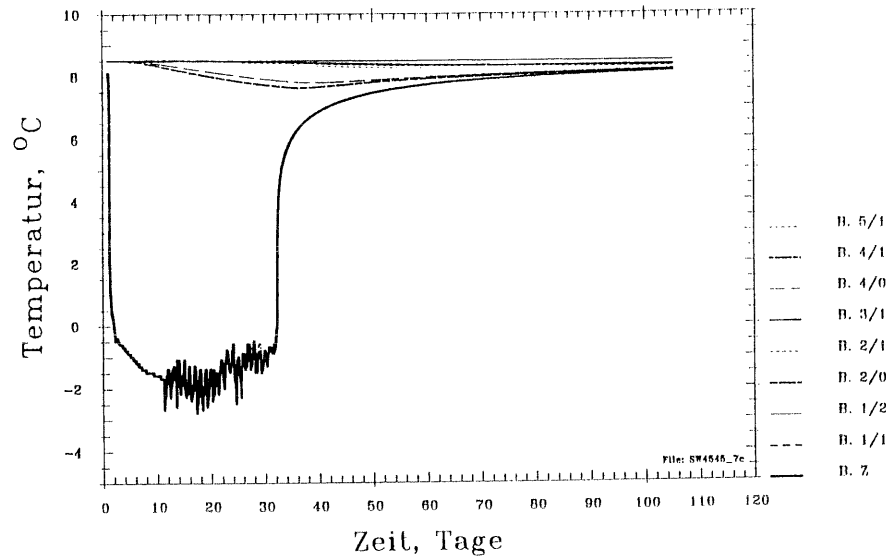


Abb. A.2.7: Berechnete Regeneration nach 31-tägigem Wärmeentzug (Datensatz 7, Tab. 5)

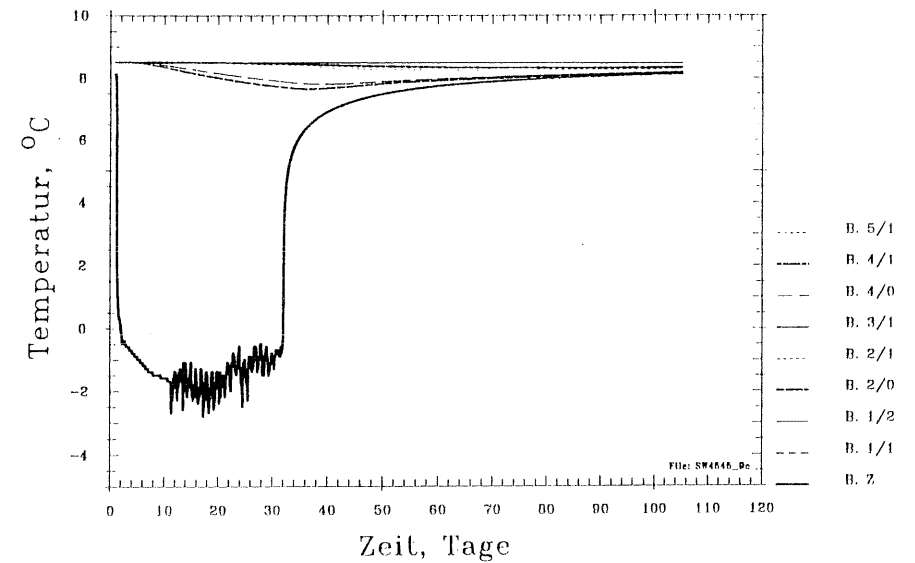


Abb. A.2.9: Berechnete Regeneration nach 31-tägigem Wärmeentzug (Datensatz 9, Tab. 5)

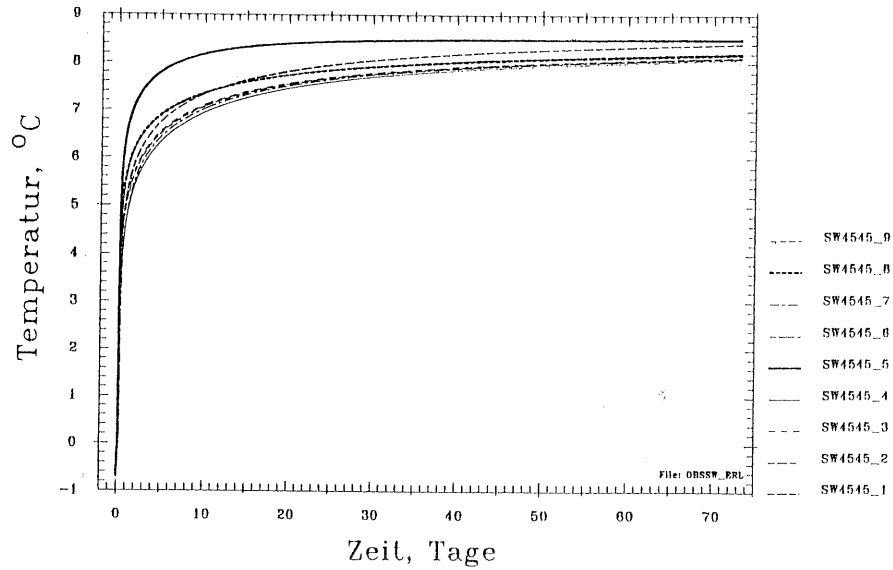


Abb. A.2.10: Berechnete Regeneration in Bohrung Z nach 31-tägigem Wärmeentzug (alle Datensätze)

1	ÖZSAYAR, Türker (1971): Paläontologie und Geologie des Gebietes östlich Trabzon (Anatolien), 138 S.	DM	12,00
2	KNOBLICH, Klaus (1971): Zur Scherfestigkeit und Rutschempfindlichkeit der Tone, 184 S.	DM	12,00
3	STRÜBEL, Günther (1974): Hydrothermale Löslichkeit und Auflösungsverhalten von Muskovit, 163 S.	DM	15,00
4	POETSCH, Thomas J. (1975): Untersuchungen von bodenbildenden Deckschichten unter besonderer Berücksichtigung ihrer vulkanischen Komponente, 180 S.	DM	15,00
5	GÖBEL, Volker W. (1975): German-English Dictionary of Rock Mechanics / Deutsch-Englisches Wörterbuch der Felsmechanik, XI + 154 S.	DM	15,00
6	HOFEDANK, Rolf-H. (1975): Untersuchungen zum Fließverhalten von Wasser im Lockergestein und klüftigem Basalt, 174 S. + Anlagen	DM	18,00
7	HOSSEINZADEH, Ali M. (1976): Einfluß des Gefüges auf die bodenmechanischen Eigenschaften feinkörniger, insbesondere tuffhaltiger Lockergesteine, 154 S.	DM	15,00
8	ZIRFAS, Jochen (1976): Geotechnische Eigenschaften von feinkörnigen organischen Lockergesteinen, 176 S., 54 Fotos	DM	18,00
9	KOLLMANN, H., STRÜBEL, G., TROST, F. (1976): Experimentelle Untersuchungen über Treibkernbildungen, 108 S., 30 Fotos	DM	18,00
10	KAISER, Gerd (1977): Hydrogeologische Untersuchungen im Niederschlagsgebiet der Chm (Hessen) 224 S.	DM	18,00
11	RABE, Egon H. (1977): Zur Stratigraphie des ostandinischen Raumes von Kolumbien, 224 S., 4 Bildtafeln.	DM	18,00
12	FESTSCHRIFT zum 65. Geburtstag von Richard Weyl Mit Beiträgen von: P. Bär, W. Blind, V. W. Göbel, E. W. Guenther, D. Henningsen, S. Holtz, J. B. Kegler, K. Knoblich, R. Madrigal, T. Özayar, H. D. Pflug, H. Pichler, R. Schmidt-Effing, M. Schöttle, W. Stegemann, R. Stengelin, F. R. Stibane, G. Strübel, C. Torres, W. Tufar, L. Werding, J. Zirfas.	DM	25,00



- |    |  |    |       |    |   |    |       |
|----|--|----|-------|----|---|----|-------|
| 13 | SCHÖTTLE, M., KNOBLICH, K., KAISER, G. (1977):<br>Geochemische und Hydrochemische Untersuchungen<br>am Bieberbach bei Giessen (Hessen), 100 S., 14 Fotos   | DM | 16,00 | 27 | AFANTCHAWO, K. (1981): Mineralbestand, Gefüge und<br>bodenmechanisches Verhalten von Schluffen.<br>180 S., 18 Fotos   | DM | 24,-- |
| 14 | LOIZIDES, G. (1977): Einfluss von Elektrolyten auf die<br>bodenmechanischen und rheologischen Eigenschaften<br>von Kaolin- und Bentonitsystemen, 236 S.  | DM | 18,00 | 28 | ASHRAF, M. (1981): Aufbau, Bodenmechanisches Verhalten<br>und Stabilität der Esna-Shales aus Oberägypten,<br>146 S., 16 Fotos   | DM | 22,-- |
| 15 | ORTIZ VASQUEZ, F. (1977): Zur Hydrogeologie und Geologie<br>der nordöstlichen Guajira-Halbinsel (Kolumbien), 188 S,<br>8 Falttafeln, 51 Abbildungen  | DM | 18,00 | 29 | GERHARD, J. (1982): Geochemische Untersuchungen an<br>einem potentiellen Erdölmuttergestein - Sannois-<br>Fischschiefer des ostbayerischen Molassebeckens<br>(Süddeutschland), 150 S., 30 Abb., 9 Fotos | DM | 25,-- |
| 16 | PIRUZI, S. (1977): Zum bodenmechanischen Verhalten ver-<br>witterter Tonschiefer, 120 S., 6 Fotos  | DM | 16,00 | 30 | MARTIN, G. (1982): Geologie des Küstengebietes von<br>Nordwest-Afrika südlich der Sahara.<br>Neue Ergebnisse aus der Erdölexploration.<br>160 S., 21 Abb.   | DM | 24,-- |
| 17 | SCHÖTTLE, M. (1978): Geochemische Untersuchungen an re-<br>zenten Sedimenten des Kontinentalrandes von NW-Afrika<br>zwischen Kanarischen u. Kapverdischen Inseln unter be-<br>sonderer Berücksichtigung der Gehalte an Schwermetallen.<br>188 S., 27 Abbildungen | DM | 18,00 | 31 | DÖRR, W. und PREISS, R. (1982): Die Geologie des<br>Nauborner Kopfes und seiner Umgebung.<br>(Blatt Nr. 5416 Braunfels und Blatt Nr. 5417<br>Wetzlar). 224 S., 56 Abb., 5 Karten                        | DM | 30,-- |
| 18 | KOLLMANN, H. (1978): Mineralogische Untersuchungen über<br>Ausblühungs- und Treiberscheinungen an Baustoffen<br>durch Sulfate, 172 S.  | DM | 24,00 | 32 | HANAUER, B. (1982): Hydrogeologische und geohydrau-<br>lische Untersuchungen im oberen Niddatal (Hessen)<br>unter besonderer Anwendung statistischer Methoden.<br>175 S., 67 Abb., 8 Karten             | DM | 25,-- |
| 19 | KAVIANY, E. (1978): Zur Hydrogeologie im Niederschlags-<br>gebiet der Dill (Hessen), 264 S., 55 Abbildungen  | DM | 18,00 | 33 | HAMZA, W. (1982): Zur Hydrogeologie und Geologie der<br>Nord-Tihama (Saudi-Arabien). 172 S., 62 Abb.<br>32 Tab., 6 Tafeln   | DM | 24,-- |
| 20 | MUTSAERS, G. (1979): Experimentelle mineralogische<br>Untersuchungen über die Synthese von Kaolinit.<br>122 S., 30 Abb.  | DM | 24,00 | 34 | KLINGE, H. (1982): Untersuchungen zum Grundwasserhaus-<br>halt der Tihama (Saudi Arabien). 162 S., 55 Abb.,<br>20 Tab., 5 Tafeln  | DM | 25,-- |
| 21 | ROUSAKIS, P. (1979): Hydrogeologie und Wasserhaushalt<br>im Niederschlagsgebiet der Wetter (Hessen).<br>216 S., 55 Abb.  | DM | 18,00 | 35 | IBE Sr., K.M. (1983): Zur Hydrogeologie im Niederschlags-<br>gebiet der Schwalm (Hessen). 184 S.  | DM | 24,-- |
| 22 | SANNER, B. (1980): Methoden zur Standsicherheitsana-<br>lyse von Böschungen, 80 S., 6 Falttafeln   | DM | 18,00 | 36 | FÜHRES, M. (1982): Die basaltische Beeinflussung des<br>Meissner-Flözes. 106 S., 29 Abb.  | DM | 22,-- |
| 23 | SCHANDELMEIER, H. (1980): Regionale Gliederung des<br>Präkambriums und Aspekte der Krustenentwicklung<br>um Mambwe/Nordost-Zambia. 134 S., 15 Fotos  | DM | 22,00 | 37 | STEUL, H. (1984): Die systematische Stellung der Conularien<br>126 S., 32 Fotos, 31 Abb.  | DM | 28,-- |
| 24 | BAALBAKI, M. (1980): Zur bodenmechanischen Beurteilung<br>lateritischer Zersetzungsprodukte von Vogelsbergbasalten.<br>152 S., 22 Fotos  | DM | 24,00 | 38 | BACKWINKEL, Chr. (1984): Zum Einfluß der Vulkanite auf die<br>Chemie der Grundwässer im Vogelsberg/Hessen<br>228 S.   | DM | 26,-- |
| 25 | OKUNLOLA, F. A. (1980): Zusammenhänge zwischen mine-<br>ralogisch-geochemischem Aufbau und bodenmechani-<br>schem Verhalten von Lateriten aus West Gabun und<br>Südwest Nigeria. 142 S., 15 Fotos  | DM | 22,00 | 39 | BAER, I. (1985): Hydrogeologische und geohydraulische Unter-<br>suchungen an einem Mainterrassenaquifer bei Seligenstadt<br>(Hessen). 126 S.  | DM | 22,-- |
| 26 | SCHAEFER, B. (1980): Der Einfluß von Alkali- und Erdal-<br>kaliionen auf die hydrothermale Löslichkeit von<br>Fluorit. 284 S., 10 Fotos  | DM | 26,00 | 40 | LENZ, W. (1986): Untersuchungen zur Schwermetallbelastung<br>und -mobilität im ehemaligen Blei-Zink-Revier Bad Ems/<br>Holzappel. 130 S.  | DM | 24,-- |

- 41 KREUTZER, W. (1986): Palynologie, Stratigraphie und Tektonik im Becken von Großalmerode. 126 S. DM 24.--
- 42 SCHIMMEL, A. (1987): Hydrochemisch-hydrodynamische Wechselbeziehungen am Beispiel des Lückenbaches bei Pohlheim/Hessen. 206 S. DM 28.--
- 43 BREHM, D.R. (1989): Entwicklung, Validierung und Anwendung eines dreidimensionalen, strömungsgekoppelten finite Differenzen Wärmetransportmodells. 120 S. DM 25.--