

WinSMART

Version 2012.04

- Die Beispiele -

Version 5.0.2

(Stand 15.09.2012)

Inhaltsverzeichnis

Inhaltsverzeichnis.....	3
Abbildungsverzeichnis	5
Tabellenverzeichnis	6
1 Erläuterung der Beispiele	7
1.1 Einführende Beispiele	7
1.2 Beispiele zur Simulation des Stofftransports (konventionelle Berechnung)	14
1.3 Beispiele zur Simulation von Sorption und Desorption (Freisetzung).....	18
1.4 Beispiele zur sequentiellen Simulation mehrere Schichten.....	21
1.5 Beispiele zur Verifizierung der sequentiellen Simulation mehrerer Modellschichten im SMART-Modus	25
2 Quellen	28

Abbildungsverzeichnis

Abbildung 1	Beispiel ex1b - Durchbruchskurven von Naphthalin und Phenanthren in der Mitte und am Auslass (an der UK) der Säule (Bodenschicht).	8
Abbildung 2	Beispiel ex1b_sm - Durchbruchskurven von Naphthalin und Phenanthren in der Mitte und am Auslass (an der UK) der Säule (Bodenschicht).	8
Abbildung 3	Vergleich der Ergebnisse der Beispiele ex1b und ex1b_sm - Durchbruchskurven von Naphthalin (linke Abb.) und Phenanthren (rechte Abb.) am Auslass (an der UK) der Säule (Bodenschicht).	9
Abbildung 4	Beispiel ex2b - Konzentrationsprofile von Naphthalin.	10
Abbildung 5	Beispiel ex1b_bio - Durchbruchskurven von Naphthalin und Phenanthren in der Mitte und am Auslass der Säule (an der UK der Bodenschicht).	12
Abbildung 6	Beispiel ex4b – Festlegung der Sorptionsparameter.	13
Abbildung 7	Beispiel ex4b – Berechnete Durchbruchskurve am Säulenende und „Pseudo“-Konzentrationsprofil.	14
Abbildung 8	Beispiel adv_1cell – Berechnete Durchbruchskurven am Säulenende (an der UK der Bodenschicht).	15
Abbildung 9	Vergleich der Durchbruchskurven von Phenanthren (PHE) je nach Anteil der Gleichgewichtssorption.	15
Abbildung 10	Bsp. adv_eq - Vergleich der Durchbruchskurven von Phenanthren (PHE) am Säulenauslass (an der UK der Bodenschicht) je nach Anteil der Gleichgewichtssorption.	16
Abbildung 11	Bsp. adv3g - Vergleich der Durchbruchskurven von Phenanthren (PHE) an drei verschiedenen Punkten des Modellraums ($x = 0.5 \text{ m}$, 0.8 m , 1.0 m).	17
Abbildung 12	Bsp. Is_kin_sorb_ref - Durchbruchskurven von Phenanthren (PHE) in der Mitte der Säule und am Säulenauslass.	19
Abbildung 13	Bsp. Is_kin_sorb_eq - Durchbruchskurven von Phenanthren (PHE) in der Mitte der Säule und am Säulenauslass.	20
Abbildung 14	Bsp. Is_kin_sorb_eq - Konzentrationsprofil von Phenanthren (PHE) nach einem Tag.	20
Abbildung 15	Schematische Darstellung des Modellraums von Beispiel 5s_bio_50a (aus Liedl, 2010).	21
Abbildung 16	Von WinSMART intern berechnete Verweilzeitenverteilungen für die einzelnen Schichten (S1 bis S5).	23
Abbildung 17	Beispiel 5s_bio_50a - Naphthalin-Durchbruchskurven an den Schichtgrenzen.	23
Abbildung 18	Beispiel 5s_nobio_44a - Naphthalin-Durchbruchskurven an den Schichtgrenzen.	24
Abbildung 19	Bsp. 5s_bio_50a_pf – Verweilzeitenverteilung mit und ohne Berücksichtigung preferentieller Fließwege.	25
Abbildung 20	Konzentrationsdurchbruchskurven an der OK und an der UK von Schicht 4.	25
Abbildung 21	Vergleich der PHE-Durchbruchskurve(n) einer sequentiellen Simulation zweier Schichten ($L_1 = 0.3 \text{ m}$, $L_2 = 0.7 \text{ m}$) mit dem Ergebnis der Referenzsimulation (eine Schicht).	26
Abbildung 22	Vergleich der PHE-Durchbruchskurve(n) einer sequentiellen Simulation zweier Schichten ($L_1 = 0.3 \text{ m}$, $L_2 = 0.7 \text{ m}$) mit dem Ergebnis der analytischen Referenzberechnung (eine Schicht).	27

Abbildung 23 Durchbruchskurve(n) eines konservativen Tracers einer sequentiellen Simulation zweier Schichten ($L_1 = 0.3$ m, $L_2 = 0.7$ m) mit der SMART Version 3.0 und der neuen Version 4.0 im Vergleich zu dem analytisch berechneten Referenzergebnis (eine Schicht)..... 28

Tabellenverzeichnis

Tabelle 1	Beispiel ex2b - Auschnitt aus der Hauptausgabedatei, Ergebnisdaten zum 200. Zeitschritt, Konzentration der beiden Stoffe in Lösung (C_DISS) und von Stoff Nr. 1 (NAP) in der Festphase (C_DIFF[index-Korngröße,index-Lithokomponente,index-Stoff]).....	10
Tabelle 2	Beispiel ex4 – Inhalt der Datei aus der die Verweilzeitendaten eingelesen werden. .	13
Tabelle 3	Schichtspezifische Daten für Bsp. 5s_bio_50a.....	22
Tabelle 4	Reaktionsrelevante Daten für Bsp 5s_bio_50a.	22

1 Erläuterung der Beispiele

1.1 Einführende Beispiele

Nachfolgend werden einige erste Anwendungsbeispiele beschrieben, wie sie bislang mit SMART mitgeliefert wurden. Sie illustrieren die Effekte der wesentlichen Prozesse sowie den Unterschied zwischen einer Berechnung im „normalen Modus“ und einer Berechnung im SMART-Modus. Des Weiteren eignen sich die Beispiele als Ausgangspunkt für die ersten „Gehversuche“ neuer Anwender.

ex1b

Beschreibung des Szenarios

Beispiel zur Beschreibung des Stofftransports zweier Kontaminanten (PHE, NAP) in einer Laborsäule/Bodenschicht.

Konstante Input-Konzentration, NAP: 3 mg/l, PHE: 0.1 mg/l

Länge der Säule, Mächtigkeit der Schicht: $L = 50$ cm.

Es wird angenommen, dass die Gleichgewichtssorption keine Rolle spielt (Parameter $f_{eq} = 0.0$ für alle Lithokomponenten). Berechnung der Sorptionskinetik via Intrapartikeldiffusion (numerische Berechnung). Die Berechnung des scheinbaren Diffusionsparameters erfolgt über lineare Sorptionsisothermen (Henry-Isothermen).

Kein Bioabbau.

Aquifermaterial: vier Lithokomponenten (Keupersandstein, Muschelkalk, Jurakalke, Quarz) mit jeweils zwei verschiedenen Korngrößenklassen (0.5 mm und 2 mm).

Zu Beginn des Experiments ist kein Schadstoff in der Säule vorhanden.

Es wird von einem gleichförmigen Strömungsfeld ohne Dispersion ausgegangen (Berechnung im „normalen“ Modus).

Ergebnisse

Die berechneten Durchbruchkurven für NAP und PHE zeigt Abbildung 1. Den höheren Verteilungskoeffizienten entsprechend ist der Anstieg der Konzentration von PHE gegenüber NAP stärker verzögert.

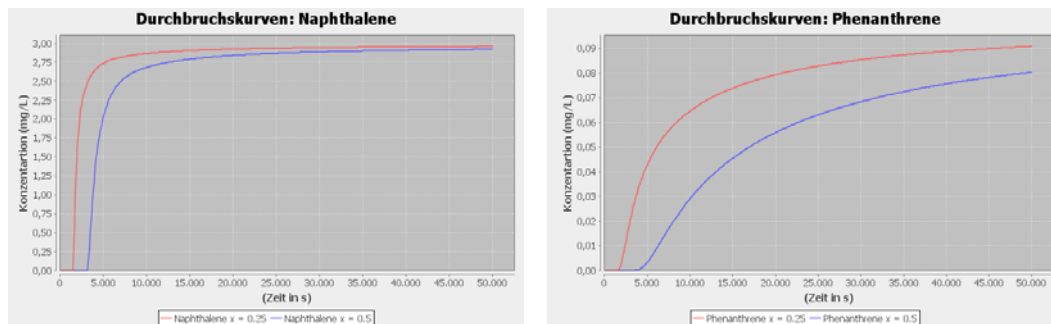


Abbildung 1 Beispiel ex1b - Durchbruchkurven von Naphthalin und Phenanthren in der Mitte und am Auslass (an der UK) der Säule (Bodenschicht).

Variationsvorschläge

- Zustromrate ändern um die Zeitskala der Advektion zu ändern
- Eine Gleichgewichtsfraction zur Berücksichtigung der Sorption an die leicht erreichbaren äußeren Sorptionsplätze einführen.
- Anteile der Gesteinsfraktionen verändern um anders zusammengesetzte Säulenfüllungen/Schichten zu simulieren (z.B. Quarzanteil reduzieren).

ex1b_sm

Beschreibung des Szenarios

Wie Beispiel ex1b, nur dass hier der Einfluss der hydrodynamischen Dispersion mit berücksichtigt wird. Hier deshalb Berechnung mit dem SMART-Modus (Annahme Dispersivität: $\alpha_L = 0.1$ m)

Ergebnisse

Wie Abbildung 2 zeigt, ist durch die Einbeziehung von Dispersionseffekten die Zeit bis zur Erstankunft der Schadstoffe am Säulenende kleiner.

Eine Berechnung der Durchbruchkurve in der Mitte der Säule/Bodenschicht ist mit dem SMART-Modus nicht möglich.

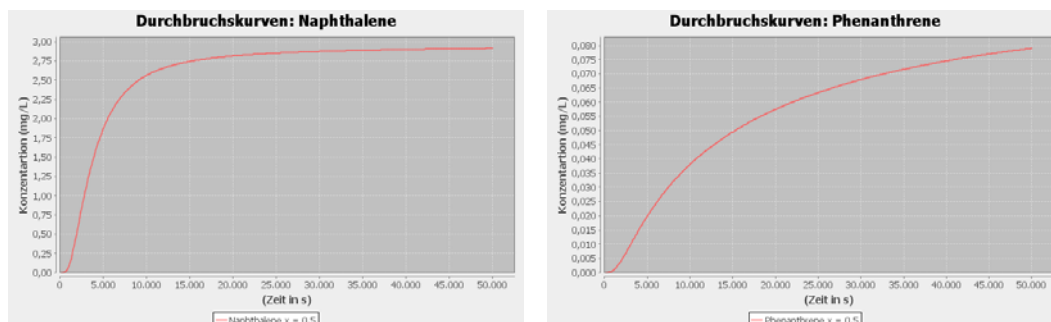


Abbildung 2 Beispiel ex1b_sm - Durchbruchkurven von Naphthalin und Phenanthren in der Mitte und am Auslass (an der UK) der Säule (Bodenschicht).

Ein Vergleich der Ergebnisse von ex1b und ex1b_sm zeigt die Unterschiede deutlich (Abbildung 3).

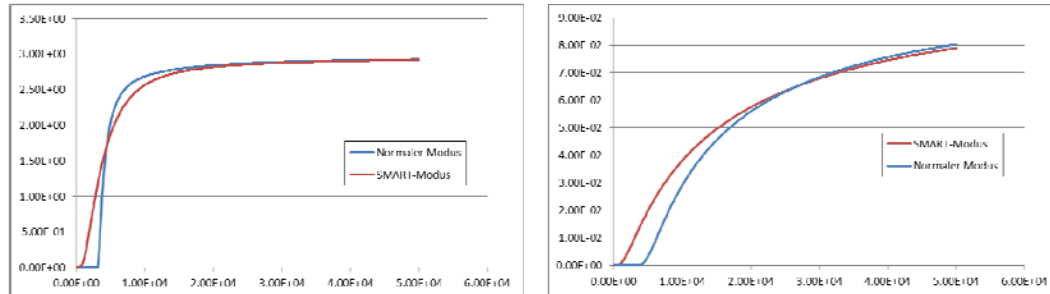


Abbildung 3 Vergleich der Ergebnisse der Beispiele ex1b und ex1b_sm - Durchbruchkurven von Naphthalin (linke Abb.) und Phenanthren (rechte Abb.) am Auslass (an der UK) der Säule (Bodenschicht).

Variationsvorschläge

- Dispersivität für die Berechnung der Verweilzeitenverteilung ändern
- Zustromrate ändern um die Zeitskala der Advektion zu ändern
- Eine Gleichgewichtsfraction zur Berücksichtigung der Sorption an die leicht erreichbaren äußeren Sorptionsplätze einführen.
- Anteile der einzelnen Gesteinsfraktionen verändern um anders zusammengesetzte Säulenfüllungen/Bodenschichten zu simulieren (z.B. Quarzanteil reduzieren).

ex2b

Beschreibung des Szenarios

Ähnlich wie Beispiel ex1b, nur dass in diesem Fall die Desorption von Kontaminanten modelliert wird. Die Anfangskonzentration in der Säule (Bodenschicht) ist größer Null. Die Säule (Bodenschicht) wird mit reinem Wasser gespült (Konzentration der Schadstoffe im Zustrom gleich Null).

Im Unterschied zu ex1b werden hier 3 Korngrößenklassen berücksichtigt.

Ergebnisse

Es werden für drei unterschiedliche Zeitpunkte Konzentrationsprofile berechnet (Abbildung 4). Die Profile zeigen die Massenverteilung bezogen auf das Gesamtvolumen. Die Stoffkonzentrationen in Lösung und in der Festphase werden entsprechend umgerechnet. Auf diese Weise sind die Daten unmittelbar vergleichbar. Zu Beginn der Simulation ist das Verhältniss zwischen Festphase und wässriger Phase ca. 10:1.

Die Konzentration SORB (Gleichgewichtsfraction) ist Null, da die Sorption vollständig als kinetischer Prozess via Intrapartikeldiffusion beschrieben wird. Das Profil zeigt die Gesamtmasse in den Bodenpartikeln, also die Summe über alle Gesteinsfraktionen (in diesem Beispiel: 11 Fraktionen = 4 Lithokomponenten x 3 Korngrößenklassen minus 1 nicht vorhandene Fraktion – Quarz in der groben Fraktion).

Wie unterschiedlich die in den einzelnen Fraktionen enthaltenen Massen sind, zeigt ein Blick in die Hauptausgabedatei ex2b.dat (Tabelle 1).

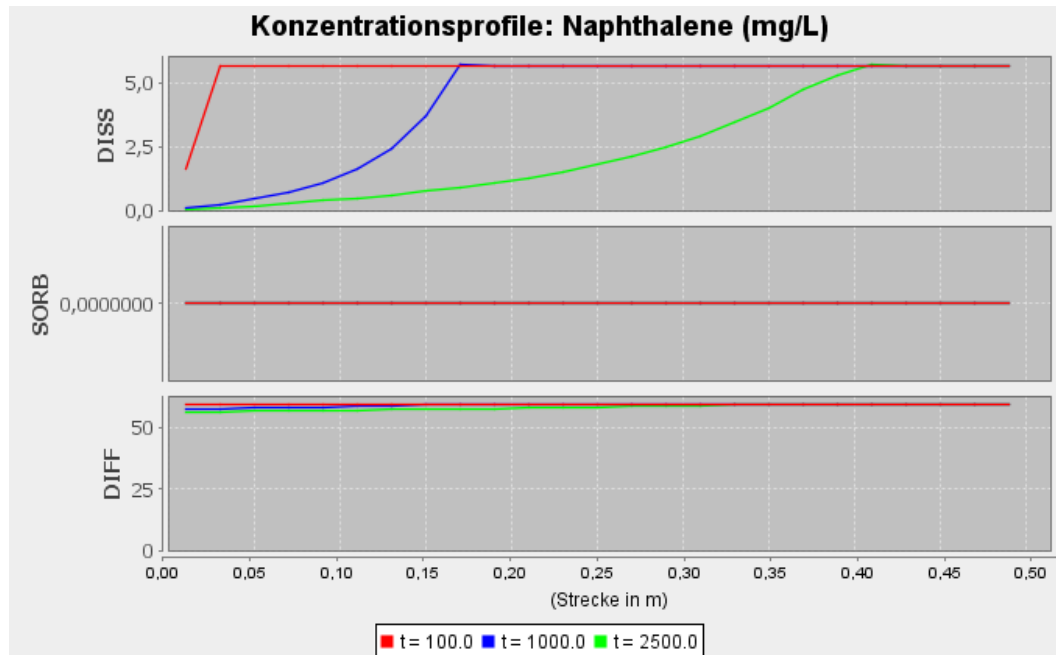


Abbildung 4 Beispiel ex2b - Konzentrationsprofile von Naphthalin.

Tabelle 1 Beispiel ex2b - Ausschnitt aus der Hauptausgabedatei, Ergebnisdaten zum 200. Zeitschritt, Konzentration der beiden Stoffe in Lösung (C_DISS) und von Stoff Nr. 1 (NAP) in der Festphase (C_DIFF[index-Korngröße,index-Lithokomponente,index-Stoff]).

```

__STEP: 200
__MASS_BALANCE_C[1]
0.0000000E+00 0.7663906E-03 -0.2184105E+00
__MASS_BALANCE_C[2]
0.0000000E+00 0.2908817E-04 -0.4751584E-02
__C_DISS[1]
0.9269056E-01 0.2101448E+00 0.3264130E+00 0.4491023E+00 0.5706359E+00
0.6988829E+00 0.8260164E+00 0.9601745E+00 0.1093275E+01 0.1233731E+01
0.1373200E+01 0.1520380E+01 0.1666660E+01 0.1821031E+01 0.1974611E+01
0.2136690E+01 0.2298110E+01 0.2468468E+01 0.2638329E+01 0.2817600E+01
0.2996570E+01 0.3185460E+01 0.3374286E+01 0.3573585E+01 0.3773102E+01
__C_DISS[2]
0.4344444E-02 0.9873483E-02 0.1536245E-01 0.2115838E-01 0.2688774E-01
0.3290636E-01 0.3882981E-01 0.4501923E-01 0.5108317E-01 0.5738419E-01
0.6352820E-01 0.6987507E-01 0.7603281E-01 0.8235439E-01 0.8845492E-01
0.9467622E-01 0.1006457E+00 0.1066899E+00 0.1124537E+00 0.1182448E+00
0.1237303E+00 0.1291959E+00 0.1343353E+00 0.1394097E+00 0.1441433E+00
__C_DIFF[1,1,1]
0.2993251E-05 0.7692084E-05 0.1234787E-04 0.1726665E-04 0.2214427E-04
0.2729777E-04 0.3241260E-04 0.3781717E-04 0.4318626E-04 0.4886001E-04
0.5450230E-04 0.6046537E-04 0.6640195E-04 0.7267678E-04 0.7893129E-04
0.8554300E-04 0.9214190E-04 0.9911864E-04 0.1060917E-03 0.1134651E-03

```

0.1208460E-03	0.1286516E-03	0.1364781E-03	0.1447559E-03	0.1530706E-03
__C_DIFF[2,1,1]				
0.0000000E+00	0.0000000E+00	0.0000000E+00	0.0000000E+00	0.0000000E+00
0.0000000E+00	0.0000000E+00	0.0000000E+00	0.0000000E+00	0.0000000E+00
0.0000000E+00	0.0000000E+00	0.0000000E+00	0.0000000E+00	0.0000000E+00
0.0000000E+00	0.0000000E+00	0.0000000E+00	0.0000000E+00	0.0000000E+00
0.0000000E+00	0.0000000E+00	0.0000000E+00	0.0000000E+00	0.0000000E+00
__C_DIFF[3,1,1]				
0.2091184E-04	0.2721914E-04	0.3356330E-04	0.4022169E-04	0.4691603E-04
0.5394229E-04	0.6100683E-04	0.6841923E-04	0.7587369E-04	0.8369101E-04
0.9155514E-04	0.9979645E-04	0.1080901E-03	0.1167745E-03	0.1255174E-03
0.1346640E-03	0.1438758E-03	0.1535032E-03	0.1632030E-03	0.1733293E-03
0.1835356E-03	0.1941780E-03	0.2049084E-03	0.2160827E-03	0.2273533E-03
__C_DIFF[1,2,1]				
0.2628827E-01	0.2641055E-01	0.2653360E-01	0.2665693E-01	0.2678060E-01
0.2690486E-01	0.2702925E-01	0.2715440E-01	0.2727954E-01	0.2740556E-01
0.2753146E-01	0.2765832E-01	0.2778499E-01	0.2791267E-01	0.2804010E-01
0.2816858E-01	0.2829675E-01	0.2842600E-01	0.2855491E-01	0.2868490E-01
0.2881452E-01	0.2894522E-01	0.2907552E-01	0.2920687E-01	0.2933781E-01
__C_DIFF[2,2,1]				
0.3228367E-01	0.3231697E-01	0.3235047E-01	0.3238397E-01	0.3241757E-01
0.3245126E-01	0.3248498E-01	0.3251885E-01	0.3255270E-01	0.3258673E-01
0.3262071E-01	0.3265490E-01	0.3268902E-01	0.3272336E-01	0.3275761E-01
0.3279210E-01	0.3282648E-01	0.3286110E-01	0.3289561E-01	0.3293036E-01
0.3296499E-01	0.3299985E-01	0.3303459E-01	0.3306955E-01	0.3310438E-01
__C_DIFF[3,2,1]				
0.3021269E-01	0.3027747E-01	0.3034265E-01	0.3040789E-01	0.3047330E-01
0.3053894E-01	0.3060463E-01	0.3067064E-01	0.3073663E-01	0.3080301E-01
0.3086930E-01	0.3093602E-01	0.3100262E-01	0.3106968E-01	0.3113659E-01
0.3120397E-01	0.3127117E-01	0.3133886E-01	0.3140635E-01	0.3147433E-01
0.3154209E-01	0.3161034E-01	0.3167837E-01	0.3174686E-01	0.3181512E-01
__C_DIFF[1,3,1]				
0.5882184E-01	0.5890034E-01	0.5897932E-01	0.5905835E-01	0.5913757E-01
0.5921704E-01	0.5929657E-01	0.5937645E-01	0.5945630E-01	0.5953658E-01
0.5961676E-01	0.5969743E-01	0.5977793E-01	0.5985896E-01	0.5993979E-01
0.6002116E-01	0.6010230E-01	0.6018401E-01	0.6026545E-01	0.6034746E-01
0.6042919E-01	0.6051147E-01	0.6059347E-01	0.6067600E-01	0.6075824E-01
__C_DIFF[2,3,1]				
0.6260119E-01	0.6262132E-01	0.6264158E-01	0.6266183E-01	0.6268214E-01
0.6270250E-01	0.6272287E-01	0.6274333E-01	0.6276377E-01	0.6278431E-01
0.6280483E-01	0.6282546E-01	0.6284605E-01	0.6286676E-01	0.6288742E-01
0.6290821E-01	0.6292894E-01	0.6294980E-01	0.6297059E-01	0.6299152E-01
0.6301238E-01	0.6303337E-01	0.6305429E-01	0.6307533E-01	0.6309628E-01
__C_DIFF[3,3,1]				
0.6132771E-01	0.6136765E-01	0.6140782E-01	0.6144801E-01	0.6148829E-01
0.6152869E-01	0.6156910E-01	0.6160969E-01	0.6165025E-01	0.6169103E-01
0.6173174E-01	0.6177269E-01	0.6181355E-01	0.6185467E-01	0.6189568E-01
0.6193696E-01	0.6197812E-01	0.6201955E-01	0.6206084E-01	0.6210240E-01
0.6214383E-01	0.6218552E-01	0.6222706E-01	0.6226886E-01	0.6231051E-01
__C_DIFF[1,4,1]				
0.6418698E-02	0.6814044E-02	0.7212892E-02	0.7620978E-02	0.8031641E-02
0.8452404E-02	0.8875274E-02	0.9308807E-02	0.9744148E-02	0.1019057E-01
0.1063859E-01	0.1109801E-01	0.1155891E-01	0.1203144E-01	0.1250537E-01
0.1299111E-01	0.1347820E-01	0.1397724E-01	0.1447760E-01	0.1498999E-01
0.1550370E-01	0.1602945E-01	0.1655655E-01	0.1709564E-01	0.1763612E-01
__C_DIFF[2,4,1]				
0.3025660E-01	0.3044432E-01	0.3063323E-01	0.3082272E-01	0.3101277E-01
0.3120388E-01	0.3139522E-01	0.3158789E-01	0.3178057E-01	0.3197476E-01
0.3216881E-01	0.3236448E-01	0.3255991E-01	0.3275704E-01	0.3295383E-01
0.3315239E-01	0.3335053E-01	0.3355047E-01	0.3374993E-01	0.3395120E-01
0.3415196E-01	0.3435450E-01	0.3455650E-01	0.3476024E-01	0.3496341E-01
__C_DIFF[3,4,1]				
0.1994358E-01	0.2025958E-01	0.2057778E-01	0.2089832E-01	0.2122007E-01
0.2154492E-01	0.2187046E-01	0.2219956E-01	0.2252900E-01	0.2286232E-01
0.2319572E-01	0.2353322E-01	0.2387063E-01	0.2421229E-01	0.2455371E-01
0.2489949E-01	0.2524494E-01	0.2559479E-01	0.2594424E-01	0.2629812E-01
0.2665153E-01	0.2700935E-01	0.2736667E-01	0.2772832E-01	0.2808946E-01

Variationsvorschläge

- Eine Gleichgewichtsfraktion zur Berücksichtigung der Sorption an die leicht erreichbaren äußeren Sorptionsplätze einführen.

- Anteile der einzelnen Gesteinsfraktionen verändern um anders zusammengesetzte Säulenfüllungen/Bodenschichten zu simulieren (z.B. Quarzanteil reduzieren).
- Längere Simulationszeiten verwenden, um die langfristige Entwicklung der Stoffmassen in der Festphase zu prognostizieren.

ex1b_bio

Beschreibung des Szenarios

Wie Beispiel ex1b, nur dass in diesem Fall Bioabbau mitberücksichtigt wird. Die Bioabbauparameter sind dabei räumlich konstant (eine räumliche Differenzierung ist möglich, wenn mehrere Schichten definiert werden). Für beide Schadstoffe wird eine Abbaukinetik 1. Ordnung angenommen. Die angenommenen Halbwertszeiten sind 6 h (NAP) und 12 h (PHE).

Ergebnisse

Entsprechend der unterschiedlichen Halbwertszeiten ist die Änderung der Durchbruchkurve von NAP größer als bei PHE (Abbildung 5).

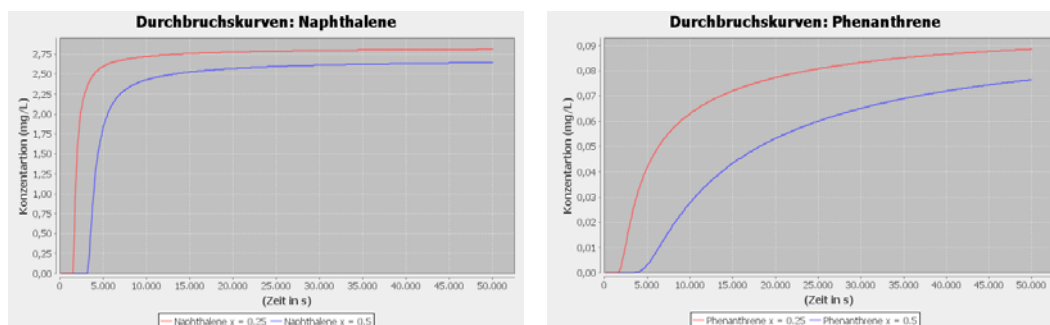


Abbildung 5 Beispiel ex1b_bio - Durchbruchkurven von Naphthalin und Phenanthren in der Mitte und am Auslass der Säule (an der UK der Bodenschicht).

Variationsvorschläge

- Halbwertszeiten variieren.

ex4

Beschreibung des Szenarios

Beispiel für die Kopplung von Reaktion und Transport eines Schadstoffes über die Verweilzeitenverteilung eines konservativen Tracers.

Die Säulenlänge beträgt 9.0 cm.

Die Verweilzeitenverteilung eines konservativen Tracers wird aus der Datei *ex4.pdf.txt* im Ordner */data* gelesen (Tabelle 2). Die Verteilung ist durch 29 „Zeit-

zellen“ (von je 10s Länge) diskretisiert. Die maximale Verweilzeit ist 290 s. Die eingelesenen Daten gehen aus einer analytischen Berechnung des Transports (nach Ogata & Banks 1961) eines konservativen Tracers mit $\alpha_L = 1$ mm hervor.

Die Eingangskonzentration beträgt 1 mg/l und ist zeitlich konstant.

Das Aquifermaterial besteht aus vier verschiedenen Lithokomponenten mit jeweils zwei Korngrößenklassen ($r_1 = 0.05$ mm, $r_2 = 0.25$ mm).

Der Bioabbau wird vernachlässigt.

Es werden Gleichgewichtssorptionsanteile angenommen (Parameter $f_{eq} > 0.0$). Als Sorptionsisothermen werden Freundlich-Isothermen verwendet (siehe Abbildung 6).

Sorptionsisothermen

Schadstoffe

phenanthrene

Isothermentypen und Parameter je Lithokomponente

Lithokomone...	feq	Isoth.typ	Parameter 1	Parameter 2	Parameter 3
Quarz1.1	0.2	2	3.0E-4	0.95	0.0
Jurakalke	0.0017	2	0.01	0.9	0.0
Muschelkalk	0.0044	2	0.022	0.85	0.0
Keupersands...	0.0011	2	0.015	0.8	0.0

Abbildung 6 Beispiel ex4b – Festlegung der Sorptionsparameter.

Tabelle 2 Beispiel ex4 – Inhalt der Datei aus der die Verweilzeitendaten eingelesen werden.

29	
10	0
20	0.00E+00
30	0.00E+00
40	1.69E-26
50	6.01E-18
60	9.22E-13
70	2.20E-09
80	4.34E-07
90	1.71E-05
100	2.25E-04
110	1.35E-03
120	4.54E-03
130	9.85E-03
140	1.52E-02
150	1.79E-02
160	1.69E-02
170	1.34E-02
180	9.21E-03
190	5.58E-03
200	3.05E-03
210	1.52E-03
220	7.05E-04
230	3.06E-04
240	1.25E-04
250	4.88E-05
260	1.82E-05
270	6.51E-06
280	2.25E-06
290	7.56E-07

Ergebnisse

Aufgrund des SMART-Modus sind hier ausschließlich Konzentrationswerte am Säuleneinlass (Randbedingung) und am Säulenauslass (= Kontrollebene) bekannt (siehe Abbildung 7).

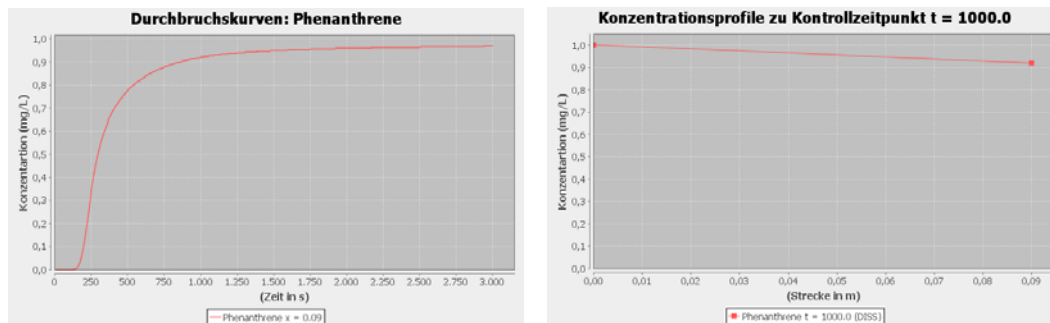


Abbildung 7 Beispiel ex4b – Berechnete Durchbruchkurve am Säulende und „Pseudo“-Konzentrationsprofil.

Variationsvorschläge

- Verweilzeitenverteilung in WinSMART berechnen, anstatt einzulesen.
Werte für α_L variieren.

1.2 Beispiele zur Simulation des Stofftransports (konventionelle Berechnung)

adv_1cell

Beschreibung des Szenarios

Simulation des advektiv-reaktiven Transports (im „normalen“ Berechnungsmodus) von drei Schadstoffen (NAP, PHE und PYR) unter Annahme von Sorptionsgleichgewicht (lineare Isotherme). Die 1 m lange Säule (bzw. 1 m mächtige Bodenschicht) ist durch eine einzelne Zelle diskretisiert. Das Beispiel veranschaulicht das „Parcel-Tracking“-Verfahren bzw. dessen Unabhängigkeit von der Modelldiskretisierung. Eine Diskretisierung des Modellraums durch Modellzellen ist nur für die räumliche Auflösung der in die Gesteinsmatrix diffundierten Stoffmasse (Sorptionskinetik) erforderlich.

Sonstige Annahmen: kein Bioabbau, 1 Lithokomponente (Muschelkalk), 1 Korngröße ($d = 2$ mm), konstante Inputkonzentration aller drei Schadstoffe.

Ergebnisse

Die berechneten Durchbruchkurven zeigen den unterschiedlichen Rückhalt der Schadstoffe aufgrund der unterschiedlichen Verteilungskoeffizienten (Abbildung 8).

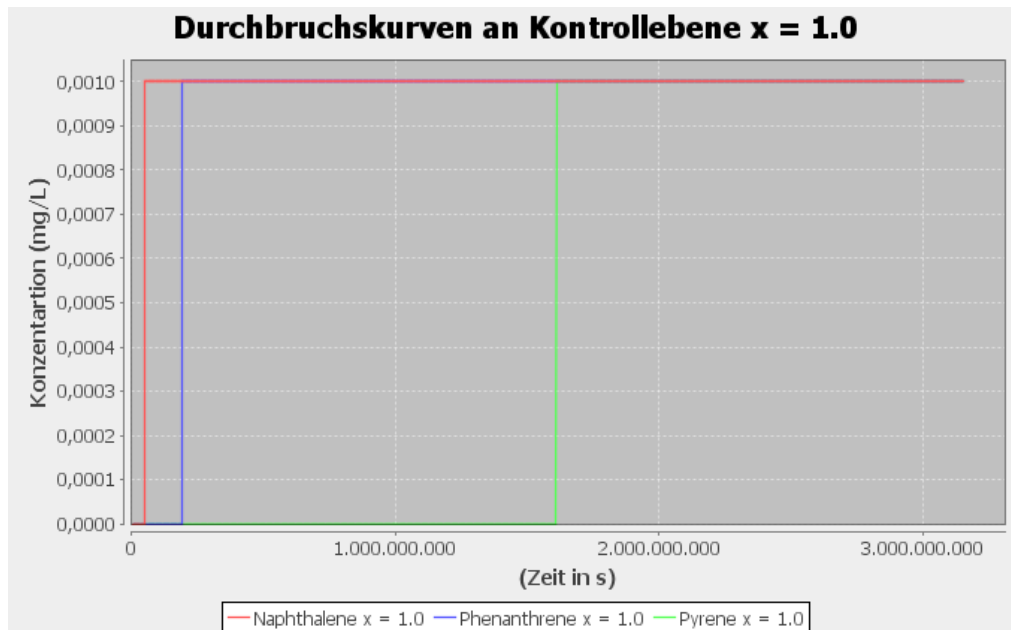


Abbildung 8 Beispiel adv_1cell – Berechnete Durchbruchskurven am Säulenende (an der UK der Bodenschicht).

Variationsvorschläge

- Änderung der Anzahl der Modellzellen zur Veranschaulichung, dass das Ergebnis unabhängig von der Modelldiskretisierung ist.
- Variation der K_d -Werte.
- Verwendung von nicht-linearen Sorptionsisothermen.

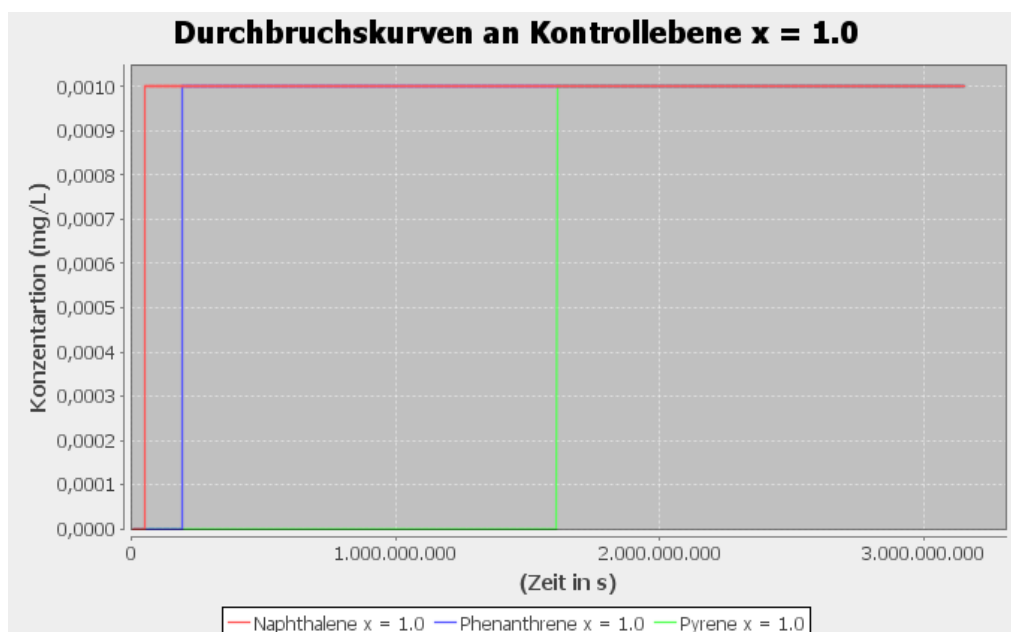


Abbildung 9 Vergleich der Durchbruchskurven von Phenanthren (PHE) je nach Anteil der Gleichgewichtssorption.

adv_eq

Beschreibung des Szenarios

Ähnliches Szenario wie in Beispiel adv_1cell, jedoch:

Wird hier die Sorption als Kombination aus Gleichgewichtssorption und kinetischer Sorption beschrieben. Dementsprechend (siehe Erläuterung zu Bsp. adv_1cell) ist die Säule (Bodenschicht) durch 50 Modellzellen diskretisiert.

Als Schadstoffe wird hier Phenanthren (PHE) innerhalb einer Rechnung bezgl. des Anteils der Gleichgewichtssorption am Sorptionsprozess insgesamt auf drei unterschiedliche Arten berücksichtigt.

Ergebnisse

Das Beispiel veranschaulicht die Bedeutung der Gleichgewichtssorption auf den Konzentrationsdurchbruch am Säulenende bzw. an der UK der Bodenschicht (siehe Abbildung 10).

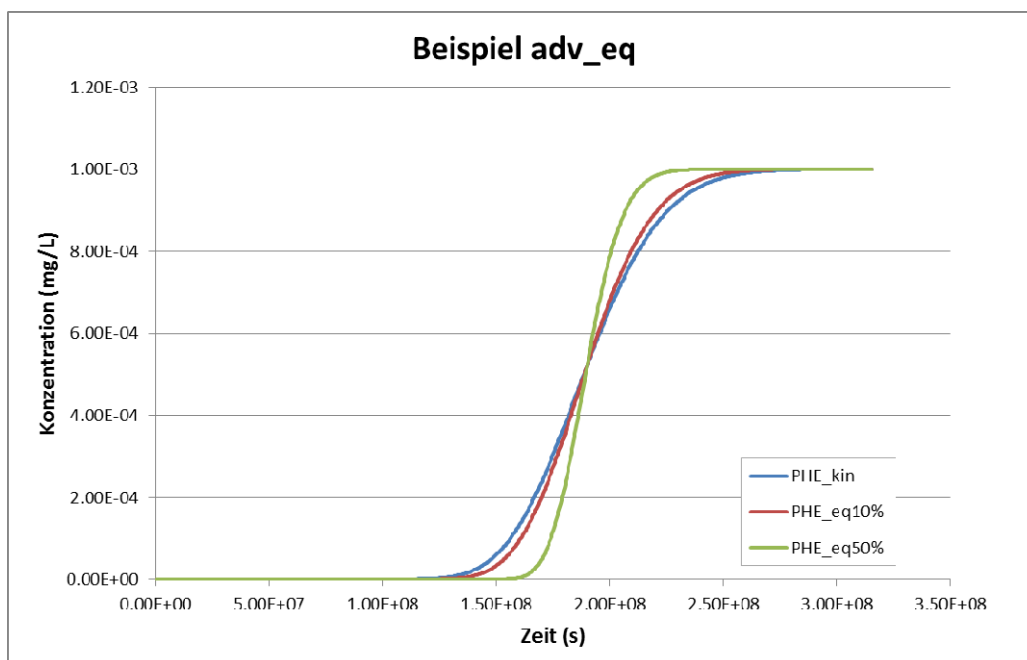


Abbildung 10 Bsp. adv_eq - Vergleich der Durchbruchkurven von Phenanthren (PHE) am Säulenauslass (an der UK der Bodenschicht) je nach Anteil der Gleichgewichtssorption.

Variationsvorschläge

- Variation der K_d -Werte.
- Variation des Gleichgewichtanteils.
- Verwendung von nicht-linearen Sorptionsisothermen.

adv3g

Beschreibung des Szenarios

Ähnliches Szenario wie in Beispiel adv_3g. Abweichungen sind: (a) Sorption wird vollständig als kinetischer Prozess (Intrapartikeldiffusion) beschrieben, (b) es werden folgende drei Korngrößenklassen betrachtet: $d\text{-FK} = 0,2 \text{ mm}$; $d\text{-MK} = 1,0 \text{ mm}$; $d\text{-GK} = 5,0 \text{ mm}$.

Ergebnisse

Das Sorptionsungleichgewicht führt zu den charakteristischen Durchbruchskurven (Abbildung 11).

Die Form der Kurven, d.h. die Geschwindigkeit des Konzentrationsanstiegs hängt ganz entscheidend von der Zusammensetzung der Gesteinsmatrix ab. Der Einfluss der Korngröße kann durch Variation des Szenarios (siehe unten) nachvollzogen werden.

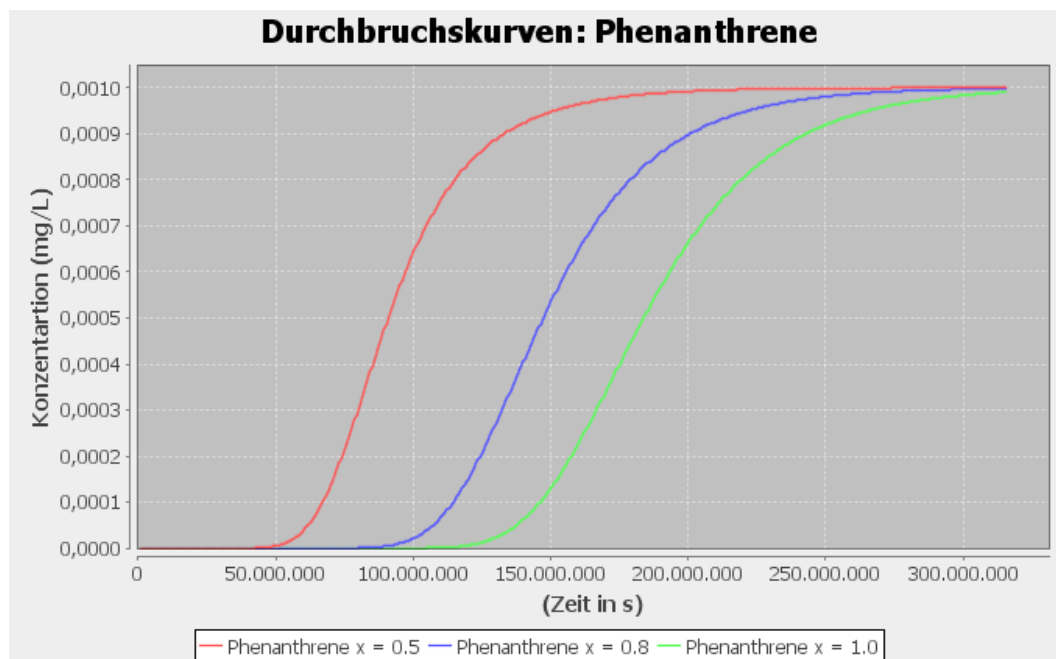
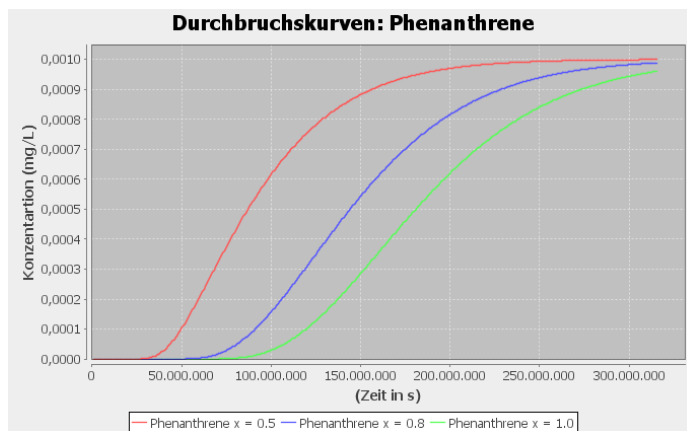


Abbildung 11 Bsp. adv3g - Vergleich der Durchbruchskurven von Phenanthren (PHE) an drei verschiedenen Punkten des Modellraums ($x = 0.5 \text{ m}$, 0.8 m , 1.0 m).

Variationsvorschläge

- Variation der Zusammensetzung der Säulenfüllung. Nach welcher Änderung ergibt sich folgendes Bild?



1.3 Beispiele zur Simulation von Sorption und Desorption (Freisetzung)

Is_kin_sorb_ref

Beschreibung des Szenarios

Simuliert wird sowohl die Equilibrierung der anfangs sauberen Säule durch eine kontinuierliche Zugabe von PHE (Zeitraum: 20 d) als auch die anschließende Schadstoff-Freisetzung aus dem Bodenmaterial, wenn die Säule mit sauberem Wasser gespült wird.

Weitere Kenndaten: Länge der Säule $L = 16\text{cm}$, diskretisiert durch 16 Modellzellen à 1 cm; Lithokomponente: Muschelkalk; eine Korngröße ($d = 1\text{ mm}$).

Ergebnisse

Abbildung 12 zeigt den zeitlichen Verlauf von Schadstoffaufnahme und -freisetzung. An beiden Kurven sind beim Übergang leichte „Überschwinger“ zu erkennen, die sich aufgrund von Approximationen bei der Verteilung der freigesetzten Stoffmasse auf die einzelnen Pakete zur Simulation des advektiv-reaktiven Transports mittels des „Parcel-Tracking“-Verfahrens ergeben. Diese „Artifakte“ verschwinden, wenn räumliche und zeitliche Modelldiskretisierung aufeinander abgestimmt werden.

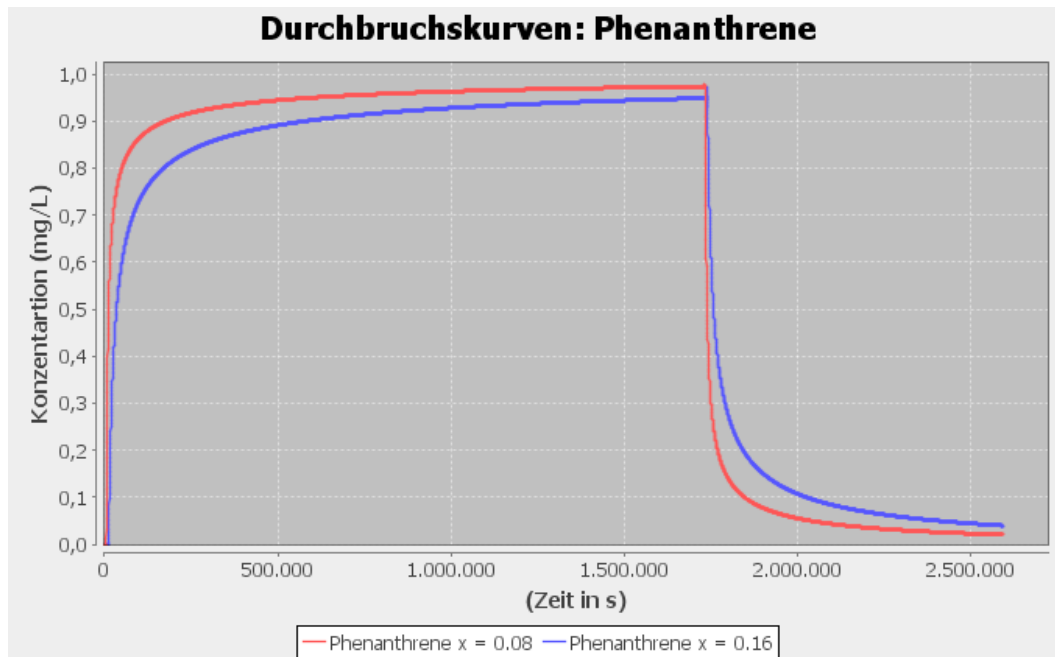


Abbildung 12 Bsp. `Is_kin_sorb_ref` - Durchbruchkurven von Phenanthren (PHE) in der Mitte der Säule und am Säulenauslass.

Variationsvorschläge

- Variation der Korngrößenklasse.
- Variation der Equilibrierungszeit.

`Is_kin_sorb_eqf1`

Beschreibung des Szenarios

Ähnliches Szenario wie in Beispiel `Is_kin_sorb_ref`, jedoch hier mit Berücksichtigung eines 20%igen Gleichgewichtsanteils bei der Beschreibung der Sorption.

Ergebnisse

Abbildung 12 zeigt den zeitlichen Verlauf von Schadstoffaufnahme und -freisetzung. Wiederum sind an beiden Kurven beim Übergang leichte „Überschwinger“ zu erkennen (siehe Erläuterung oben).

Den Unterschied zwischen Gleichgewichtssorption und Ungleichgewichtssorption veranschaulicht Abbildung 14. Während die Kurven für die Konzentration in der wässrigen Phase (DISS) und in der Festphase (→ schnelle Sorptionsplätze) (SORB) synchron verlaufen, hängt die Konzentration des diffusiv in der Bodenmatrix festgelegten Anteils (DIFF) der Entwicklung in den Gleichgewichtsphasen nach.

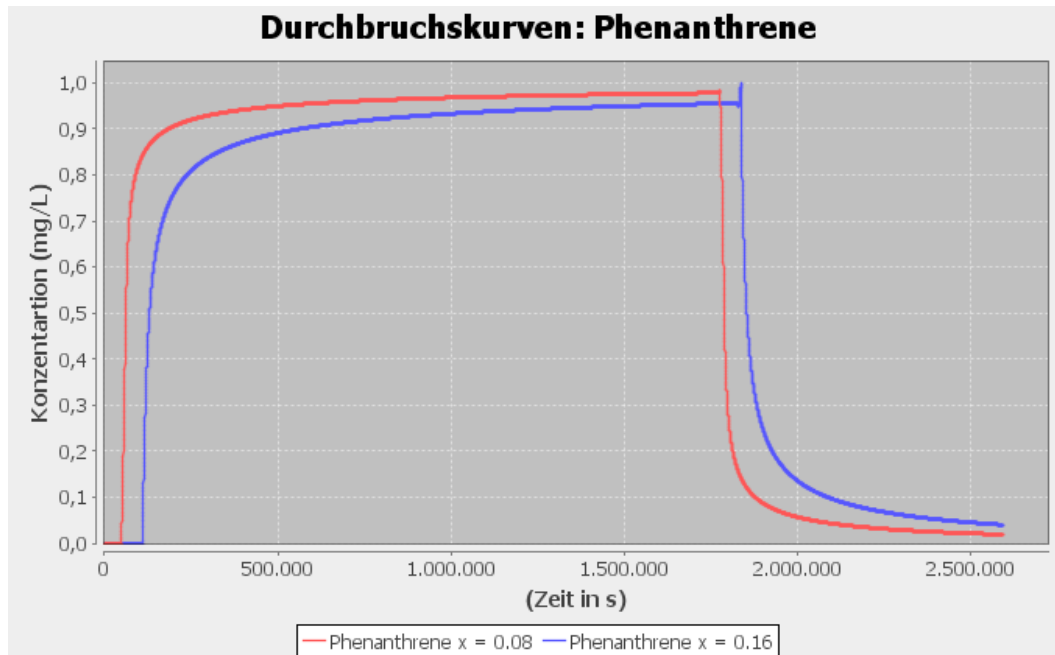


Abbildung 13 Bsp. Is_kin_sorb_eq - Durchbruchskurven von Phenanthren (PHE) in der Mitte der Säule und am Säulenauslass.

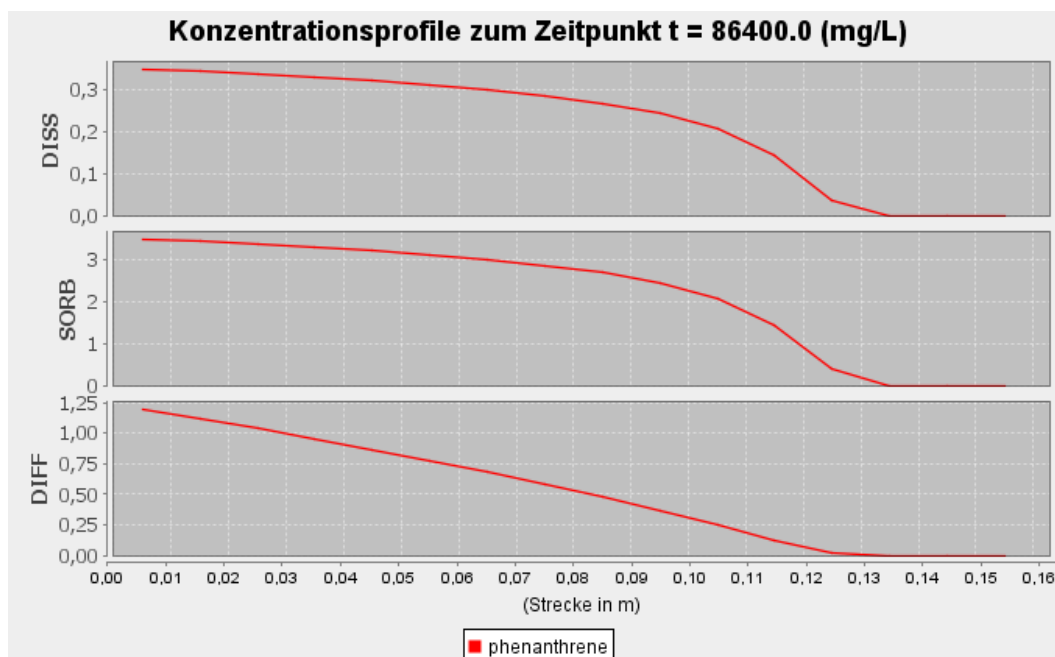


Abbildung 14 Bsp. Is_kin_sorb_eq - Konzentrationsprofil von Phenanthren (PHE) nach einem Tag.

Variationsvorschläge

- Variation der Equilibrierungszeit.
- Weitere Kontrollebenen und -zeitpunkte.

1.4 Beispiele zur sequentiellen Simulation mehrere Schichten

5s_bio_50a

Beschreibung des Szenarios

Beschreibung des Stofftransports von Naphthalin durch ein 5-Schichten-System (siehe Abbildung 15). Weitere Kenndaten sind:

- Transportstrecke insgesamt $L = 3.0 \text{ m}$
- Berechnung im SMART-Modus
- Berechnung der Verweilzeitenverteilung nach Dispersivität $= L/100$ (Tabelle 3)
- Berücksichtigung der Sorption als Gleichgewichtsprozess
- Berechnung mit Bioabbau (siehe Tabelle 4)
- Input-Konzentration abklingend von anfänglich 1.5 mg/L mit einer Abklingkonstante von $0,2 \text{ 1/a}$ ($\rightarrow 1 \text{ mg/L}$ nach 740 d , 0.5 mg/L nach 2005 d).
- Zustrom kontinuierlich 200 m/a ($= 6.342 \text{ e-09 m/s}$)
- Simulationszeitraum ca. 50 Jahre: 8000 Zeitschritte, $\Delta t = 200000 \text{ s}$ (~ 2.3 Tage)

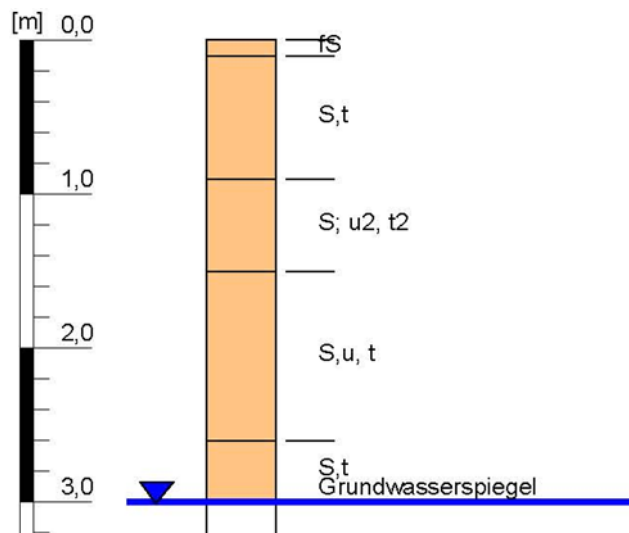


Abbildung 15 Schematische Darstellung des Modellraums von Beispiel 5s_bio_50a (aus Liedl, 2010).

Tabelle 3 Schichtspezifische Daten für Bsp. 5s_bio_50a.

Nr.	Bezeichnung	Mächtigkeit (m)	K-Wert (m/s)	Porosität (%)	Sättigung (%)	Wasser-gefüllte Porosität (%)	Dispersivität (mm)	Modellzellenanzahl (-)
1	fS	0.1	3.47 e-5	41	49.40	20.25	10	36
2	S,t	0.8	4.86 e-6	42	86.46	36.31	80	438
3	S,u2,t2	0.6	1.13 e-5	39	65.95	25.72	60	292
4	S,u,t	1.1	7.52 e-6	39	58.01	22.62	110	365
5	S,t	0.4	4.86 e-6	42	86.46	36.31	40	219

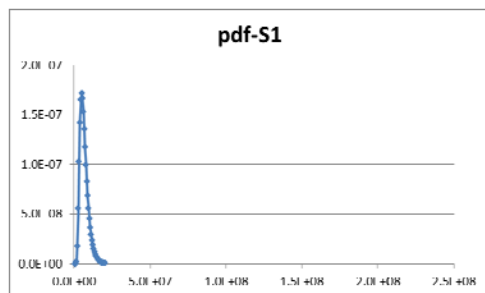
Es wird ferner angenommen, dass das Aquifermaterial aus einer Korngrößenklasse ($d = 2,0 \text{ mm}$) besteht. Die Berechnung der Sorption erfolgt über eine lineare Sorptionsisotherme (Henry-Isotherme).

Tabelle 4 Reaktionsrelevante Daten für Bsp 5s_bio_50a.

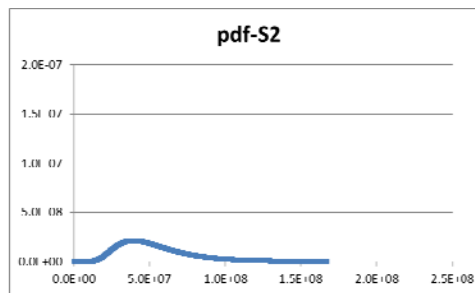
Nr.	Bezeichnung	Empirische Konstante m (-)	Feststoffdichte (kg/m^3)	Intrapartikelporosität (%)	Henry-Koeffizient (L/kg)	Bioabbau: $T_{1/2}$ / Ref.konz. (Jahr / mg/L)
1	f,S	2.0	2.54 e3	1.0	3.0 e-3	1 / 0.0015
2	S,t	2.0	2.59 e3	1.0	0.2 e-3	1 / 0.0015
3	S,u2,t2	2.0	2.46 e3	1.0	4.0 e-3	1 / 0.0015
4	S,u,t	2.0	2.46 e3	1.0	0.1 e-3	1 / 0.0015
5	S,t	2.0	2.59 e3	1.0	0.0 e-3	1 / 0.0015

Ergebnisse

Die von WinSMART berechneten Verweilzeitenverteilungen zeigt Abbildung 16. Mit diesen Verweilzeitenverteilungen rechnet WinSMART im SMART-Modus den Transport durch das 5-Schichten-System. Die berechneten Durchbruchkurven am Ort der Beurteilung zeigt Abbildung 17.

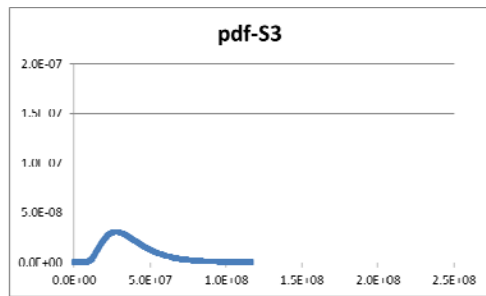


5s_bio_50a.01.pdf.txt

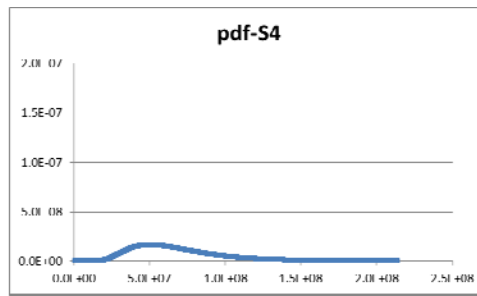
36 Intervalle: $\Delta\tau = 567878.1 \text{ s}$ 

5s_bio_50a.02.pdf.txt

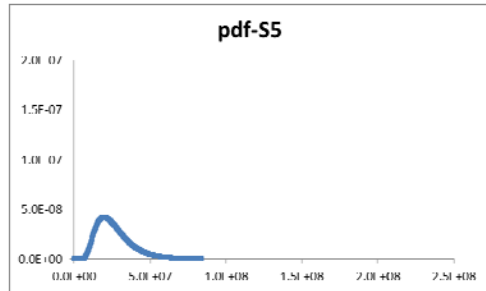
438 Intervalle: $\Delta\tau = 382506.6 \text{ s}$



5s_bio_50a.03.pdf.txt

292 Intervalle: $\Delta\tau = 399582.8$ s

5s_bio_50a.04.pdf.txt

365 Intervalle: $\Delta\tau = 586054.7$ s

5s_bio_50a.05.pdf.txt

219 Intervalle: $\Delta\tau = 382506.6$ s

Abbildung 16 Von WinSMART intern berechnete Verweilzeitenverteilungen für die einzelnen Schichten (S1 bis S5).

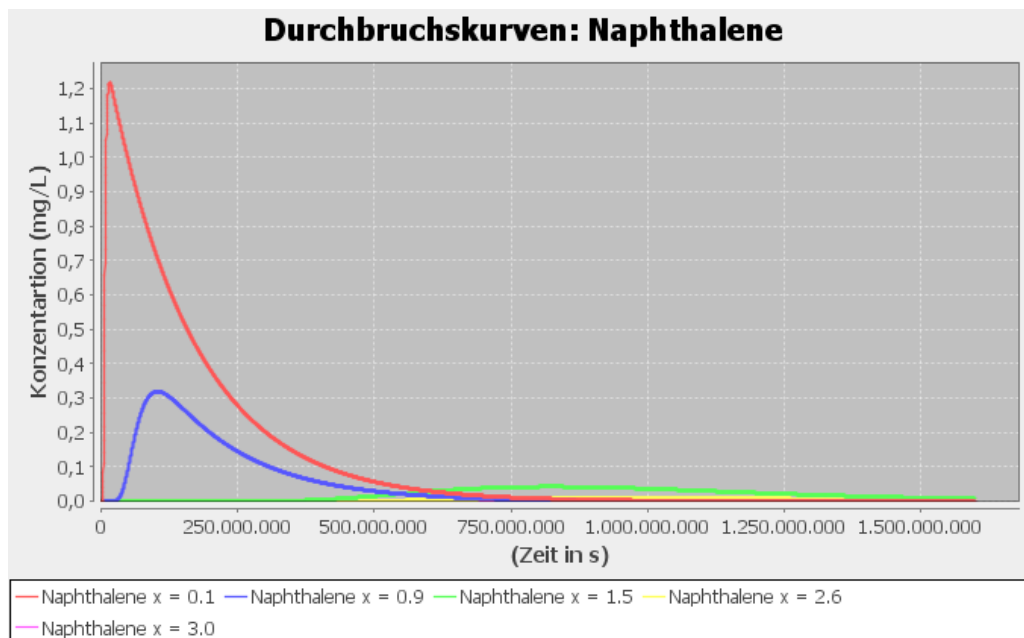


Abbildung 17 Beispiel 5s_bio_50a - Naphthalin-Durchbruchskurven an den Schichtgrenzen.

5s_nobio_44a

Beschreibung des Szenarios

Szenario ähnlich wie in Beispiel „5s_bio_50a“, jedoch wird hier kein Bioabbau berücksichtigt. Alle anderen Parameter sind gleich, mit Ausnahme der zeitlichen Diskretisierung (4000 Zeitschritte, $\Delta t = 345600$ s (4 Tage), Simulationszeitraum ca. 50 Jahre).

Ergebnisse

Die berechneten Durchbruchkurven am Ort der Beurteilung zeigt Abbildung 18. Man sieht deutlich die gegenüber Szenario 5s_bio_50a erhöhten Maximalwerte des Konzentrationsdurchbruchs.

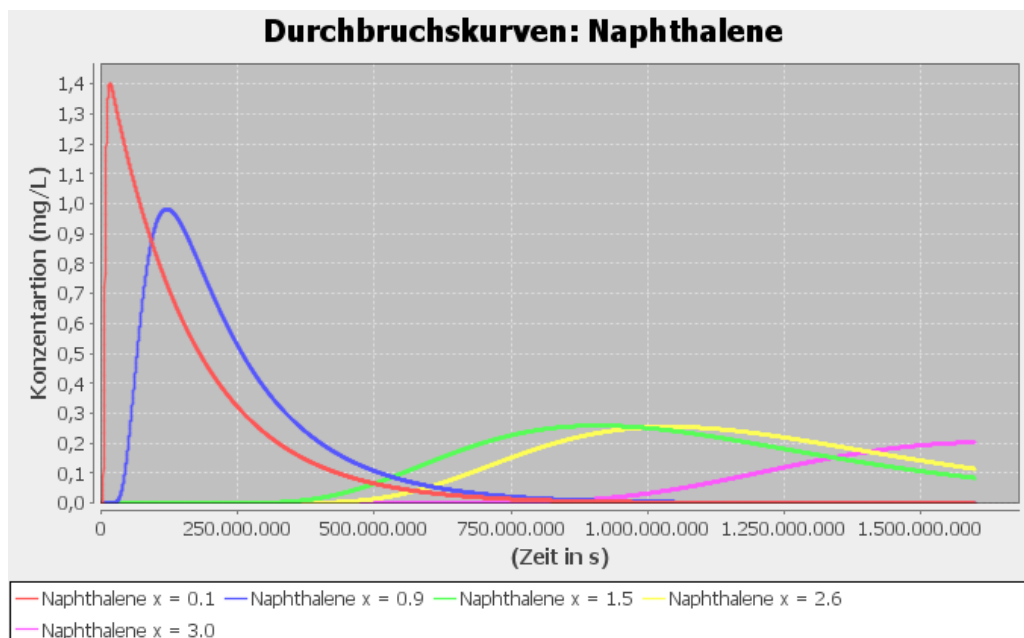


Abbildung 18 Beispiel 5s_nobio_44a - Naphthalin-Durchbruchkurven an den Schichtgrenzen.

5s_bio_50a_pf

Beschreibung des Szenarios

Berechnung wie im Beispiel „5s_bio_50a“, jedoch wird hier mit der Berücksichtigung von präferentiellen Fließwegen in Schicht 4. Statt der Berechnung der Verweilzeitenverteilung durch WinSMART wird hier eine Datei eingelesen (Verzeichnis data/Sut_pf.pdf.txt).

Den Unterschied in den Verweilzeitenverteilungen zeigt Abbildung 19

Die resultierenden Unterschiede in den Konzentrationsdurchbruchkurven an der Unterkante von Schicht 4 wird in Abbildung 20 veranschaulicht.

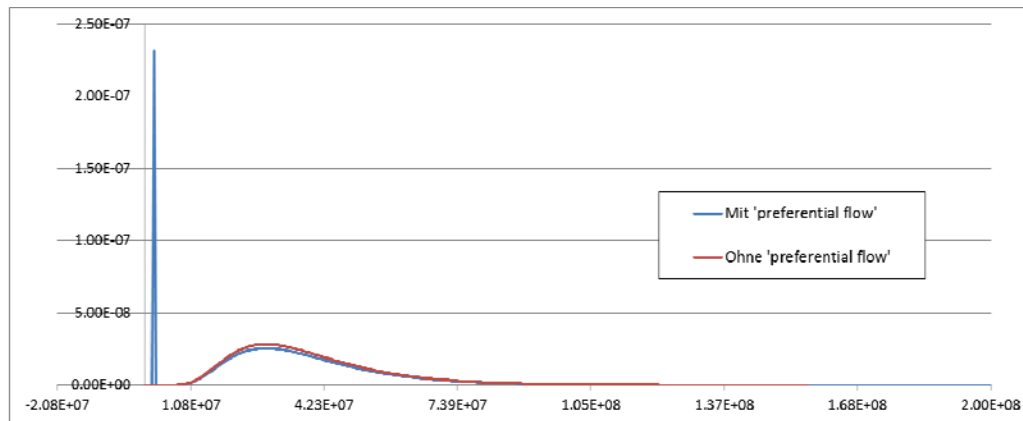


Abbildung 19 Bsp. 5s_bio_50a_pf – Verweilzeitenverteilung mit und ohne Berücksichtigung preferentieller Fließwege.

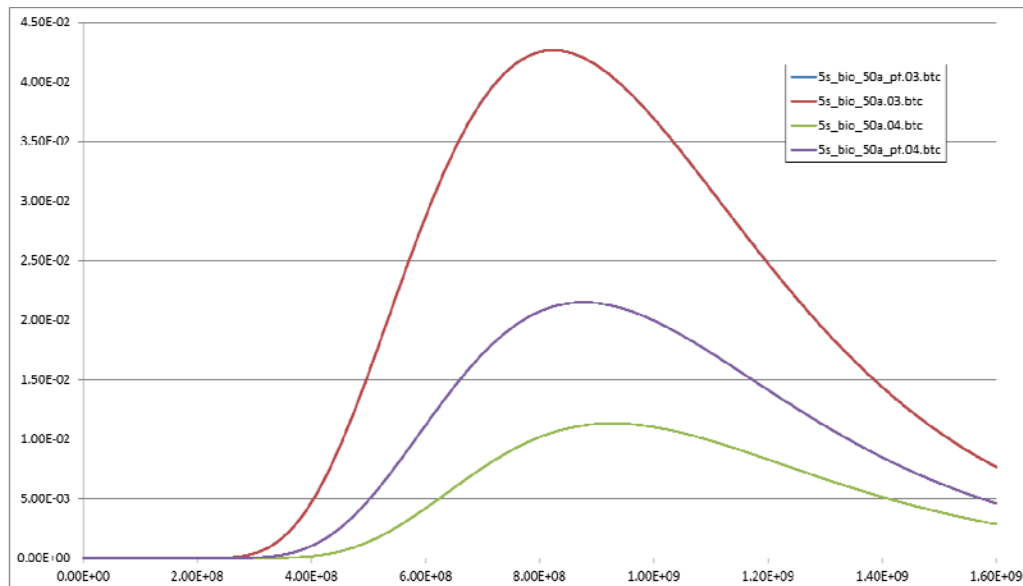


Abbildung 20 Konzentrationsdurchbruchkurven an der OK und an der UK von Schicht 4.

1.5 Beispiele zur Verifizierung der sequentiellen Simulation mehrerer Modellschichten im SMART-Modus

disp_stt

Beschreibung des Szenarios

Beispiel zur Beschreibung des Stofftransports eines Schadstoffs (Phenanthren - PHE) mit konstanter Input-Konzentration in einer 100 cm langen Säule, mit Intrapartikeldiffusion (numerisch) und ohne Bioabbau.

Das Aquifermaterial besteht aus einer Lithokomponente (Muschelkalk) und einer Korngrößenklasse ($d = 2,0$ mm). Die Berechnung des scheinbaren Diffusionskoeffizienten erfolgt über eine lineare Sorptionsisotherme (Henry-Isotherme).

Die Berechnung der Verweilzeitenverteilung erfolgte extern (Datei *disp_stt.pdf* im

Ordner /data) für folgende Annahmen: $q = 300 \text{ mm/a}$, $n=n_e=0.3$, $L = 1 \text{ m}$, $\alpha = 0.5 \text{ m}$.

disp_seq_stt

Beschreibung des Szenarios

Gegenstück zum Beispiel „disp_stt“. Hier allerdings Unterscheidung und sequentielle Simulation zweier Schichten ($L_1 = 0.3 \text{ m}$, $L_2 = 0.7 \text{ m}$).

Die Berechnung der Verweilzeitenverteilung erfolgte extern (Datei *disp_seq1_stt.pdf* für obere Schicht 1 sowie *disp_seq2_stt.pdf* für untere Schicht 2 im Ordner /data) für die gleichen Annahmen wie in Beispiel „disp_stt“ ($q = 300 \text{ mm/a}$, $n=n_e=0.3$, $\alpha = 0.5 \text{ m}$).

Ergebnisse

Abbildung 2 zeigt, dass die Unterschiede in den Berechnungsergebnissen gering sind ($< 1\%$).

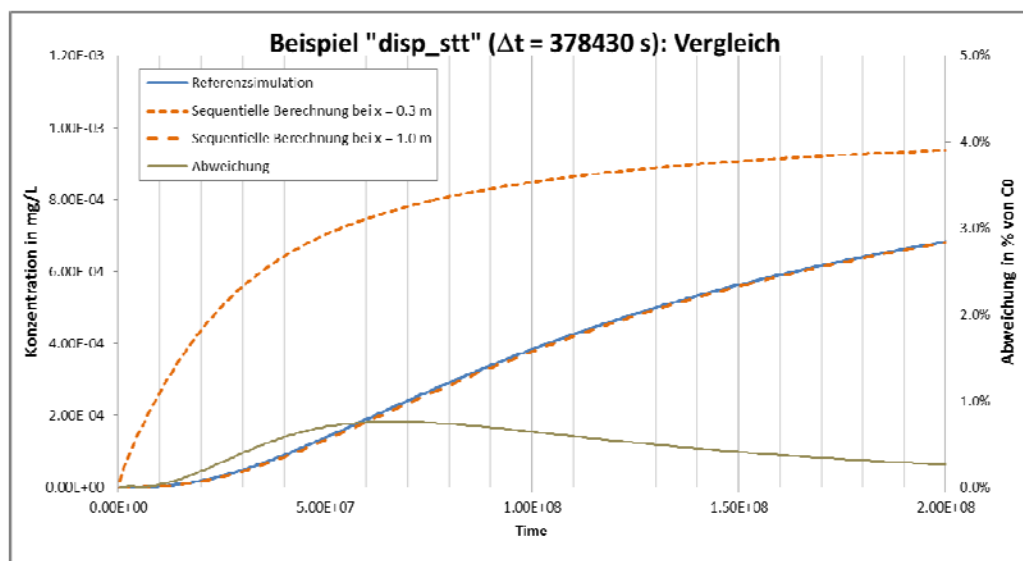


Abbildung 21 Vergleich der PHE-Durchbruchskurve(n) einer sequentiellen Simulation zweier Schichten ($L_1 = 0.3 \text{ m}$, $L_2 = 0.7 \text{ m}$) mit dem Ergebnis der Referenzsimulation (eine Schicht).

disp_cons_stt

Beschreibung des Szenarios

Beispiel zur Beschreibung des Stofftransports eines konservativen Tracers mit konstanter Input-Konzentration in einer 100 cm langen Säule.

Die Berechnung der Verweilzeitenverteilung erfolgte extern (Datei *disp_cons_stt.pdf* im Ordner /data) für folgende Annahmen: $q = 300 \text{ mm/a}$, $n=n_e=0.3$, $L = 1 \text{ m}$, $\alpha = 0.5 \text{ m}$.

disp_cons_seq_stt

Beschreibung des Szenarios

Gegenstück zum Beispiel „disp_cons_stt“. Hier allerdings Unterscheidung und sequentielle Simulation zweier Schichten ($L_1 = 0.3$ m, $L_2 = 0.7$ m).

Die Berechnung der Verweilzeitenverteilung erfolgte extern (Datei *disp_cons_seq1_stt.pdf* für obere Schicht 1 sowie *disp_cons_seq2_stt.pdf* für untere Schicht 2 im Ordner /data) für die gleichen Annahmen wie in Beispiel „disp_stt“ ($q = 300$ mm/a, $n=n_e=0.3$, $\alpha = 0.5$ m).

Ergebnisse

Abbildung 3 zeigt, dass die Unterschiede in den Berechnungsergebnissen gering sind ($< 1\%$).

Die Übereinstimmung mit den Ergebnissen der bisherigen SMART Version 3.0 (sequentielle Verbindung der Berechnungen der einzelnen Schichten händisch) und der analytischen Berechnung zeigt, dass die neue SMART Version korrekt rechnet (Abbildung 4).

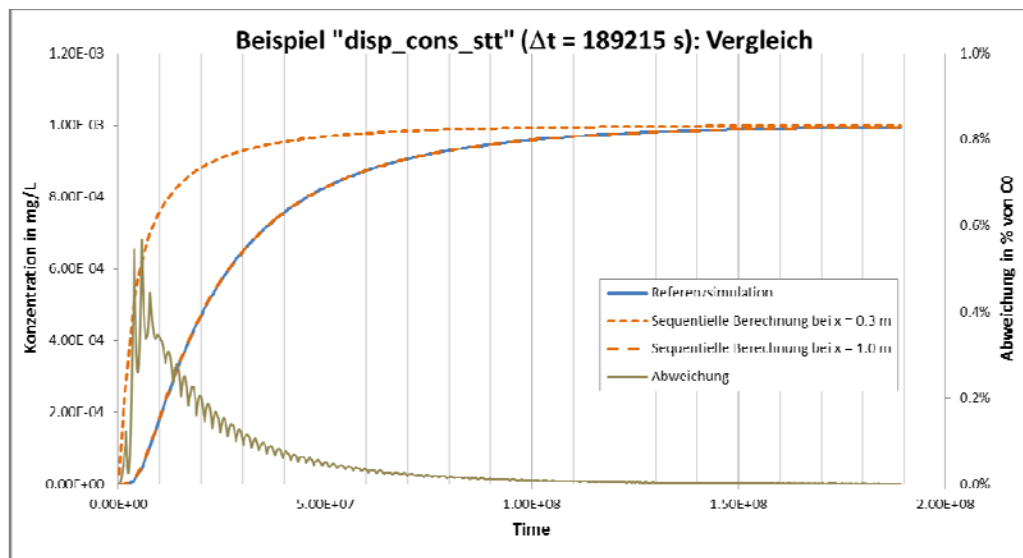


Abbildung 22 Vergleich der PHE-Durchbruchskurve(n) einer sequentiellen Simulation zweier Schichten ($L_1 = 0.3$ m, $L_2 = 0.7$ m) mit dem Ergebnis der analytischen Referenzberechnung (eine Schicht).

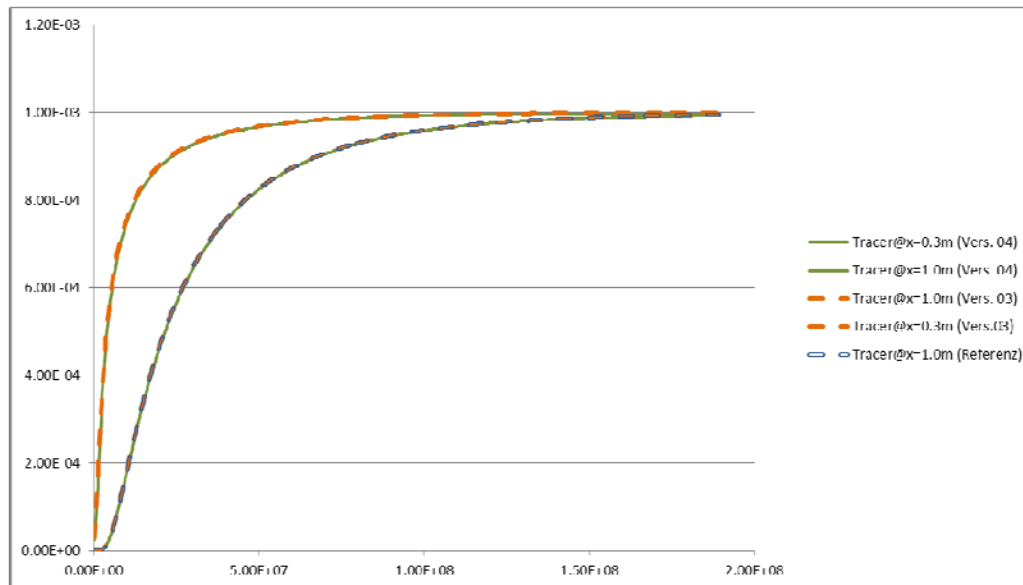


Abbildung 23 Durchbruchkurve(n) eines konservativen Tracers einer sequentiellen Simulation zweier Schichten ($L_1 = 0.3$ m, $L_2 = 0.7$ m) mit der SMART Version 3.0 und der neuen Version 4.0 im Vergleich zu dem analytisch berechneten Referenzergebnis (eine Schicht).

disp_cons_seq_stt_b

Beschreibung des Szenarios

Berechnung wie im Beispiel „disp_cons_seq_stt“, jedoch wird hier in der ersten Schicht die Verweilzeitenverteilung nicht eingelesen, sondern analytisch berechnet.

disp_cons_seq_stt_c

Beschreibung des Szenarios

Berechnung wie im Beispiel „disp_cons_seq_stt“, jedoch wird hier in beiden Schichten die Verweilzeitenverteilung analytisch berechnet.

2 Quellen

Liedl, R., 2010. Infos zum Programm SMART. Vortrag an der TU Dresden, 17. November 2010.

Ogata, A., Banks, R.G., 1961. A solution of the differential equation of longitudinal dispersion in porous media. Prof. paper 411-A, U.S. Geol. Survey, Washington D.C.