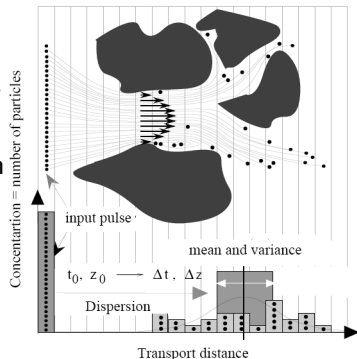


Versuchsteil II – Ziele

- → hydraulischen Eigenschaften und Richardgleichung als Basis für Modellierung der Dynamik von Flüssigkeiten in porösen Medien
- ⇒ Messung und Parametrisierung der hydrodynamischen Dispersion
- ⇒ Vergleich von zwei theoretischen Modellen (CD- und MI-Modell)

Konvektions-Dispersions-Modell (CD) I

- Annahme: gelöste Moleküle wandern hauptsächlich entlang der Stromlinien des heterogenen Geschwindigkeitsfeldes
- Geschwindigkeitsänderung durch Diffusion → alle möglichen Geschwindigkeiten
- ⇒ zentraler Grenzwertsatz:
Gaußverteilung der zurückgelegten Wegstrecken Δz in Δt mit Mittelwert $\langle z \rangle = \bar{v} \cdot t$



Konvektions-Dispersions-Modell (CD) II

Teilchentransport durch Konvektion, diffusive Prozesse und hydrodynamischer Dispersion

$$j_T = \underbrace{j_w c_w}_{j_T^{\text{conv}}} - \underbrace{D_{\text{eff}} \partial_z c_w}_{j_T^{\text{disp}}}$$

j_w Volumenfluss des Wassers

c_w Lösungskonzentration im Wasser

D_{eff} effektiver Diffusionskoeffizient, berücksichtigt Dispersion und molekulare Diffusion

⇒ Massenerhaltung des gelösten Stoffes:

$$\partial_t \theta c_w + \partial_z j_T = 0$$

Konvektions-Dispersions-Modell (CD) III

⇒ Konvektions-Dispersions-Gleichung mit $V := \bar{v} = \frac{j_w}{\theta}$ und Dispersionskoeffizienten $D := \frac{D_{\text{eff}}}{\theta}$

$$\partial_t c_w + V \partial_z c_w - D \partial_z^2 c_w = 0$$

V und D sind freie Parameter des Konvektions-Dispersions-Modells. Für $\langle z \rangle$ und $\langle t \rangle$ folgt:

$$\begin{aligned} \langle z \rangle &= Vt \quad , \quad \sigma_z^2 = 2Dt \\ \langle t \rangle &= \frac{z}{V} \quad , \quad \sigma_t^2 = \frac{2Dz}{V^3} \end{aligned}$$

⇒ Messung dieser Verteilungen im Experiment beim Fluss einer Farblösung (Brilliant Blue) durch Bodenprobe

CD-Modell-Erweiterung: Mobil-Immobil-Modell (MIM) I

- reale Flüssigkeiten: unbewegliche Schichten an Porenwänden
→ unbeteiligt am Stofftransport
→ Erweiterung des CD-Modells zum Mobil-Immobil-Modell (MIM)
- Mobile und Immobiler Phasen:
Wassergehalt: $\theta \rightarrow \theta_m + \theta_{im}$
Lösungskonzentration: $c_w \rightarrow c_m + c_{im}$
⇒ erweiterte Konvektions-Dispersions-Gleichung

$$\partial_t c_m + \frac{\theta_{im}}{\theta_m} \partial_t c_{im} + V \partial_z c_m - D \partial_z^2 c_m = 0$$

CD-Modell-Erweiterung: Mobil-Immobil-Modell (MIM) II

- gelöste Stoffe wechseln zwischen mobiler und immobil Phase
→ neuer Parameter $\omega \in \mathfrak{R} > 0$

$$\partial_t c_{im} = -\omega(c_{im} - c_m)$$

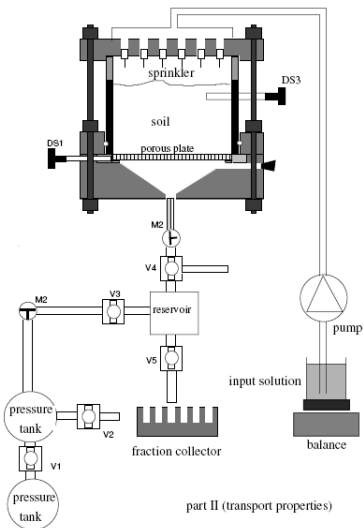
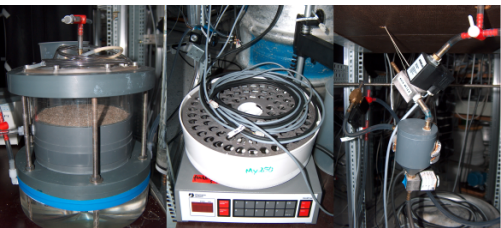
- Verzögerungsfaktor R :

$$R = \frac{\theta}{\theta_m} = 1 + \frac{\theta_{im}}{\theta_m}$$

⇒ 4 freie Parameter im MI-Modell: Diffusionskonstante D , mittlere Geschwindigkeit V , ω und Verzögerungsfaktor R

Grundprinzip der Messung

- Sprinkler beregnet Bodenprobe (Wasser / Tracer)
- Abfüllung des Durchflusses in Reagenzgläsern zur späteren Spektroskopie
→ Tracer-Durchbruchskurve
- Anpassung der Modellparameter an Durchbruchskurve

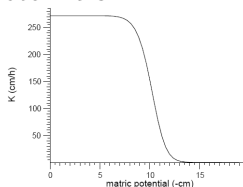


Aufbau und Vorbereitung der Messung I

- Wasser unterhalb der Keramikplatte entfernt
- Anschluss der Pumpe und der Magnetventile an Computer
→ Konfigurationsdatei *instruments.dat* editiert
- Kalibration der Pumpe
- Bestimmung des benötigten Matrix-Potenzials

AbleSEN von hydraulischer
Leitfähigkeitsfunktion aus
Versuchsteil 1

→ Konfigurationsdatei *dynamics.dat*



Aufbau und Vorbereitung der Messung II

- Berechnung der Messdauer

$$t_{mess} = \frac{V_w}{j_w} = \frac{5 \cdot A \cdot h \cdot \theta(\Psi_m)}{j_w} = 2.25h$$

- Berechnung der Reagenzglas-Fülldauer für 95 Rgls
⇒ Fülldauer $t_F = t_{mess}/95 = 85s$.
- Probe mit reinem Wasser berechnen → bis konstantes Fließfeld
- Herstellung des Tracers (Brilliant-Blue-Lösung)
≈ 20mg/l (spätere Messung: 19.51 mg/l)

Nachtmessung

Am Abend:

- Start der Messung: Wasser durch Brilliant-Blue ausgetauscht
- keine Befüllung der ersten 4 Rgl wegen experimentelles Missgeschick
 - ⇒ ersten 5.7min Messdaten fehlen
 - ⇒ ersten 4 Konzentrationen mit reinem Wasser gemessen

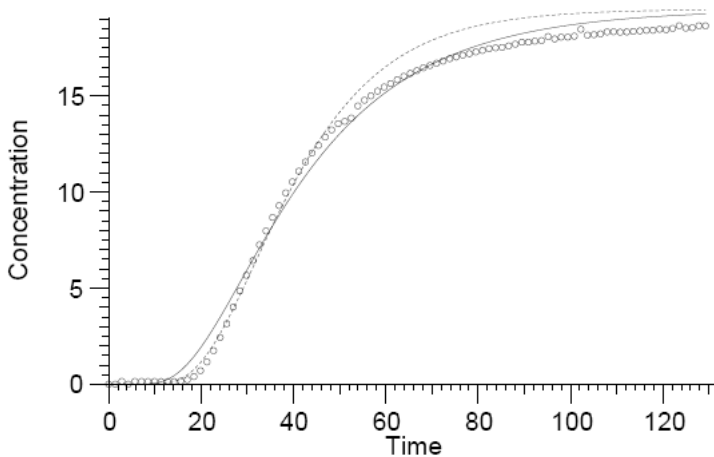
Am nächsten Tag:

- Kalibrierung des Photometers mittels 10 Standardlösungen
- Bestimmung der BB-Konzentrationen aller Reagenzgläser
→ Tracer-Durchbruchskurve

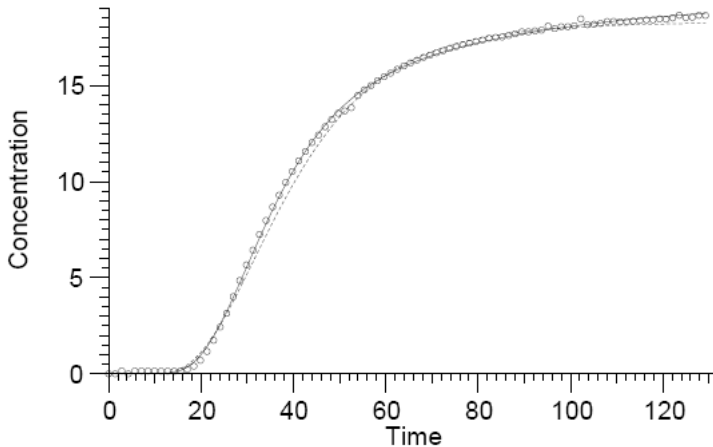
Auswertung – Vorgehensweise (beide Modelle)

- 1 grobe Bestimmung der Modell-Startparameter von Durchbruchkurve
- 2 Lösung der Konvektions-Dispersions-Gleichung mit Startparametern
- 3 Iterative Verbesserung der Parameter von Hand
- 4 Verwendung des LM-Algorithmuses zur Bestimmung optimaler Parameter

CD-Modell



MI-Modell



LM-Ergebnisse: CD- und MI-Modell

Durchbruchskurve:

$$\langle t \rangle \approx 40 \text{ min}$$

$$\sigma_t^2 \approx 23.5 \text{ min}^2$$

| | CD-Modell | MI-Modell |
|----------|--|--|
| V | $(0.2408 \pm 0.0002) \frac{\text{cm}}{\text{min}}$ | $(0.298 \pm 0.002) \frac{\text{cm}}{\text{min}}$ |
| D | $(0.426 \pm 0.002) \frac{\text{cm}^2}{\text{min}}$ | $(0.216 \pm 0.003) \frac{\text{cm}^2}{\text{min}}$ |
| R | — | (1.313 ± 0.004) |
| ω | — | (0.0268 ± 0.0006) |
| | $\begin{pmatrix} 1 & 0 \\ -0.1747 & 1 \end{pmatrix}$ | $\begin{pmatrix} 1 & 0 & 0 & 0 \\ -0.8519 & 1 & 0 & 0 \\ +0.9136 & -0.8480 & 1 & 0 \\ +0.8583 & -0.6678 & +0.6355 & 1 \end{pmatrix}$ |

Fehlerquellen

- Änderung der Bodenmatrix durch Aufschwemmen
- Luftblasen in der Probe
- Endlichkeit der Bodenprobe (Randproblem)
- Lösung reagiert mit Bodenpartikel
→ Massenerhaltung verletzt
- unterschiedliche Dichten von Wasser und Tracer
- zusätzliche WW zwischen Tracer und Boden
- LM-Algorithmus läuft in lokales Minimum

Zusammengefasste Erkenntnisse

- makroskopische hydraulische Eigenschaften beschreiben Wasserdynamik
→ Bestimmung mittels Inverse-Modeling-Verfahren
- Lösungstransportprozesse werden hinreichend mittels MI-Modell beschrieben
→ beinhaltet Konvektion, Dispersion und Immobile Phase

Danke! Fragen?

Vielen Dank für Ihre Aufmerksamkeit!

Vielen Dank an unseren Betreuer **Klaus Schneider** und an die chemisch-technische Assistentin!