

DECKBLATT

Projekt	PSP-Element	Obj. Kenn.	Funktion	Komponente	Baugruppe	Aufgabe	UA	Lfd. Nr.	Rev.
N A A N	NNNNNNNNNN	NNNNNN	NN A A A N N	A A N N N A	A A N N	X A A X X	A A	NNNN	N N
9K	352126.38	-	-	-	-	EGA	RB	0001	00

Titel der Unterlage Modellrechnung zur Grundwasserbewegung  
 GSF-Bericht "Beschreibung des Programms SAPT zur  
 Stromlinienberechnung, August 1988"

Seite I  
 Stand 08/88  
 lfd. Nr. 203

Ersteller GSF

Textnummer

Stempelfeld

PSP-Element TP 2: 9K/2122423

zu Plan-Kapitel: 3.1.10.4

PL



11/02/89

Freigabe für Behörden

PL



11/02/89


Freigabe im Projekt

Diese Unterlage unterliegt samt Inhalt dem Schutz des Urheberrechts sowie der Pflicht zur vertraulichen Behandlung auch bei Beförderung und Vernichtung und darf vom Empfänger nur auftragsbezogen genutzt, vervielfältigt und Dritten zugänglich gemacht werden. Eine andere Verwendung und Weitergabe bedarf der ausdrücklichen Zustimmung der PTB.



**Beschreibung des Programms SAPT**  
**zur Stromlinienberechnung**

**AUGUST 1988**

**Verfasser:** 

## Inhaltsverzeichnis

Seite

1	Zusammenfassung.....	1
2	Einleitung.....	2
3	Charakterisierung des Strömungsfeldes.....	3
4	Berechnung der Stromlinien.....	4
5	Die Programmsteuerung.....	6
6	Das JOB-INPUT-FILE.....	7
7	Fehlermöglichkeiten.....	9
8	Verifizierung des Programms.....	10
8.1	Das Geschwindigkeitsfeld.....	10
8.2	Ergebnisse.....	11
8.3	Bewertung.....	11
	Tabellenverzeichnis.....	12
	Abbildungsverzeichnis.....	12
	Programmbeschreibung rsa.....	13

### Zusammenfassung

Das Programm SAPT (SWIFT ANALYTIC PARTICLE TRACKING) berechnet auf analytische Weise die Stromlinien, sowie die Laufzeit und Laufstrecke von Wasserteilchen in einem vorgegebenen Strömungsfeld, welches von dem Finite-Differenzen-Programm SWIFT berechnet wurde. Die Stromlinien werden in einer Tabelle und als Lineprint dargestellt.

Das Programm benötigt eine JOB-INPUT Datei, welche zur Steuerung des Programmablaufs dient, und eine Ausgabedatei von SWIFT, in der die Porositäten und die Geschwindigkeitsfelder abgelegt sind.

## 1 Einleitung

Will man ein vorgegebenes Strömungsfeld charakterisieren, so reicht es vielfach nicht aus, daß man das Geschwindigkeitsfeld vektoriell auf einer Zeichnung oder in Tabellen darstellt. Betrachtet man beispielsweise kontaminiertes Grundwasser, so ist es von großer Bedeutung zu wissen, wohin und wie schnell das kontaminierte Grundwasser fließt. Für die Beantwortung solch einer Fragestellung berechnet man Stromlinien. Diese liefern Auskunft darüber, wie sich ein Teilchen in einem vorgegebenen Strömungsfeld bewegt.

## 2 Charakterisierung des Strömungsfeldes

Das Programm SAPT ist auf die von SWIFT bei der Grundwasserrechnung erzeugte Ausgabedatei zugeschnitten. Das Programm SWIFT berechnet auf einem regelmäßigen Gitter die hydraulischen Drücke in den Blockmittelpunkten. Nach dem Gesetz von Darcy ist die Grundwasserströmung proportional zum Druckgradienten. Die Komponenten des Druckgradienten werden in SWIFT zwischen den in jeder Richtung jeweils benachbarten Blöcken gebildet, so daß die Geschwindigkeitskomponenten in der Mitte der Grenzfläche zwischen den Blöcken vorliegen und senkrecht zur Fläche gerichtet sind. Dies wird auf Abbildung 1 in einem zweidimensionalen Beispiel verdeutlicht.

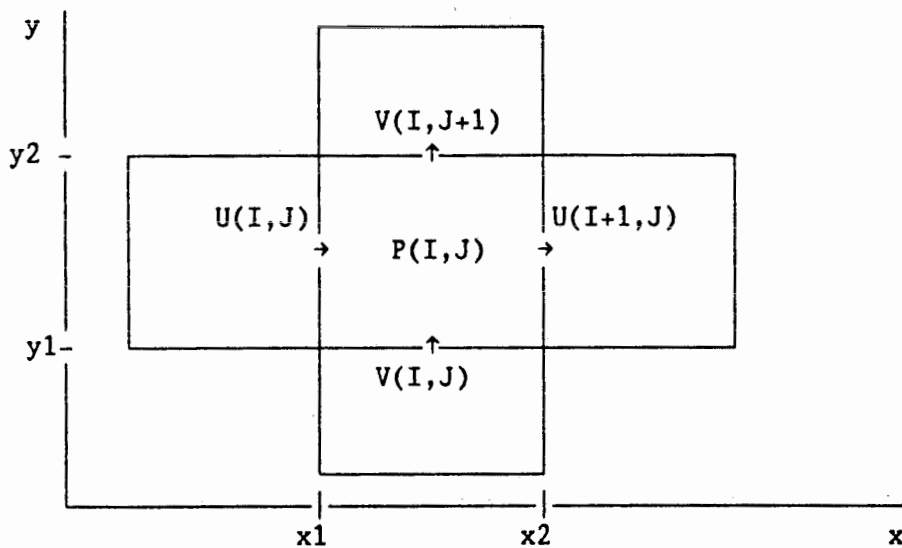


Abb. 1: Diskretisierung des Geschwindigkeit- und Druckfeldes

U ist die x-Komponente der Geschwindigkeit

V ist die y-Komponente der Geschwindigkeit

P ist der hydraulische Druck

I ist die Blockindizierung in x-Richtung

J ist die Blockindizierung in y-Richtung

### 3 Die Berechnung der Stromlinien

Ausgehend von einem Startblock wird jede Stromlinie blockweise berechnet. Für die Berechnung der Stromlinie in einem Block wird angenommen, daß die Geschwindigkeit in jeder der drei Raumrichtungen nur eine lineare Funktion der Koordinate, in die die Geschwindigkeit zeigt, ist. Die Geschwindigkeit in x-Richtung wird damit nur eine Funktion der x-Koordinate. Mit dieser Interpolationsannahme bleibt die Kontinuitätsgleichung an jedem Punkt im Block gültig, aber man bekommt unstetige Geschwindigkeitsfelder. In Grundwasserströmungen mit abrupten Geschwindigkeitsänderungen von Wasserleiter zu Wasserstauer, z.B. beim Übergang von Ton zu Sandstein, sind diese unstetigen Geschwindigkeiten an den Grenzflächen vertretbar. Mit dieser Interpolation lassen sich für jeden Block die relativen Ortskoordinaten des Teilchens (X,Y,Z) als Funktion der Relativzeit im Block bestimmen.

Sei  $t_e$  die Eintrittszeit und  $t_a$  die Austrittszeit des Teilchens in b.z.w. aus einem Block. Die Relativzeit  $t$  in dem Block ist definiert als:  $t = t_r - t_e$ , wobei  $t_r$  die Zeitkoordinate ist.

$$X=f(t)$$

$$Y=g(t)$$

$$Z=h(t)$$

Beispielhaft für alle drei Koordinaten wird die Bewegungsgleichung und deren Lösung für die x-Koordinate abgeleitet.

Sei  $x_1$  die x-Koordinate des linken und  $x_2$  die des rechten Blockrandes.

Sei  $X$  die relative Ortskoordinate des Teilchens im Block.

$$X(t) = x(t) - x_1 \quad x_1 \leq x \leq x_2$$

Sei  $X_s$  der Startpunkt im Block.

$$X_s = X(t=0)$$

Sei  $U_1$  die Geschwindigkeit in x-Richtung am linken und  $U_2$  die am rechten Blockrand.

$$U_1 = U(I, J, K) \quad U_2 = U(I+1, J, K)$$



Mit  $\Delta U = U_2 - U_1$  und  $\Delta X = x_2 - x_1$  läßt sich die Bewegungsgleichung schreiben:

$$u(x(t)) = U_1 + \frac{\Delta U}{\Delta X} * x(t)$$

Die gewöhnliche Differentialgleichung für die X Koordinate des Teilchens lautet damit:

$$\frac{d x(t)}{d t} = U_1 + \frac{\Delta U}{\Delta X} * x(t)$$

Die Lösung dieser Differentialgleichung ist:

$$x(t) = (x_s + U_1 * \frac{\Delta X}{\Delta U}) * \exp(\frac{\Delta U}{\Delta X} * t) - U_1 * \frac{\Delta X}{\Delta U} \quad \text{Gl. 3.1}$$

Um die Bahnkurve eines Teilchen in einem Block bestimmen zu können, muß man noch die Verweilzeit  $\Theta$  ( $\Theta = t_a - t_e$ ) in dem Block ermitteln. Gleichung 3.1 wird dafür nach der Zeit aufgelöst, und für jede erreichbare Blockgrenze wird die Zeit ermittelt, die das Teilchen braucht um die Grenze zu erreichen. Die minimale dieser Zeiten ist dann die Verweilzeit. Zum Beispiel errechnet sich die Verweilzeit, wenn die Blockgrenze  $X = \Delta X$  zuerst erreicht wird, aus:

$$\Theta = \frac{\Delta X}{\Delta U} * \ln \left[ \frac{U_1 * \frac{\Delta X}{\Delta U} + \Delta X}{U_1 * \frac{\Delta X}{\Delta U} + x_s} \right] \quad \text{Gl. 3.2}$$

#### 4 Die Programmsteuerung

SAPT ist für den interaktiven Betrieb gedacht und fragt nach Start des Programms nach den Namen von drei Dateien.

Die Benutzer am IFT sollten die Routine `rsa`, die auf dem Directory `/mnt/arens/quellen/script` steht, zum Start des Programms benutzen.

Eine Beschreibung von `rsa` befindet sich auf der letzten Seite.

Das `JOB-INPUT-FILE` : Diese Datei enthält Steuerparameter für SAPT und die Startpunkte der Teilchen .

Das `Daten-INPUT-FILE`: Dies ist die Ausgabedatei von SWIFT (TAPE 7).

Das `OUTPUT-FILE` : Dieses FILE enthält die Darstellung der von SAPT errechneten Stromlinien.

Wahlweise wird für die graphische Darstellung der Stromlinien die Datei mit dem festen Namen `KOORDINATEN.DAT` angelegt.

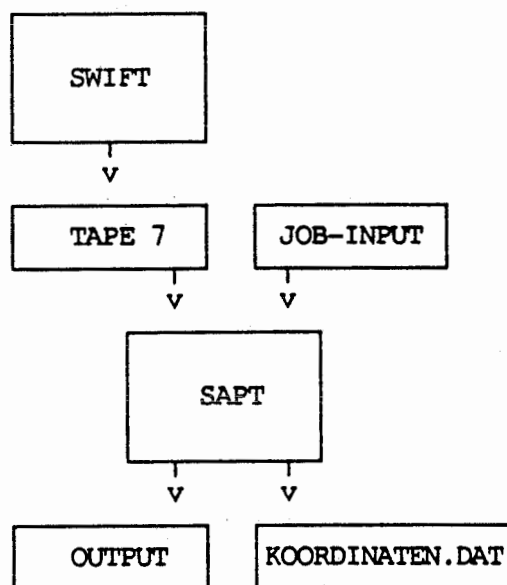


Abb. 2: Ablaufdiagramm für eine Stromlinienberechnung mit SAPT

5 Das JOB-INPUT-FILE

1. Zeile (A50)

Liste: TITLE (CHARACTER\*50)

TITLE enthält eine Überschrift für die Stromlinien.

2. Zeile (A10)

Liste: DATUM (CHARACTER\*10)

DATUM enthält eine weitere zehn Zeichen lange Kennung.

3. Zeile (Unformatiert)

Liste: IBA,IBE (INTEGER)

IBA,IBE grenzt den Blockbereich in X-Richtung, in dem das Teilchen laufen darf, ein.  $0 < IBA < IBE \leq ID$

ID ist die Anzahl der Modellblöcke in x-Richtung.

4. Zeile (Unformatiert)

Liste: JBA,JBE (INTEGER)

JBA,JBE grenzt den Blockbereich in Y-Richtung, in dem das Teilchen laufen darf, ein.  $0 < JBA < JBE \leq JD$

JD ist die Anzahl der Modellblöcke in y-Richtung.

5. Zeile (Unformatiert)

Liste: KBA,KBE (INTEGER)

KBA,KBE grenzt den Blockbereich in Z-Richtung, in dem das Teilchen laufen darf, ein.  $1 < KBA < KBE \leq KD$

KD ist die Anzahl der Modellblöcke in z-Richtung.

6. Zeile (Unformatiert)

Liste: LLL,RICT,KOOP (INTEGER)

LLL beschränkt die Anzahl der von einem Teilchen zu durchlaufenen Blöcke (Abbruchkriterium für fehlerhafte Stromlinien).

RICHT = 1 Teilchen laufen vorwärts  
= -1 Teilchen laufen rückwärts

KOOP Nur für KOOP=1 wird eine Datei KOORDINATEN.DAT angelegt,  
welche notwendig für die Zeichnung der Stromlinien ist.

7. Zeile (I1)

Liste: ANZ

ANZ definiert die Anzahl der zu berechnenden Trajektorien.

$1 \leq \text{ANZ} \leq 9$

8. bis 7+ANZ. Zeile (Unformatiert)

Liste: ISF,JSF,KSF,XSF,YSF,ZSF (3INTEGER,3REAL)

ISF,JSF,KSF ist die Blockindizierung des Startblocks.

XSF,YSF,ZSF ist der relative Startpunkt im Startblock.

$0.,0.,0. \leq \text{XSF,YSF,ZSF} \leq 1.,1.,1.$

## 6. Fehlermöglichkeiten

Durch eine ungünstige Wahl des Startpunkts eines Teilchens oder durch eine fehlerhafte SWIFT Rechnung kann es zu folgenden drei Fehlern kommen, die keinen Programmabbruch zur Folge haben.

Die Geschwindigkeit im Startpunkt ist Null. Es wird eine Fehlermeldung auf das OUTPUT-FILE geschrieben " Geschwindigkeit im Block ist 0! ".

Die Strömung im erreichten Block geht von allen Seiten in den Block hinein. Die Stromlinie wird abgebrochen, und es erscheint eine Fehlermeldung " Hier kommt keiner mehr raus! ". Die Geschwindigkeiten im erreichten Block werden auf das OUTPUT-FILE geschrieben (U1, U2, V1, V2, W1, W2).

Das Teilchen bleibt auf einer Blockkante oder einer Blockecke hängen, so daß es immer zwischen zwei Blöcken pendelt. Dies kann durch die Unstetigkeiten im Geschwindigkeitsfeld verursacht werden ( Interpolationssannahme). Die Stromlinie wird nach LLL Blöcken abgebrochen, und es wird eine Fehlermeldung geschrieben " LLL Blöcke wurden durchlaufen! ". Der letzte Fehler kann durch eine kleine Änderung der Startposition des Teilchens behoben werden.

## 7 Verifizierung des Programms

Um die Qualität des Programms SAPT zu testen wurde die im Rahmen von Hydrocoin vorgeschlagene Testrechnung, Level 3 Case 7, für Particle Tracking durchgeführt. Mit SAPT werden Stromlinien in einem zweidimensionalen Strömungsfeld berechnet, für das analytisch berechnete Stromlinien existieren.

### 7.1 Das Geschwindigkeitsfeld

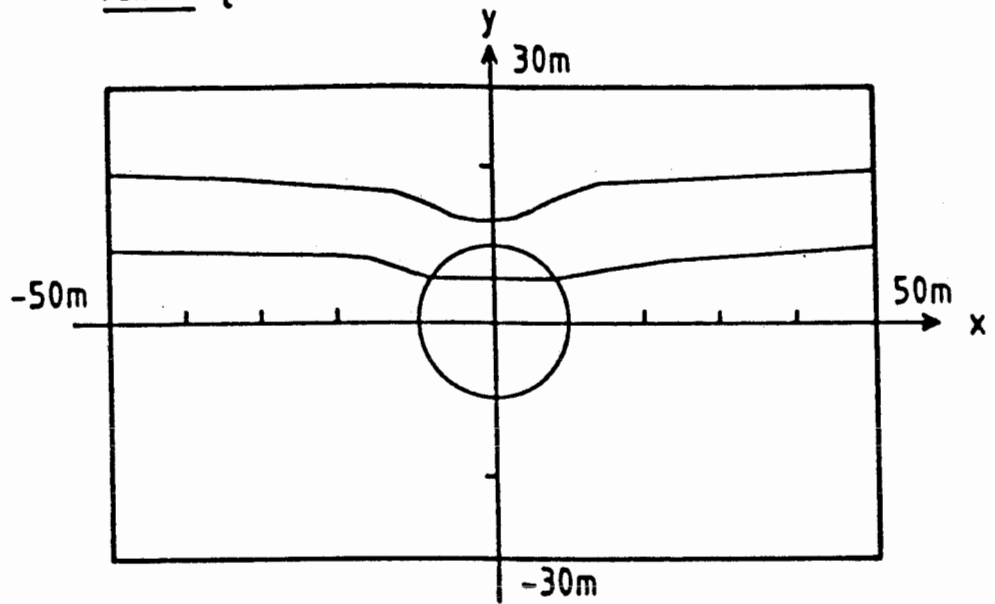
In einem rechteckigen Gebiet von 100m x 60m Ausdehnung liegt eine Kreisfläche von 20m Durchmesser (siehe Abb. 3). Es gelten unterschiedliche Definitionen für das Geschwindigkeitsfeld innerhalb oder außerhalb der Kreisfläche. Je nach Startpunkt müssen die Teilchen die Kreisfläche durchqueren oder auch nicht. Diskretisiert wird das gesamte Gebiet in Blöcke von 2m x 2m. Dies ergibt eine Gesamtblockzahl von 1500.

$$\text{für } |r| > a \quad \left\{ \begin{array}{l} U = \frac{K_b G}{\eta P_b} \left[ 1 - \frac{K_c - K_b}{K_c + K_b} a^2 \frac{y^2 - x^2}{r^4} \right] \\ V = \frac{K_b G 2 (K_c - K_b) a^2 x y}{\eta P_c (K_c + K_b) r^4} \end{array} \right.$$

$$\text{für } |r| \leq a \quad \left\{ \begin{array}{l} U = \frac{K_b G 2 K_c}{\eta P_c (K_c + K_b)} \\ V = 0 \end{array} \right.$$

$a = 10\text{m}$	$\eta = 10^{-3} \text{ Pa sec}$	$G = 10^3 \text{ Pa/m}$	$P_c = 0.1$	$P_b = 0.1$
Fall 1:	$K_b = 10^{-15} \text{ m}^2$	Fall 2:	$K_b = 10^{-15} \text{ m}^2$	
	$K_c = 10^{-13} \text{ m}^2$		$K_c = 10^{-17} \text{ m}^2$	

Fall 1:  $K_c = 10^{-13} \text{m}^2$



Fall 2:  $K_c = 10^{-17} \text{m}^2$

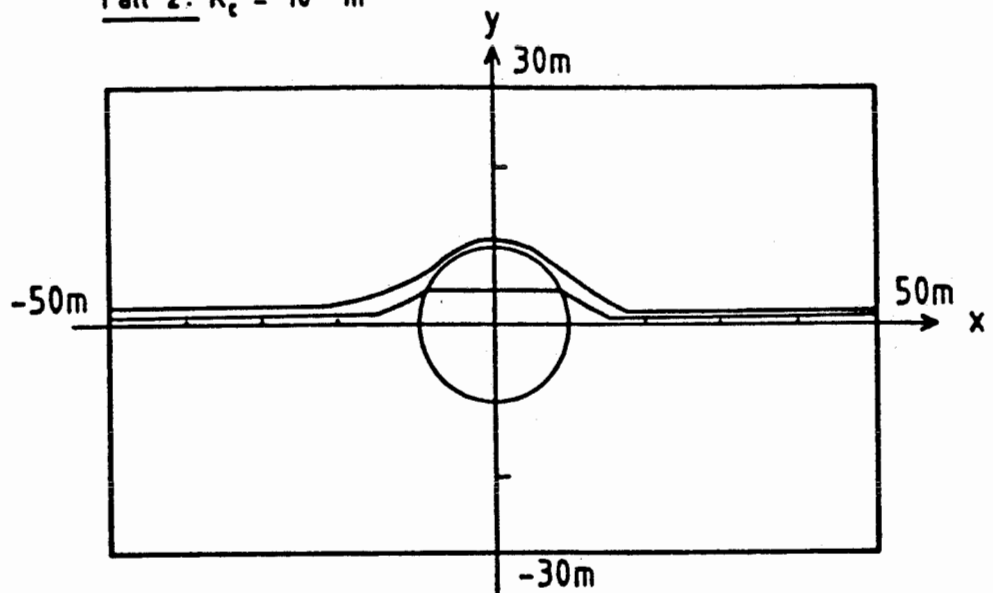


Abb. 3: Schematische Darstellung der Stromlinien

## 7.2 Ergebnisse

Die von SAPT berechneten Stromlinien werden in den Tabellen 1 - 3 mit den analytisch errechneten Stromlinien verglichen. Dargestellt wird, wann und wo ein Teilchen einen bestimmten Wert auf der x- Koordinate erreicht.

## 7.3 Bewertung

Im Fall 1 sind die vom Programm SAPT ermittelten Stromlinien nahezu identisch wie die analytisch berechneten Stromlinien.

Im Fall 2 sind deutliche Abweichungen zwischen den analytisch berechneten oder den mit SAPT berechneten Stromlinien erkennbar. Fall 2 stellt einen extremen Test für ein Particle Tracking dar. Teilchen, die nur geringfügig unterschiedliche Startpositionen haben, nehmen ähnliche Wege mit sehr unterschiedlichen Laufzeiten. Teilchen die an einem Ort mit einem  $y \leq 0.2m$  starten nehmen den kürzeren aber langsameren Weg durch den Kreis, während Teilchen die an einem Ort mit einem  $y > 0.2m$  starten, den Kreis schnell umfahren. Die Strömungsverhältnisse werden im Fall 2 nur dann richtig dargestellt, wenn die Diskretisierung so fein gewählt wird, daß die Kreisoberfläche und das Geschwindigkeitsfeld in der Nähe des Kreises fast stetig wiedergegeben werden. Eine Verfeinerung des Gitters von  $2m \times 2m$  auf  $1m \times 1m$  verbessert das Ergebnis sichtbar. Dies zeigt sich besonders deutlich für die Stromlinie 7 der verfeinerten Rechnung (siehe Tabelle 3).

Insgesamt läßt sich sagen, daß im Rahmen der Diskretisierung mit dem Programm SAPT Stromlinien in guter Übereinstimmung mit den analytischen Lösungen berechnet werden können.



Tabellenverzeichnis

Tab.1 Fall 1: Stromlinien für ein Gitternetz von 2m x 2m

Tab.2 Fall 2: Stromlinien für ein Gitternetz von 2m x 2m

Tab.3 Fall 2: Stromlinien für ein Gitternetz von 1m x 1m

Abbildungsverzeichnis

Abb. 1 Diskretisierung des Geschwindigkeit- und Druckfeldes

Abb. 2 Ablaufdiagramm für eine Stromlinienberechnung mit SAPT

Abb. 3 Schematische Darstellung der Stromlinien

### Programmbeschreibung für rsa (run sapt)

Das Programm rsa befindet sich auf dem Directory /mnt/arens/quellen/script. Mit rsa wird das Stromlinienprogramm sapt gestartet. Das Programm fragt zuerst nach dem Namen der JOB-INPUT Datei. Es wird ein Dateiname mit der Erweiterung .JOB erwartet. Die Erweiterung des Namen darf bei der Eingabe nicht mit eingegeben werden. Als nächstes fragt das Programm nach dem Namen des Directories, in der die JOB-INPUT Datei steht. Hier muß der vollständige Pfadnamen mit einem / am Ende eingegeben werden, z.B. /scr/arens/. Steht die Datei in dem gegenwärtigen Arbeitsdirectory ist nur die Eingabe von Return erforderlich. Der Name der SWIFT Rechnung wird als dritte Eingabe angefordert. Als vierte Eingabe wird der Name des Directories erwartet, in dem die SWIFT Rechnung steht. Auch hier wird der vollständige Pfadnamen mit einem / am Ende erwartet.

Tab. 1: Fall 1: Stromlinien für ein 2m x 2m Gitternetz  
 Koordinatenangaben in m, Zeitangaben in a

Stromlinie	Startpunkt	y Koordinate x=0		y Koordinate x=50		Reisezeit bis x=0		Reisezeit bis x=50	
		analytisch	berechnet	analytisch	berechnet	analytisch	berechnet	analytisch	berechnet
1	-50, 10	5.2	5.3	10	10	132	132	265	265
2	-50, 12	6.3	6.3	12	12	136	136	273	274
3	-50, 14	7.3	7.3	14	14	141	141	283	282
4	-50, 16	8.8	8.5	16	16	149	150	299	300
5	-50, 18	9.4	9.6	18	18	163	160	326	321
6	-50, 20	13.3	13.2	20	20	176	177	352	354
7	-50, 22	16.9	16.9	22	22	169	170	339	339
8	-50, 24	19.8	19.8	24	24	167	167	334	335

Tab. 2: Fall 2: Stromlinien für ein 2m x 2m Gitternetz  
 Koordinatenangaben in m, Zeitangaben in a

Stromlinie	Startpunkt	y Koordinate x=0		y Koordinate x=50		Reisezeit bis x=0		Reisezeit bis x=50	
		analytisch	berechnet	analytisch	berechnet	analytisch	berechnet	analytisch	berechnet
1	-50, 0.1	4.8	1.8	0.1	0.1	1611	1679	3216	3359
2	-50, 0.12	5.8	2.	0.12	0.12	1512	1550	3025	3099
3	-50, 0.14	6.8	2.1	0.14	0.14	1385	1547	2770	3094
4	-50, 0.16	7.8	2.2	0.16	0.16	1222	1545	2452	3089
5	-50, 0.18	8.7	2.3	0.18	0.18	993	1543	1974	3085
6	-50, 0.2	9.7	2.3	0.2	0.2	602	1540	1210	3083
7	-50, 0.5	10.1	3.4	0.5	0.5	202	1530	403	3060
8	-50, 1.	10.4	10.8	1.	1.	191	208	382	416

Tab. 3: Fall 2: Stromlinien für ein 1m x 1m Gitternetz  
 Koordinatenangaben in m, Zeitangaben in a

Stromlinie	Startpunkt	y Koordinate x=0		y Koordinate x=50		Reisezeit bis x=0		Reisezeit bis x=50	
		analytisch	berechnet	analytisch	berechnet	analytisch	berechnet	analytisch	berechnet
1	-50, 0.1	4.8	1.8	0.1	0.1	1611	1709	3216	3418
2	-50, 0.12	5.8	2.	0.12	0.12	1512	1679	3025	3357
3	-50, 0.14	6.8	2.	0.14	0.14	1385	1677	2770	3353
4	-50, 0.16	7.8	2.2	0.16	0.16	1222	1675	2452	3350
5	-50, 0.18	8.7	2.3	0.18	0.18	993	1674	1974	3347
6	-50, 0.2	9.7	2.4	0.2	0.2	602	1673	1210	3345
7	-50, 0.5	10.1	10.4	0.5	0.5	202	220	403	440
8	-50, 1.	10.4	10.5	1.	1.	191	193	382	386