

# Inhaltsverzeichnis

<b>1</b>	<b>Einleitung</b>	<b>1</b>
<b>2</b>	<b>Strömung</b>	<b>3</b>
2.1	Existierende Modelltechniken . . . . .	3
2.1.1	Der FHP-I . . . . .	6
2.1.2	Der Lattice-Boltzmann Automat . . . . .	10
2.1.3	Der Lattice BGK . . . . .	18
2.2	Die Randbedingungen . . . . .	19
2.2.1	Behandlung von Hindernissen . . . . .	20
2.2.2	Behandlung der Randzellen . . . . .	21
2.2.3	Anlegen eines Druckgradienten . . . . .	22
2.2.4	Umsetzung . . . . .	23
2.3	Technische Umsetzung . . . . .	27
2.4	Anwendung . . . . .	28
2.5	Bedeutung der Gittergröße . . . . .	31
2.6	Zusammenfassung . . . . .	33
<b>3</b>	<b>Prozesse gelöster Komponenten</b>	<b>35</b>
3.1	Transport . . . . .	35
3.1.1	Der diffusive Transport . . . . .	35
3.1.2	Der advektive Transport . . . . .	36
3.1.3	Dynamisierung der Iteration . . . . .	37
3.2	Die Reaktionen . . . . .	41
3.2.1	Reaktionstypen . . . . .	41
3.2.2	Erweiterte Randbedingungen . . . . .	43
3.3	Technische Umsetzung . . . . .	44
3.4	Verifikation . . . . .	45
3.5	Zusammenfassung . . . . .	47
<b>4</b>	<b>Transport-Reaktions-Modelle</b>	<b>49</b>
4.1	Einfluß der Geometrie auf den Transport . . . . .	51
4.1.1	Modellannahmen . . . . .	52
4.1.2	Sensibilitätsanalyse . . . . .	53
4.1.3	Ergebnisse . . . . .	54
4.2	Einfluß der Gezeiten auf den Transport . . . . .	54
4.2.1	Modellannahmen . . . . .	55
4.2.2	Modellverhalten während eines Tidenzyklus . . . . .	56

4.2.3	Das Verteilungsmuster . . . . .	59
4.2.4	Ergebnisse . . . . .	62
<b>5</b>	<b>Strukturverändernde Prozesse</b>	<b>65</b>
5.1	Der Durchlässigkeitswert . . . . .	65
5.2	Strukturmodifikation . . . . .	67
5.3	Transformation des Porenraumes . . . . .	71
5.4	Technische Umsetzung . . . . .	75
5.5	Verifikation . . . . .	76
5.6	Anwendungsbeispiel Kalzifizierung . . . . .	78
5.7	Zusammenfassung . . . . .	80
<b>6</b>	<b>Fazit und Ausblick</b>	<b>81</b>
6.1	Mächtigkeit des Modells . . . . .	81
6.2	Grenzen des Modells und zukünftige Entwicklungen . . . . .	81
6.3	Softwarepaket DySTReM . . . . .	83
<b>A</b>	<b>DySTReM Kurzreferenz</b>	<b>85</b>
A.1	Programmstart . . . . .	85
A.2	Parametereingabe . . . . .	86
A.3	Gitterdarstellung . . . . .	88
A.4	Graphendarstellung . . . . .	90
<b>B</b>	<b>Quellcode</b>	<b>93</b>
B.1	Verknüpfung der Zellen . . . . .	93
B.2	Einheitlicher Schleifenrumpf für LBA und LBGK . . . . .	93
B.3	Berechnung des Gleichgewichtszustandes . . . . .	94
B.4	Berechnung des Iterationsschrittes . . . . .	95
B.5	Advektiver und diffusiver Transport einer Zelle . . . . .	95
B.6	Berechnung des Transportiterationsschrittes . . . . .	96
B.7	Dichte- und Konzentrationskorrektur einer Zelle . . . . .	97
B.8	Einheitlicher Schleifenrumpf für Strukturveränderungen . . . . .	97
B.9	Strukturmodifikation . . . . .	99
B.10	Porenraumtransformation . . . . .	99
<b>C</b>	<b>Parametersätze</b>	<b>101</b>
C.1	Modelle zu Kapitel 2 . . . . .	101
C.2	Modelle zu Kapitel 3 . . . . .	101
C.3	Modelle zu Kapitel 4 . . . . .	102
C.4	Modelle zu Kapitel 5 . . . . .	104

# Abbildungsverzeichnis

2.1	Gitterzelle des FHP-I . . . . .	7
2.2	Kollisionsregeln des FHP-I . . . . .	9
2.3	Stetige Approximierung der FHP-Zelle . . . . .	10
2.4	Gitterzelle des Lattice-Boltzmann Automaten . . . . .	10
2.5	Hindernisreflexion . . . . .	20
2.6	Externer Druckgradient . . . . .	22
2.7	Idealisiertes Modell . . . . .	24
2.8	Strömungssimulation einer Sedimentprobe . . . . .	29
2.9	Geschwindigkeitsgradienten für LBA und LBGK . . . . .	30
2.10	Einfluß der Gittergröße . . . . .	32
3.1	Poiseuille-Strom . . . . .	45
3.2	Transport durch Diffusion . . . . .	46
3.3	Transport durch Advektion . . . . .	46
4.1	Sedimentoberfläche . . . . .	49
4.2	Strömungsmuster zweier Sandwattsedimente . . . . .	50
4.3	Sauerstoffgradient . . . . .	51
4.4	Sauerstoffverteilung im Sediment . . . . .	53
4.5	Sensibilitätsanalyse . . . . .	54
4.6	Grundwasserfluß . . . . .	55
4.7	Fließgeschwindigkeit während des Tidenzyklus . . . . .	56
4.8	Sauerstoffgehalt während des Tidenzyklus . . . . .	57
4.9	Sauerstoffverteilung im Tidenzyklus I . . . . .	58
4.10	Sauerstoffverteilung im Tidenzyklus II . . . . .	61
4.11	Lokale Konzentrationen im Tidenzyklus . . . . .	64
5.1	Konvergenz bei unterschiedlichen Durchlässigkeiten . . . . .	76
5.2	Variation des Durchlässigkeitswertes . . . . .	77
5.3	Einfluß der Mineralisierung auf die Fließgeschwindigkeit . . . . .	78
5.4	Mineralisierung . . . . .	79
6.1	Sandripel . . . . .	82
A.1	Hauptmenü . . . . .	85
A.2	Globale Parameter . . . . .	86
A.3	LBE spezifische Parameter . . . . .	86
A.4	Modellierte Stoffkomponenten . . . . .	87

A.5	Modellierte Reaktionen . . . . .	88
A.6	Gitterdarstellung . . . . .	89
A.7	Lattice Setup . . . . .	90
A.9	Graph Setup . . . . .	91
A.8	Funktionendarstellung . . . . .	91

## Tabellenverzeichnis

2.1	Derzeit eingesetzte Lattice-Gas- und Lattice-Boltzmann-Modelltypen . . . . .	5
2.2	Aufwandsabschätzung des Lattice-Boltzmann Automaten und Lattice BGK . . . . .	28
3.1	Transportschritte 1. und 2. Iteration . . . . .	40
3.2	Relative Fehler der Advektion und Diffusion . . . . .	40
5.1	Auswertung belegter Zellen . . . . .	72
5.2	Variation des Durchlässigkeitswertes . . . . .	76

# Vorwort

Die vorliegende Arbeit entstand im Rahmen des von Dr. Thomas Klenke geleiteten DFG Projektes „Fluktuationen von Stoffdynamik und Morphogenese in porösen Medien – Analyse und Modellierung am Beispiel von Wattsedimenten“. Die Betreuung der Arbeit übernahm Prof. Dr. Wolfgang Ebenhöf.

An dieser Stelle möchte ich mich für die Hilfe bei der Korrektur und Fehlersuche bedanken bei Frank Ahlhorn, Dr. Peter Harmand, Dr. Thomas Klenke, Frank Neumann und Dr. Kai Wirtz.

Nicht zuletzt gilt mein großer Dank meiner lieben Frau Marie-Hélène, die immer bereit zur Diskussion und sehr geduldig mit mir war.

## **Zusammenfassung**

Die Bewegung von Flüssigkeiten durch ein poröses Medium kann nur schwer durch Berechnen der Navier-Stokes Gleichungen gelöst werden. Zelluläre Automaten bieten einen geeigneten Weg, um nicht nur die Strömung in solchen komplexen geometrischen Strukturen zu simulieren, sondern auch biochemische Reaktionen der transportierten Substanzen und sogar die Änderung der Geometrie aufgrund von Ausfällung zu modellieren. In der Dissertation werden einige bekannte Zelluläre Automaten diskutiert und modifiziert. Eine Version eines 2D-Lattice-Boltzmann Automaten wird auf Sedimente aus dem Norddeutschen Wattenmeer angewandt. Die poröse Geometrie wird aus Rasteraufnahmen ermittelt. Durch oszillierenden Tiedruck und Strömungen muß das interstitielle Wasser durch das Sediment fließen. Die resultierenden Strömungsmuster in Raum und Zeit sind sehr komplex und weisen große Ähnlichkeit mit realen Mustern auf. Sie zeigen vorwiegende Fließpfade. Als Beispiel wird simuliert, wie diese Strömungsmuster im Modell die Verteilung von Sauerstoff, DOC und anderen transportierten Substanzen festlegen. Sauerstoff wird nahe der Sedimentoberfläche produziert (durch photosynthetische Algen) und in tieferen Schichten verbraucht (Oxidation von DOC). Die biologischen Implikationen werden diskutiert. Die bestimmende Rolle der Porenraumgeometrie in Bezug auf die Verteilung der transportierten Substanzen kann bewiesen werden. In einem anderen Beispiel wird Kalzifikation modelliert. Durch Ausfällung von Kalziumkarbonaten können sich Porenzwischenräume verkleinern oder sich sogar schließen. Zu diesem Zweck wurde der Automat um teildurchlässige Zellen erweitert.

Zur Berechnung und Darstellung der Modelle wurde das Programm DySTReM (Dynamisches Struktur Reaktions Modell) entwickelt. Es erlaubt eine recht allgemeine Simulation von Advektions-, Diffusions- und Reaktionsprozessen in porösen Medien wie beispielsweise Sedimente aus dem Wattenmeer.

## **Abstract**

The flow of fluids through a porous medium can hardly be calculated by solving Navier-Stokes equations. Cellular automata offer a convenient way not only to simulate the currents in such complex geometrical situations, but also to model biogeochemical reactions of the transported substances and even the change of geometry due to precipitation. In the dissertation, some known cellular automata are discussed and modified. A version of a 2D-Lattice-Boltzmann automaton is applied to Wadden Sea sediments. The porous geometry is taken from microphotographs. The interstitial water is forced to flow through the sediment by oscillating tidal pressure and currents. The resulting flow patterns in space and time are very complex and have great similarities to realistic patterns. They show predominant flow paths. As an example, it is simulated how these flow patterns determine in a model situation the distribution of oxygen, DOC, and other transported substances. Oxygen is produced near the sediment surface (by photosynthetic algae) and consumed in deeper layers (oxidation of DOC). The biological implications of the observed patterns are discussed. The dominant role of pore geometry for the distribution of oxygen and other substances could be proven. In another example calcification is modelled. By precipitation of calciumcarbonate some pores can narrow and even become closed. For this purpose, the automaton was extended to enable semipermeability of cells.

A software tool DySTReM (Dynamical Structure Reaction Model) was developed. It allows quite general simulations of advection, diffusion, and reaction processes in porous media like sandy Wadden Sea sediments.

# Kapitel 1

## Einleitung

Derzeit besteht großes Interesse, das Ökosystem Wattenmeer in seiner Gesamtheit zu erforschen. Wodurch wurde jedoch dieses rege Interesse an einem sonst unscheinbaren System geweckt? Ein wesentlicher Punkt spielt hierbei das heute allgemein bestehende Umweltbewußtsein, das entstand, als man feststellte, daß die kontinuierlich steigenden Belastungen der Nordsee durch Verklappung und Überfischung das Ökosystem nachhaltig verändern. Politik und Wirtschaft verlangten nach einer Möglichkeit, die Schäden bzw. notwendigen Sanierungsmaßnahmen abschätzen zu können. Die auf diesem Wege initialisierte Forschung eröffnete neue Fragestellungen, beispielsweise die Frage nach den Auswirkungen einer Klimaänderung sowie der Installation von Windparks und Fischfarmen in Küstennähe. Der entstandene Themenkomplex läßt sich allein durch die Naturwissenschaften nicht lösen, woraufhin der neue Zweig des *Coastal Zone Management* geschaffen wurde.

Im Bereich der Naturwissenschaften richtet man das Augenmerk verstärkt auf das Watt, da man erkannt hat, daß die hier lebenden Organismen in einer komplexen Art und Weise interagieren und ein enorm hohes Regenerierungspotential für das Ökosystem Nordsee repräsentieren. Das Watt ist geprägt durch eine Vielzahl sehr unterschiedlicher Prozesse und Mechanismen. Hierzu zählen u.a.

- Sedimenttransporte, die durch die Gezeiten bzw. klimatische Phänomene gesteuert werden und für die typische Sandripelbildung verantwortlich sind,
- Sedimentumlagerungen, die in jeder Größenordnung stattfinden können, angefangen vom Wattwurm bis hin zu Ausbaggerungen zur Schaffung/Erhaltung von Schiffahrtswegen,
- Emulsionen, z.B. Erdöle im Meer- oder Porenwasser, die durch Umweltverschmutzung (Schiffahrt und Ölplattformen) in das Watt gelangen,
- Wasser-Gas-Gemische, die durch mikrobiologische Aktivitäten entstehen. Freigesetzt werden dabei in erster Linie Methan, Kohlendioxid, Schwefelwasserstoffe und Sauerstoff,
- Transportmechanismen, die wasserlösliche Substanzen mittels Advektions- und Diffusionsprozessen durch das Wattsediment transportieren,
- Chemische Reaktionen, die aufgrund lokaler Bedingungen oder durch Mikroorganismen stattfinden,
- Biofilme, die von Mikroorganismen gebildet werden und im Watt häufig anzutreffen sind. Sie dienen den Organismen zur Stabilisierung der lokalen Umweltbedingungen und beeinflussen vor allem die Transporteigenschaften des Systems,



- Mineralisierungen, die die Sedimentstruktur des Porenraumes verändern. Sie lassen sich durch Probenuntersuchungen nachweisen. Mineralisierungen finden statt beim Absterben von Mikroorganismen oder sind physikalischer Natur.

Zum einen werden konkrete Szenarien betrachtet wie z.B. das Auftreten von Schwarzen Flecken (Breves 1997; Höpner 1996) oder der Ölabbau durch Mikroorganismen (Berthe-Corti und Ebenhö 1999; Haußels 1997). Zum anderen werden Mechanismen oder Lebensgemeinschaften bezüglich ihrer Funktionsweise untersucht, woraus sich ein besseres Systemwissen entwickeln kann<sup>1</sup>.

Eine entscheidende Rolle spielen hierbei Prozesse im mikroskaligen Sandwatt, da diese die geologische und physiologische Umgebung sowohl für mikroskopische als auch für makroskopische Organismen formen. Eine sehr wichtige Komponente ist hierbei das Porenwasser, das als Träger für chemische Substanzen und Mikroorganismen dient. Mit Hilfe der Transportprozesse werden lokal die nötigen Bedingungen für biologische, chemische und physikalische Prozesse geschaffen, die die lokale Sedimentstruktur modifizieren (können). Diese wiederum beeinflussen die Transporteigenschaften des Systems. Hierzu sei ein Artikel von Forkel (1999) empfohlen, der sich an Leser aller Disziplinen wendet. In ihm werden grundlegende Techniken und Grenzen derzeitiger Grundwasserströmungsmodelle vorgestellt und Probleme bei der Umsetzung bzw. im praktischen Einsatz diskutiert.

In dieser Arbeit wird gezeigt, wie sich Transport- und Reaktionsprozesse, Biofilme und Mineralisierungen in ihrer Wechselwirkung formal beschreiben und mit Hilfe von zellulären Automaten modellieren lassen. Die Systemdynamik wird anhand einiger konkreter Modelle veranschaulicht. Die Arbeit gliedert sich wie folgt:

In Kapitel 2 wird zunächst eine kurze Einführung in die Theorie der zellulären Automaten gegeben und es werden die im Rahmen dieser Arbeit verwandten Automatenmodelle zur Strömungssimulation vorgestellt. In den Abschnitten 2.3 und 2.4 wird aufgezeigt, wie die Automatenmodelle umgesetzt werden, welche Probleme hierbei entstehen können und wie man diese umgeht bzw. löst.

In Kapitel 3 werden die Transportprozesse Advektion und Diffusion für die zuvor definierten zellulären Automaten hergeleitet sowie die Behandlung allgemeiner Reaktionsterme formuliert. Zur effizienten Umsetzung werden die Transportprozesse abgeschätzt und eine maximale Iterationszeit bestimmt.

In Kapitel 4 werden zwei Modelle vorgestellt, die den Einfluß der Geometrie und der Gezeiten auf die Verteilung im Porenwasser gelöster Substanzen belegen. In einer anschließenden Diskussion werden u.a. Gemeinsamkeiten und Unterschiede zu gängigen eindimensionalen Modellen aufgezeigt.

In Kapitel 5 werden strukturverändernde Prozesse (Mineralisierung/Ausfällung, Wachstum) für die zellulären Automaten hergeleitet und Probleme bei der Umsetzung diskutiert.

In Kapitel 6 erfolgt eine Rekapitulation der vorhergehenden Kapitel und es werden mögliche Anwendungsgebiete und zukünftige Entwicklungen diskutiert.

Parallel zur Modellentwicklung wurde das Softwarepaket DySTReM entwickelt, mit dem alle Modelle dieser Arbeit gerechnet und ausgewertet wurden. In Anhang A wird die Software genauer beschrieben und die wichtigsten Funktionen erläutert. In Anhang B und C sind die wesentlichen Prozeduren des Modells sowie die Parametersätze sämtlicher in dieser Arbeit verwendeten Modelle aufgeführt.

---

<sup>1</sup>Beispiele zur Untersuchung bzw. Modellierung der aufgeführten Mechanismen finden sich in Rutgers van der Loeff 1981; Masselot und Chopard 1998 (Sedimenttransport), Emerton et al. 1997 (Emulsionen), Jørgensen 1996 (Transportprozesse), Cunningham et al. 1991; Gerdes et al. 1993 (Biofilme).

# Kapitel 2

## Strömung

Unter dem Begriff der Strömung soll hier im engeren Sinn der Fluß von Wasser durch ein poröses Medium verstanden werden. Die Strömung bestimmt entscheidend den Transport gelöster sowie partikulärer Komponenten, und sie charakterisiert den Rahmen, in dem die inneren Prozesse stattfinden. Zunächst wird auf existierende und derzeit gebräuchliche Strömungsmodelle eingegangen. Zusammenhänge sowie jeweilige Vor- und Nachteile einzelner Typen werden diskutiert. Schließlich werden die verwendeten Methoden beschrieben und anhand eines Beispiels verifiziert.

### 2.1 Existierende Modelltechniken

Die Strömung von Wasser stellt sich auf atomarer Ebene als Bewegung und Kollision von Molekülen dar. So besteht die grundsätzliche Idee aller Strömungsmodelle darin, diese Molekülbewegung zu simulieren und durch Mittelung über Raum und/oder Zeit auf den makroskopischen Fluß zu schließen. Die Tatsache, daß dieses makroskopische Verhalten durch statistisches, aber nicht notwendig exaktes Verhalten im Mikroskopischen bestimmt ist (DeMasi et al. 1989), erlaubt es, mit relativ einfachen Modellen zu realitätsnahen Ergebnissen zu gelangen.

Grundsätzlich sind zwei Ansätze denkbar: entweder 'verfolgt' man die einzelnen Moleküle durch den Raum, oder man betrachtet jeweils einen lokalen Ausschnitt des Raumes. Eine realitätsnahe Modellierung der Strömung erfordert die Simulation einer sehr hohen Anzahl von Molekülen. Es bietet sich daher der zweite Ansatz an, da er eines geringeren Speicheraufwandes bedarf. Der Raum kann dabei entweder in gleichgroße (diskrete) Flächen eingeteilt werden – was den Vorteil einer leicht umsetzbaren und effizienten Berechnung mit dem Computer hat, oder in unterschiedlich große Flächen. Letzteres ist als Finite-Elemente-Methode bekannt und erweist sich als vorteilhaft, wenn nähere Informationen über die Geometrie des Raumes vorhanden sind (siehe z.B. Braun und Sambridge 1995; Karlin und Succi 1998; Xi et al. 1999). Hier soll der erste Ansatz verfolgt werden, da das Modell universell, d.h. unabhängig von der Geometrie, einsetzbar sein soll. Dies gilt insbesondere im Zusammenhang mit den in Kapitel 5 beschriebenen strukturverändernden Prozessen.

Die Simulation erfolgt durch sukzessives Berechnen der Molekülbewegungen bzw. Kollisionen für alle Flächen. Demzugrunde liegt das Prinzip der zellulären Automaten (von Neumann 1966; Codd 1968), die erst mit dem Aufkommen der Computer entstanden. Die diskreten Flächen heißen *Zellen* und die einzelnen Rechenschritte *Iterationen*.

**Definition 2.1:** *Zellulärer Automat*

Ein Quadrupel  $(\mathcal{P}, \mathcal{Z}, \mathcal{V}, \Phi)$  heißt *zellulärer Automat* in  $\mathbb{Z}^d$  ( $d \in \mathbb{N}$ ), falls folgendes gilt:

a)

$$\mathcal{P} = \{p_0, p_1, \dots, p_n\} \subset \mathbb{Z}^d \text{ mit } p_0 = 0.$$

$\mathcal{P}$  heißt die Menge *relativer Nachbarn*. Für  $z \in \mathbb{Z}^d$  ist  $z + \mathcal{P}$  die *Nachbarschaft* von  $z$ . Dann heißt

$$\mathcal{Z} = \bigcap \{M \subset \mathbb{Z}^d \mid M + \mathcal{P} = M, 0 \in M\}$$

der *zelluläre Raum* zu  $\mathcal{P}$ .

b)

$$\mathcal{V} = V_1 \times \dots \times V_m \subset \mathbb{R}^m$$

$\mathcal{V}$  heißt *Variablenraum*<sup>1</sup>.

c)

$$T : \mathcal{V}^{n+1} \rightarrow \mathcal{V}$$

$T$  heißt die *Transitionsfunktion*.

d)

$$\Phi : \text{Abb}(\mathcal{Z} \rightarrow \mathcal{V}) \rightarrow \text{Abb}(\mathbb{N} \times \mathcal{Z} \rightarrow \mathcal{V})$$

mit folgenden Eigenschaften für  $\mathcal{S}^0 : \mathcal{Z} \rightarrow \mathcal{V}$

$$\text{i) } \Phi(\mathcal{S}^0)(0, \cdot) = \mathcal{S}^0$$

$$\text{ii) } \Phi(\mathcal{S}^0)(t+1, z) = T\left(\Phi(\mathcal{S}^0)(t, z+p_0), \dots, \Phi(\mathcal{S}^0)(t, z+p_n)\right) \text{ für alle } t \in \mathbb{N}, \\ z \in \mathcal{Z}$$

$\mathcal{S}^0$  heißt der *Anfangszustand* und  $\mathcal{S}^t$  der aus  $\mathcal{S}^0$  resultierende *Zustand* zur Zeit  $t$ . Der Übergang ii) heißt *Transitionsschritt* bzw. der  $t$ -te *Iterationsschritt*.

**Bemerkung 2.1:** Dieser Automat hat einen unbeschränkten zellulären Raum  $\mathcal{Z}$ . In der praktischen Anwendung ist aber  $\mathcal{Z}$  immer beschränkt, zum einen gegeben durch die physikalische Situation, in der Ränder auftreten, zum anderen durch die Computerkapazität. Durch diese Beschränkungen enthält  $\mathcal{Z}$  „Randzellen“, also solche Zellen, deren Nachbarschaft nicht mehr in ganz  $\mathcal{Z}$  liegt. Für diese Randzellen muß die Transitionsregel  $T$  abgewandelt werden, wofür es vielfältige Möglichkeiten gibt (siehe Abschnitt 2.2).

In der Praxis ist heute beispielsweise selbst die Simulation aller Moleküle eines Kubikmillimeters Wasser technisch unmöglich. Eine Möglichkeit besteht darin, *Partikel* als Repräsentanten größerer Molekülmengen zu betrachten. Die jeweilig repräsentierte Menge hängt von der räumlichen und zeitlichen Skalierung ab. Andere Verfahren finden sich z.B. in Droz und Chopard (1988) und Il-langasekare und Döll (1989). Die Klasse der zellulären Automaten, die einzelne Partikelbewegungen und -kollisionen simulieren, nennt man Lattice-Gas Automaten (LGA). Ersetzt man die binären Besetzungszahlen durch Erwartungswerte, so spricht man von Lattice-Boltzmann-Equation Automaten (LBE), siehe Tabelle 2.1 und Kapitel 2.1.2.

Da die Modellkonzepte entscheidend von der Zelldimension und -geometrie abhängen, muß diese zuvor diskutiert werden:

Obwohl es erstrebenswert ist, ein reales, natürliches System, z.B. einen Wassertropfen oder Meeresablagerungen, mit einem Modell gleicher Dimension zu simulieren, so ergeben sich jedoch in diesem speziellen Fall zwei Problemfelder. Zum einen erfordert gerade die Realisierung eines dreidimensionalen LGA bzw. LBE einen sehr hohen Rechenaufwand (siehe dazu Wolfram (1986) und Kapitel 6). Zum anderen sind die heute zur Verfügung stehenden Meßapparaturen entweder nicht ausreichend für dreidimensionale Analysen von Komponenten in realen Systemen oder befinden sich noch

<sup>1</sup>Die Mengen  $V_i \subset \mathbb{R}$  dienen zur Beschreibung der Zellzustände und werden in der Informatik als Datentyp bezeichnet.

LGA	HPP	<i>Hardy, Pomeau und Pazzis</i>
		zweidimensionaler Automat mit quadratischen Zellen und i.a. 4 oder 8 relativen Nachbarn (Hardy et al. 1973; Giraud et al. 1998)
	FHP	<i>Frisch, Hasslacher und Pomeau</i>
		zweidimensionaler Automat mit hexagonalen Zellen. Es wird zwischen drei Modelltypen unterschieden: dem FHP-I mit 6 relativen Nachbarn (siehe Kapitel 2.1.1), dem FHP-II, eine Erweiterung des FHP-I mit siebten Ruheteilchen und dem FHP-III, ein FHP-II mit vollständigen Kollisionsregeln (Frisch et al. 1986; d’Humières und Lallemant 1987; Koponen et al. 1997; Emerton et al. 1997)
	FCHC	<i>face-centered-hypercubic</i>
		Da regelmäßige dreidimensionale Gitter nicht genügend Symmetrie für makroskopische Isometrie aufweisen, verwendet der FCHC ein vierdimensionales Bravais Gitter mit 24 relativen Nachbarn. Zur Auswertung wird das Gitter in den dreidimensionalen Raum projiziert (d’Humières et al. 1986; Adler et al. 1995).
LBE	LBA	<i>Lattice-Boltzmann Automat</i>
		Der LBA basiert auf dem FHP-III. Im Gegensatz zu den FHP, die mit diskreten Belegungszahlen rechnen, werden beim LBA Besetzungswahrscheinlichkeiten verwendet. Die Kollisionsregeln lassen sich in diesem Fall durch eine Matrix darstellen (siehe 2.1.2 und Frisch et al. 1987; Wolfram 1986; Bernsdorf 1994).
	LBGK	<i>Lattice Bhatnagar Gross Krook</i>
		Unter Annahme einer Gleichgewichtsverteilung wird die Kollisionsmatrix durch einen Relaxationsparameter ersetzt. Der Anteil der Partikel in Ruhe wird heraufgesetzt (siehe Kapitel 2.1.3, Bhatnagar et al. 1954; Qian et al. 1992; Masselot und Chopard 1998; Gonnella et al. 1998).

**Tabelle 2.1:** Derzeit eingesetzte Lattice-Gas- und Lattice-Boltzmann-Modelltypen

in der Probephase (DeLeo et al. 1997). So können allenfalls in mikroskaligen Sedimenten Elementverteilungen zweidimensional bzw. Konzentrationen gelöster Stoffe eindimensional (als Tiefengradienten) erfaßt werden. Die im Modell gewonnenen Informationen über die dritte Dimension können somit nur unzureichend verifiziert werden. Aus diesen Gründen wird hier ein zweidimensionales Modell gewählt<sup>2</sup>.

Die Zellgeometrie soll die folgenden Eigenschaften erfüllen: Sie soll

- ein Isokaeder sein, da Moleküle (unter Nichtberücksichtigung äußerer Kräfte) in alle Richtungen gleichmäßig diffundieren,
- den zweidimensionalen Raum vollständig überdecken,
- den gleichen (euklidischen) Abstand zu allen angrenzenden Nachbarn aufweisen,
- für alle Zellen gleich sein, da nach Voraussetzung für zelluläre Automaten jede Zelle die gleichen relativen Nachbarn besitzt.

Daraus folgt die Wahl eines Hexagons<sup>3</sup>. Im folgenden werden deshalb die Modelltypen FHP-I, LBA

<sup>2</sup>Diese Vereinfachung ist heutzutage durchaus üblich (vgl. z.B. Emerton et al. (1997), Giraud et al. (1998), Gonnella et al. (1998), Masselot und Chopard (1998)). Die Konstruktion des Modells wird zeigen, daß die Erweiterung auf ein dreidimensionales Modell von geringem Aufwand ist (siehe auch Kapitel 6).

<sup>3</sup>In der Literatur werden meist gleichseitige Dreiecke gewählt (Frisch et al. 1987), wobei die Zellkoordinaten auf den Schnittpunkten liegen. Der Unterschied zum Hexagon liegt allein in der Darstellung.

und LBGK nach der Terminologie von (Def. 2.1) hergeleitet. Dafür wird zunächst der zelluläre Raum spezifiziert.

**Definition 2.2:** *Hexagonales Gitter*

Sei  $\mathcal{Z} \subset \{(x, y) | x, y \in \mathbb{Z}, x + y \text{ gerade}\}$ ,

$$p : \begin{cases} \mathbb{Z}^2 & \rightarrow & \mathbb{R}^2 \\ (x, y) & \mapsto & (\frac{\sqrt{3}}{2}x, \frac{1}{2}y) \end{cases} \quad \text{und} \quad dist : \begin{cases} \mathbb{Z}^2 \times \mathbb{Z}^2 & \rightarrow & \mathbb{R} \\ (z_1, z_2) & \mapsto & \|p(z_2) - p(z_1)\|_2 \end{cases},$$

dann heißt der metrische Raum  $(\mathcal{Z}, dist)$  *hexagonales Gitter*.

**Bemerkung 2.2:** Die Definition des hexagonalen Gitters referenziert die für die Implementierung notwendige (ganzahlige) Zellindizierung mit ihrer räumlichen Position und normiert den Zellabstand.

### 2.1.1 Der FHP-I

Hexagonale Gitter wurden als erstes von Frisch, Hasslacher und Pomeau verwendet (Frisch et al. 1986; Frisch et al. 1987). In diesem Abschnitt soll der FHP-I als Motivation vorgestellt werden. Einer Gitterzelle  $z \in \mathcal{Z}$  werden sechs Nachbarn zugeordnet (siehe Abb. 2.1), die – von  $z$  aus gesehen – sechs Richtungen entsprechen (siehe Abb. 2.1 und Def. 2.2):

$$\mathcal{P} := \{p_0, \dots, p_6\} := \left\{ \begin{pmatrix} 0 \\ 0 \end{pmatrix}, \begin{pmatrix} 1 \\ -1 \end{pmatrix}, \begin{pmatrix} 0 \\ -2 \end{pmatrix}, \begin{pmatrix} -1 \\ -1 \end{pmatrix}, \begin{pmatrix} -1 \\ 1 \end{pmatrix}, \begin{pmatrix} 0 \\ 2 \end{pmatrix}, \begin{pmatrix} 1 \\ 1 \end{pmatrix} \right\}$$

Die Menge der relativen Nachbarn ist symmetrisch ( $\mathcal{P} = -\mathcal{P}$ ) und sogar isotrop im Sinne des hexagonalen Gitters von Definition 2.2. In der weiteren Diskussion von FHP-I wird  $p_0 = \begin{pmatrix} 0 \\ 0 \end{pmatrix}$  weggelassen, da der Zustand der Zelle selbst im FHP-I für die Transitionsfunktion nicht benötigt wird:

$$\mathcal{P} = \{p_1, \dots, p_6\}$$

Der Variablenraum ist

$$\mathcal{V} = \{0, 1\}^6$$

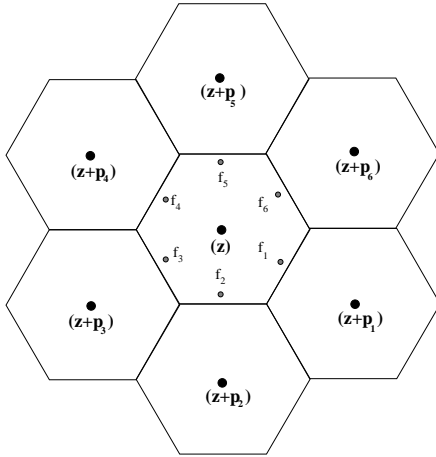
Die Zustände des Automaten zur Zeit  $t$  werden mit

$$\mathcal{S}^t = \Phi(\mathcal{S}^0)(t, \cdot) \in Abb(\mathcal{Z} \rightarrow \mathcal{V}) \quad \text{für alle } t \in \mathbb{N}$$

bezeichnet, wobei  $\mathcal{S}^0$  der Anfangszustand ist. Die Zustände der Zellen sind dann

$$\Phi(\mathcal{S}^0)(t, z) =: f^t(z) = (f_1^t(z), \dots, f_6^t(z)) \in \mathcal{V} \quad \text{für alle } t \in \mathbb{N} \text{ und alle } z \in \mathcal{Z}$$

**Bedeutung:**  $f_i^t(z) = 1$  bedeutet, daß sich zur Zeit  $t$  in der Zelle  $z$  ein Teilchen befindet, das sich in Richtung  $i$  bewegt, also zur Zeit  $t + 1$  in der Nachbarzelle  $z + p_i$  anzutreffen ist. Es gibt höchstens ein solches Teilchen.  $f_i^t(z) = 0$  heißt entsprechend, daß in der Zelle kein Teilchen mit Bewegungsrichtung  $i$  vorliegt.



**Abbildung 2.1: Gitterzelle des FHP-I.** Zu jeder Zelle  $z$  und jeder Zeit  $t$  gehören sechs Werte  $f_i \in \{0, 1\}$ , die angeben, ob sich ein Partikel in Richtung des  $i$ -ten Nachbarn  $(z + p_i)$  bewegt.

**Bemerkung 2.3:** Bei der Betrachtung einer festen Zelle  $z$  zu einem bestimmten Zeitpunkt  $t$  kann die verkürzte Schreibweise  $f_i$  anstelle von  $f_i^t(z)$  verwendet werden.

Die Transitionsfunktion  $T$  wird in zwei hintereinanderauszuführende Teile zerlegt:

$$T = T_K \circ T_B$$

Zuerst werden die Teilchen bewegt ( $T_B$ ), dann wird ihre Bewegungsrichtung durch Kollision geändert ( $T_K$ ). Der Zwischenzustand nach der Bewegung und vor der Kollision wird hier mit  $f^{t+1/2}$  bezeichnet.

Im ersten „halben“ Iterationsschritt bewegen sich die Teilchen entsprechend ihrer Richtung um eine Zelle weiter. Es gilt also

$$f_i^{t+1/2}(z + p_i) = f_i^t(z). \quad (2.1)$$

Bezeichne

$$|i + 3| := (i - 1 + 3) \pmod{6 + 1} \quad (2.2)$$

dann läßt sich damit  $T_B$  folgendermaßen formulieren:

$$T_B : \begin{cases} \mathcal{V}^6 & \rightarrow \mathcal{V} \\ (g_1, \dots, g_6) & \mapsto T_B(g_1, \dots, g_6) \end{cases} \quad \text{mit } (T_B(g_1, \dots, g_6))_i := g_{|i+3|,i}$$

Angewandt auf eine Zelle  $z$  zur Zeit  $t$  bedeutet das

$$f^{t+1/2}(z) := T_B(f^t(z + \mathcal{P}))$$

wobei

$$f_i^{t+1/2}(z) := \left( (f^t(z + \mathcal{P})) \right)_i = f_i^t(z + p_{|i+3|}) = f_i^t(z - p_i)$$

Hier wurde die Abkürzung verwendet:

$$f^t(z + \mathcal{P}) := (f^t(z + p_1), \dots, f^t(z + p_6))$$

Im zweiten „halben“ Iterationsschritt werden Kollisionen ausgeführt. Die Partikel innerhalb einer Zelle treten untereinander in Wechselwirkung. Dies wird durch die Kollisionsfunktion  $T_K : \mathcal{V} \rightarrow \mathcal{V}$  beschrieben:

$$f^{t+1}(z) := T_K(f^{t+1/2}(z)) = (I + \Delta)(f^{t+1/2}(z)). \quad (2.3)$$

Die Zerlegung von  $T_K$  in die Identität und die Änderung der Belegung  $\Delta$  dient der Behandlung der später betrachteten Automaten, bei denen die Kollisionen durch eine Matrix beschrieben werden.  $\Delta$  beschreibt die Änderung der Belegung:

$$\Delta f^{t+1/2}(z) = f^{t+1}(z) - f^{t+1/2}(z)$$

Die *Kollisionsregeln* sind in Abbildung 2.2 dargestellt. Neben der Bedingung  $T_K(\mathcal{V}) \subset \mathcal{V}$  muß  $T_K$  zwei weitere, physikalisch wichtige Bedingungen erfüllen, nämlich Massen- und Impulserhaltung.

$$\begin{aligned} \sum_{i=1}^6 \delta_i &= 0 & (\text{Massenerhaltung}), \\ \sum_{i=1}^6 p_i \delta_i &= (0, 0) & (\text{Impulserhaltung}). \end{aligned} \tag{2.4}$$

Die Darstellung der Kollisionsregeln in Abbildung 2.2 ist vollständig, wenn man – wie aus physikalischen Gründen geboten – Isometrie voraussetzt. Die Regeln müssen unter den Drehungen um  $60^\circ$  und unter Spiegelungen invariant sein. Die Drehung eines Zustandes um den Winkel  $60^\circ$  läßt sich durch einen Drehoperator  $R$  beschreiben und schnell numerisch umsetzen.

$$(Rf)_j := f_{|j+1|} \text{ mit } |m| := (m - 1) \bmod 6 + 1 \text{ für alle } m \in \mathbb{Z} \tag{2.5}$$

Die Spiegelungen an den drei Achsen 1-4, 2-5, 3-6 werden durch  $S_k$ ,  $k = 1, 2, 3$  beschrieben:

$$(S_k f)_j = f_{|k-j|} \tag{2.6}$$

Bei der Kollisionsfunktion des Automaten FHP-I ergibt sich das Problem, daß  $T_K$  keine deterministische Abbildung ist. In einigen Fällen muß – wie in Abbildung 2.2 dargestellt – aus zwei gleichwahrscheinlichen Möglichkeiten ausgewählt werden. In der Praxis ist das problemlos, aber es erschwert die formale Darstellung der Transitionsfunktion im Fall FHP-I. Mit den beschriebenen Abbildungen läßt sich der zelluläre Automat FHP-I definieren.

**Definition 2.3: FHP-I**

Sei  $(\mathcal{Z}, dist)$  ein hexagonales Gitter. Sei

$$\begin{aligned} \mathcal{P} &= \{p_1, \dots, p_6\} \\ &:= \left\{ \begin{pmatrix} 1 \\ -1 \end{pmatrix}, \begin{pmatrix} 0 \\ -2 \end{pmatrix}, \begin{pmatrix} -1 \\ -1 \end{pmatrix}, \begin{pmatrix} -1 \\ 1 \end{pmatrix}, \begin{pmatrix} 0 \\ 2 \end{pmatrix}, \begin{pmatrix} 1 \\ 1 \end{pmatrix} \right\} \end{aligned}$$

die relative Nachbarschaft,

$\mathcal{V} = \{0, 1\}^6$  der Variablenraum und

$T = T_K \circ T_B$  die Transitionsfunktion

mit dem Bewegungsanteil

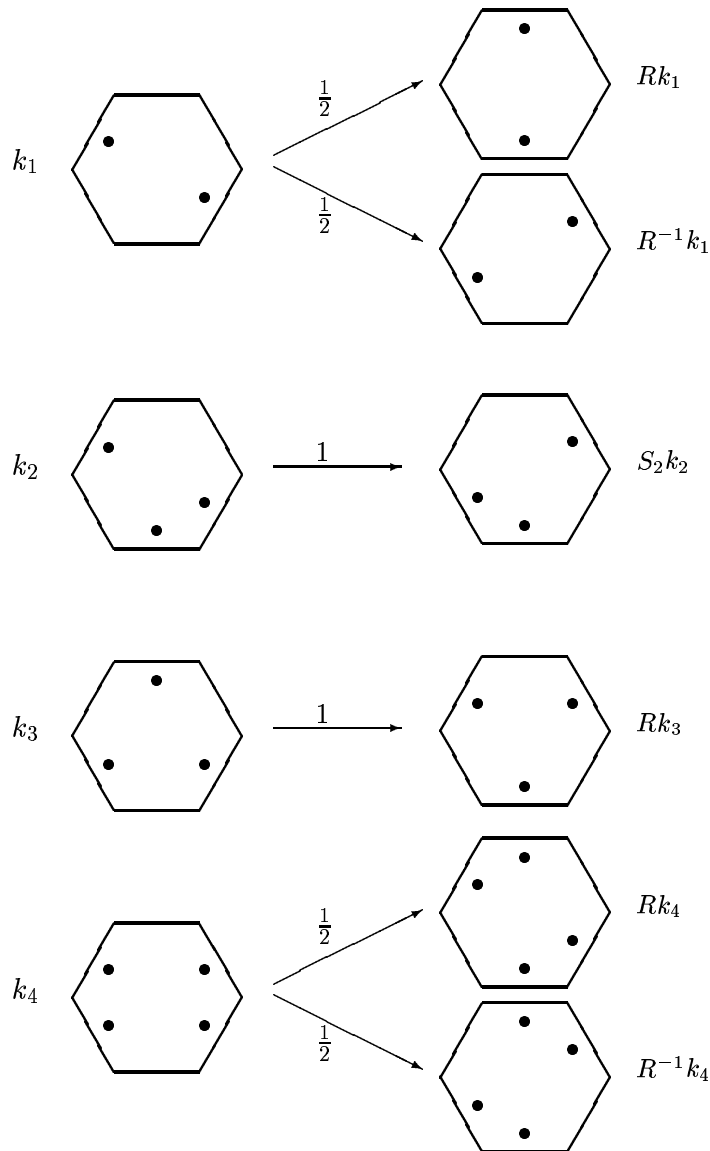
$$T_B : \begin{cases} \mathcal{V}^6 & \rightarrow \mathcal{V} \\ (g_1, \dots, g_6) & \mapsto T_B(g_1, \dots, g_6) \end{cases} \text{ mit } (T_B(g_1, \dots, g_6))_i := g_{|i+3|, i}$$

und dem Kollisionsanteil

$$T_K : \mathcal{V} \rightarrow \mathcal{V},$$

wie er in Abbildung 2.2 beschrieben ist.

Sei  $\Phi$  wie in Definition 2.1 mit der Transitionsfunktion  $T$  definiert. Dann heißt  $(\mathcal{P}, \mathcal{Z}, \mathcal{V}, \Phi)$  der zelluläre Automat FHP-I.

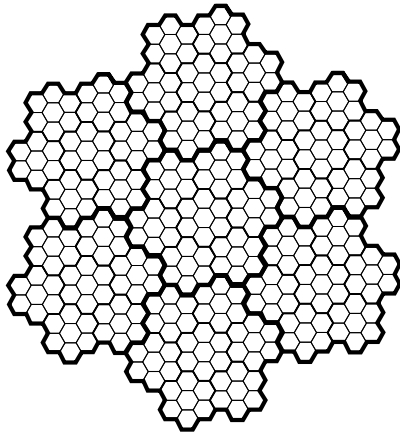


**Abbildung 2.2: Kollisionsregeln des FHP-I.** Dargestellt sind alle Fälle (bis auf Drehungen und Spiegelungen), in denen Kollisionen auftreten. Ein Sechseck symbolisiert eine Zelle  $z$ , die Punkte stehen für  $f_i = 1$ , wobei die Zählung wie in Abbildung 2.1 beschrieben erfolgt. Links ist der Zustand vor Ausführung der Kollision  $T_K$  und rechts nach der Kollision dargestellt. Die Kollisionszustände werden mit  $k_j$ ,  $j = 1, \dots, 4$  bezeichnet.  $R$  beschreibt die Rotation des Zustandes um  $60^\circ$ ,  $S_2$  die Spiegelung an der 2-5-Achse (vertikal). Auf dieser Achse sitzt das ungepaarte Teilchen. Der Zustand nach einer Kollision ist nicht immer eindeutig. Die Zahlen an den Pfeilen sind Wahrscheinlichkeiten.

**Bemerkung 2.4:** Bedingt durch die nichtdeterministische Abbildung  $\Delta$  ist der FHP-I streng genommen kein zellulärer Automat nach Def. 2.1. In Anlehnung an die in der Literatur übliche Notation (siehe z.B. Frisch et al. (1986)) wird diese Bezeichnung dennoch verwendet.

Der FHP-I ist ideal zur Implementierung geeignet, da eine Belegung nur die Werte 0 und 1 annehmen kann. Demzufolge treten bei der Berechnung durch einen Computer keine numerischen Fehler auf. Der Nachteil ist allerdings, daß durch die Verwendung von 'ganzen' Partikeln der Zustand der Zellen





**Abbildung 2.3: Stetige Approximierung der FHP-Zelle.** Die Zelle sowie ihre sechs Nachbarn werden zu einer Zelle zusammengefaßt. Jede Position  $p_i$  (vgl. Abb. 2.1) der neuen Zelle  $Z$  erhält die durchschnittliche Anzahl der Partikel in  $Z$  mit der Richtung  $p_i$ . Sukzessives Anwenden führt zum Lattice-Boltzmann Automaten.

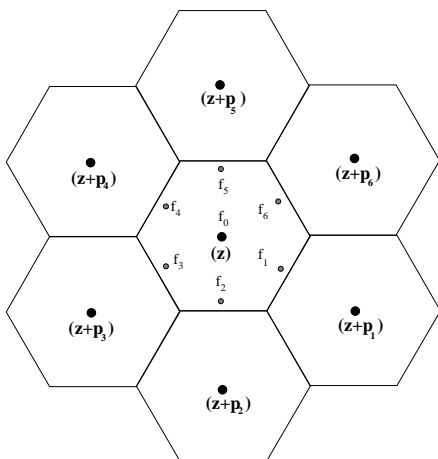
(außer in trivialen Fällen) nicht konvergiert. Jede (Brownsche) Bewegung ist sichtbar, welches die Verwendung großer Gitter notwendig macht. Abhilfe schafft Mittelung über die Zeit und/oder den Raum.

Die Mittelung über den Raum erfolgt, indem man eine Zelle mit ihren sechs Nachbarn zusammenfaßt; dabei 'verfeinert' sich die Belegung um den Faktor drei, da je drei Zellnachbarn im Zellverbund an eine neue Zelle angrenzen (siehe Abb. 2.3).

Generiert man einen zellulären Automaten aus stetig approximierten Zellen, so repräsentieren die Belegungen  $f_i(z)$  den Erwartungswert, daß sich ein Partikel in der Position  $p_i$  befindet.

Ein weiteres Problem liegt darin, daß Massen- und Impulserhaltung voneinander abhängig sind, wodurch physikalisch unrealistische Zustandsoszillationen entstehen. Die Einführung eines siebten Ruheteilchens (FHP-II) oder die Erweiterung der Nachbarschaft verringern diesen Effekt entscheidend (Chen et al. 1989; Chen et al. 1992).

### 2.1.2 Der Lattice-Boltzmann Automat



**Abbildung 2.4: Gitterzelle des Lattice-Boltzmann Automaten.** Die Nachbarschaft einer Zelle im LBA wird gegenüber dem FHP-I um die Position  $p_0$  (Ruheseite) erweitert.

Der Lattice-Boltzmann Automat (LBA) ist ein zellulärer Automat mit hexagonalem Gitter und sieben Nachbarn (siehe Abb. 2.4). Wie im FHP repräsentieren die relativen Koordinaten den Bewegungsimpuls der Partikel. Die wesentliche Veränderung gegenüber dem FHP-I besteht aber darin, daß die Besetzungszahlen für die sieben Positionen nicht mehr nur die Werte 0 oder 1 annehmen, sondern

reelle Zahlen aus dem Intervall  $[0, 1]$  sind. Damit ist der Variablenraum

$$\mathcal{V} = [0, 1]^7$$

Die sieben Komponenten von  $f \in \mathcal{V}$  können als Erwartungswerte von Zufallsvariablen interpretiert werden, die die Besetzung (1) oder Nichtbesetzung (0) der Positionen angeben. Die Transitionsfunktion besteht wieder aus zwei Teilen wie beim FHP-I:

$$T = T_K \circ T_B$$

Der erste Teil ist ungeändert, bis auf die Hinzunahme der Ruheposition 0, die nicht bewegt wird:

$$T_B : \mathcal{V}^7 \rightarrow \mathcal{V} \text{ mit } \begin{aligned} (T_B(g_0, g_1, \dots, g_6))_i &:= g_{|i+3|, i}, & \text{falls } i > 0 \\ (T_B(g_0, g_1, \dots, g_6))_0 &:= g_{0,0} & \text{sonst} \end{aligned}$$

Der zweite Teil wird in Identität und Änderung zerlegt:

$$T_K : \mathcal{V} \rightarrow \mathcal{V}, T_K = I + \Delta^{Boltz} \text{ mit } \Delta^{Boltz} : \mathcal{V} \rightarrow [-1, 1]^7$$

**Bemerkung 2.5:** Der Automat LBA wird dadurch so erfolgreich und einfach, daß man  $\Delta^{Boltz}(\rho)$  durch eine lineare Abbildung ersetzt, also durch eine Matrix beschreibt:

$$\Delta^{Boltz} : [0, 1]^7 \rightarrow [-1, 1]^7$$

Die Matrix  $\Delta^{Boltz}$  ist von der Zelldichte – bezeichnet als  $\rho$  –, d.h. der Anzahl der Partikel in der jeweiligen Zelle, abhängig. Im folgenden wird gezeigt, daß sich die Matrix  $\Delta^{Boltz}$  explizit bestimmen läßt<sup>4</sup>.

Dichte und Geschwindigkeit einer Zelle  $z$  mit Zustand  $f^t(z)$  ist gegeben durch

$$\begin{aligned} \rho &:= \sum_{i=0}^6 f_i & (\text{Dichte}) \\ v = (v_x, v_y) &:= \frac{1}{\rho} \sum_{i=0}^6 p_i f_i & (\text{Geschwindigkeit}) \end{aligned} \tag{2.7}$$

Die Matrix  $\Delta^{Boltz}(\rho)$  ist eindeutig durch Massen- und Impulserhaltung (vgl. 2.4)

$$\sum_{j=0}^6 b_{ji} = 0, \quad \sum_{j=0}^6 p_j b_{ji} = (0, 0), \quad i \in \{0, \dots, 6\}, \tag{2.8}$$

sowie den Sätzen (2.1) und (2.2) bestimmt.

**Satz 2.1: Isometrieinvarianz**

$\Delta^{Boltz}$  ist eine Matrix der Form

$$\Delta^{Boltz}(\rho) = \begin{pmatrix} b_0 & b_1 & b_1 & b_1 & b_1 & b_1 & b_1 \\ b_1^* & b_2 & b_3 & b_4 & b_5 & b_4 & b_3 \\ b_1^* & b_3 & b_2 & b_3 & b_4 & b_5 & b_4 \\ b_1^* & b_4 & b_3 & b_2 & b_3 & b_4 & b_5 \\ b_1^* & b_5 & b_4 & b_3 & b_2 & b_3 & b_4 \\ b_1^* & b_4 & b_5 & b_4 & b_3 & b_2 & b_3 \\ b_1^* & b_3 & b_4 & b_5 & b_4 & b_3 & b_2 \end{pmatrix}$$

<sup>4</sup>Die Korrektheit der Bildmenge läßt sich leicht mit den Eigenwerten aus (2.9) für die Gleichungen  $\Delta_i^{Boltz} x = y$ ,  $i = 0, \dots, 6$  nachrechnen.

**Beweis:** Aus der Isometrieinvarianz der Kollision des realen Systems folgt für  $f \in \mathcal{V}$

$$\begin{aligned} (\mathbf{R}^a \Delta^{Boltz} \cdot f)_j &= (\Delta^{Boltz} \cdot (\mathbf{R}^a f))_j, \quad a, j \in \{0, \dots, 6\} \\ \iff (\mathbf{R}^a (\dots, \sum_n b_{m,n} f_n, \dots))_j &= \sum_n b_{j,n} (\mathbf{R}^a f)_n \\ \xrightarrow{f \text{ bel.}} & \quad (*) \boxed{b_{|j+a|,n} f_n = b_{j,|n-a|} f_n} \end{aligned}$$

Im folgenden sei  $f = (0, \dots, 0, f_n, 0, \dots, 0)$  mit  $f_n = 1$ .

- Sei  $n = j$ , dann  $b_{|j+a|,j} \stackrel{(*)}{=} b_{j,|j-a|}$ ,  $a, j \in \{1, \dots, 6\}$ , d.h.  $\Delta_{i,j=1,\dots,6}^{Boltz}$  ist symmetrisch,
- sei  $n = 0$ , dann  $b_{|j+a|,0} \stackrel{(*),(2.5)}{=} b_{j,0} =: b_1^*$ ,
- sei  $j = 0$ , dann  $b_{0,n} \stackrel{(*),(2.5)}{=} b_{0,|n+a|} =: b_1$ ,
- sei  $j \geq 1$  und  $n = |j+a|$ , dann  $b_{|j+a|,|j+a|} \stackrel{(*)}{=} b_{j,|j+a|-a} = b_{j,j} =: b_2$ ,
- sei  $n \geq 1$ , dann  $\Delta^{Boltz} \cdot f = (b_{0,n}, b_{1,n}, \dots, b_{n-1,n}, b_{n,n}, b_{n+1,n}, \dots, b_{6,n})$ .

Aufgrund der Achsensymmetrie der Kollision folgt

$$b_{|n-m|,n} = b_{|n+m|,n}, \quad m \in \{0, \dots, 6\}.$$

Durch Setzen von  $b_0 := b_{0,0}$ ,  $b_3 := b_{1,2}$ ,  $b_4 := b_{1,4}$ ,  $b_5 := b_{1,5}$  und die Massenerhaltung folgt der Rest.

q.e.d.

Die Elemente der Matrix lassen sich als Wechselwirkungen zwischen den Partikelpositionen interpretieren. So steht  $b_0$  für den Einfluß des Ruhepartikels auf sich selbst,  $b_1$  für den Übergang von Rand- in Ruheposition,  $b_1^*$  für den Übergang von Ruhe- in Randposition und  $b_2, b_3, b_4$  und  $b_5$  für Wechselwirkungen von Partikeln in den relativen Randpositionen  $0^\circ, 60^\circ, 120^\circ$  und  $180^\circ$ .

**Bemerkung 2.6:** Nach Konstruktion des LBA sind die Positionen  $p_0$  und  $p_i$  ( $i \in \{1, \dots, 6\}$ ) gleichgewichtet, woraus  $b_1 = b_1^*$  und somit Symmetrie der Matrix  $\Delta^{Boltz}$  folgt.

Mit einem Mathematikprogramm wie MAPLE lassen sich Eigenwerte und -vektoren bestimmen

$$\begin{aligned} \Delta^{Boltz} x &= \lambda x, \\ \lambda_{1,2,3} &= 0, \quad x_{1,2,3} = (\alpha, \alpha - \beta + \gamma, 2\alpha - \beta, 2\alpha - \gamma, \alpha + \beta - \gamma, \beta, \gamma), \quad \alpha, \beta, \gamma \in \mathbb{R}, \\ \lambda_4 &= -3b_3 + 3b_4, \quad x_4 = (0, -\alpha, -\alpha, \alpha, -\alpha, \alpha, -\alpha), \quad \alpha \in \mathbb{R}, \\ \lambda_{5,6} &= 2b_5 - 2b_3, \quad x_{5,6} = (0, -\alpha - \beta, \beta, \alpha, -\alpha - \beta, \beta, \alpha), \quad \alpha, \beta \in \mathbb{R}, \\ \lambda_7 &= -7b_1, \quad x_7 = (-6\alpha, \alpha, \alpha, \alpha, \alpha, \alpha, \alpha), \quad \alpha \in \mathbb{R}. \end{aligned} \tag{2.9}$$

Der LBA konvergiert bei konstanten Randbedingungen aufgrund der Bewegung und der Erhaltungssätze, d.h.

$$\forall z \in \mathcal{Z} \exists f^{eq}(z) \in \mathcal{V} : f^{eq}(z) = \lim_{t \rightarrow \infty} f^t(z).$$

Für den folgenden Satz werden zwei Schreibweisen eingeführt:



Mit (2.8) und Wiedereinsetzen von  $\hat{f}_m$  ist dies äquivalent zu

$$f_i^{eq} = \frac{1}{1 + e^{h+p_i \cdot q}}, \quad h \in \mathbb{R}, \quad q \in \mathbb{R}^2.$$

”  $\Leftarrow$  ”: Seien die Bezeichnungen wie oben. Aus (\*\*\*) folgt

$$\begin{aligned} \prod_{m=0}^6 \hat{f}_m^{k_m} &= \prod_{m=0}^6 \hat{f}_m^{k_m + (\delta_{k,j})_m} \\ \Leftrightarrow \Lambda(f^{eq}, k) &= \Lambda(f^{eq}, k + \delta_{k,j}), \quad j \in \{1, \dots, |\delta_k|\} \\ \Leftrightarrow \sum_{j=1}^{|\delta_k|} w_{k,j} (k_i + (\delta_{k,j})_i) &= \sum_{j=1}^{|\delta_k|} w_{k,j} (k_i + (\delta_{k,j})_i) \\ &\quad \cdot \Lambda(f^{eq}, k) \quad \cdot \Lambda(f^{eq}, k + \delta_{k,j}) \\ \Leftrightarrow \sum_{k \in K} \sum_{j=1}^{|\delta_k|} w_{k,j} (k_i + (\delta_{k,j})_i) &= \sum_{k \in K} \sum_{j=1}^{|\delta_k|} w_{k,j} k_i \Lambda(f^{eq}, k) \\ &\quad \cdot \Lambda(f^{eq}, k) \\ \Leftrightarrow 0 &= \sum_{k \in K} \sum_{j=1}^{|\delta_k|} w_{k,j} (\delta_{k,j})_i \Lambda(f^{eq}, k) \\ &= (\Delta^{Boltz}(f^{eq}))_i \end{aligned}$$

q.e.d.

Falls ein lokales Gleichgewicht herrscht, so kann man erwarten, daß die lokale Funktion  $f_i^t(z)$  nur von den globalen Parametern Dichte  $\rho(z, t)$  und Geschwindigkeit  $v(z, t)$  abhängt.

**Bemerkung 2.7:** Im stationären Zustand  $f^{eq}$  gilt  $f_0^{eq} = \frac{\rho^{eq}}{7}$ . Dies folgt unmittelbar aus Satz 2.1, wonach

$$d_0 + 6d_1 = 0 \wedge d_0 f_0^{eq} + d_1 (\rho^{eq} - f_0^{eq}) = 0.$$

Der stationäre Zustand  $f^{eq}$  kann somit geschrieben werden als

$$f_i^{eq} = f_{FD}(h + p_i q) \text{ mit } h = h(\rho, v) \in \mathbb{R}, \quad q = q(\rho, v) \in \mathbb{R}^2, \quad i \in \{0, \dots, 6\} \quad (2.10)$$

und es gilt

- $f_{FD}(h(\rho, v)) = \frac{\rho}{7}, \quad q(\rho, 0) = (0, 0)$
- $h(\rho, v) = h(\rho, -v) \Rightarrow h(\rho, v) = h_0(\rho) + h_2(\rho)v^2 + O(v^4)$
- $q(\rho, -v) = -q(\rho, v) \Rightarrow q(\rho, v) = q_1(\rho)v + O(v^3)$

Taylorentwicklung um  $v = (0, 0)$  führt zu

$$f_i^{eq}(\rho, v) = f_{FD}(h_0) + q_1 p_a f'_{FD}(h_0) |v| + h_2 f'_{FD}(h_0) |v|^2 + \frac{1}{2} (q_1 p_a)^2 f''_{FD}(h_0) |v|^2 + O(v^3) \quad (2.11)$$

Mit (2.8) lassen sich  $h_0, h_2, q_1$  bestimmen und man erhält (siehe z.B. Frisch et al. (1987))

$$\begin{aligned} f_i^{eq}(\rho, v) &= \frac{\rho}{7} \left( 1 + \frac{7}{3} (p_i v) + G(\rho) ((p_i v)^2 - \frac{3}{7} I_2 v) \right) + O(v^3) \\ G(\rho) &= \frac{49}{18} \frac{7-2\rho}{7-\rho} \end{aligned} \quad (2.12)$$

wobei  $I_n$  die Einheitsmatrix vom Rang  $n$  bezeichne. Im folgenden sei  $v \ll 1$  angenommen.

### Die Navier-Stokes Gleichung

In hydrodynamischen Systemen werden die Strömungseigenschaften einer Substanz durch die Navier-Stokes Gleichung beschrieben. Bei der Betrachtung von Flüssigkeiten vereinfacht sich diese zur *inkompressiblen Navier-Stokes Gleichung*

$$\begin{aligned}\partial_t \rho v + \rho v \nabla v &= -\nabla p + \rho \nu \nabla^2 v (+\nabla q) \\ \nabla v &= 0,\end{aligned}\tag{2.13}$$

wobei  $p$  den System- und  $q$  einen externen Druckgradienten angibt.  $\nu$  ist die kinematische Viskosität der Flüssigkeit. Ein Modell zur Simulation von Flußdynamiken kann nur dann adäquat sein, wenn es ebenfalls diese Eigenschaft aufweist. Im folgenden wird die Navier-Stokes Gleichung aus dem Modell hergeleitet.

Für große Gitter und Zeitintervalle läßt sich der Iterationsschritt dann mit  $\delta_t, \delta_z \ll 1$  stetig approximieren zu

$$f_i^{t+\delta_t}(z + p_i \delta_z) - f_i^t(z) = \Delta_i^{Boltz}(f_i^t(z)).\tag{2.14}$$

Mit der Annahme, daß  $\delta_x, \delta_t \approx \epsilon$ , erhält man mittels Taylorentwicklung

$$f_i^t(z + p_i \delta_z) = f_i^t(z) + \partial_t f_i^t(z) + p_i \nabla f_i^t(z) + \frac{1}{2} \epsilon (\partial_t + p_i \nabla)^2 f_i^t(z) + O(\epsilon^2)\tag{2.15}$$

Für den Fall, daß  $\epsilon \rightarrow 0$ , spricht man von der *Boltzmann-Transport-Gleichung*

$$\partial_t f_i + p_i \nabla f_i = \Delta_i(f).\tag{2.16}$$

Im makroskopischen Raum formulieren sich die Erhaltungssätze (2.8) zu

$$\begin{aligned}\partial_t \rho + \nabla(\rho v) &= 0 \quad (\text{Kontinuitätsgleichung}) \\ \partial_t v + (v \nabla)v &= 0 \quad (\text{Bewegungsgleichung})\end{aligned}\tag{2.17}$$

Mit (2.16) läßt sich die Bewegungsgleichung schreiben als

$$\sum_i \partial_t(p_i f_i) + \sum_i p_i(p_i \nabla f_i) = 0.\tag{2.18}$$

Mit Hilfe von (2.12) läßt sich dies entwickeln zu (siehe Frisch et al. (1987) S.669-675)

$$\partial_t(\rho v) + \nabla p = \nabla s + O(\epsilon v),\tag{2.19}$$

mit

$$\begin{aligned}p &= c_s^2 \rho \left( 1 - \mu \left( \frac{v}{c_s} \right)^2 \right) I_2 + \rho \mu I_2 v && (\text{Fluß - Tensor}) \\ s &= \nu \nabla(\rho v) && (\text{Viskositätsstreß - Tensor}) \\ \mu &= \frac{7}{12} \frac{7-2\rho}{7-\rho} && (\text{Korrekturfaktor}) \\ \nu &= \nu(\rho, \Delta^{Boltz}) = \frac{1}{28} \frac{49}{\rho(7-\rho)} \frac{49}{49-\frac{8}{7}\rho(7-\rho)} - \frac{1}{8} && (\text{kinematische Viskosität}) \\ c_s &= \sqrt{\frac{3}{7}} && (\text{Schallgeschwindigkeit})\end{aligned}\tag{2.20}$$

Für den Fall  $v \ll c_s$  und  $\mu = 1$  entspricht dies der inkompressiblen Navier-Stokes Gleichung. Die Abhängigkeit  $\mu s$  von der Dichte  $\rho$  ist Grund für die Nichterfüllung der Galileischen Invarianz und es folgt gleichzeitig die Notwendigkeit der Inkompressibilität.

**Bemerkung 2.8:** Die Kollisionsmatrix ist unabhängig von der Erfüllung der Navier-Stokes Gleichung, sie bestimmt jedoch die Viskosität.

**Bemerkung 2.9:** Bei Simulation einer Flüssigkeit läßt sich die Galileische Invarianz durch passende Skalierung wiederherstellen (Frisch et al. 1987). Werden mehrere Stoffe (z.B. Wasser und im Wasser gelöste Substanzen) gleichzeitig simuliert, ist die Skalierung nicht mehr eindeutig, da  $\mu$  vom jeweiligen Stoff bzw. dessen Dichte abhängt. Einen Ausweg bietet die Erweiterung mit mehr Partikelgeschwindigkeiten (Chen et al. 1989).

Mit dem Raumskalierungsfaktor  $\epsilon_{sys}$  werden die Größen Raum ( $R$ ), Zeit ( $T$ ), Geschwindigkeit ( $V$ ), Druck ( $P$ ) und Viskosität wie folgt skaliert<sup>5</sup>:

$$\begin{aligned} R &= \epsilon_{sys} r, & P &= \epsilon_{sys}^{-2} \mu^{-1} p, \\ T &= \epsilon_{sys}^2 \mu t, & \nu &= \mu^{-1} \nu, \\ V &= \epsilon_{sys}^{-1} v. \end{aligned} \quad (2.21)$$

**Bemerkung 2.10:** Die Skalierung der Viskosität hat zur Folge, daß nur Viskositäten  $\nu > 0.2931$  ( $\rho = 1.9956$ ) simuliert werden können, wodurch der LBA nur zur Simulation laminarer Strömungen geeignet ist (Diemer et al. 1989). Zudem ergeben sich für Dichten  $\rho > 3.5$  negative Viskositäten.

### Numerische Berechnung des Lattice-Boltzmann Automaten

Der Iterationsschritt läßt sich schreiben als

$$f_i^{t+1} - f_i^{t+1/2} = \left( \dots, \sum_i \underbrace{\Delta_j^{Boltz} f_i^{t+1/2}}_{\xrightarrow{t \rightarrow \infty} f_i^{eq}}, \dots \right) \quad (2.22)$$

Damit stellt sich bei der numerischen Berechnung das Problem der Auslöschung. Dies läßt sich vermeiden, indem man den Zustand  $f$  in Gleichgewichts- und Nichtgleichgewichtszustand aufteilt.

$$f_i^{t+1} - f_i^{t+1/2} = \Delta_i^{Boltz} (f^{t+1/2} - f^{eq} + f^{eq}) \stackrel{\Delta_i^{Boltz}(f^{eq})=0}{=} \Delta_i^{Boltz} (f^{t+1/2} - f^{eq}) \quad (2.23)$$

Unter Ausnutzung der Inkompressibilität läßt sich die Berechnung des Gleichgewichtszustandes vereinfachen

$$f_i^{eq} = \frac{\rho_0}{7} \left( 1 + \frac{3}{7} (p_i v) + G(\rho_0) ((p_i v)^2 - \frac{3}{7} v^2) \right) + O(\Delta \rho) \quad (2.24)$$

mit  $\rho_0 = \rho(z, t)$  f.a.  $t \in \mathbb{N}$ ,  $z \in \mathcal{Z}$ . In einem letzten Schritt läßt sich die Matrixmultiplikation vereinfachen

$$\begin{aligned} \Delta_i^{Boltz} (f - f^{eq}) &= \Delta_i^{Boltz} (f) - \frac{\rho_0}{7} \Delta_i^{Boltz} (I_7) - \frac{3}{7} \frac{\rho_0}{7} v \Delta_i^{Boltz} (p_i) - \frac{\rho_0}{7} G(\rho_0) \Delta_i^{Boltz} ((p_i v)^2) \\ &\quad + \frac{3}{7} \frac{\rho_0}{7} v^2 \Delta_i^{Boltz} (I_7) \\ &= \Delta_i^{Boltz} (f - \frac{\rho_0}{7} G(\rho_0) (p_i v)^2). \end{aligned} \quad (2.25)$$

Der Lattice-Boltzmann Automat ist dann gegeben durch:

<sup>5</sup>Groß- bzw. Fettbuchstaben bezeichnen makroskopische Größen.

**Definition 2.4:** *Lattice-Boltzmann Automat*

Sei  $(\mathcal{Z}, dist)$  hexagonales Gitter. Sei

$$\mathcal{P} = \{p_0, \dots, p_6\} \\ := \left\{ \begin{pmatrix} 0 \\ 0 \end{pmatrix}, \begin{pmatrix} 1 \\ -1 \end{pmatrix}, \begin{pmatrix} 0 \\ -2 \end{pmatrix}, \begin{pmatrix} -1 \\ -1 \end{pmatrix}, \begin{pmatrix} -1 \\ 1 \end{pmatrix}, \begin{pmatrix} 0 \\ 2 \end{pmatrix}, \begin{pmatrix} 1 \\ 1 \end{pmatrix} \right\}$$

die relative Nachbarschaft,

$\mathcal{V} = [0, 1]^7$  der Variablenraum und

$T = T_K \circ T_B$  die Transitionsfunktion

mit dem Bewegungsanteil

$$T_B : \mathcal{V}^7 \rightarrow \mathcal{V} \text{ mit } \begin{cases} (T_B(g_0, g_1, \dots, g_6))_i := g_{|i+3|,i}, & \text{falls } i > 0 \\ (T_B(g_0, g_1, \dots, g_6))_0 := g_{0,0} & \text{sonst} \end{cases}$$

und dem Kollisionsanteil

$$T_K : \begin{cases} \mathcal{V} \rightarrow \mathcal{V} \\ f \mapsto T_K(f) = I(f) + \Delta^{Boltz}(\rho)(f - f') \end{cases}$$

mit  $f'_i = G(\rho_0)(p_i v)^2 = \frac{49}{18} \frac{7-2\rho_0}{7-\rho_0} (p_i v)^2$  und

$$(pv)^2 = \begin{pmatrix} 0 \\ \frac{(\sqrt{3}v_x+v_y)^2}{4} \\ v_y^2 \\ \frac{(\sqrt{3}v_x-v_y)^2}{4} \\ \frac{(\sqrt{3}v_x+v_y)^2}{4} \\ v_y^2 \\ \frac{(\sqrt{3}v_x-v_y)^2}{4} \end{pmatrix} \text{ mit } \begin{cases} v_x = \frac{1}{\rho}[(f_1 - f_3 - f_4 + f_6) \cdot \cos \frac{\pi}{6}] \\ v_y = \frac{1}{\rho}[(-f_1 - f_3 + f_4 + f_6) \cdot \sin \frac{\pi}{6} \\ + (-f_2 + f_5) \cdot \sin \frac{\pi}{2}] \end{cases}$$

Die Matrix  $\Delta^{Boltz} = (b_{i,j})$  ergibt sich zu

$$\Delta^{Boltz}(\rho) = -\frac{1}{2}r(1-r) \begin{pmatrix} b_0 & b_1 & b_1 & b_1 & b_1 & b_1 & b_1 \\ b_1 & b_2 & b_3 & b_4 & b_5 & b_4 & b_3 \\ b_1 & b_3 & b_2 & b_3 & b_4 & b_5 & b_4 \\ b_1 & b_4 & b_3 & b_2 & b_3 & b_4 & b_5 \\ b_1 & b_5 & b_4 & b_3 & b_2 & b_3 & b_4 \\ b_1 & b_4 & b_5 & b_4 & b_3 & b_2 & b_3 \\ b_1 & b_3 & b_4 & b_5 & b_4 & b_3 & b_2 \end{pmatrix}$$

wobei  $r := \frac{\rho}{7}$  und

$$\begin{aligned} b_0 &:= 24r^2 - 24r + 12 &= 6(2r-1)^2 + 6 \\ b_1 &:= -4r^2 + 4r - 2 &= (-1)(2r-1)^2 - 1 \\ b_2 &:= 10r^2 - 10r + 8 &= 2.5(2r-1)^2 + 5.5 \\ b_3 &:= -6r^2 + 6r - 5 &= (-1.5)(2r-1)^2 - 3.5 \\ b_4 &:= 2r^2 - 2r + 1 &= 0.5(2r-1)^2 + 0.5 \\ b_5 &:= 2r^2 - 2r + 2 &= 0.5(2r-1)^2 + 1.5 \end{aligned}$$



Sei  $\Phi$  wie in Definition 2.1 mit der Transitionsfunktion  $T$  definiert. Dann heißt  $(\mathcal{P}, \mathcal{Z}, \mathcal{V}, \Phi)$  der zelluläre Automat LBA.

Mit Hilfe des LBA (bzw. LGA mit großen Gittern) lassen sich Strömungen von inkompressiblen Stoffen sehr gut simulieren (Higuera und Succi 1989; Kougias 1991; Bernsdorf 1994; Di Pietro et al. 1994), darüber hinaus ist der LBA bzgl. der Eingabeparameter numerisch äußerst stabil (Higuera et al. 1989). Entscheidender Nachteil ist jedoch die dichteabhängige Skalierung.

### 2.1.3 Der Lattice BGK

Die Dichteabhängigkeit von  $\mu$  in der Navier-Stokes Gleichung wird durch die Fermi-Dirac Verteilung verursacht. In der diskreten kinetischen Theorie (Gatignol 1975) sind Gase Maxwellverteilt. Unter dieser Annahme kann man die Partikeldichte in der Ruheposition erhöhen und erhält Galileische Invarianz (Qian et al. 1991). Ersetzt man die Kollisionsmatrix  $\Delta^{Boltz}$  durch einen Relaxationsfaktor  $\omega$ , so bleiben die Eigenschaften der Navier-Stokes Gleichung erhalten (Bhatnagar et al. 1954; Qian et al. 1992).

Der Iterationsschritt im LBGK vereinfacht sich dann gegenüber dem des LBA zu

$$\begin{aligned} f_i^{t+1/2}(z) &= f_i^t(z - p_i), \\ f_i^{t+1}(z) - f_i^{t+1/2}(z) &= \omega(f_i^{eq}(z) - f_i^{t+1/2}(z)). \end{aligned} \quad (2.26)$$

Im Fall  $0 < \omega < 1$  spricht man von Unter- und im Fall  $1 < \omega < 2$  von Überrelaxation. Der Algorithmus ist für  $0 < \omega < 2$  linear stabil<sup>6</sup> (Qian et al. 1992). Diese Form des Automaten repräsentiert den derzeitigen Stand der Forschung (Shan und He 1998; Karlin und Succi 1998). Die Berechnung des Gleichgewichtszustandes beschränkte sich anfangs auf die Ausnutzung der erhöhten Partikelbelegung der mittleren Position (Qian et al. 1992; Chen et al. 1992). Neuere Arbeiten hingegen versuchen, auch thermodynamische Eigenschaften auf das Modell zu übertragen bzw. zu verallgemeinern (He und Luo 1997; Karlin und Succi 1998; Luo 1998; Shan und He 1998). Mit der *Boltzmann-Maxwellschen Verteilung*

$$g(\xi) \equiv \frac{\rho}{2\pi RT} e^{-\frac{(\xi-v)^2}{2RT}}, \quad (2.27)$$

wobei hier  $R$  die ideale Gaskonstante,  $T$  die Temperatur,  $\xi$  die jeweilige Partikel- und  $v$  die Zellgeschwindigkeit bezeichnen, erhält man für den hexagonalen LBGK (vgl. Glg. 2.24, He und Luo 1997)

$$f_i^{eq}(z) = w_i \rho (1 + 4(p_i v) + 8(p_i v)^2 - 2v^2), \quad w_i = \begin{cases} \frac{1}{2}, & i = 0 \\ \frac{1}{12}, & i = 1, \dots, 6 \end{cases}. \quad (2.28)$$

Hierbei ist  $RT = c_s^2$  gesetzt mit der Schallgeschwindigkeit  $c_s = 1/2$ .

#### Definition 2.5: Lattice BGK

Seien  $\mathcal{P}, \mathcal{V}, T_B$  wie in Definition 2.4 und

$$T := T_K \circ T_B$$

<sup>6</sup>Für die Erwartungswerte  $\lambda$  der Matrix  $\Delta^{Boltz}$  gilt  $-2 \leq \lambda \leq 0$ .

mit dem Kollisionsanteil

$$T_K : \begin{cases} \mathcal{V} & \rightarrow & \mathcal{V} \\ f & \mapsto & T_K(f) = (1 - \omega)f + \omega f^{eq} \end{cases}$$

mit dem Relaxationsfaktor  $\omega \in ]0, 2[$  und  $f^{eq}$  nach (2.28).  $\Phi$  sei nach (Def. 2.1) definiert mit  $T$ . Dann heißt  $(\mathcal{P}, \mathcal{Z}, \mathcal{V}, \Phi)$  der zelluläre Automat LBGK.

Die Viskosität ist im LBGK bestimmt durch (Qian et al. 1992; Dardis und McCloskey 1998)

$$\nu = \frac{1}{8} \left( \frac{2}{\omega} - 1 \right). \quad (2.29)$$

und hängt allein von dem Relaxationsfaktor ab. Man erkennt sofort, daß jede beliebige (positive) Viskosität gewählt werden kann und daß die Dichteabhängigkeit verschwunden ist. Die Skalierung erfolgt analog (2.21) mit  $\mu = 1$ .

In der Praxis ist die Simulation realistischer Viskositäten (z.B. Wasser:  $\nu = 1$  bis  $2 \cdot 10^{-6} m^2/s \Rightarrow \omega \geq 1,999968$ ) nicht möglich, da der LBGK für  $\omega \rightarrow 2$  instabil wird. Diese Unstabilität ist im wesentlichen durch den Anteil ruhender Partikel (Sterling und Chen 1996) und die Rechengenauigkeit (Teixeira 1997) bestimmt. Größte Stabilität wurde für Systeme nachgewiesen, in denen 2/3 der Partikel in der mittleren Position liegen (Sterling und Chen 1996).

Aus der Hydrodynamik ist bekannt, daß Strömungsmuster nicht nur von der Viskosität, sondern ebenso von der Strömungsgeschwindigkeit und dem Raum abhängig sind. Diese Charakteristik wird mit der sogenannten *Reynoldszahl* beschrieben:

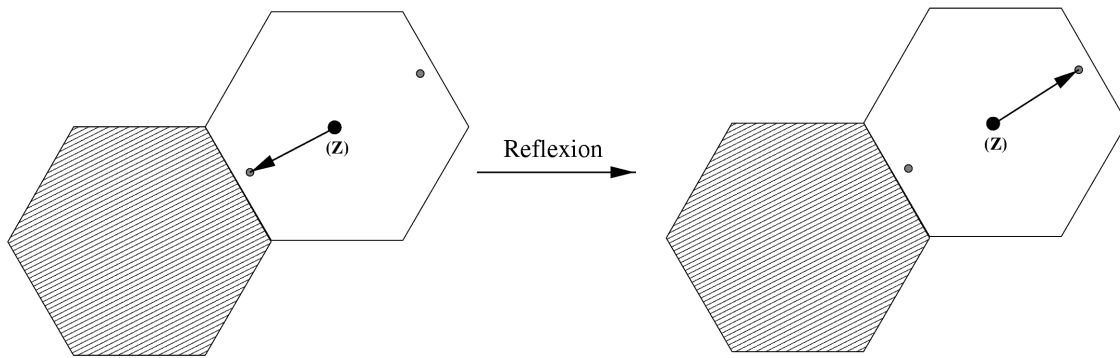
$$Re = \frac{v \cdot L}{\nu}, \quad (2.30)$$

wobei  $v$  die charakteristische Fließgeschwindigkeit in  $[Zellen/Iteration]$ ,  $L$  die charakteristische Länge in  $[Zellen]$  und  $\nu$  die kinematische Viskosität in  $[Zellen^2/Iteration]$  beschreibt (Higuera et al. 1989; Benzi et al. 1992). Alle zitierten LGA bzw. LBE simulieren reale Wasser- oder sogar Windströme mit relativ hohen Viskositäten, indem die entsprechende Reynoldszahl simuliert wird. Hohe Reynoldszahlen erreicht man durch Herabsetzen der Viskosität, Erhöhung der Fließgeschwindigkeit oder Vergrößerung des Modellgitters (siehe (2.30) und Worthing et al. (1997)). Für sehr große Reynoldszahlen läßt sich ein Smagorinsky-Subgrid-Verfahren anwenden, indem der Relaxationsfaktor lokal berechnet wird (Smagorinsky 1963; Hou et al. 1996; Masselot und Chopard 1998).

Die in dieser Arbeit betrachteten Sandwattsedimente weisen jedoch hydraulische Leitfähigkeiten in der Größenordnung von  $10^{-4} m/s$  auf, die Permeabilitäten  $k \approx 10^{-11} m^2$  entsprechen (Domenico und Schwartz 1998). In diesem Bereich sind die auftretenden Ströme ausschließlich laminar ( $Re \ll 1$ , (Klenke, persönliche Kommunikation)), d.h., es treten keine Turbulenzen auf und die Viskosität hat einen vernachlässigbaren Effekt auf das Strömungsbild. Dies wurde durch Untersuchungen gezeigt (Freed 1998), läßt sich aber für die LBE auch direkt herleiten (siehe Satz 2.3 und Satz 2.4).

## 2.2 Die Randbedingungen

Zur Simulation von Strömungen in (porösen) Medien ist es notwendig, die Zellen mit einer zusätzlichen Information über ihre Struktur zu versehen, sowie eine entsprechende Ergänzung der Transitionsfunktion vorzunehmen. Ferner wird geklärt, auf welche Weise die Randzellen zu behandeln sind und das Generieren externer Kräfte erfolgt.



**Abbildung 2.5: Hindernisreflexion.** Ein Partikel, daß in der Bewegungsphase auf ein Hindernis trifft, wird in die entgegengesetzte Richtung reflektiert. Der Zustand der Hinderniszellen ist invariant.

### 2.2.1 Behandlung von Hindernissen

Im realen Medium wird zwischen Porenraum (durchlässig) und Sediment bzw. festen Komponenten (undurchlässig) unterschieden<sup>7</sup>. An der Sedimentoberfläche ist, aufgrund von Reibungseffekten, die Strömungsgeschwindigkeit Null. Dies läßt sich im Modell erreichen, indem Partikel von den Oberflächen vollständig reflektiert werden<sup>8</sup>.

#### Definition 2.6: Zellstruktur

Eine Zelle heißt  $\left\{ \begin{array}{l} \text{frei} \\ \text{Hindernis} \end{array} \right\}$ , wenn Partikel benachbarter Zellen  $\left\{ \begin{array}{l} \text{transportiert} \\ \text{reflektiert} \end{array} \right\}$  werden (vgl. Abb. 2.5). Die Menge  $Struc = \{\text{frei}, \text{Hindernis}\}$  heißt dann Zellstruktur.

Die bisher nur für freie Zellen definierte Transitionsfunktion muß für Hindernisse und den Übergang frei–Hindernis ergänzt werden. Die Definitionen vom FHP-I und der LBEs werden dementsprechend erweitert.

#### Definition 2.7: Hindernis-Erweiterung

Sei  $(\mathcal{Z}, \mathcal{P}, \mathcal{V}, \Phi)$  ein zellulärer Automat nach (Def. 2.3), (Def. 2.4) oder (Def. 2.5). Dann wird der Variablenraum und die Zustandsmenge um die Struktur erweitert

$$\mathcal{V}' = [0, 1]^7 \times Struc$$

Die Hindernisreflexion wirkt sich auf die Bewegungskomponente der Transitionsfunktion aus, die entsprechen erweitert wird zu

$$T = (T_K \circ T'_B, id_{Struc})$$

wobei sich die „Bewegung“  $T'_B$  mit  $h = (f, s) \in \mathcal{V}'$  schreiben läßt als

$$T'_B : \left\{ \begin{array}{ll} \mathcal{V}'^7 & \rightarrow \mathcal{V}' \\ (h_0, \dots, h_6) & \mapsto T'_B(h_0, \dots, h_6) \end{array} \right.$$

<sup>7</sup>In Kapitel 5 werden allgemeinere Strukturen (z.B. Biofilme) behandelt.

<sup>8</sup>Ein Vergleich verschiedener Grenzbedingungen findet sich in Lavallée et al. (1991).

mit

$$(T'_B(h_0, \dots, h_6))_i = \begin{cases} f_{i,0}, & \text{falls } s_0 = \text{Hindernis} \\ f_{|i+3|,i}, & \text{falls } s_0 = \text{frei} \wedge s_i = \text{frei} \\ f_{|i+3|,0}, & \text{falls } s_0 = \text{frei} \wedge s_i = \text{Hindernis} \end{cases} .$$

und der „Strukturveränderung“

$$id_{Struc} : \begin{cases} \mathcal{V}^7 & \rightarrow \mathcal{V}' \\ (h_0, \dots, h_6) & \mapsto s_0 \end{cases}$$

Sei  $\Phi'$  nach (Def. 2.1) definiert mit  $T'$ , dann heißt der zelluläre Automat  $(\mathcal{P}, \mathcal{Z}, \mathcal{V}', \Phi')$   $\left\{ \begin{array}{l} \text{FHP - I} \\ \text{LBA} \\ \text{LBGK} \end{array} \right\}$   
mit Zellstruktur.

**Bemerkung 2.11:** Die Strukturveränderung gewinnt erst mit Einführung entsprechender Prozesse in Kapitel 5 an Bedeutung.

Ähnlich wie zuvor werden die Zusände abkürzt durch  $\Phi(\mathcal{S}^0)(t, z) =: (f^t(z), s^t(z)) \in \mathcal{V}'$ .

### 2.2.2 Behandlung der Randzellen

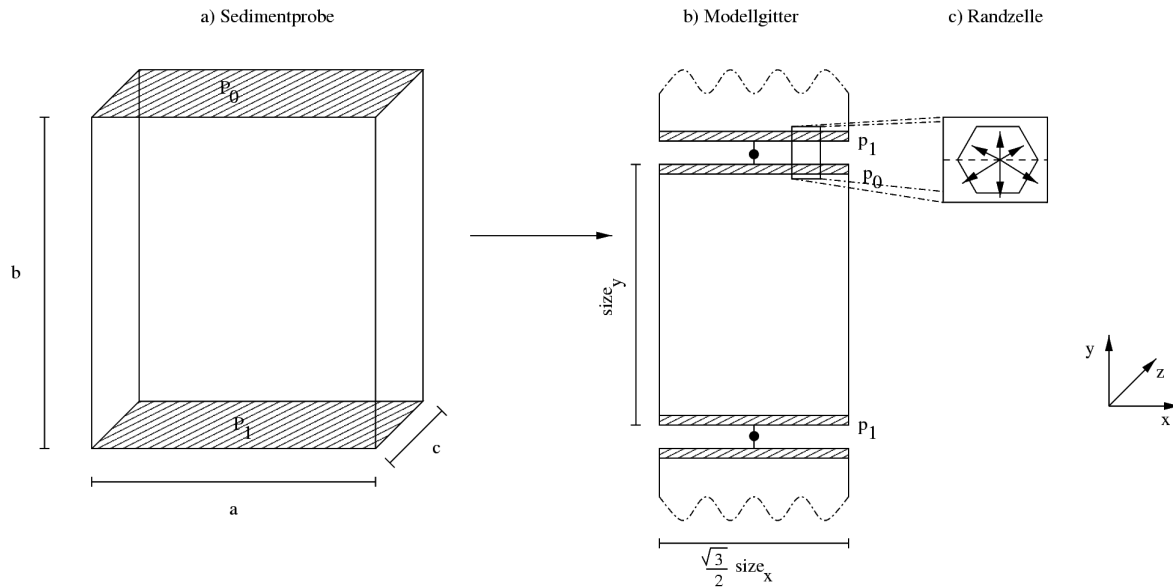
Der Automat wird als zweidimensionales Feld implementiert. Dabei sind die Nachbarschaften der Randzellen unvollständig und müssen separat betrachtet werden. Es bieten sich generell drei Lösungsmöglichkeiten an:

- Die Randzellen werden auf einen iterationsinvarianten Zustand gesetzt. Dies kann eine Hinderisstruktur oder ein vorgegebener Zellimpuls sein. Während der Iteration werden diese Zellen ausgelassen und fungieren lediglich als Nachbarn innerer Zellen.
- Für die Randzellen werden gesonderte Transitionsfunktionen definiert.
- Der Zustand einer Zelle wird aus dem Systemzustand berechnet, beispielsweise der gemittelte Zustand des Systems bzw. einer Umgebung der Zelle (keine Transitionsfunktion im Sinne von Def. 2.1).
- Die Randzellen werden mit den gegenüberliegenden Zellen verknüpft. Auf diese Weise werden periodische Randbedingungen geschaffen. Dies löst gleichzeitig das Problem der Massenerhaltung. Zu beachten ist hierbei, daß die Feldgröße in x-Richtung gerade sein muß (folgt aus der geometrischen Anordnung der Zellen).

Wattsedimente lassen sich in Schichten mit Mächtigkeiten von einigen Millimetern bis hin zu mehreren Dezimetern unterteilen. Jede Schicht weist bezüglich Porosität und Struktur einen homogenen Charakter auf. Da die Größenordnung der zur Simulation verwendeten Sedimentaufnahmen im Millimeterbereich liegt, lassen sich periodische Randbedingungen annehmen.

Strömungen entstehen durch lokale Druckunterschiede, die gemessen bzw. berechnet werden können. Eine realistische Umsetzung im Modell ist das Generieren eines Über- bzw. Unterdrucks an der einen und eines Unter- bzw. Überdrucks an der anderen Seite. Der so entstandene Druckgradient breitet sich im Simulationsprozeß über das System aus, bis (bei konstanten externen Parametern) ein Gleichgewichtszustand eintritt. Die vorwiegende Strömungsrichtung in den betrachteten Sedimenten

ist vertikal und die Aufnahmen sind allesamt Tiefenschnitte, weshalb im folgenden Abschnitt nur vertikal gerichtete Druckgradienten betrachtet werden.



**Abbildung 2.6: Externer Druckgradient.** Während sich in der Probe der Druckgradient von oben nach unten bzw. umgekehrt aufbaut, geschieht dies im Modell von beiden Seiten aus gleichzeitig. Durch Verknüpfung des oberen und unteren Randes muß nur eine Zellreihe gesondert behandelt werden. Bei der Umsetzung in das Modell wird  $size_y$  vorgegeben und  $size_x$  aus den Dimensionen der realen Probe bestimmt.

### 2.2.3 Anlegen eines Druckgradienten

Gegeben sei ein dreidimensionales (reales) System mit globalen Einheiten  $R, T, V$  (Länge, Zeit und Geschwindigkeit). Der betrachtete Ausschnitt habe die Abmessungen  $a \times b \times c [R^3]$ , das entsprechende Modell  $size_x \times size_y$  Zellen. Zur Erzeugung einer Strömung wird ein vertikaler Druckgradient  $-\partial_y P$  an das reale System gelegt (siehe Abb. 2.6). Es genügt, aufgrund der Dimension des Modells, einen räumlich uniformen Gradienten zu betrachten, d.h.

$$\partial_x P_i = 0, \quad \partial_z P_i = 0, \quad i = 0, 1. \quad (2.31)$$

Sinnvoll ist jedoch die Option eines zeitlich variablen Druckgradienten  $\partial_y P(t)$ , beispielsweise zur Simulation von Gezeitengängen. Beim Generieren des vertikalen Druckgradienten sollen nur die Randzellen der ersten bzw. der letzten Zeile angeregt werden<sup>9</sup>. In diesem Fall haben in den oberen Randzellen nur die unteren Positionen  $f_1, f_2, f_3$  bzw. in den unteren Randzellen die oberen Positionen  $f_4, f_5, f_6$  einen Einfluß auf das innere System.

Aus der Beziehung

$$\partial_y P = \frac{P_1 - P_0}{b} = \frac{\frac{1}{2}(P_0 + P_1) + P^* - \left(\frac{1}{2}(P_0 + P_1) - P^*\right)}{b} = \frac{2P^*}{b} \quad (2.32)$$

mit  $P^* = \left| P_0 - \frac{1}{2}(P_0 + P_1) \right|$

<sup>9</sup>Ansonsten müßten lokale Besonderheiten, z.B. abgeschlossene Porenräume, durch Fallunterscheidung getrennt behandelt werden.

folgt, daß bei Verknüpfung des oberen und unteren Randes nur eine Randzeile (die nullte) betrachtet werden muß.

Mit der Newtonschen Beziehung

$$\partial_t V = \frac{F}{m}, \quad (2.33)$$

wobei  $F = \partial_y P \cdot b \cdot a \cdot c$  und  $m = \rho \cdot a \cdot b \cdot c$ , läßt sich die Beschleunigung einer Zelle  $z \in \mathcal{Z}$  bestimmen:

$$\partial_t v = \left( \frac{\partial_y P}{\rho} \right) \epsilon_{sys}^3 \mu \quad (2.34)$$

und<sup>10</sup>

$$\epsilon_{sys} = \sqrt{\frac{a}{\frac{\sqrt{3}}{2} size_x} \cdot \frac{b}{size_y}}, \quad size_x = 2 \cdot \left[ \frac{1}{\sqrt{3}} \frac{a \cdot size_y}{b} \right]. \quad (2.35)$$

Die Mittelung von  $\epsilon_{sys}$  ist notwendig, da  $size_x \in \mathbb{N}$ .

In der Literatur finden sich noch zwei weitere Ansätze zur Integration externer Kräfte. Eine Möglichkeit besteht darin, den Druckgradienten nicht, wie hier vorgestellt, nur in der ersten Zeile zu generieren, sondern in jeder Zelle gleichzeitig (Verberg und Ladd 1999). Eine andere Methode ist die lokale Lösung der Navier-Stokes Gleichung mit externer Kraft  $F$  (Martys et al. 1998). Hierzu wird der Iterationsschritt (2.26) erweitert zu

$$f_i^{t+1}(z) - f_i^{t+1/2}(z) = \omega(f_i^{eq}(z) - f_i^{t+1/2}(z)) - F \cdot (f_i^t(z) - f_i^t(z - p_i)). \quad (2.36)$$

Shan und He (1998) zeigten, daß sich der Belegungszustand  $f$  in Termen Hermitescher Polynome entwickeln läßt, womit sich der Gleichgewichtszustand aus (2.27) formuliert zu

$$f_i^{eq}(z) = w_i \rho \left( 1 + 4(p_i v) + 8(p_i v)^2 - 2v^2 - \frac{1}{\omega} (4(F p_i) + 16(p_i v)(F p_i) - 4|F v|^2) \right), \quad (2.37)$$

wobei  $w_i$  für die Positionsgewichtung und  $\omega$  für den Relaxationsfaktor steht.

#### 2.2.4 Umsetzung

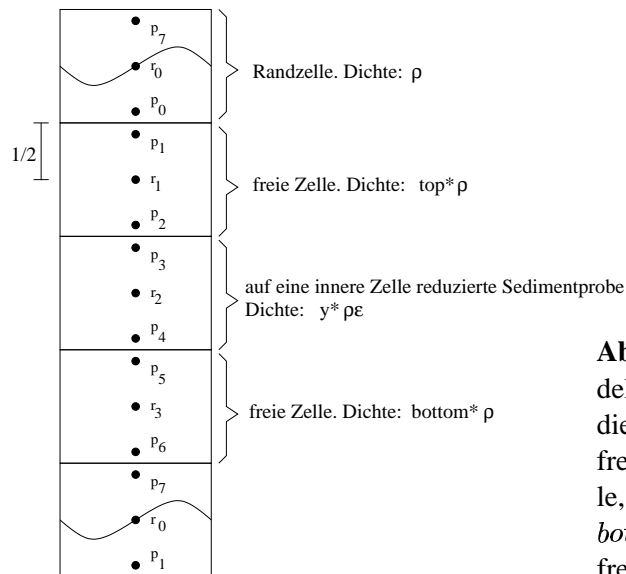
Durch die in 2.2.2 gemachte Annahme periodischer Randbedingungen hat jede Zelle eine vollständige Nachbarschaft. Ein Iterationsschritt besteht aus der definierten Iteration (Def. 2.4) und einem Beschleunigungsschritt der nullten Zellreihe:

$$\begin{aligned} z &= (x, 0) \in \mathcal{Z}, \quad f = f(z), \quad \rho = \rho(z) \\ \Delta f &:= \frac{\partial_y P \cdot \epsilon_{sys}}{4 \cdot \sin \frac{\pi}{6} + 4 \cdot \sin \frac{\pi}{2}} \\ v'_y(z) = v_y(z) + \partial_t v_z \cdot 1t &= \frac{1}{\rho} \left( (-f_1 - f_3 + f_4 + f_6) \cdot \sin \frac{\pi}{6} + (-f_2 + f_5) \cdot \sin \frac{\pi}{2} \right) + \frac{6}{\rho} \Delta f \\ &= \frac{1}{\rho} \left( -(f_1 - \Delta f) - (f_3 - \Delta f) + (f_4 + \Delta f) + (f_6 + \Delta f) \right) \cdot \sin \frac{\pi}{6} \\ &\quad + \left( -(f_2 - 2\Delta f) + (f_5 + 2\Delta f) \right) \cdot \sin \frac{\pi}{2}. \end{aligned} \quad (2.38)$$

Hieraus ergeben sich einige Konsequenzen. Zum einen wurde hier vorausgesetzt, daß die nullte Reihe nur aus freien Zellen besteht. Zum anderen muß man bedenken, daß die Existenz von Hindernissen

<sup>10</sup>[.] bezeichnet die Gaußklammer.

in der ersten bzw. letzten Zeile, bedingt durch die diskrete Struktur, eine Ausbreitung des Gradientens über das System stark beeinträchtigt bzw. verhindert. Die Fließgeschwindigkeit am oberen Rand weicht extrem von der Geschwindigkeit im System ab, wodurch ausgeprägte Randeffekte entstehen. Ein weiteres Problem stellen Rückkopplungseffekte dar, die direkt von der Turbulenz der Strömung abhängen. Im laminaren Fall stabilisiert sich jedoch die vertikale Fließrichtung bereits nach wenigen Zeilen. Aus diesen Gründen werden im Modell oben und unten Reihen freier Zellen hinzugefügt. Die obere Randzeile sei als *Initiatorzeile* bezeichnet.



**Abbildung 2.7: Idealisiertes Modell.** Jedes Modell läßt sich auf 4 Zellen reduzieren. Diese sind die Initiatorzelle mit dem Druckgradienten, zwei freie Zellen zum Flußausgleich und die innere Zelle, die die Sedimentprobe repräsentiert. *top* und *bottom* bezeichnen hier die Anzahl der addierten freien Zellreihen.

Es sei erwähnt, daß bei Simulation turbulenter Strömungen eine zusätzliche Neuausrichtung des Geschwindigkeitsgradienten in der Beschleunigungszeile den Rückkopplungseffekt vermeidet (siehe dazu auch Anhang A).

### Definition 2.8: Reflektionsgrad

Der *Reflektionsgrad* eines Systems sei ein Wert  $a \in [0, 1]$ , der angibt, wieviel der Partikel vom System reflektiert werden.  $a$  ist abhängig von der Porosität und der Hindernisstruktur.

**Bemerkung 2.12:** Bei turbulenten Strömungen nimmt der Reflektionsgrad zu, d.h. er ist zusätzlich vom Druckgradienten abhängig.

### Satz 2.3: Austauschbarkeit

In einem konkreten System mit einem Reflektionsgrad  $0 < a < 1$  läßt sich die Anregung mittels Beschleunigungsterm  $\partial v$  (mit der stationären Geschwindigkeit  $\bar{v}_b$ ) durch einen konstanten Term  $v_0$  (mit der stationären Geschwindigkeit  $\bar{v}_c$ ) austauschen, und es gilt

$$\frac{\bar{v}_c}{\bar{v}_b} = 2a.$$

**Beweis:** Gegeben sei ein System mit Porosität  $\varepsilon$  und Reflektionsgrad  $a$ , das in ein hexagonales Gitter der Größe  $x \times y$  übersetzt wird, wobei die unterste und oberste Zellreihe jeweils frei sei. Dem

Modell werden eine Initiatorzeile mit Anregung  $d < |\bar{v}|$ , sowie  $top \in \mathbb{N}$  freie Zellreihen oben und  $bottom \in \mathbb{N}$  freie Zellreihen unten hinzugefügt. Die Zelldichte sei  $\rho$ .

Nach Voraussetzung gilt  $\bar{v}_x(f^{eq}) = 0$ . Für den stationären Zustand läßt sich dann die 2-dim.

7-Nachbar-LBE Zelle vereinfachen zu einer 1-dim. 3-Nachbar Zelle  $\begin{pmatrix} p_a \\ r \\ p_b \end{pmatrix}$ . Im Anfangszu-

stand gelte  $p_i = \mathbf{p}$ . Als nächstes läßt sich nun jede Zellreihe zu je einer Zelle mitteln. Hindernisse erhalten hierbei die Belegung  $(0, 0, 0)$ . In einem letzten Schritt werden die addierten freien Zellen und das System auf je eine Zelle reduziert (siehe Abb. 2.7). Dabei bezeichnen die Positionen  $p_i$  jeweils die nach oben bzw. unten orientierten Partikel der Grenzzeilen und es gilt  $p_i + p_{(i+1) \bmod 8} =: 2\mathbf{p}$ . Mit den Bezeichnern  $c$  für konstante Anregung und  $b$  für Beschleunigung gilt für die Initiatorzelle

$$\begin{aligned} p_0^c &= \mathbf{p} + d, & p_7^c &= \mathbf{p} - d, \\ p_0^b &= p_6 + d, & p_6^c &= p_1 - d. \end{aligned} \quad (2.39)$$

Die restlichen Positionen sind durch das Gleichungssystem

$$\begin{aligned} \text{I } p_1 &= ap_2 + p_3 & \text{IV } p_4 &= (1-a)p_2 \\ \text{II } p_2 &= p_0 & \text{V } p_5 &= (2\mathbf{p} - p_0) \\ \text{III } p_3 &= (1-a)p_5 & \text{VI } p_6 &= p_4 + ap_5 \end{aligned} \quad (2.40)$$

bestimmt (die  $r_i$  werden vernachlässigt, da sie auf den Zellimpuls keinen Einfluß haben). Die Durchschnittsgeschwindigkeit im System ergibt sich aus

$$\bar{v} = \frac{p_3 - p_4}{y\rho\epsilon}, \quad (2.41)$$

wobei

$$p_3 = (1-a)(2\mathbf{p} - p_0), \quad p_4 = (1-a)p_0, \quad p_0 = \mathbf{p} + \frac{d}{2a}. \quad (2.42)$$

Daraus folgt unmittelbar

$$\frac{\bar{v}_c}{\bar{v}_b} = \frac{(1-a)2(\mathbf{p} - p_0^c)}{(1-a)2(\mathbf{p} - p_0^b)} = 2a \quad (2.43)$$

q.e.d.

**Bemerkung 2.13:** Der Term  $\epsilon - (1-a)$  beschreibt den Anteil der Partikel, die nur passiv an der Strömung durch das System beteiligt sind. Der Wert ist um so größer, je mehr Nischen die Hindernisstruktur aufweist. Für nischenlose Strukturen wie z.B. ein (zweidimensionales) Rohr gilt  $\epsilon \approx 1-a$ . Wenn nur die Porosität einer Struktur bekannt ist, läßt sich diese Methode direkt auf die Gitterzellen anwenden, um die Permeabilität des Systems zu bestimmen (Dardis und McCloskey 1998).

Aus der Schwierigkeit,  $a$  zu bestimmen resultiert, die Notwendigkeit, ein sich selbst induzierendes Modell zu wählen. Der Satz 2.3 zeigt, daß dies höchstens durch Rundungsfehler zu Aufschaukelungseffekten führen kann. Es folgt unmittelbar<sup>11</sup>

<sup>11</sup>siehe dazu auch Scheidegger (1974)



**Satz 2.4:** *fixer Druckgradient*

Gegeben sei eine Geometrie, auf der eine Strömung mit dem Druckgradienten  $\nabla p_{fix}$  ( $\sim \partial_t v$ ) berechnet wird. Wird eine zweite Strömung mit Druckgradienten  $\nabla p$  berechnet, so resultiert im laminaren Fall dasselbe Strömungsmuster und es gilt

$$\bar{v} = \frac{\nabla p}{\nabla p_{fix}} \bar{v}_{fix},$$

wobei  $\bar{v}_{fix}$  und  $\bar{v}$  die jeweiligen Durchschnittsgeschwindigkeiten bezeichnen.

**Beweis:** Auf der Modellebene folgt aus Satz 2.3 und (2.38):  $\bar{v} \sim \partial_t v$ , sowie Linearität des eindimensionalen Strömungsmusters:

$$p_3 = (1 - a)(p - \frac{\partial_t v}{2a}), \quad p_4 = (1 - a)(p + \frac{\partial_t v}{2a}). \quad (2.44)$$

Die Linearität im zweidimensionalen Fall folgt unmittelbar aus den Kollisionen und deren Isotropie.

Im realen System ist dies gewährleistet durch *Darcy's Gesetz*

$$\bar{v} = -\frac{k}{\eta} \cdot \nabla p, \quad (2.45)$$

wobei  $k$  für die Permeabilität des Systems steht, die im laminaren Fall konstant ist.

q.e.d.

**Bemerkung 2.14:** Unter bestimmten Voraussetzungen läßt sich die Gültigkeit von Darcy's Gesetz direkt auf dem hexagonalen Gitter mit Hilfe von Simulationsrechnungen zeigen (Balasubramanian et al. 1987).

Im Modell wird ein fester Gradient  $\Delta f_{fix} = \frac{\rho c_0}{6}$  gesetzt. Die makroskopische Durchschnittsgeschwindigkeit ergibt sich dann aus (2.38)

$$\bar{V} = \frac{\partial_y P \cdot \epsilon_{sys}}{\rho c_0} \bar{v}_{fix}. \quad (2.46)$$

Die Wahl eines fixen Druckgradienten bringt einen großen Vorteil mit sich: Eine Überprüfung der Skalierungsgrenzen beim Übersetzen des realen Druckgradienten ( $|\Delta f| < \frac{\rho}{12}$ ,  $|v| \ll c_s$ ) entfällt. Bei der Wahl des Gradienten muß berücksichtigt werden, daß je kleiner der Wert, desto größer die numerischen Fehler (abhängig vom Datentyp), und je größer der Wert, desto größer die Abweichung von der durchschnittlichen Dichte (Verlust der Inkompressibilität, Auftreten von Turbulenzen im LBGK).

**Bemerkung 2.15:** Die vorangehenden Sätze haben gezeigt, daß sich Druckgradient und Fließgeschwindigkeit im laminaren Fall proportional verhalten. Wird im Modell eine von der Realität abweichende Viskosität angenommen (siehe Abschnitt 2.1.3), so muß der ursprüngliche Druckgradient bzw. die resultierende Geschwindigkeit entsprechend (2.30) skaliert werden.

## 2.3 Technische Umsetzung

Als Programmiersprache für das Modell wurde die Sprache C gewählt. Die Umsetzung erfolgte unter Unix/Linux auf einer HP APOLLO 9000 *Series 700* sowie auf einem PC AMD K6-2 350 MHz. Im Programm wird eine Zelle als Struktur definiert:

```
typedef struct zelle
{
    char          inhalt;           Zellstruktur (frei, Hindernis)
    double        f[7];           Partikelbelegung  $f = (f_0 \dots, f_6)$ 
    struct zelle *nb[6];         Zeiger auf die Nachbarzellen
} typ_zelle, *ptr_to_zelle;
```

Das hexagonale Gitter wird als zweidimensionales Feld der Größe  $(size_x, size_y)$  deklariert. Zusätzlich werden die Zellen mit ihren Nachbarn verknüpft (siehe Anhang B.1).

Die Hindernisstruktur liegt als Graubild in Form einer Datei vor. Dieses wird in ein Schwarz/Weiß Bild gewandelt und in das hexagonale Gitter übertragen. Ist die Auflösung des Modellgitters geringer als die des Sedimentbildes, so wird für jede Zelle der mittlere Besetzungswert<sup>12</sup>  $\beta$  bestimmt. Anhand eines Filterwertes  $0 \leq \phi \leq 1$  erfolgt die Übersetzung nach

$$s(z) = \begin{cases} \textit{Hindernis}, & \text{falls } \beta(z) > \phi \\ \textit{frei} & \text{sonst.} \end{cases} \quad (2.47)$$

Durch die triviale Wahl  $\phi = 0,5$  erhält das Modellgitter eine Porosität ähnlich wie das Ausgangsbild. Da jedoch strukturelle Eigenschaften im Vordergrund der Untersuchungen stehen, ist es sinnvoller, einen höheren Wert zu wählen. Auf diese Weise bleiben kleine Zwischenräume und Pfade im Modellgitter erhalten, wohingegen die Porosität zwangsläufig zunimmt.

Die Iterationsschritte des LBA und LBGK werden implementiert. Die aufgrund des hohen Rechenaufwandes vollzogene programmtechnische Optimierung geht zu Lasten der Lesbarkeit (siehe Anhang B.2–B.4).

Zum Vergleich beider Algorithmen läßt sich eine Aufwandsabschätzung durchführen (siehe Tabelle 2.2). Die aufwendigere Matrixmultiplikation im LBA läßt sich durch programmtechnische Optimierung stark vereinfachen (siehe Anhang B). Somit ist der Rechenaufwand des LBA ca. 1/3 höher als der des LBGK. Während der Rechenaufwand vorwiegend durch die Anzahl der Multiplikationen bestimmt wird, ist der Rundungsfehler abhängig von der Anzahl der Additionen bzw. Subtraktionen. Im LBA haben alle Additionen die Größenordnung  $f_i$ , ( $i = 0, \dots, 6$ ). Im LBGK muß zwischen Additionen der Größenordnung  $f_0$  und  $f_i$ , ( $i = 1, \dots, 6$ ) unterschieden werden. Bezeichne  $\hat{f}$  den numerischen Wert von  $f$ , so ergibt sich pro Position und Iteration

$$\begin{aligned} \textit{LBA} : |f_i - \hat{f}_i| &\leq 72 \cdot 10^{1-d_m} \cdot \max_{j=0, \dots, 6} \{f_j\} \stackrel{v \rightarrow 0}{\cong} \frac{72}{7} \rho \\ \textit{LBGK} : |f_i - \hat{f}_i| &\leq 8 \cdot 10^{1-d_m} \cdot f_0 + 36 \cdot 10^{1-d_m} \max_{j=1, \dots, 6} \{f_j\} \stackrel{v \rightarrow 0}{\cong} \frac{64}{7} \rho. \end{aligned} \quad (2.48)$$

Hier bezeichnet  $d_m$  die Mantissenlänge des Datentyps (`double` bzw. `float`) und  $10^{1-d_m}$  die relative Maschinengenauigkeit. Damit ist der Fehlerterm bei beiden Algorithmen etwa gleich groß. Die Kollisionsterme verteilen die Partikeldichte gleichmäßig über alle Positionen  $p_i$  ( $i > 0$ ) einer Zelle, wodurch das Strömungsmuster sehr robust gegenüber Rundungsfehlern ist. Kritisch hingegen ist

<sup>12</sup>schwarze Pixel/gesamte Pixel  $\approx$  Hindernisse/(Fläche/Zelle)

Rechenschritt	LBA	LBGK
$v, pv$	9M+16A	9M+16A
$f^{eq}$	6M	24M+14A
$m$ und $sm$	6M+12A	—
$f_0$	2M+2A	1M+2A
$f_1, \dots, f_6$	$6 \cdot (7M + 7A)$	$6 \cdot (1M + 2A)$
<b>Summe</b>	<b>65M+72A</b>	<b>40M+44A</b>

**Tabelle 2.2: Aufwandsabschätzung des Lattice-Boltzmann Automaten und Lattice BGK.** Jeder (iterations-)konstante Term wird nur einmal zum Beginn der Iteration bzw. Simulation berechnet und nicht weiter berücksichtigt (siehe Anhang B). Zuweisungen und bedingte Anweisungen werden vernachlässigt. Additionen bzw. Subtraktionen werden mit 'A' und Multiplikationen bzw. Divisionen sind mit 'M' gekennzeichnet.

der unerwünschte Massengewinn bzw. -verlust. Die Invarianz der globalen Masse erlaubt eine Massenkorrektur des Modells. Dies wird erreicht, indem die Dichte der Initiatorzellen entsprechend der Massendifferenz modifiziert wird.

## 2.4 Anwendung

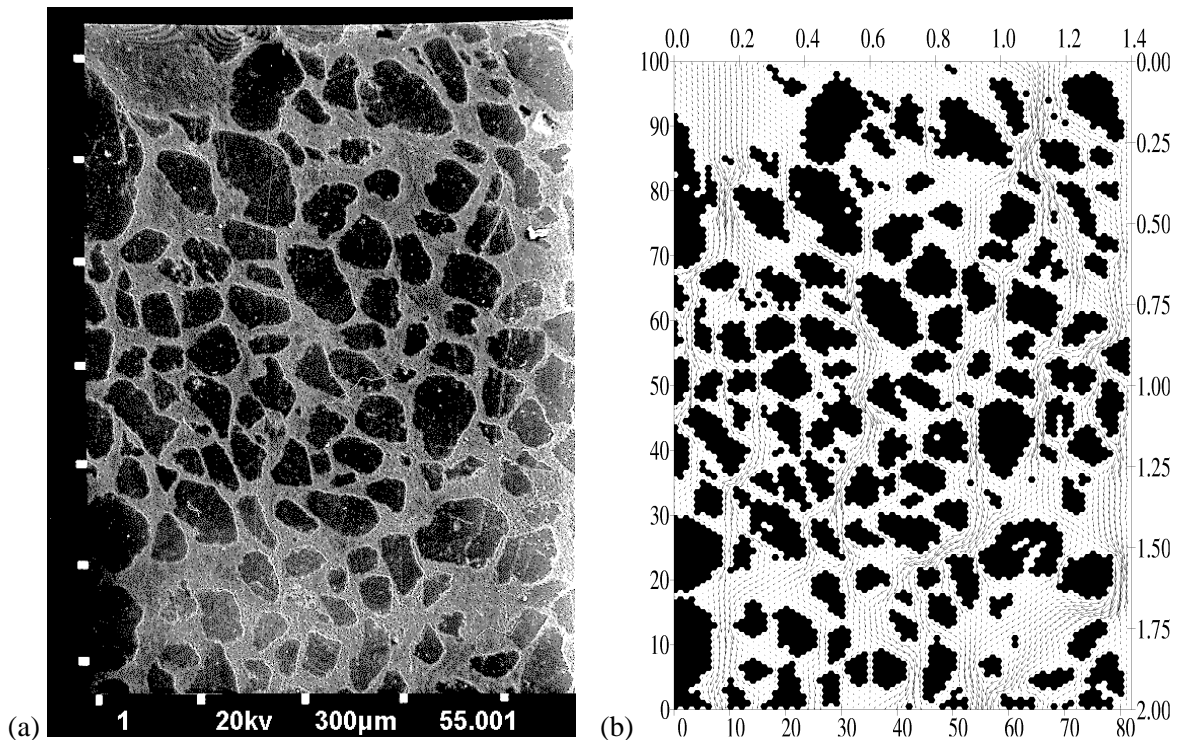
Das Strömungsmodell wird auf Sedimentstrukturen angewendet, die aus Proben rezenter Wattablagerungen von der Insel Mellum gewonnen wurden (Ostfriesisches Wattenmeer, siehe Abb. 2.8a). Das Sediment weist eine vielschichtige Sequenz wechselnder fein- bis mittelsandige Quarzsande und mikrobieller Matten mit kleinen Anteilen detritischer Körner (vorwiegend Quarz und Schwermetalle) auf (Kropp et al. 1997). Die Mächtigkeit jeder Sequenz schwankt zwischen 2 und 8  $mm$ . Die Sedimentkerne sind charakterisiert durch eine durchschnittliche Korngröße von  $100\mu m$  und einer Porosität von  $\varepsilon \approx 0.55$ . Zur geometrischen Analyse durch Rasterelektronen-Mikroskopie (REM) wurden kleine Teile der Sedimentkerne ausgeschnitten und über 12 Stunden in 4% 1.5-Dipentanlösung fixiert. Die Proben wurden mehrmals gewaschen, um kristallines Salz zu entfernen, bevor sie in einer Serie abgestufter Ethanol/Wasser-Bideststillat-Mischungen dehydriert wurden. Die präparierten Sedimente wurden in Epoxydharz eingebettet und poliert, um eine ebene Oberfläche zu erhalten. Schließlich wurden die Oberflächen mit einer Graphitschicht überzogen und mit einem REM untersucht (Kropp et al. 1997). Die erhaltenen Bilder wurden in ein gängiges Datenformat (TIFF) gewandelt, das vom Modell gelesen wird. Im vorliegenden Fall hat die Probe (Abb. 2.8(a)) eine Auflösung von  $482 \times 674$  Bildpunkten und wird mit dem Filterwert  $\phi = 0,6$  in ein hexagonales Gitter der Größe  $82 \times 100$  [Zellen] übertragen.

Das Modell wurde initialisiert<sup>13</sup> mit einer Dichte von  $\rho = 1,121$ , einer Viskosität von  $\nu = 0,4$  und gleichmäßiger Verteilung  $f_i^0(z) = f^{eq}(\rho, v \equiv 0)$ ,  $z \in \mathcal{Z}$ . Neben der Initiatorzeile (siehe Abschnitt 2.2.4) wurden oben und unten freie Zellreihen hinzugefügt. Als Abbruchkriterium wird die relative Änderung in der Durchschnittsgeschwindigkeit gewählt

$$\left| \frac{\bar{v}(t+1) - \bar{v}(t)}{\bar{v}(t)} \right| \leq \epsilon, \quad \epsilon = 1 \cdot 10^{-4}. \quad (2.49)$$

Der LBA konvergiert bei einem Druckgradienten von  $\partial_y P = 0,025 Nm$  nach 1821, der LBGK

<sup>13</sup>Der vollständige Parametersatz findet sich in Anhang C.

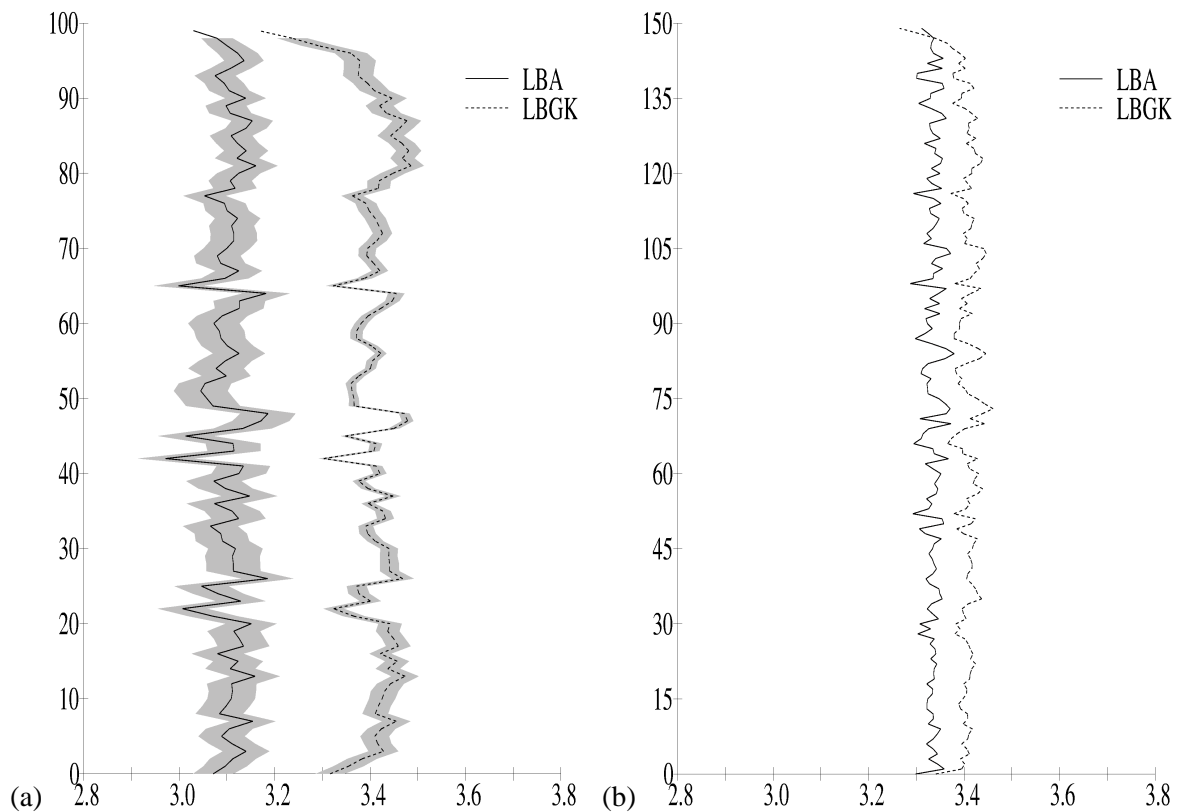


**Abbildung 2.8: Strömungssimulation einer Sedimentprobe.** (a) zeigt eine Rasterelektronenmikroskopische Aufnahme eines Profilschnittes an der Oberfläche eines supratidalen Sedimentes ( $1.45 \times 2.00 \text{ mm}$ , Insel Mellum, Ostfriesisches Wattenmeer). Oben: Sedimentoberfläche; schwarz: mineralische Komponenten; grau: Porenraum. Die Porosität beträgt  $\varepsilon = 0.548$ . (b) zeigt die Strömung im stationären Zustand, berechnet mit dem LBA. Die Vektoren repräsentieren die Zellgeschwindigkeit  $v = (v_x, v_y)$ . Weiß kennzeichnet die freien, Schwarz die Hinderniszellen. Hinzugefügte freie Zellreihen (*top* und *bottom*) sind nicht mit dargestellt. Die Porosität des Modellgitters beträgt  $\varepsilon = 0.587$ , die ermittelte Permeabilität beträgt  $k = 7,4 \cdot 10^{-11} \text{ m}^2$ .

nach 3186 Iterationen mit einer durchschnittlichen Geschwindigkeit<sup>14</sup> von  $\bar{v} = 3,1 \cdot 10^{-6} \text{ m/s}$  bzw.  $\bar{v} = 3,4 \cdot 10^{-6} \text{ m/s}$ . Bei Wahl gleicher Viskosität und Dichte liefern beide Algorithmen nahezu identische Strömungsbilder; es resultieren jedoch leicht unterschiedliche Fließgeschwindigkeiten (siehe Abb. 2.8(b) und 2.9). Das Strömungsmuster verhält sich äußerst robust gegenüber Änderungen in der Viskosität (siehe Abb. 2.9(a)). Die Randeffekte des LBGK im oberen und unteren Randbereich sind deutlicher ausgeprägt als beim LBA, wohingegen die Fließgeschwindigkeit des LBA sensibler auf Schwankungen der Viskosität reagiert (siehe auch Bem. 2.10). Ursache für diese Abweichungen können in der Berechnung der Viskosität bzw. des Skalierungsfaktors  $\mu$  liegen. Hinweise hierauf sind jedoch in der Literatur nicht zu finden. Von einer Überprüfung der Viskositäten sei an dieser Stelle abgesehen, da diese für die weitere Arbeit nur eine untergeordnete Rolle spielt.

Das Strömungsmuster ist charakterisiert durch prononcierte, aber kurze Pfade mit relativ hohen Fließgeschwindigkeiten. Es gibt keinen ausgeprägten Weg vom oberen zum unteren Sedimentrand, der als Hauptflußpfad interpretiert werden könnte. Andererseits bewirken die ungeordneten Fließpfade eine Durchmischung des perkolierenden Wassers. Bedingt durch die Inkompressibilität ist der

<sup>14</sup>Der Druckgradient ist hier willkürlich gewählt und repräsentiert keinen realistischen Wert. Die Ergebnisse, insbesondere die Permeabilität  $k$ , sind – im laminaren Fall – nach Darcy's Gesetz unabhängig von der Größe des Druckgradienten.



**Abbildung 2.9: Geschwindigkeitsgradienten für LBA und LBGK.** In (a) und (b) sind die durchschnittlichen vertikalen Fließgeschwindigkeiten (in  $10^{-6}m/s$  für das Sediment gemäß Abb. 2.8(a)) pro Zellreihe mit jeweils unterschiedlichen Gittergeometrien (a:  $82 \times 100$  Zellen, b:  $120 \times 150$  Zellen) dargestellt. Für das Gitter (a) wurde zudem eine Sensibilitätsanalyse der Viskosität durchgeführt ( $\nu = 0, 4 \pm 0, 02$ ). Der graue Bereich in (a) kennzeichnet die maximalen Abweichungen vom Mittelwert.

Partikelaustausch zwischen zwei Zellreihen global konstant. Die vertikale Fließgeschwindigkeit einer Zeile ist jedoch Schwankungen unterlegen (siehe Abb. 2.9). Die Ursache hierfür liegt in der hexagonalen Zellstruktur. Mit zunehmender Gittergröße nimmt dieser Effekt jedoch ab (vgl. Abb. 2.9(b)).

Die Schwankungen zwischen minimaler und maximaler Geschwindigkeit sind hoch (siehe Abb. 2.8(b)). Dies wird durch den unterschiedlichen Anteil an Hinderniszellen pro Zellreihe verursacht sowie durch Nischen in der Struktur, in denen die Fließgeschwindigkeit stark abnimmt bzw. Null beträgt. Die dadurch erzeugten hohen Fließgeschwindigkeiten in den freien Passagen sind teilweise zehnmal höher als die durchschnittliche Geschwindigkeit. Wie oben bereits erwähnt, stellt sich die Übertragung des Sedimentbildes in das Gitter als problematisch dar, wenn mehrere Pixel auf eine Zelle abgebildet werden (was aufgrund des hohen Rechenaufwandes gerade bei der Integration weiterer Prozesse<sup>15</sup> die Regel ist).

<sup>15</sup> siehe Kapitel 3 und 5

## 2.5 Bedeutung der Gittergröße

Es hat sich gezeigt, daß die Größe des Gitters die Simulation lokaler Strömungseigenschaften stark beeinflusst. Ein wesentliches Ergebnis der Simulation ist die durchschnittliche Fließgeschwindigkeit, woraus sich beispielsweise die Permeabilität berechnen läßt. Um den Einfluß der Gittergröße auf die Modellergebnisse zu untersuchen, wird das obige Modell für verschiedene Gitter berechnet. Die resultierende Fließgeschwindigkeiten  $\bar{v}(size_y)$  sowie die Modellporositäten  $\varepsilon(size_y)$  werden in einem Graphen aufgetragen (siehe Abb. 2.10). Es zeigt sich, daß LBA und LBKG für alle Gitter nahezu gleiche Ergebnisse liefern (siehe oben). Deutlich ist ein Zusammenhang zwischen der Fließgeschwindigkeit und der Porosität des Modellgitters zu erkennen. Abhängig von der Wahl des Filterwertes  $\phi$  wird das zugrundeliegende Probenbild für ausreichend kleine Gitter in einen einzigen Sedimentblock ( $1 - \varepsilon < \phi$ ) oder ein hindernisfreies Gitter ( $1 - \varepsilon \geq \phi$ ) übersetzt, wobei die Fließgeschwindigkeit im massigen, porenraumfreien Sedimentblock Null ist. Im hindernisfreien Gitter hingegen divergiert sie. Dieses wird durch folgende Überlegung klar:

Nach einer Einschwingphase konvergiert der vertikale Geschwindigkeitsgradient für jede Geometrie gegen Null (vgl. Abb. 2.9(b)). Der horizontale Geschwindigkeitsgradient ist im hindernisfreien Gitter ebenfalls Null (der Druckgradient wird horizontal uniform initialisiert). Somit gilt  $\nabla v = 0$ . Mit konstantem Druckgradienten folgt mit der Navier-Stokes Gleichung:

$$\partial_t v = -v \cdot 0 - const + \nu \cdot 0 \neq 0 \quad (2.50)$$

Hieraus ergeben sich die Beziehungen

$$\begin{aligned} \bar{v}(size_y) \xrightarrow{size_y \rightarrow 0} & \begin{cases} 0, & \text{falls } 1 - \varepsilon < \phi \\ \infty, & \text{falls } 1 - \varepsilon \geq \phi \end{cases}, \quad \bar{v}(size_y) \xrightarrow{size_y \rightarrow \infty} \bar{v}^* \\ \varepsilon(size_y) \xrightarrow{size_y \rightarrow 0} & \begin{cases} 0, & \text{falls } 1 - \varepsilon < \phi \\ 1, & \text{falls } 1 - \varepsilon \geq \phi \end{cases}, \quad \varepsilon(size_y) \xrightarrow{size_y \rightarrow \infty} \varepsilon. \end{aligned} \quad (2.51)$$

Das asymptotische Verhalten von  $\bar{v}$  und  $\varepsilon$  läßt eine einfache Korrektur der Fließgeschwindigkeit zu. Dazu

### Definition 2.9: $\alpha$ -Korrektur

Gegeben sei ein (stationäres) Strömungsbild des LBA bzw. LBKG auf

$$\mathcal{Z} = \{0, \dots, size_x - 1\} \times \{0, \dots, size_y - 1\}.$$

Die reale Porosität sei mit  $\varepsilon$  und die des Modellgitters mit  $\varepsilon_M$  bezeichnet. Mit Einführung eines Faktors

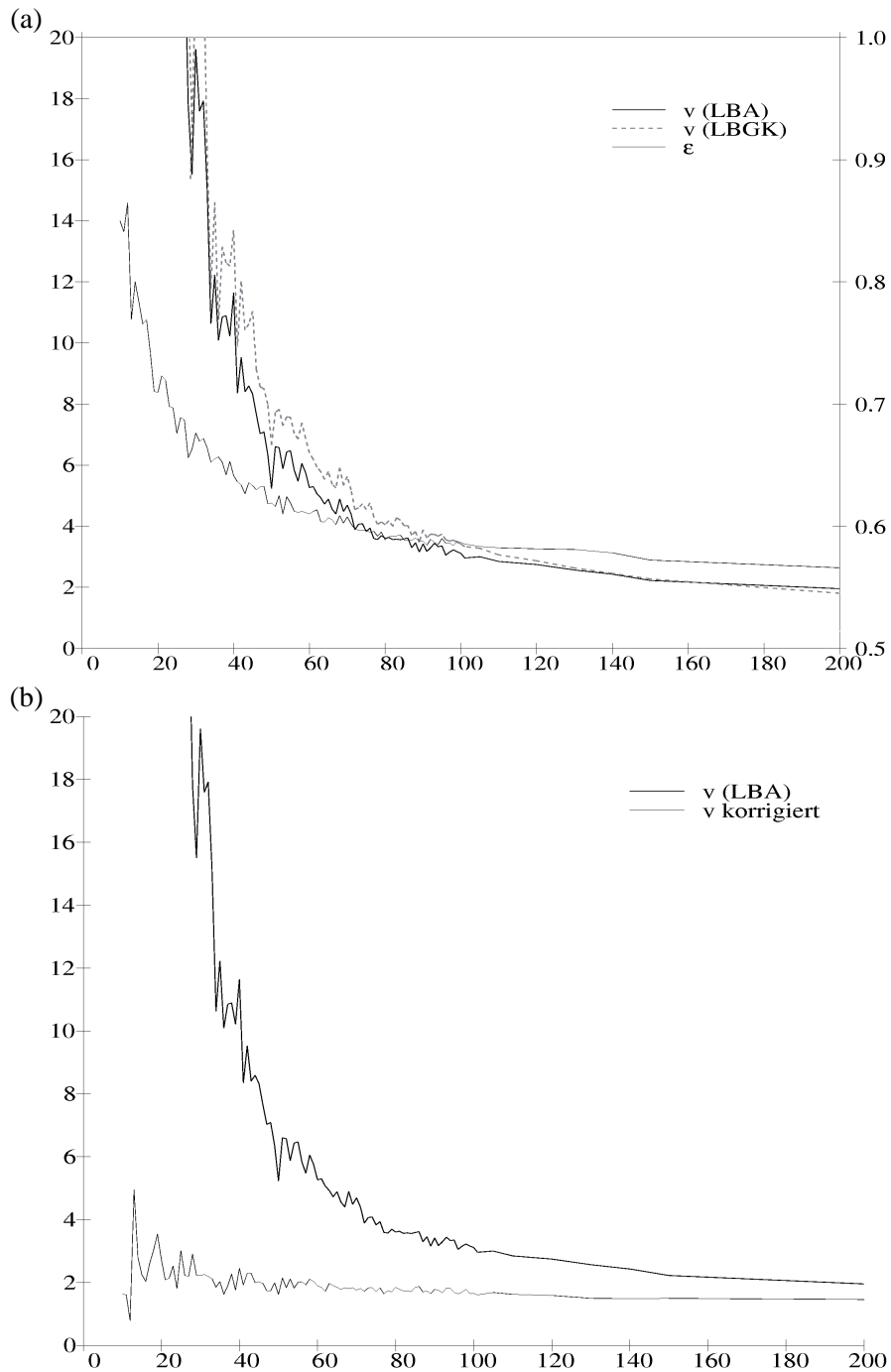
$$K_\alpha := \left( \frac{(1 - \varepsilon_M) \cdot \varepsilon}{\varepsilon_M \cdot (1 - \varepsilon)} \right)^\alpha, \quad \alpha \in \mathbb{R}$$

lassen sich die lokalen Geschwindigkeiten  $v(z), z \in \mathcal{Z}$  korrigieren zu

$$v_{korrr}(z) = K_\alpha \cdot v(z).$$

Dieses Verfahren sei als  $\alpha$ -Korrektur bezeichnet.

Es wird klar, daß die Fließgeschwindigkeit wesentlich von der Porosität abhängt. Eine alternative Korrekturmöglichkeit besteht darin, die Modellporosität an die reale Porosität durch geeignete Wahl von  $\phi$  anzupassen. Bei kleinen Gittern besteht hierbei die Gefahr, daß feine Fließpfade durch die Mittelung wegfallen und so das Strömungsmuster gravierend verändert wird. Hierbei gilt es, das Gitter ausreichend groß zu wählen, so daß zumindest ein Fließpfad vom oberen zum unteren Modellrand existiert. Hierzu folgende Definition:



**Abbildung 2.10: Einfluß der Gittergröße.** Für die Automaten LBA und LBGK sind in (a) die vertikalen Fließgeschwindigkeiten in  $10^{-6} \text{ cm/s}$  sowie Porositäten (bei gleichem Filterwert  $\phi$ ) für Modellgitter der Längen  $size_y = 10, \dots, 200$  aufgetragen. Die Abbildung (b) zeigt einen Vergleich der vertikalen Fließgeschwindigkeiten für den LBA ohne und mit  $\alpha$ -Korrektur ( $\alpha = 4$ ).

**Definition 2.10:** *Cutoff*

Gegeben sei ein Sedimentbild, in dem ein freier Weg vom oberen zum unteren Bildrand führt. Als *Cutoff* des Modells wird die maximale Gittergröße bezeichnet, bei der kein Weg freier Zellen vom oberen zum unteren Gitterrand führt.

Der Cutoff gibt somit das größte Gitter an, für das die Ergebnisse auf jeden Fall falsch sind ( $\bar{v}(size_y) = 0$ ). Bestimmt ist der Cutoff durch den breitesten Weg vom oberen zum unteren Bildrand. Die Breite des Weges läßt sich mit Hilfe einer rekursiven Funktion bestimmen. Dabei werden die freien Pixel der ersten Zeile als potentielle Startpunkte angesehen. Die Wegbreite ist durch den Durchmesser an freien Pixeln gegeben (es reicht, wenn die Sedimentpixel ausreichend dünn verteilt sind). Der erste Rekursionsschritt führt in die benachbarten Pixel, wobei jeder Nachbar für einen neuen Weg steht. Die Breite des Weges ist dann die minimale Breite aller Wegpunkte. Ist ein Nachbarpixel bereits durch einen anderen Weg beschrieben, so wird dieses Pixel ausgelassen und die aufeinandertreffenden Wege vereint (Breite ist dann die maximale Breite beider Wege). Die Rekursion ist beendet, wenn entweder kein unverwendetes Nachbarpixel mehr existiert oder der untere Rand erreicht wurde. Liegt ein Pixel der letzten Reihe auf einem oder mehreren Wegen, so ist die Breite durch die maximale Breite all dieser Wege gegeben. Der Cutoff ist dann gegeben, wenn die Wegbreite der Zellbreite im Modell entspricht.

**Bemerkung 2.16:** Die beschriebene Funktion ist im Vergleich zur Simulation mit deutlich weniger Rechenaufwand verbunden, jedoch aufgrund der Rekursion wesentlich speicherintensiver.

## 2.6 Zusammenfassung

Die Strömung stellt die Grundlage zur Simulation von Transport- und Reaktionsprozessen dar. In der Literatur sind zahlreiche Ansätze zu finden, in denen Partikel unterschiedlicher Eigenschaften transportiert werden (Kougias 1991; Stockman et al. 1997). Grundlegender Ansatz hierbei ist eine Erweiterung der Kollisionsregeln des LGA bzw. LBA. Als problematisch erweist sich dieser Ansatz, wenn weitere Komponenten integriert werden sollen. In diesem Fall muß der Programmcode modifiziert werden und darüber hinaus steigt der Rechenaufwand erheblich, da die Interaktion aller Komponenten untereinander spezifiziert werden muß. Dies macht die Konstruktion eines allgemeinen Transport-Reaktion-Modells unmöglich. Bei Verwendung des FHP oder LBA bleibt zudem das Problem der Galileischen Invarianz. Im folgenden wird deshalb, sofern nicht anders erwähnt, der LBGK verwendet.

Bei der Berechnung von gering viskösen Flüssen ergeben sich zwei Probleme. Zum einen erhöht sich die Anzahl der nötigen Iterationen bis zum Erreichen des Abbruchkriteriums<sup>16</sup>. Zum anderen erfordert die Simulation laminarer Flüsse zudem äußerst geringe Fließgeschwindigkeiten ( $c_0 \rightarrow 0$ ), wodurch die Summanden beim Addieren des Druckgradienten sehr klein werden und die Fehler durch Auslöschung zunehmen. Zwangsläufig lassen sich gering visköse Flüsse nur mit erhöhter Reynoldszahl simulieren<sup>17</sup>, wodurch man an die Grenzen des laminaren Bereiches gerät und somit Darcy's Gesetz an Gültigkeit verliert. Die Permeabilität sollte folglich, wie im weiteren Verlauf der Arbeit, nur mit hohen Viskositäten berechnet werden.

In Sedimenten sind die meisten Prozesse durch Reaktionen zwischen gelösten Substanzen beschrieben. Da diese keinen bzw. nur geringen Einfluß auf das Strömungsverhalten des umgebenden (Salz-)wassers haben (sofern die jeweiligen Konzentrationen unterhalb der Sättigungsgrenze liegen),

<sup>16</sup>Im vorgestellten Beispiel bedeutet dies etwa 3.000 Iterationen bei  $\nu \sim 10^{-1}$  und 10.000 Iterationen bei  $\nu \sim 10^{-4}$ .

<sup>17</sup>Die Simulation von  $\nu \approx 10^{-5}$  erfordert bei doppelt genauen Fließkommazahlen  $Re \geq 1$ .



läßt sich der Transport unabhängig von den Iterationsschritten des LGA bzw. LBE beschreiben, was sich gerade bei konstanten Strömungsbedingungen als großer Vorteil erweist. Im folgenden Kapitel werden entsprechende Terme für die Advektion und Diffusion definiert sowie eine Erweiterung um Reaktionsprozesse vorgenommen.

## Kapitel 3

# Prozesse gelöster Komponenten

In diesem Kapitel werden Transport- und Reaktionsprozesse für strukturinvariante Systeme in das Modell integriert. In Kapitel 4 werden zwei reale Systeme simuliert, und in Kapitel 5 folgen strukturverändernde Prozesse.

### 3.1 Transport

Im Porenwasser natürlicher Systeme (Boden, Lockersedimente, Festgestein) werden eine Vielzahl chemischer Substanzen transportiert. Diese Substanzen sind größtenteils wasserlöslich, insbesondere gasförmige und feste Stoffe in geringen Konzentrationen. Bei geringen Konzentrationen haben diese keinen Einfluß auf die Strömungseigenschaften bzw. die Viskosität des Porenwassers. Sie weisen jedoch unterschiedliche Diffusionskonstanten auf, die im wesentlichen von der Temperatur, dem Druck und der Substanz selbst abhängig sind. Der Transport mit dem Porenwasser läßt sich in einen diffusiven und einen advektiven Term unterteilen.

Bevor der Transport von im Wasser gelösten Substanzen im Modell hergeleitet werden kann, muß der Zellzustand um die Stoffkonzentration erweitert werden. Hierzu sei

$$\begin{aligned} \mathcal{C} &:= \{c \in \mathcal{C}_1 \times \mathcal{C}_2 \times \dots \times \mathcal{C}_k \mid \mathcal{C}_i = [0, c_i^{max}], i = 1, \dots, k\}, \\ \mathcal{V}^* &:= [0, 1]^7 \times Struc \times \mathcal{C}, \end{aligned} \tag{3.1}$$

wobei  $c$  die Stoffkonzentration der  $k$  Stoffe bezeichnet, die durch das Modell simuliert werden. Zusätzlich müssen die maximalen Konzentrationen  $c_i^{max}$  bekannt sein. Sie bestimmen den Geltungsbereich des Transport-Reaktions-Modells.

**Bemerkung 3.1:** Übersteigt eine Konzentration  $c_i$  den Maximalwert  $c_i^{max}$ , so geht der Stoff entweder in den gasförmigen Zustand über oder er fällt aus. Die maximale Konzentration ist etwa das Doppelte der Sättigungskonzentration (Ebenhöh, persönliche Kommunikation).

#### 3.1.1 Der diffusive Transport

Die Diffusion eines Stoffes mit der Konzentration  $c$  und der Diffusionskonstanten  $D_c$  läßt sich im eindimensionalen Fall beschreiben durch (Crank 1975)

$$\frac{\partial c}{\partial t} = D_c \frac{\partial^2 c}{\partial x^2}, \tag{3.2}$$

Differentiation zeigt, daß

$$c = at^{-\frac{1}{2}} e^{-\frac{x^2}{4tDc}}, \quad a \in \mathbb{R} \quad (3.3)$$

Lösung von (3.2) ist. Damit ist es möglich, die Diffusion im Automaten unabhängig von den Partikelbelegungen zu definieren. In der horizontalen Dimension ergibt dies (vgl. Abb. 2.4)

$$\begin{aligned} c^{t+\Delta t}(z) - c^t(z) &= \Delta t \cdot D_c \cdot \frac{1}{dx} \left( \frac{c^t(z+dx) - c^t(z)}{dx} - \frac{c^t(z) - c^t(z-dx)}{dx} \right) \\ &= \Delta t \frac{D_c}{dx^2 b} \left( c^t(z+p_6) + c^t(z+p_1) + c^t(z+p_3) + c^t(z+p_4) - 2bc^t(z) \right), \end{aligned} \quad (3.4)$$

wobei  $\Delta t$  für die Realzeit,  $dx = \frac{\sqrt{3}}{2} \epsilon_{sys}$  für den Zellabstand in x-Richtung und  $b = 2$  für die Anzahl der Nachbarn in x-Richtung steht. Die Diffusion zwischen zwei benachbarten Zellen  $z$  und  $z+p_i$  läßt sich dann allgemein formulieren mit

$$Diffusion(z, z+p_i, t) = c^{t+\Delta t}(z) - c^t(z) = \Delta t \underbrace{\frac{2D_c}{3\epsilon_{sys}^2}}_{=: c_{Diff}} (c^t(z+p_i) - c^t(z)). \quad (3.5)$$

### 3.1.2 Der advective Transport

Für die Advektion ist die relative Geschwindigkeit zwischen den Zellen maßgeblich von Bedeutung. Die Fließgeschwindigkeit von  $z$  nach  $z+p_i$  in einem (LBE) Iterationsschritt ist gegeben mit

$$v_{z \rightarrow p_i} = \frac{f_{|i+3|}^t(z+p_i) - f_i^t(z)}{f_{|i+3|}^t(z+p_i) + f_i^t(z)} \stackrel{v \ll c_s}{\approx} \frac{1}{2g\rho} (f_{|i+3|}^t(z+p_i) - f_i^t(z)) \quad (3.6)$$

mit

$$\lim_{v \rightarrow 0} \frac{f_i^{eq}}{\rho} =: g = \begin{cases} \frac{1}{7} & \text{im LBA} \\ \frac{1}{12} & \text{im LBGK} \end{cases}, \quad i = 1, \dots, 6. \quad (3.7)$$

Es wird angenommen, daß sich die gelöste Substanz analog zu den Partikeln über die Zellpositionen  $p_i$  verteilt, d.h.  $c_i^t(z) = \frac{f_i^t(z)}{\rho} \approx g c^t(z)$  für  $i = 1, \dots, 6$ . Die Menge des durch Advektion transportierten Stoffes ist proportional zur interzellularen Geschwindigkeit und der Konzentration in der Ausgangszelle sowie antiproportional zur Entfernung zwischen den Zellen.

$$c^{t+\Delta t}(z) - c^t(z) = \Delta t \cdot \epsilon_{sys}^{-1} \cdot v_{z \rightarrow p_i}^t \cdot g \cdot \gamma_i^t(z), \quad \text{mit } \gamma_i^t(z) = \begin{cases} c^t(z), & \text{falls } v_{z \rightarrow p_i} \geq 0 \\ c^t(z+p_i) & \text{sonst.} \end{cases} \quad (3.8)$$

Bei der Verwendung eines fixen Druckgradienten wird die Geschwindigkeit entsprechend (2.46) skaliert. Mit der skalierten Geschwindigkeit ist der advective Transport zwischen  $z$  und  $z+p_i$

$$Advektion(z, z+p_i, t) = \Delta t \frac{1}{2\rho} (f_{|i+3|}^t(z+p_i) - f_i^t(z)) \cdot \gamma_i^t(z), \quad (3.9)$$

bzw. bei der Verwendung eines fixen Druckgradienten nach (2.46)

$$Advektion(z, z+p_i, t) = \Delta t \underbrace{\frac{\partial_y P}{2\rho^2 c_0}}_{=: c_{Adv}} (f_{f_{ix,|i+3|}}^t(z+p_i) - f_{f_{ix,i}}^t(z)) \cdot \gamma_i^t(z), \quad (3.10)$$

**Bemerkung 3.2:** Die Advektion wird i.a. als Transport mit der Strömung verstanden und demnach sollte ein Konzentrationspeak, wie ein Blatt auf dem Wasser, durch das System wandern. Die Diskretheit des Modells erfordert jedoch die Beschreibung eines sukzessiven Transportes, wodurch eine sogenannte *numerische Diffusion* in Strömungsrichtung entsteht (siehe dazu auch Satz 3.2). Die hexagonale Form der Zellen bewirkt zudem eine, wenn auch geringere, laterale Ausdehnung. Dieses Problem ist allgemein bekannt und läßt sich nur schwer und unter hohem Rechenaufwand mindern (Ebenhöh, persönliche Kommunikation). Da dieser Effekt jedoch allein in Strömungsrichtung auftritt (siehe auch Abschnitt 3.4), verliert er zunehmend an Bedeutung bei der Anwendung in komplexen Geometrien und reaktiven Systemen.

Der gesamte Transport definiert sich aus Diffusion und Advektion über alle (freien) Nachbarzellen. Dies führt zur allgemeinen *Transportgleichung*  $T_{C_i} : \mathcal{V}^{*7} \rightarrow \mathcal{V}^*$

$$T_{C_i} := c^{t+\Delta t}(z) - c^t(z) = \underbrace{\Delta t \sum_{j=1}^{n-1} \delta_j(z + p_j) \cdot (Diffusion(z, z + p_j, t) + Advektion(z, z + p_j, t))}_{=: Trans(z+\mathcal{P}, t)|_{C_i}},$$

$$\delta_j(z) = \begin{cases} 1, & \text{falls } s(z) = \textit{frei} \\ 0, & \text{falls } s(z) = \textit{Hindernis} \end{cases},$$
(3.11)

wobei  $n = |\mathcal{P}| - 1$  die Anzahl der 'echten' Nachbarn bezeichnet.

**Bemerkung 3.3:** Die Herleitung der Advektion und Diffusion bezog sich generell auf den Transport einer Substanz in einer Richtung. Die Terme in der Gleichung beziehen sich somit auf die  $i$ -te Substanz und summieren über alle Richtungen.

$T_C := \times_{i=1}^k T_{C_i}$  ist die Erweiterung der Transitionsfunktion  $T'$  auf die Stoffkonzentrationen, d.h.  $T^* = (T_K \circ T'_B, id_{Struc}, T_C)$  (siehe Def. 2.7).

Die Definition des Transportes erlaubt folgende Schlußfolgerungen

- Durch die Verwendung der Diffusionskonstante ist der Transport unabhängig von der Partikeldichte  $g$ . Dies liegt daran, daß die Diffusionskonstante implizit die Temperatur definiert.
- Die Definition von Advektion und Diffusion ist mit geeigneten  $n, b$  auf jede symmetrische, gleichgewichtete Nachbarschaft anwendbar. Dies gilt insbesondere bei einer Erweiterung auf drei Dimensionen.
- Die Strömung ist unabhängig vom Transport.

### 3.1.3 Dynamisierung der Iteration

Während der Transportprozeß von der Strömung abhängt, ist umgekehrt die Strömung unabhängig vom Transport. Die relativen Fließgeschwindigkeiten ändern sich nur, wenn sich entweder der Druckgradient ändert oder innere Prozesse die Sediment- bzw. Hindernisstruktur modifizieren. Dies macht es sinnvoll, den Iterationsschritt in zwei separate Schritte „Strömung“ und „Transport“ zu unterteilen und die Berechnung der Strömung bei Erreichen des stationären Zustandes einzustellen. Ein weiterer Punkt ist, daß das Strömungsfeld im betrachteten Millimeterbereich in relativ kurzer (realer) Zeit

konvergiert<sup>1</sup>, während Transport- und Reaktionsprozesse meist Stunden oder Tage dauern. Durch die Entkopplung von Strömung und Transport ist es möglich, den Transportschritt flexibel, wenn auch nicht beliebig, zu setzen, insbesondere ihn zu vergrößern. Eine obere Grenze stellt die Zeit dar, in der die Konzentrationsänderung einer Zelle zu einem Bereichsfehler ( $c \notin [0, c^{max}]$ ) führt. Die Gleichung (3.11) läßt sich schreiben als

$$T_{C_i} = \Delta t \cdot \left( D_c \cdot c_{Diff} \cdot \sum_{i=1}^6 (c^t(z+p_i) - c^t(z)) + c_{Adv} \left( \sum_{j \in J} f_j(z) c^t(z+p_j) + \sum_{k \in K} f_k(z) c^t(z) \right) \right), \quad (3.12)$$

mit den relativen Partikelflüssen

$$f_j(z) := f_{fix,j^*}(z+p_j) - f_{fix,j}(z), \quad J := \{j | f_j(z) \geq 0\}, \quad K := \{1, \dots, 6\} \setminus J,$$

wobei  $f_{fix,i}(z)$  die mit festem Druckgradienten initialisierte Belegung bezeichnet. Aus den Gleichgewichtszuständen (2.12) bzw. (2.28) folgt

$$0 < \sum_{j \in J} f_j(z) = - \sum_{k \in K} f_k(z) =: s(z) \quad (3.13)$$

und es gilt

**Satz 3.1:** *Maximales Transportintervall*

Für das Transportintervall  $\Delta t$  gilt

$$\Delta t \leq (6D_c c_{Diff} + c_{Adv} \zeta)^{-1} =: \Delta t_m \quad \text{mit } \zeta := \max\{s(z) | z \in \mathcal{Z}\}.$$

$\Delta t_m$  ist das maximale Transportintervall.

**Beweis:** Sei  $c = c^t(z)$  und  $c_m := \max_{i=1, \dots, 6} (c^t(z+p_i))$ .

1. Fall:  $T_{C_i} > 0$

$$\begin{aligned} 0 < T_{C_i} &\leq \Delta t \left( \underbrace{6D_c c_{Diff}}_{>0} (c_m - c) + \underbrace{c_{Adv} \zeta}_{\geq 0} (c_m - c) \right) \leq c^{max} - c(z) \\ \Rightarrow \Delta t &\leq \underbrace{\frac{c^{max} - c}{c_m - c}}_{\geq 1} (6D_c c_{Diff} + c_{Adv} \zeta)^{-1}. \end{aligned} \quad (3.14)$$

2. Fall:  $T_{C_i} \leq 0$

$$\begin{aligned} -c &\leq \Delta t (-6D_c c_{Diff} c - c_{Adv} \zeta c) \leq T_{C_i} \leq 0 \\ \Rightarrow \Delta t &\leq (6D_c c_{Diff} + c_{Adv} \zeta)^{-1}. \end{aligned} \quad (3.15)$$

Sei  $z \in \mathcal{Z}$  mit  $s(z) = \zeta$ . Setze  $c^t(z) = c_0 > 0$  und  $c^t(z+p_i) = 0, i = 1, \dots, 6$ . Dann folgt:

$$\forall \epsilon > 0 : (\Delta t = \Delta t_m + \epsilon) \Rightarrow c^{t+\Delta t}(z) < 0. \quad (3.16)$$

q.e.d.

<sup>1</sup>Im Beispiel aus Kapitel 2 konvergiert die Strömung nach  $3,8 \cdot 10^{-7}$  Sekunden (LBA) bzw.  $1,5 \cdot 10^{-6}$  Sekunden (LBGK).

**Bemerkung 3.4:** Die Bedingung (3.16) beschreibt die Situation in der 1. Iteration.

Die Limitierung durch das maximale Transportintervall ist jedoch nicht ausreichend, um adäquate Simulationsergebnisse zu gewährleisten. Zum einen können bei großen Transportintervallen Konzentrationswellen auftreten, d.h., aufgrund zu hoher Transportmengen ist die Konzentration einer Zelle abwechselnd nahe dem Maximum  $c^{max}$  bzw. nahe Null. Zum anderen beeinflusst die Diskretheit des Raumes den Transport. In einer Iteration findet ein Konzentrationsaustausch über eine Zelldistanz statt. Verdoppelt man das Transportintervall, so halbiert sich die Anzahl der Iterationen und damit der Transportradius. Somit läßt sich ein Fehler bei der Berechnung nicht vermeiden. Ziel ist es, diesen Fehler auf die Größenordnung der numerischen Rechenfehler zu senken, wodurch er vernachlässigbar wird. Hierzu muß zunächst das Transportintervall abgeschätzt werden.

Es sein ein hindernisfreies hexagonales Gitter  $\mathcal{Z}$  gewählt, für das gelte

$$\exists a \in \mathcal{Z} : c^0(a) = c_0 + \psi \wedge \forall z \in \mathcal{Z} \setminus \{a\} : c^0(z) = c_0; c_0, c_0 + \psi \in [0, c^{max}]. \quad (3.17)$$

Untersucht werden die Fälle reiner Diffusion ( $\zeta = 0$ ) und reiner Advektion ( $\partial_y P \zeta \epsilon_{sys}^2 \gg 8D_c \rho^2 c_0$ ). Im Falle der Advektion sei die Strömung strikt eindimensional in Richtung  $i \in \{1, \dots, 6\}$ , d.h.

$$\forall z \in \mathcal{Z} : (f_i(z) = g + \frac{1}{2}\zeta \wedge f_{|i+3|}(z) = g - \frac{1}{2}\zeta \wedge \forall i \in \{1, \dots, 6\} \setminus \{i, |i+3|\} : f_i(z) = g), \quad (3.18)$$

wobei  $g$  für die Gleichgewichtsbelegung steht (siehe (3.7)). Sei  $\gamma := \Delta t / \Delta t_m$ , so lassen sich die Iterationsschritte für Advektion und Diffusion schreiben als

$$\begin{aligned} c^{t+\Delta t}(z) - c^t(z) &= \frac{1}{6}\gamma \sum_{i=1}^6 c^t(z + p_i) - c^t(z) \quad (\text{Diffusion}) \\ c^{t+\Delta t}(z) - c^t(z) &= \gamma(c^t(z - p_i) - c^t(z)) \quad (\text{Advektion}) \end{aligned} \quad (3.19)$$

In dem gewählten System können Konzentrationswellen nur durch Diffusion auftreten. Aus Bemerkung 3.4 folgt, daß diese vermieden werden durch die Forderung

$$\begin{aligned} c^1(a) &> c^1(a + p_i) \text{ f.a. } i \in \{1, \dots, 6\} \\ \Leftrightarrow c_0 + \psi + \gamma(c_0 - (c_0 - \psi)) &> c_0 + \gamma\left(\frac{1}{6}(c_0 + \psi) - \frac{1}{6}c_0\right) \\ \Leftrightarrow (1 - \gamma)\psi &> \frac{1}{6}\gamma\psi \\ \Leftrightarrow \gamma &< \frac{6}{7}. \end{aligned} \quad (3.20)$$

Es bleibt nun zu klären, wie groß  $\gamma$  gewählt werden kann, so daß die Simulationsergebnisse qualitativ gleich bleiben.

Iteration	$ z - a $	Diffusion	Advektion
<b>1</b>	0	$c_0 + (1 - \gamma)\psi$	$c_0 + (1 - \gamma)\psi$
	1	$c_0 + \frac{1}{6}\gamma\psi$	$c_0 + \gamma\psi$
	$> 1$	$c_0$	$c_0$
<b>2</b>	0	$c_0 + (1 - 2\gamma + \frac{7}{6}\gamma^2)\psi$	$c_0 + (1 - \gamma)^2\psi$
	1	$c_0 + \frac{1}{3}\gamma(1 - \frac{5}{6}\gamma)\psi$	$c_0 + 2\gamma(1 - \gamma)\psi$
	$\sqrt{3}$	$c_0 + 2(\frac{1}{6}\gamma)^2\psi$	—
	2	$c_0 + (\frac{1}{6}\gamma)^2\psi$	$c_0 + \gamma^2\psi$
	$> 2$	$c_0$	$c_0$

**Tabelle 3.1: Transportschritte 1. und 2. Iteration.** Berechnete Advektion und Diffusion für das Gitter aus (3.17) mit  $\gamma = \frac{\Delta t}{\Delta t_m}$  und, im Fall der Advektion,  $z = a + np_i$  ( $n \in \mathbb{N}$ ).

**Satz 3.2: Lokale Stabilität**

Gegeben sei ein hindernisfreies Gitter  $\mathcal{Z}$  nach (3.17). Bezeichne  $\psi \leq \epsilon c_0$  eine Störung und  $t = \Delta t$  die reale Zeit, so gilt

$$\forall z \in \mathcal{Z}, 0 < \gamma < 1 : \left( 0 < p < 1, |z - a| < 2 \Rightarrow \left| \frac{c^t(z, \gamma) - c^t(z, p\gamma)}{c^t(z, p\gamma)} \right| < \gamma^2 \epsilon \right).$$

**Beweis:** Für die Diffusion und Advektion lassen sich die Konzentrationen der ersten zwei Iterationen explizit berechnen (siehe Tabelle 3.1). Anhand dieser Werte wird der Transport in einer Iteration  $(\gamma, \Delta t)$  mit dem Transport in zwei Iterationsschritten  $(\frac{1}{2}\gamma, \frac{1}{2}\Delta t)$  verglichen und die relative Abweichung bestimmt (siehe Tabelle 3.2).

Es zeigt sich, daß der relative Fehler der Advektion überwiegt. Aus der Berechnung der Iterationen ergibt sich, daß die Konzentration im Fall der eindimensionalen Advektion binomialverteilt ist. Sei  $n \in \mathbb{N}$  mit  $\gamma' = \frac{1}{n}\gamma$  und  $t = \Delta t$ , dann ergibt sich der relative Fehler in  $z = a + kp_i$  zu

$$\begin{aligned} \left| \frac{c^t(z, \gamma) - c^t(z, \gamma')}{c^t(z, \gamma')} \right| &\leq |c^t(z, \gamma) - c^t(z, \gamma')| \frac{\psi}{c_0} \\ &\leq \left| \gamma^k (1 - \gamma)^{1-k} - \binom{n}{k} \left(\frac{1}{n}\gamma\right)^k \left(1 - \frac{1}{n}\gamma\right)^{n-k} \right| \cdot \frac{\psi}{c_0} \end{aligned} \quad (3.21)$$

1. Fall:  $k=0$

$$\left| \frac{c^t(z, \gamma) - c^t(z, \gamma')}{c^t(z, \gamma')} \right| \leq \left| (1 - \gamma) - \left(1 - \frac{n}{n}\gamma + \frac{n(n-1)}{2n^2}\gamma^2 - \dots\right) \right| \frac{\psi}{c_0} \leq \frac{\gamma^2 \psi}{2c_0} \quad (3.22)$$

	$ z - a $	$\left  \frac{c^t(z, \gamma) - c^t(z, \gamma')}{c^t(z, \gamma')} \right $
<b>Diff.</b>	0	$\leq \frac{7}{24} \frac{\psi \gamma^2}{c_0}$
	1	$\leq \frac{5}{72} \frac{\psi \gamma^2}{c_0}$
<b>Adv.</b>	0	$\leq \frac{1}{4} \frac{\psi \gamma^2}{c_0}$
	1	$\leq \frac{1}{2} \frac{\psi \gamma^2}{c_0}$

**Tabelle 3.2: Relative Fehler der Advektion und Diffusion.** Für  $\gamma, \gamma' = \frac{1}{2}\gamma$  und  $t = \Delta t$  werden die relativen Fehler der Advektion und Diffusion anhand der Ergebnisse aus Tabelle 3.1 ermittelt.

2. Fall:  $k=1$

$$\left| \frac{c^t(z, \gamma) - c^t(z, \gamma')}{c^t(z, \gamma')} \right| \leq \left| \gamma - \frac{n}{n} \gamma (1 - \frac{n}{n} \gamma + \dots) \right| \frac{\psi}{c_0} \leq \frac{\gamma^2 \psi}{c_0} \quad (3.23)$$

Für  $0 < p < 1$  folgt unmittelbar

$$\begin{aligned} \exists n \in \mathbb{N} : \frac{1}{n+1} < p < \frac{1}{n} \\ \Rightarrow \left| \frac{c^t(z, \gamma) - c^t(z, p\gamma)}{c^t(z, p\gamma)} \right| &\leq \max \left\{ \left| \frac{c^t(z, \gamma) - c^t(z, \frac{1}{n+1}\gamma)}{c^t(z, \frac{1}{n+1}\gamma)} \right|, \left| \frac{c^t(z, \gamma) - c^t(z, \frac{1}{n}\gamma)}{c^t(z, \frac{1}{n}\gamma)} \right| \right\} \\ &\stackrel{(3.22), (3.23)}{\leq} \gamma^2 \frac{\psi}{c_0} \stackrel{\text{Voraus.}}{\leq} \gamma^2 \epsilon \end{aligned} \quad (3.24)$$

q.e.d.

**Bemerkung 3.5:** Bezeichne  $\xi := 10^{1-dm}$  die relative Maschinengenauigkeit (siehe oben), so sind die Simulationsergebnisse numerisch identisch für  $p\gamma, \gamma$ , falls gilt

$$\gamma^2 \epsilon < \frac{1}{2} \xi \Leftrightarrow \gamma < \sqrt{\frac{\xi}{2\epsilon}}.$$

Je höher die Fehlertoleranz, desto kleiner muß  $\gamma$  gewählt werden. Für die Simulationen der folgenden Kapitel sei  $\epsilon = 8\xi$  willkürlich gewählt, d.h.  $\gamma < \frac{1}{4}$ .

## 3.2 Die Reaktionen

Der überwiegende Teil an chemischen und biologischen Prozessen in Sedimenten besteht aus Stoffumsetzungen, die keinen oder vernachlässigbaren Einfluß auf Struktur und Transporteigenschaften haben, sofern Edukt- und Produktkonzentrationen weit unterhalb der stoffspezifischen Löslichkeit liegen. In diesem Fall genügt es, den Iterationsschritt der Konzentrationsänderung  $T_{C_i}$  (siehe (3.11)) um einen Reaktionsschritt zu ergänzen

$$T_{C_i} = \Delta t (Trans(z + \mathcal{P}, t) + Reakt(z, t)) \Big|_{C_i} \quad (3.25)$$

$Reakt(z, t) : \mathcal{C} \rightarrow \mathcal{C}$  steht dabei für die Summe der Konzentrationsänderungen in  $c_i \in \mathcal{C}_i$  durch die simulierten Reaktionen und hängt nur vom Zustand der Zelle  $S(t, z)$  ab.

### 3.2.1 Reaktionstypen

#### Redox-Reaktionen

Einen Standardtypen stellen die Redox-Reaktionen dar:



Die  $n$  Edukte  $E_i$  mit Faktoren  $e_i$  werden durch die Reaktion  $R$  in  $m$  Produkte  $P_j$  mit Faktoren  $p_j$  umgesetzt. Die Reaktionsgeschwindigkeit ist gegeben durch

$$v(R) = k_R \prod_{i=1}^n c(E_i)^{e_i}. \quad (3.27)$$

Hierbei ist  $k_R$  die Reaktionskonstante von  $R$  und  $c(E_i)$  steht für die Konzentrationen der Edukte  $E_i$ .



### Gleichgewichtsreaktionen

Finden Hin- und Rückreaktion auf ähnlichen Energieniveaus statt, so spricht man von einer Gleichgewichtsreaktion

$$\sum_{i=1}^n e_i E_i \xrightleftharpoons{R} \sum_{j=1}^m p_j P_j. \quad (3.28)$$

Die Reaktionsgeschwindigkeit ist gegeben durch

$$v(R) = k_{R_1} \prod_{i=1}^n c(E_i)^{e_i} - k_{R_2} \prod_{j=1}^m c(P_j)^{p_j}. \quad (3.29)$$

$k_{R_1}$  ist die Reaktionskonstante der Hin- bzw.  $k_{R_2}$  die Reaktionskonstante der Rückreaktion.

### Enzymreaktionen

Ein wichtiger Reaktionstyp in biologischen Systemen ist die Enzymreaktion



Hierbei steht  $A$  für das Substrat,  $E$  für das Enzym und  $P$  für das Produkt. Die Berechnung der Reaktionsgeschwindigkeit erfolgt nach der Michaelis-Menten-Gleichung (siehe Koolman und Röhms 1998)

$$v(R) = k_R \frac{c_g(E) \cdot c(A)}{km + c(A)} \quad \text{mit } km = \frac{c(E) \cdot c(A)}{c(EA)}. \quad (3.31)$$

$c_g(E) = c(E) + c(EA)$  bezeichnet die Gesamtkonzentration des Enzyms  $E$ .

### Reaktionshemmer

Unter gewissen Randbedingungen nimmt die Geschwindigkeit einer Reaktion ab. So können an der Reaktion unbeteiligte Substanzen die Reaktion durch ihre Präsenz hemmen oder gar unterbinden. Dieses Phänomen tritt beispielsweise bei der Sulfidreduktion auf, die nur bei nahezu völliger Abwesenheit von Sauerstoff stattfindet. Auch kann das Erreichen der Sättigungsgrenze eines Reagenten die Geschwindigkeit herabsetzen. Andererseits kann durch die Verwendung von Hemmungstermen erreicht werden, daß der Gültigkeitsbereich einer Stoffkonzentration nicht überschritten wird (siehe z.B. Abschnitt 4.1). Sei  $H$  ein Reaktionshemmer der Reaktion  $R$ , so läßt sich dies formulieren mit (siehe (3.26))

$$\sum_{i=1}^n e_i E_i \xrightarrow{R} \sum_{j=1}^m p_j P_j \Big|_H. \quad (3.32)$$

Die gehemmte Reaktionsgeschwindigkeit  $v_H(R)$  erhält einen zusätzlichen Term mit dem Hemmungsgrad  $R_H$  (siehe (3.27))

$$v_H(R) = v(R) \left( 1 - \frac{c(H)}{c^{max}(H)} \right)^{R_H}. \quad (3.33)$$

Zu einer Reaktion  $R$  lassen sich beliebig viele Reaktionshemmer definieren.

**Bemerkung 3.6:** Jedes Edukt und jedes Produkt entspricht einem vom Modell simulierten Stoff, d.h.

$$\begin{aligned} \forall i \in \{1, \dots, n\} \exists p \in \{1, \dots, k\} : c(E_i) \in \mathcal{C}_p, \\ \forall j \in \{1, \dots, m\} \exists p \in \{1, \dots, k\} : c(P_j) \in \mathcal{C}_p. \end{aligned}$$

Ein Edukt kann auch Produkt derselben Reaktion sein, z.B. bei katalytischen Prozessen.

Mit den vorgestellten Reaktionstypen läßt sich die Transitionsfunktion der Reaktionen formulieren:

**Definition 3.1:** *Transport-Reaktions-Erweiterung*

Sei  $(\mathcal{P}, \mathcal{Z}, \mathcal{V}', \Phi')$  ein zellulärer Automat mit  $n+1 = |\mathcal{P}|$  relativen Nachbarn nach Def. 2.7 und  $\mathcal{C}, \mathcal{V}^*$  nach (3.1). Weiter seien  $\Delta t_{LBE}$  und  $\Delta t$  die Zeit eines Iterationsschrittes des LBE bzw. des Transportes und  $\mathcal{R}$  die Menge der Modellreaktionen. Wähle  $q \in \mathbb{N}$  so, daß gilt  $\frac{\Delta t}{\Delta t_{LBE}} \geq q$ . Dann läßt sich die Transitionsfunktion schreiben als (vgl. Def. 2.7 und Bem. 3.3)

$$T^* = ((T_K \circ T'_B)^q, id_{Struc}, \times_{\mathcal{C}_i \in \mathcal{C}} T_{\mathcal{C}_i})$$

mit den Transitionen für Transport und Reaktion der gelösten Stoffe

$$T_{\mathcal{C}_i} : \begin{cases} \mathcal{V}^{*7} & \rightarrow & \mathcal{V}^* \\ (h_0, \dots, h_{n-1}) & \mapsto & \Delta t (Trans(z + \mathcal{P}, t) + Reakt(z, t))|_{\mathcal{C}_i} \end{cases}$$

wobei die Reaktionen definiert sind durch

$$Reakt(z, t)|_{\mathcal{C}_i} = \sum_{R \in \mathcal{R}} v(R) \cdot \begin{cases} -ec_i^t(z), & \text{falls } i. \text{ Stoff Edukt in } R \text{ mit Faktor } e \\ pc_i^t(z), & \text{falls } i. \text{ Stoff Produkt in } R \text{ mit Faktor } p \\ 0 & \text{sonst} \end{cases}$$

$\Phi^*$  nach (Def. refza) definiert mit  $T^*$ . Dann heißt der zelluläre Automat  $(\mathcal{P}, \mathcal{Z}, \mathcal{V}^*, \Phi^*)$  *Transport-Reaktions-Modell*.

**Bemerkung 3.7:** Der Wert  $q$  gibt die Anzahl der LBE-Iterationen an, die pro Transportschritt ausgeführt werden. Wurde im Modell die (laminare) Strömung berechnet und ist der Porenraum invariant, so wird  $q = 0$  gesetzt. Erst die Hinzunahme von strukturverändernden Prozessen in Kapitel 5 erfordert eine Korrektur der Strömung.

### 3.2.2 Erweiterte Randbedingungen

Ausschlaggebend für mikrobiell gesteuerte Stoffumsetzungen im Sediment ist das Nährstoffangebot. Dieses ergibt sich aus

- (a) vorhandenen Ressourcen,
- (b) eingetragenen Stoffen und
- (c) internen Produktionen.

In den betrachteten vertikalen Sedimentschnitten läßt sich horizontale Homogenität bzgl. des Nährstoffeintrages annehmen. Der Stoffeintrag wird dann im Modell durch eine konstante Konzentrationszunahme in der ersten bzw. letzten Zeile simuliert, ähnlich der Realisierung des Druckgradienten (siehe Abschnitt 2.2.3). Interne Produktionen lassen sich in Stoffumsetzungen nach (3.25) und Stoffbildungen unterscheiden. Unter Stoffbildung fallen alle Reaktionen, deren Edukte nicht durch das Modell simuliert werden. Die Stoffbildung wird realisiert durch eine ortsgebundene Konzentrationszunahme (siehe dazu Abschnitt 4.1). Zeitliche Variation von Stoffeintrag und -bildung erlaubt die Simulation von Tag/Nacht- bzw. Sommer/Winterzyklen.

Ein weiterer wichtiger Punkt bei Prozessen in Wattsedimenten sind die Gezeiten. Welchen Einfluß diese auf die Strömung im Sediment haben, hängt entscheidend von den umgebenden Bedingungen ab. Ein typisches System wird in Abschnitt 4.2 vorgestellt.

### 3.3 Technische Umsetzung

Nach der Initialisierung der Strömung mit fixem Druckgradienten (siehe Abschnitt 2.3) werden das Transportintervall  $\Delta t$ , die Diffusions- und Advektionskonstante(n) ( $c_{Diff}$  und  $c_{Adv}$ ) sowie die relativen Flüsse  $f_j(z)$  bestimmt. Hierzu wird die Typendeklaration der Zelle entsprechend erweitert:

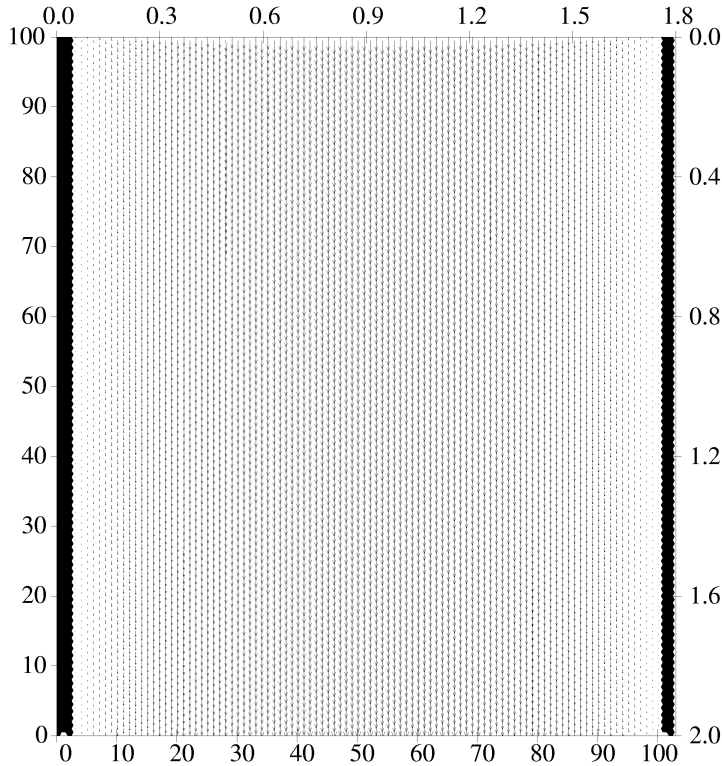
```
typedef struct zelle
{
    ...
    float      c[k];           Konzentration der k Substanzen
                                in mmol/l
    float      rvel[6];       f_j(z)
} typ_zelle, *ptr_to_zelle;
```

Zusätzlich wird eine Struktur für jede Substanz angelegt mit Informationen über maximale Konzentration  $c_i^{max}$  und stoffspezifischer Diffusionskonstante. Im Anschluß erfolgt die Berechnung der Transport-Reaktions-Simulation. Wird der (makroskopische) Druckgradient modifiziert, so erfolgt eine entsprechende Anpassung von  $\Delta t$  und der Advektionskonstante  $c_{Adv}$ .

Ein wichtiger Aspekt ist die Randbedingung an der oberen bzw. unteren Gittergrenze. Für die Advektion reicht es, das Substrat bei Überschreiten der Modellgrenzen zu löschen (Rückflüsse treten nicht auf). Im Fall der Diffusion würde dies jedoch eine unnatürlich starke Abnahme der Substratmenge im System zur Folge haben, da der Konzentrationsgradient am Rand zu groß ist. Deshalb wird der Konzentrationsgradient der jeweils vorletzten Zeile künstlich fortgesetzt.

Es ist sinnvoll das umgebende Porenwasser bzw. den Diffusionsraum bezogen auf die Sedimentprobe als unendlich groß anzunehmen. Dies bedeutet bei diffusivem Transport  $\forall z \in \mathcal{Z} : c_i^t(z) \xrightarrow{t \rightarrow \infty} 0$ . Nimmt die Konzentration zum Modellrand zu bzw. bleibt sie konstant, so würde die Fortsetzung des Konzentrationsgradienten die Substratmenge im System eine Erhöhung bzw. Stagnation bewirken. Deshalb wird im Fall zunehmender Konzentration der Konzentrationsgradient negiert bzw. bei konstanter Konzentration ein artifizierlicher negativer Gradient gesetzt. Die entsprechenden Routinen finden sich in Anhang B.5 und Anhang B.6.

Nach dem Iterationsschritt für den Transport werden die Reaktionen ausgeführt. Da diese nur von den lokalen (in der Zelle befindlichen) Substanzen abhängen, kann jede Zelle einzeln betrachtet werden. Für jede Zelle werden nacheinander die einzelnen Substratumsetzungen mit Hilfe der kinetischen Gleichungen berechnet. Zur Vermeidung von Bereichsfehlern werden die Reaktionsraten entsprechend minimiert. Dazu folgendes Beispiel:



**Abbildung 3.1: Poiseuille-Strom.**  
 Als ideales System wird ein  $104 \times 100$  Zellen ( $1,8 \times 2,0$  Millimeter) großes zweidimensionales Rohr verwendet, indem die Strömung berechnet wird. Die Pfeile repräsentieren die Fließrichtung und -geschwindigkeit. Die mittlere Fließgeschwindigkeit beträgt  $9 \cdot 10^{-5} m/s$ .

Gegeben sei eine Redox-Reaktion der Form



Bezeichne  $c_{E_i}(z)$  bzw.  $c_{P_j}(z)$  die Stoffkonzentration eines Eduktes bzw. Produktes in der Zelle, so ist die Reaktionsrate der Reaktion  $R$  gegeben mit

$$r = v(R, z) \cdot \Delta t = k_R \prod_{i=1}^n c_{E_i}(z)^{e_i} \Delta t. \quad (3.35)$$

Die Reaktionsrate wird minimiert

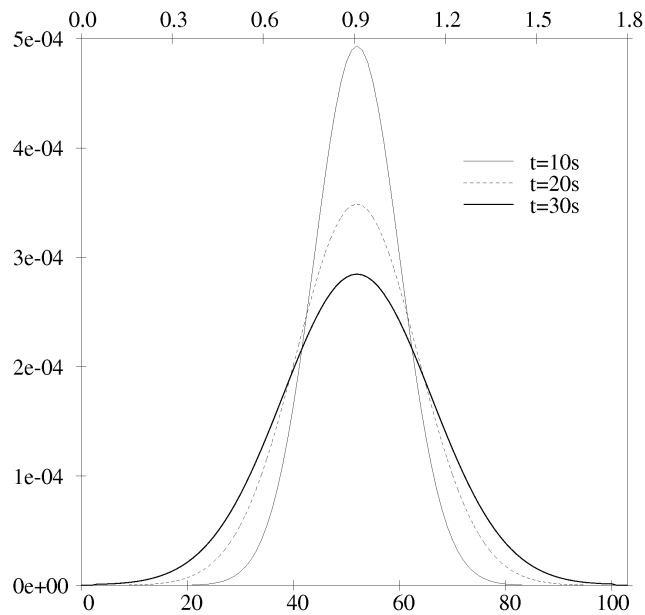
$$r = \min\{r, \min_{1 \leq i \leq n} \{e_i \cdot c_{E_i}(z)\}, \min_{1 \leq j \leq m} \{c_{P_j}^{max}(z) - p_j \cdot c_{P_j}(z)\}\} \quad (3.36)$$

und die Konzentrationen entsprechen angepaßt

$$\forall 1 \leq i \leq n, 1 \leq j \leq m : \begin{cases} c_{E_i}^{t+\Delta t}(z) - c_{E_i}^t(z) = -r e_i \cdot c_{E_i}(z) & \text{und} \\ c_{P_j}^{t+\Delta t}(z) - c_{P_j}^t(z) = r p_j \cdot c_{P_j}(z). \end{cases} \quad (3.37)$$

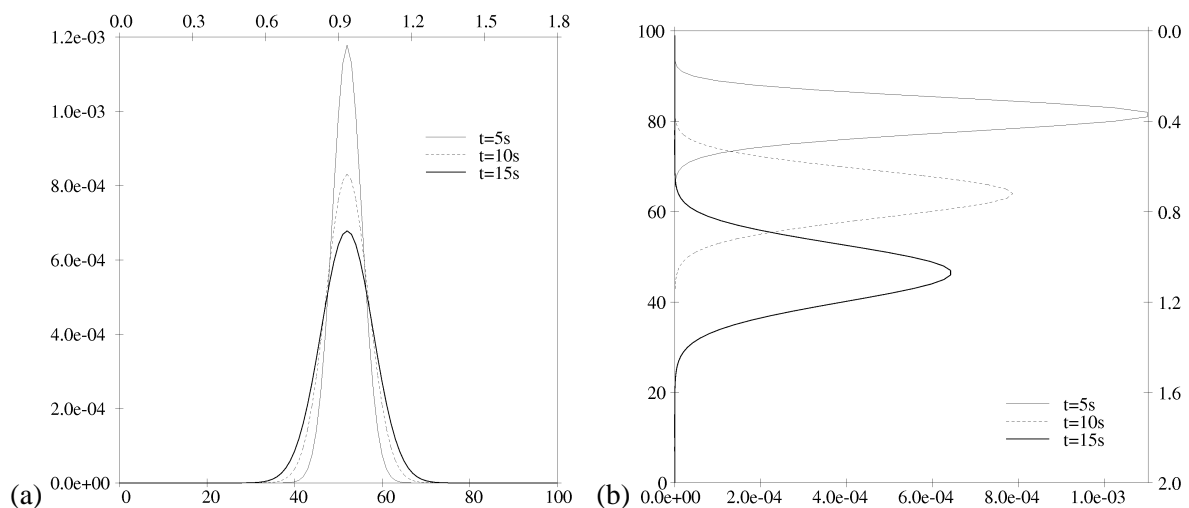
### 3.4 Verifikation

Zur Überprüfung und zur Veranschaulichung werden Beispielrechnungen anhand eines idealen Systems (siehe Abb. 3.1) durchgeführt. Für die Diffusion wird die Fließgeschwindigkeit auf Null ge-



**Abbildung 3.2: Transport durch Diffusion.** Es wird das gleiche Gitter wie in Abb 3.1 verwendet, jedoch mit  $\bar{v} = 0 \text{ m/s}$ . Die Diffusionskonstante wird  $D_c = 1 \cdot 10^{-5} \text{ cm}^2/\text{s}$  gesetzt. Die Abbildung zeigt den horizontalen Konzentrationsgradienten in  $\text{mmol/l}$  zu drei Zeitpunkten.

setzt ( $v(z) = 0 \text{ m/s}$  f.a.  $z \in \mathcal{Z}$ ), wodurch der Advektionsterm wegfällt. In der Mitte des Systems ( $z^* = (\frac{1}{2}\text{size}_x, \frac{1}{2}\text{size}_y)$ ) wird eine Anfangskonzentration eines fiktiven Stoffes  $c$  gesetzt ( $c^0(z^*) = 1 \text{ mmol/l}$ ). Die Parameter werden dermaßen gewählt, daß der gelöste Stoff nach etwa 120 Sekunden den linken bzw. rechten Rand erreicht. Die Ausbreitung des Stoffes verläuft erwartungsgemäß konzentrisch und stimmt bereits nach wenigen Iterationen mit den theoretischen Werten überein, unabhängig von der Gittergröße. Die Abbildung 3.2 zeigt die horizontale Ausbreitung.



**Abbildung 3.3: Transport durch Advektion.** Die Abbildungen zeigen den horizontalen (a) und vertikalen (b) Konzentrationsgradienten in  $\text{mmol/l}$  zu verschiedenen Zeiten.

Für die Advektion wird eine konstante Fließgeschwindigkeit angenommen (siehe Abb. 3.3). In der mittleren Zelle der obersten Reihe wird wieder eine Anfangskonzentration von  $c$  gesetzt mit der Diffusionskonstanten  $D_c = 0 \text{ cm}^2/\text{s}$ . Neben der vertikalen läßt sich auch eine horizontale Ausbreitung erkennen (siehe Bem. 3.2). Dieser Effekt hängt allein von dem Gitter ab und verringert sich bei

Vergrößerung des Gitters. Der relative Effekt gegenüber der Diffusion nimmt proportional mit der Länge des Iterationsschrittes zu.

### **3.5 Zusammenfassung**

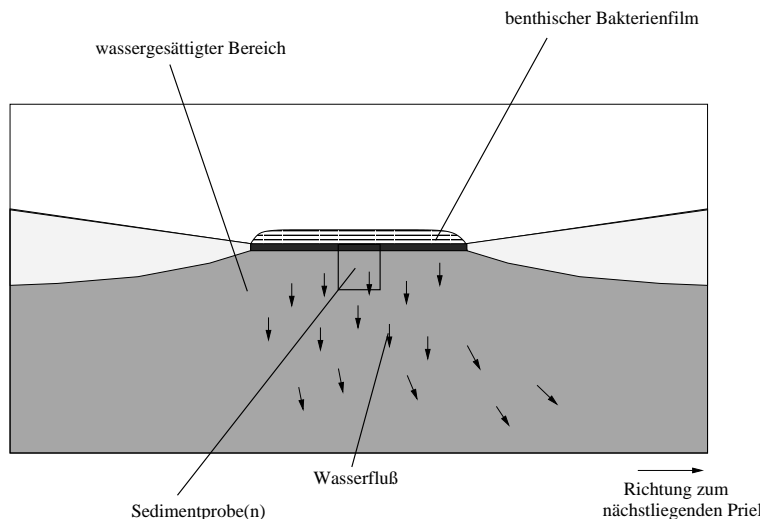
Die bis hierhin gemachten Definitionen der Strömung und des Transportes stellen mit der Porenraumstruktur den Hintergrund dar, auf dem im Sediment die gesamte Schar innerer Prozesse stattfindet. Im folgenden Abschnitt werden Reaktionen gelöster Stoffe sowie erweiterte Randbedingungen zur Simulation externer Nährstofftransporte und Gezeitengänge integriert. In Kapitel 5 folgen Fällungs-, Lösungs- und Wachstumsprozesse, die Strömung und Transport beeinflussen.

## Kapitel 4

# Transport-Reaktions-Modelle

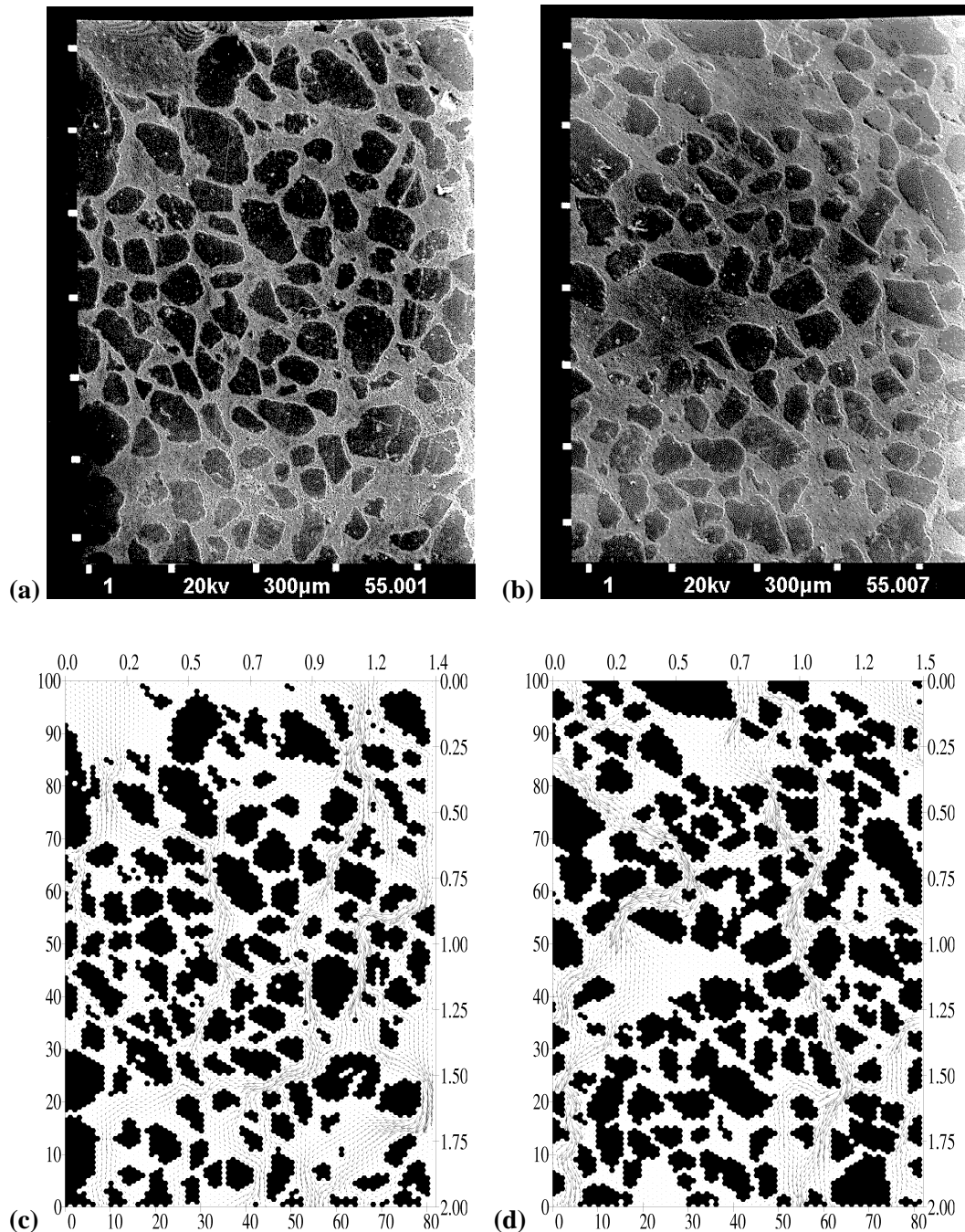
Im folgenden wird eine für die Watten der Nordsee typische Situation betrachtet (Gerdes et al. 1985). An der Sedimentoberfläche in einer lokalen Senke hat sich eine wenige Millimeter dicke Schicht benthischer Bakterien etabliert (siehe Abb. 4.1). Die Bakterien produzieren einen viskösen Film, der zur Glättung der Sedimentoberfläche führt und eine lokale Herabsetzung der effektiven Permeabilität bewirkt. Der Film ist hydraulisch wirksam und bewirkt eine permanente Wassersättigung des Porenraumes.

Die permanente Wassersättigung ist Voraussetzung für die Behandlung im Modell, da die beschriebenen Automaten nur inkompressible Ströme des Porenwassers simulieren. Die Abmessungen der Sedimentprobe erlauben die Annahme, daß der Wasserfluß innerhalb der Probe strikt vertikal ist. Als Porenraumgeometrie werden zwei Sedimentproben von der Insel Mellum verwendet, die der be-



**Abbildung 4.1: Sedimentoberfläche.** Ausschnitt der lokalen sedimentologischen und hydraulischen Umgebung der Meßstelle bei Ebbe. Der mikrobielle Film beeinflusst den Wasserstand in der Nähe der Oberfläche.

schriebenen Situation entstammen (siehe Abb. 4.2) und im weiteren mit *A* bzw. *B* gekennzeichnet werden. Da sich die Simulation von gering viskösem Wasser als problematisch erweist, wird für die Modellrechnung eine Viskosität von  $\nu = 1 \cdot 10^{-2}$  gewählt und der Druckgradient bzw. die Fließgeschwindigkeit entsprechend (2.30) angepaßt. Die restlichen Parameter werden wie in Abschnitt 2.4 gewählt.

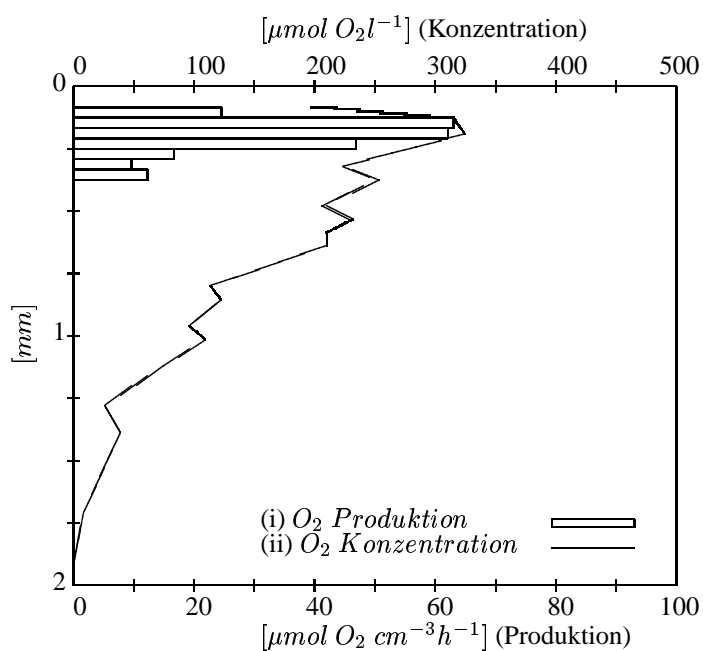


**Abbildung 4.2: Strömungsmuster zweier Sandwattsedimente.** Die Abbildungen (a) und (b) zeigen Rasterelektronenaufnahmen zweier Profilschnitte an der Oberfläche eines supratidalen Sedimentes von der Insel Mellum (a:  $1.45 \times 2.00 \text{ mm}$ ,  $\varepsilon = 0.548$ ; b:  $1.5 \times 2.00 \text{ mm}$ ,  $\varepsilon = 0.507$ ; siehe auch 2.4). Oben: Sedimentoberfläche; schwarz: mineralische Komponenten; grau: Porenraum. In (c) und (d) sind die Strömungsmuster im stationären Zustand dargestellt. Die Vektoren repräsentieren die relative Zellgeschwindigkeit  $v = (v_x, v_y)$  (c:  $\bar{v} = 1,6 \cdot 10^{-5} \text{ m/s}$ ,  $k = 7,4 \cdot 10^{-11} \text{ m}^2$ ; d:  $\bar{v} = 1,15 \cdot 10^{-5} \text{ m/s}$ ,  $k = 5,2 \cdot 10^{-11} \text{ m}^2$ ). Weiß kennzeichnet die freien, schwarz die Hinderniszellen. Ein Vergleich des Strömungsmusters (c) mit dem aus 2.4 zeigt, daß bei Änderung der Viskosität die wesentlichen Fließpfade erhalten bleiben.



## 4.1 Einfluß der Geometrie auf den Transport

Es soll untersucht werden, inwiefern die Sedimentstruktur auf kleinen räumlichen Skalen ( $10^{-4}$  bis  $10^{-3}m$ ), in denen lokale Besonderheiten wie Strukturnischen und Biofilme in Sandsedimenten sichtbar werden, Transport- und Reaktionsprozesse beeinflussen (Haußels et al. 2001). Als Referenzsubstanz wird Sauerstoff gewählt, da dieser eine wichtige Komponente in biologischen Prozessen darstellt und mit hoher Genauigkeit gemessen werden kann (Michaelsen et al. 1992). Als Porenraumgeometrie wird die Sedimentprobe A verwendet. Da für diesen Standort keine hochauflösenden Sauerstoffprofile verfügbar sind, werden stattdessen Profile von Severn Estuary (U.K.) herangezogen (siehe Abb. 4.3). An beiden Stellen finden sich Sedimente ähnlicher Natur, insbesondere bzgl. ihrer Korngrößenverteilung, mikrobieller Besiedlung und mikrobieller Aktivität (Paterson et al. 1994). Die hydraulische



**Abbildung 4.3: Sauerstoffgradient.** Hochauflösende Gradienten von (i) biologischen sedimentären Sauerstoffproduktion und (ii) Sauerstoffkonzentration in einem tidalen Sandwattsediment (Portishead, Severn Estuary, U.K.).

Leitfähigkeit von Sandwattsedimenten liegt bei  $1 \cdot 10^{-4}m/s$  (Domenico und Schwartz 1998). Biologische Aktivität und Etablierung von Biofilmen im Porenraum setzen diese noch weiter herab. Die resultierenden Fließgeschwindigkeiten sind jedoch ausreichend hoch, so daß ein advektiv kontrollierter Transport stattfindet (Huettel und Gust 1992) und es kann angenommen werden, daß der Wasserfluß durch das gewählte Medium laminar ist. Zur Simulation des Sauerstofftransportes wird die Diffusionskonstante  $D_{CO_2} = 1 \cdot 10^{-5}cm^2/s$  gesetzt (Reid et al. 1986).

Zunächst sei der gemessene Sauerstoffgradient von Portishead (U.K.) betrachtet. Nimmt man eine konstante Biomasse an, die den Sauerstoff durch eine Respirationreaktion verbraucht, so sollte die Sauerstoffkonzentration anfangs linear und dann exponentiell mit der Tiefe abnehmen. Es lassen sich verschiedene Ursachen für die beobachteten Schwankungen annehmen:

- bakterielle Sauerstoffproduktions- und Verbrauchsrate sind nicht konstant,
- die Sedimentgeometrie beeinflusst die Transporteigenschaften und
- Auftreten von erhöhten Sauerstoffkonzentrationen in Sedimentnischen und/oder Adsorption an den Partikeloberflächen.

Es wird zwar allgemein angenommen, daß die Sedimentgeometrie einen Einfluß auf den Transport hat, jedoch ist gängige Meinung, daß dieser eher vernachlässigbar ist und die beobachtbaren Variationen (vgl. Abb. 4.3) vielmehr durch wechselnde Sauerstoffproduktion bis in tiefere Sedimentschichten (einige  $100\mu m$ ) verursacht werden (Klenke, persönliche Kommunikation).

Um den alleinigen Einfluß der Struktur auf die Konzentrationsverteilung untersuchen zu können, wird ein stark vereinfachtes System angenommen. Neben Strömung und Transport werden die zwei Reaktionsprozesse, Sauerstoffproduktion und -respiration, integriert.

#### 4.1.1 Modellannahmen

Im Fall des Sedimentes von Portishead findet die sediment-intrinsische Sauerstoffproduktion dicht unter der Sedimentoberfläche statt (siehe Abb. 4.3). Dabei besteht die Besiedlung aus epipelischen Diatomeen, wobei *Nitzschia epithemioides* die dominierende Spezies ist (86% der gesamten Gemeinschaft, siehe Paterson et al. 1994). Die Sauerstoffproduktion nimmt von der Oberfläche an bis zu einer Tiefe von etwa  $140\mu m$  nahezu linear zu und dann auf ähnlicher Distanz wieder ab. Im Modell läßt sich dies leicht simulieren, indem man eine tiefenabhängige Funktion definiert

$$f(z) = \begin{cases} (1 - |\frac{y-y^*}{y^*}|)p_{max}, & \text{falls } |y - y^*| < y^* \\ 0 & \text{sonst} \end{cases}, \quad (4.1)$$

wobei  $z = (x, y)$ ,  $y^*$  die Tiefe (in Gitterzellen) maximaler Produktion und  $p_{max} = 60 \mu mol/cm^3 \cdot h$  bezeichnet. Die Tiefe  $y^*$  ist bestimmt durch

$$\int_{0mm}^{2mm} g(h)dh = \sum_{y=0}^{2y^*} \epsilon_{sys} \cdot f(z) = \epsilon_{sys} \cdot y^* \cdot p_{max}. \quad (4.2)$$

Die Funktion  $g(h)$  bezeichnet hier die reale Produktion in der Tiefe  $h$  und  $\epsilon_{sys}y^*$  die reale Tiefe maximaler Produktion. Weiter sei eine maximale Sauerstoffkonzentration  $c^{max} = 2 \cdot c^{Sat}$  (doppelte Sättigungskonzentration) gewählt und die Produktion beschrieben durch

$$prod(z) = f(z) \cdot \left(1 - \frac{c_{O_2}^t(z)}{c_{O_2}^{max}}\right), \quad (4.3)$$

wobei  $c_{O_2}^{max}$  für die maximale Konzentration im Porenwasser steht. Wird diese durch die Produktion überschritten, so tritt der Sauerstoff in Form von Gas aus dem Sediment aus und wird somit für das Modell irrelevant.

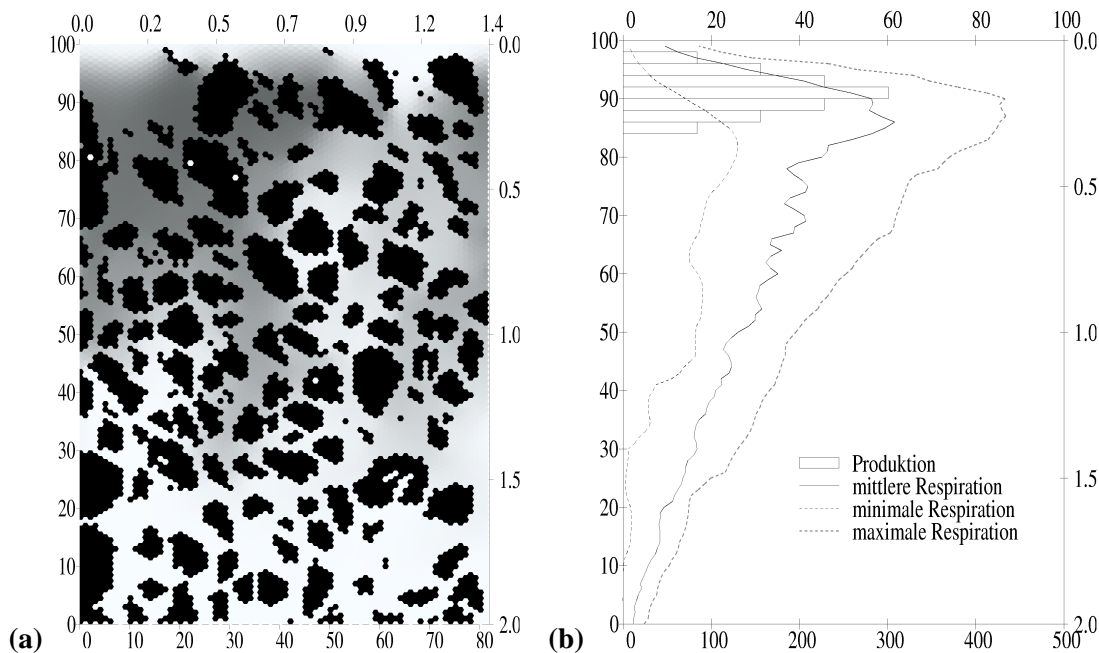
Für die Respiration wird angenommen, daß die Konzentration der Konsumenten sowie die Reaktionskonstante sowohl räumlich als auch zeitlich konstant sind. Ein einfacher Reaktionsterm für die Sauerstoffrespiration ist (Jørgensen 1996)




Die kinetische Gleichung lautet entsprechend

$$resp(z, t) = K_{resp} \cdot \frac{c_{O_2}^t(z)}{km + c_{O_2}^t(z)}, \quad (4.5)$$

wobei  $K_{resp} = k_{resp} \cdot c_{CH_2O} \cdot \rho_{micro}$  das Produkt aus der Reaktionskonstanten, der Biomassenkonzentration (Substrat) und der Dichte der Mikroorganismen ist. Die Sauerstoffaffinität des Systems



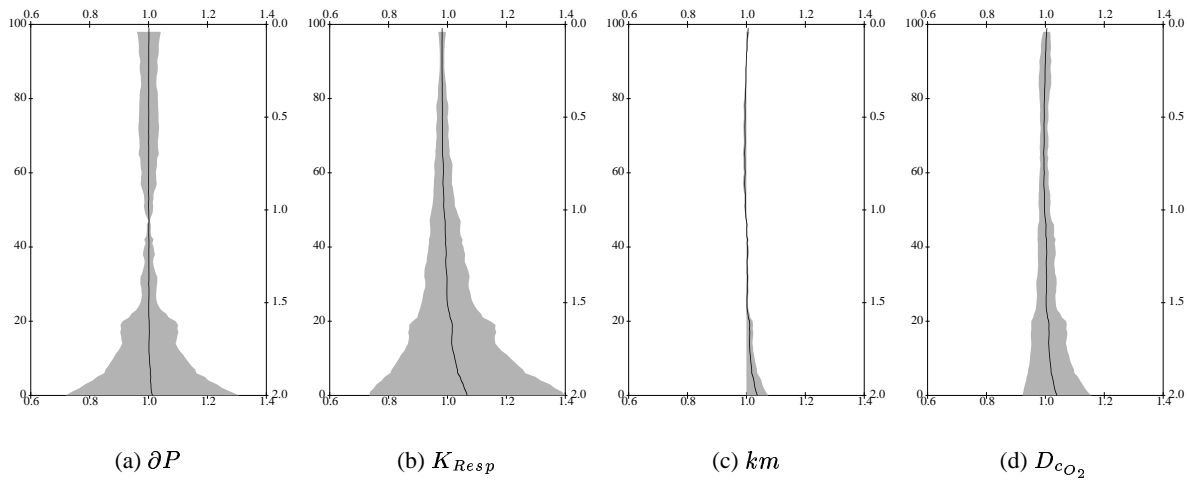
**Abbildung 4.4: Sauerstoffverteilung im Sediment.** Das Verteilungsmuster im Modell (a) zeigt die  $1,45 \times 2,0 \text{ mm}$  große Sedimentprobe A aus Abb. 4.2. Die schwarz gefärbten Zellen kennzeichnen das Sediment und die grauen die jeweilige Sauerstoffkonzentration in der Zelle:  $0 \mu\text{mol O}_2 \text{l}^{-1}$    $500 \mu\text{mol O}_2 \text{l}^{-1}$ . In (b) ist die durchschnittliche Sauerstoffproduktion in  $\mu\text{mol O}_2 \text{cm}^{-3} \text{h}^{-1}$  sowie die minimale, durchschnittliche und maximale Sauerstoffrespiration in  $\mu\text{mol O}_2 \text{l}^{-1}$  dargestellt (vgl. Abb. 4.3).

liegt zwischen  $0,3 \cdot 10^{-6}$  und  $1,5 \cdot 10^{-6} \text{ mol/l}$  (Haußels 1997). Die Konstante  $K_{resp}$  bestimmt im wesentlichen die Eindringtiefe des Sauerstoffes. Um einen ähnlichen Gradienten wie in Abbildung 4.3 zu erhalten, muß  $K_{resp}$  durch eine Serie von Simulationsläufen kalibriert werden. Für die Strömung wird der obige Parametersatz verwendet. Nach Erreichen des stationären Strömungsfeldes startet die Simulation des Transport-Reaktions-Systems. Die Konzentrationsverteilung bzw. -gradient konvergiert nach etwa 30.000 (Transport-)Iterationen (siehe Abb. 4.4). Die Konzentrationsverteilung zeigt ein inhomogenes Muster, das in vertikaler und horizontaler Richtung hohe Variabilität aufweist. Diese Variabilität spiegelt sich ebenso im Gradienten wider. Die durchschnittliche Sauerstoffkonzentration nimmt mit der Tiefe nicht monoton ab und ist durch deutliche Fluktuationen geprägt, im Gegensatz zum Sauerstofffluß (Konzentration  $\times$  Geschwindigkeit). Beispielsweise schwankt die durchschnittliche Konzentration in  $1,2 \text{ mm}$  Tiefe um etwa 100% auf einer Distanz von <sup>1</sup>  $100 \mu\text{m}$ . Die allgemeine Abnahme der Sauerstoffkonzentration läßt sich jedoch im Konzentrationsbild und im Gradienten deutlich erkennen.

#### 4.1.2 Sensibilitätsanalyse

Zur Untersuchung der Modellstabilität wird eine Sensibilitätsanalyse durchgeführt. Da die Strömung bereits in Abschnitt 2.4 behandelt wurde, genügt hier die Betrachtung von  $K_{resp}$ ,  $km$ ,  $\partial P$  und  $D_{cO_2}$ .

<sup>1</sup>(siehe Abb. 4.4b), Zellreihen 40-45



**Abbildung 4.5: Sensibilitätsanalyse.** Zur Analyse wurde jeder Parameter leicht modifiziert ( $\pm 5\%$ ). Die Abbildungen zeigen die relativen Abweichungen im vertikalen Profil.

Hierzu wird jeweils ein Parameter leicht modifiziert. Die Ergebnisse zeigt Abbildung 4.5. Das Konzentrationsbild wird im wesentlichen durch die Größen  $\partial P/D_c$  (Variabilität),  $K_{resp}$  (Eindringtiefe) und  $km$  (lineare/exponentielle Abnahme) charakterisiert.

### 4.1.3 Ergebnisse

Ein Vergleich der Modellergebnisse mit den Proben bioaktiver Wattsedimente zeigt, daß sich reale und virtuelle Profile sehr ähnlich sind. Durch die Annahme konstanter Produktions- und Respirationsraten werden die Variationen im Gradienten einzig durch die strukturabhängige Perkolations im Porenraum verursacht. Da die Fließpfade durch die Geometrie bestimmt sind, ist eindeutig gezeigt, daß die Geometrie einen entscheidenden Einfluß auf die Sauerstoffverteilung im Sediment hat.

Die Hauptursache hierfür liegt in der Existenz von „Fließschatten“ innerhalb der Sedimentstruktur (Abb. 4.2). In Bereichen der Sauerstoffproduktion ist hier die Konzentration relativ hoch, wohingegen in Bereichen, in denen nur Respiration stattfindet, die Konzentration bis auf Null herabsinkt, da der Transport durch die Diffusion bestimmt ist.

Verringert man die Fließgeschwindigkeit bzw. den Druckgradienten, so läßt sich ein Übergang in ein diffusives System erkennen. In diesem Fall wird der Einfluß der Geometrie vernachlässigbar und man erhält ein ideales Diffusionsprofil.

Die Tatsache, daß Modell- und reales Profil ähnlich, aber nicht identisch sind, hat mehrere Gründe. Zum einen stimmen die Geometrien nicht überein. Dies ist in der Problematik begründet, daß bei der primären Fixierung der Probe zur Aufnahme eine nachträgliche Messung des Sauerstoffgradienten unmöglich wird bzw. eine primäre Messung des Gradienten die Sedimentstruktur zerstört. Zum anderen wurden im Modell idealisierte Bedingungen angenommen.

## 4.2 Einfluß der Gezeiten auf den Transport

In tidalen Systemen lassen sich stark variierende hydrodynamische Prozesse innerhalb der Sedimente beobachten (Davies und Lawrence 1994; Keen und Glenn 1995). Diese externen Kräfte zeigen einen

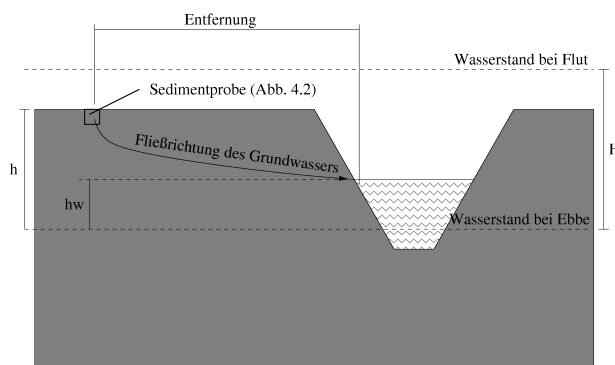
deutlichen Effekt auf den Transport von Substanzen in Sedimenten, auf die Transformation reaktiver Substanzen und auf die intrinsischen Charakteristika der Struktur (Anderson und Meyer 1986; Rutgers van der Loeff 1981; White 1994; Whitehouse 1995). Einflüsse verschiedener Prozesse auf die Verteilung von Substanzen (u.a. von Sauerstoff) wurden in den letzten Jahren im mesoskaligen Raum anhand von Feldstudien (Cunningham et al. 1991; Glud et al. 1994; Jørgensen und Des Marais 1990) sowie Modellen (Cunningham und Wanner 1994; Davies und Lawrence 1994) untersucht. In diesem Abschnitt soll mit dem Effekt der Gezeiten ein bislang kaum untersuchtes Phänomen komplexer natürlicher Systeme betrachtet werden (Haußels et al. 2000). Dabei ist von besonderem Interesse, wie in tidalen Systemen inhomogene Konzentrationsverteilungen beeinflusst werden durch

- benthische mikrobielle Produktion und Konsumption von Sauerstoff,
- strukturelle Charakteristika von Sedimenten und
- einen externen hydrodynamischen Stimulus resultierend aus dem Gezeitengang,

sowie die Frage, in welchem kooperativen Wechselspiel diese Faktoren zueinander stehen.

#### 4.2.1 Modellannahmen

Ausgangspunkt ist wieder das Szenario von Abbildung 4.1. Zusätzlich sei angenommen, daß das Oberflächenwasser lichtdurchlässig ist und eine zeitkonstante Illumination herrscht, wodurch der Einfluß von Tageslicht auf die Sauerstoffproduktion vernachlässigt werden kann. Um allgemeinere Aussagen treffen zu können, werden hier beide Proben aus Abbildung 4.2 berücksichtigt. Zur Integration



**Abbildung 4.6: Grundwasserfluß.** Richtung und hydraulische Bedingungen der Grundwasserbewegung von der Position der Sedimentproben bis zum nächstliegenden Priel. Die Proben befinden sich in einer Höhe von  $h = 186\text{cm}$  über dem Wasserstand bei Ebbe.  $H = 2\text{m}$  beschreibt die Tiden-schwankung während eines Gezeitenzyklus,  $h_w(t)$  den Abstand zum minimalen Wasserstand zum Zeitpunkt  $t$  und  $l = 85\text{m}$  die horizontale Entfernung zum Priel.

von Gezeitenkräften in das Modell wird ein größerer Ausschnitt der örtlichen Umgebung betrachtet (Abb. 4.6). Die betrachteten Sedimente sind während der Flut etwa zwei Stunden lang mit Wasser bedeckt (Klenke, persönliche Kommunikation). Die durchschnittliche Tide beträgt vor Ort ungefähr  $2\text{m}$  (Reineck 1982), wodurch sich die Angaben aus Abbildung 4.6 ergeben. Bei Ebbe verursachen die unterschiedlichen Wasserstände an der Meßstelle und dem nächstliegenden Priel einen Grundwasserfluß. Der Wasserfluß ist durch Darcy's Gesetz beschrieben

$$\bar{v} = \frac{Q}{A} = k_f \cdot \frac{h - h_w}{l}, \quad (4.6)$$

wobei  $\bar{v}$  die Durchschnittsgeschwindigkeit,  $Q$  die Flußmenge,  $A$  die Querschnittsfläche des Leiters,  $k_f$  die hydraulische Leitfähigkeit,  $h - h_w$  die vertikale und  $l$  die horizontale Entfernung zwischen

den Sedimentproben und dem Priel bezeichnet. Die hydraulische Leitfähigkeit ergibt sich aus der Gravitation, Viskosität des Porenwassers ( $\nu = 1 \cdot 10^{-6} \text{m}^2/\text{s}$ ) und Permeabilität (siehe Abb. 4.2):

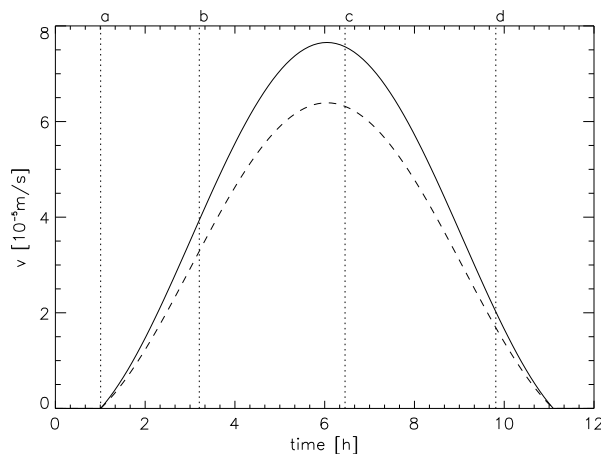
$$k_f = k \cdot \frac{g}{\nu} \quad (4.7)$$

Da sich die Proben in einer lokalen Senke befinden, fließt bei Ebbe permanent Wasser durch das Sediment. Dieser Fakt garantiert, daß der Grundwasserfluß allein durch die Gleichung (4.6) beschrieben wird. Bei Flut liegt der Wasserstand über der Sedimentoberfläche ( $h_w > h$ ). Das Niveau an der Meßstelle und dem Priel ist gleichhoch, wodurch keine advective Strömung durch das Sediment mehr stattfindet. Als Reaktionsprozesse werden Sauerstoffproduktion und -konsumption aus Abschnitt 4.1 übernommen.

Da die Strömung in Sandwattsedimenten laminar ist (siehe Abschnitt 2.4), läßt sich das Strömungsfeld im Gezeitengang nach Satz 2.4 modellieren, indem ein zuvor berechnetes Feld mit einem zeitabhängigen Faktor  $\psi(t)$  multipliziert wird. Der mittlere Gezeitengang folgt einer Sinusschwingung (Reineck 1982). Mit den Angaben aus Abbildung 4.6 ergibt sich

$$\psi(t) = \partial P_{max} \cdot \max\left\{0, 2 \cdot \sin\left(\frac{2\pi t}{12}\right)\right\} \quad (4.8)$$

mit  $\partial P_{max} = 0,5 \text{Nm}$ . Bedingt durch unterschiedliche Permeabilitäten weichen die durchschnittlichen Fließgeschwindigkeiten voneinander ab (siehe Abb. 4.7). Nach Berechnung der konstanten



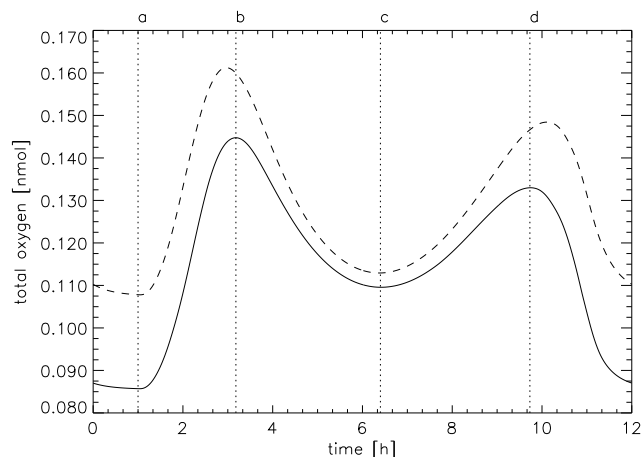
**Abbildung 4.7: Fließgeschwindigkeit während des Tidenzyklus.** Die vertikale Geschwindigkeit ist für beide Sedimentproben absolut aufgetragen (durchgezogen: Probe A, gestrichelt: Probe B). Die Markierungen *a, b, c, d* bezeichnen vier kritische Zeitpunkte (siehe Abb. 4.8).

Strömungsfelder (Abb. 4.2) erfolgt die Transport-Reaktionssimulation über drei Tidenzyklen. Zu Beginn wird die Sauerstoffkonzentration in allen Gitterzellen auf Null gesetzt ( $\forall z \in \mathcal{Z} : c^0(z) = 0$ ). Nach der Initialisierungsphase weisen alle Transport- und Reaktionsparameter periodisches Verhalten bzgl. des Gezeitenzyklus auf. Im folgenden wird deshalb ein einziger (der zweite) Gezeitenzyklus zur Analyse herangezogen.

## 4.2.2 Modellverhalten während eines Tidenzyklus

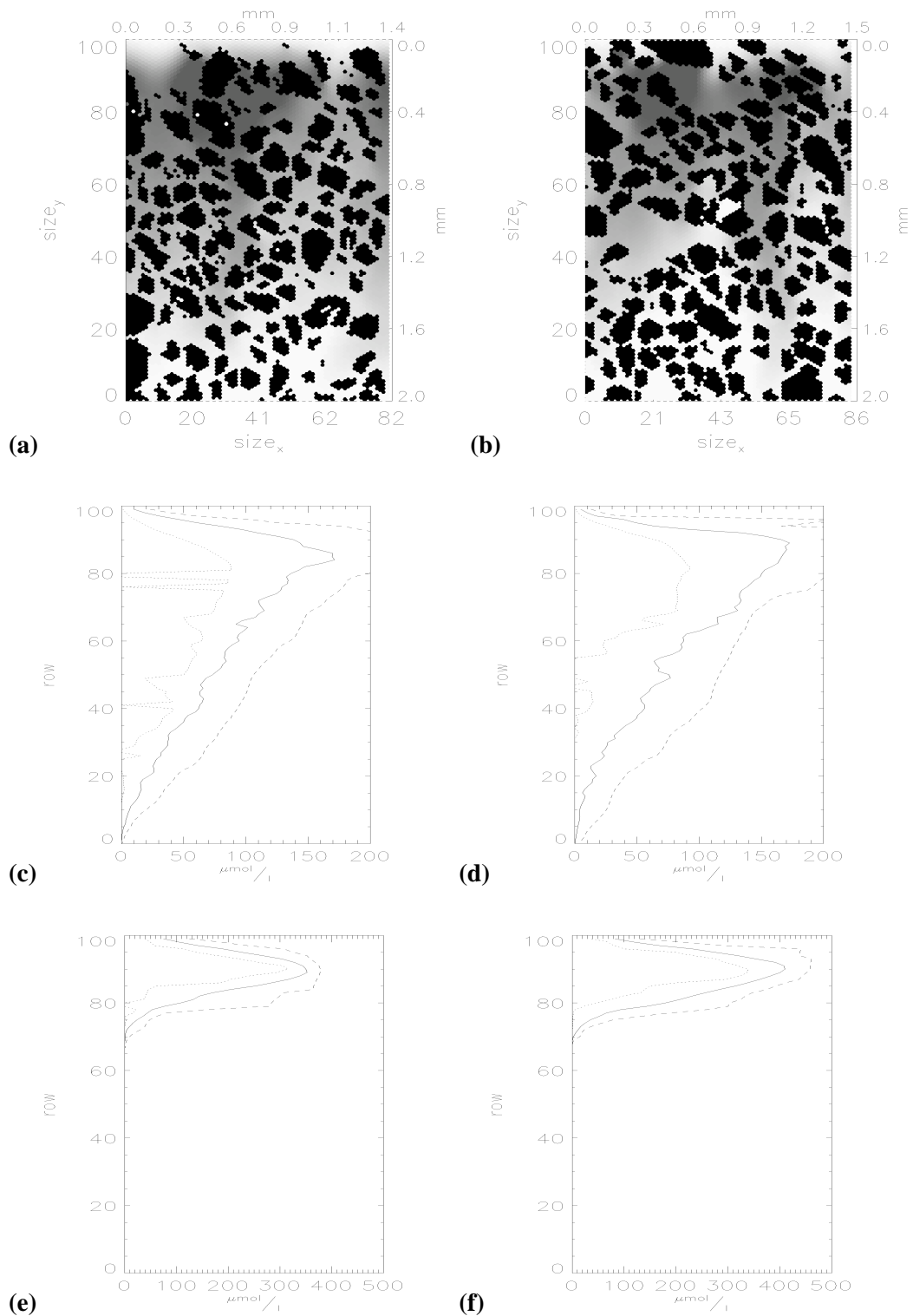
### Der globale Sauerstoffgehalt

Trägt man den globalen Sauerstoffgehalt in der Zeit auf (Abb. 4.8), so sind die Graphen beider Sedimente durch je vier Extremwerte charakterisiert. Zwei dieser Extrema liegen in beiden Proben zeitlich gleich: Wenn der Wasserstand unter die Sedimentoberfläche sinkt und sich ein Grundwasserfluß etabliert ( $t = a$ ), sowie kurze Zeit nachdem die Fließgeschwindigkeit ihr Maximum erreicht hat ( $t = c$ ).



**Abbildung 4.8:** Sauerstoffgehalt während des Tidenzyklus. Die durchgezogene Linie steht für Probe A und die gestrichelte für Probe B. Die vier Extremwerte der Kurve aus dem Sediment A sind mit  $a - d$  gekennzeichnet.

Das erste Intervall  $t \in [0, a]$  beschreibt die Flutphase. Es findet kein (vertikaler) Wasserfluß statt, so daß das System strikt diffusiv ist. Der Einfluß des Transportprozesses auf die Sauerstoffverteilung ist wesentlich geringer als der des Produktions- und des Respirationsprozesses. Folglich wird der produzierte Sauerstoff bereits nahe der Quelle an der Oberfläche des Sedimentes konsumiert. In tieferen Bereichen des Sedimentes ist Sauerstoff vollkommen abwesend (Abb. 4.9(e),(f)). Die Sauerstoffprofile zeigen die Charakteristika von Konzentrationsprofilen in diffusiven Systemen. Dieses Verhalten zeigt sich für beide Sedimente, da die Diffusion unabhängig von der Porenraumgeometrie ist. Die Sauerstoffkonzentration ist relativ hoch im Bereich der Produktion, dennoch ist der Produktionsprozeß geringer als der Respirationsprozeß bedingt durch die begrenzte Sauerstoffaufnahme durch das Porenwasser (vgl. Glg. 4.3). Demzufolge sinkt der Sauerstoffgehalt, bis sich ein Gleichgewicht zwischen Produktion und Respiration eingestellt hat. Einziger Unterschied zwischen den Proben A und B ist eine höhere Konzentration in B trotz geringerer globaler Porosität ( $\epsilon_B < \epsilon_A$ ). Ursache ist eine lokal höhere Porosität nahe der Sedimentoberfläche in Probe B (vgl. Abb. 4.2), wodurch den Sauerstoffproduzenten ein größeres Volumen zur Besiedlung zur Verfügung steht. Zum Zeitpunkt  $t = a$  sinkt der Wasserspiegel unter die Sedimentoberfläche, und es bildet sich ein Grundwasserfluß zum nächstliegenden Priel. Ein vertikaler Wasserstrom transportiert den gelösten Sauerstoff in die tieferen Poren des Sedimentes. Die Konzentration im oberen Porenraum nimmt mit zunehmender Geschwindigkeit ab. Gleichzeitig steigt die Konzentration in den tieferen Zonen. Das Verteilungsmuster ändert sich fundamental von einem diffusiven zu einem advektiven Charakter (Abb. 4.9a-d). Im Produktionsprozeß nimmt der limitierende Faktor  $(1 - \frac{c(z)}{c^{max}})$  zu, da in dieser Phase Transport- und Produktionsprozeß dominieren. Der Sauerstoffgehalt im System steigt deutlich an und demzufolge auch die Respiration. Zum Zeitpunkt  $t = b$  überwiegt schließlich die Konsumtion gegenüber dem Transport, der nun langsamer zunimmt und der Sauerstoffgehalt erreicht seinen maximalen Wert. In der Probe B wird dieser Punkt früher erreicht, da die globale Fließgeschwindigkeit etwas geringer ist als in A.



**Abbildung 4.9: Sauerstoffverteilung im Tidenzyklus I.** Die linke Spalte zeigt die Situation in Probe A bzw. die rechte die von Probe B. In den Abbildungen (a) und (b) ist das Verteilungsmuster und in (c) und (d) das entsprechende Sauerstoffprofil in der advektiven Phase während der Ebbe dargestellt. (e) und (f) zeigen die Sauerstoffverteilung bei reiner Diffusion. In den Abbildungen steht die durchgezogene Linie für den Mittelwert (pro Zeile), die gestrichelte Linie für den Maximal- und die gepunktete für den Minimalwert.



Nach sechs Stunden ist der niedrigste Wasserstand erreicht, und die Flut setzt ein. Die Fließgeschwindigkeit nimmt ab, und die Konzentration im oberen Porenraum nimmt wieder zu, wodurch der globale Sauerstoffgehalt steigt. Da die Respiration ein irreversibler Prozeß ist, tritt dieses Phänomen verzögert in Relation zum Zeitpunkt des maximalen Flusses auf. Ein Sauerstoffminimum liegt für beide Proben bei  $t = c$  vor. Mit abnehmender Fließgeschwindigkeit invertiert sich das globale Verhalten, jedoch nicht symmetrisch. Diese Asymmetrie ist durch die weiterhin hohe Sauerstoffpräsenz im ganzen System bedingt, die eine hohe globale Konsumption bei steigendem Wasserstand nach sich zieht.

Zum Zeitpunkt  $t = d$  wird ein zweites Maximum des globalen Sauerstoffs erreicht, das jedoch weniger stark ausgeprägt ist als bei  $t = b$ . Dieses Maximum wird in der Probe *B* später erreicht, da der Quotient der (Gitter)Zellen mit Sauerstoffproduktion und Porenzellen höher ist als in Probe *A*. Folglich dominiert der Produktionsprozeß die Respiration für einige Stunden (im Modell).

### 4.2.3 Das Verteilungsmuster

Es hat sich gezeigt, daß das globale Verhalten in beiden Sedimenten trotz unterschiedlicher Geometrien sehr ähnlich ist. In diesem Abschnitt werden räumliche Aspekte diskutiert.

Im diffusiven Fall ( $t = a$ ) zeigt sich diese Ähnlichkeit sowohl in der räumlichen Verteilung als auch im gemittelten Konzentrationsprofil (Abb. 4.9(e),(f)). Die Sauerstoffkonzentration nimmt, von der Schicht der Produzenten ausgehend, parabolisch in vertikaler Richtung ab. Zum Vergleich läßt sich das Konzentrationsprofil im homogenen eindimensionalen Raum berechnen (siehe Glg. 3.3)

$$\frac{d}{dt}c = \alpha \cdot \frac{d^2}{dy^2}c - K_{resp} \cdot \frac{c}{c + km}, \quad (4.9)$$

wobei  $K_{resp}$ ,  $km$  aus (4.5),  $y$  die vertikale Distanz zum Produktionslayer,  $\alpha \in \mathbb{R}$  und  $\frac{d}{dt}c = 0$  für den stationären Zustand ist. Im oberen Sediment ist die Konzentration hoch ( $c \gg km$ ) und (4.9) vereinfacht sich zu

$$0 = \alpha \cdot \frac{d^2}{dy^2}c - K_{resp} \implies c(y) = c_0 - \frac{K_{resp}}{2\alpha}y^2 \text{ (parabolisch)}, \quad (4.10)$$

wobei  $c_0$  die Sauerstoffkonzentration am Produktionshorizont bezeichnet. Im tieferen Sediment nimmt die Konzentration ab ( $c \ll km$ ) und (4.9) wird zu

$$0 = \alpha \cdot \frac{d^2}{dy^2}c - K_{resp} \frac{c}{km} \implies c(y) = c_0 \cdot e^{-\sqrt{\frac{K_{resp}}{\alpha}}y} \text{ (exponentiell)}, \quad (4.11)$$

womit sich obige Beobachtung erklären läßt.

Mit steigender Fließgeschwindigkeit dringt der Sauerstoff entlang der Hauptflußpfade in den Porenraum ein (vgl. Abb. 4.2 und Abb. 4.9(a),(b)). Maximale Sauerstoffpenetration und stärkste Advektion treten zusammen mit der höchsten Geschwindigkeit auf. In der advektiv kontrollierten Situation weisen beide Proben strukturgebundene Charakteristika bezüglich Verteilungsmuster und Konzentrationsgradienten auf. In Probe *B* nimmt die Sauerstoffkonzentration bis zu einer Tiefe von  $1,4\text{mm}$  linear ab und in Probe *A* bis über das untere Bildende hinaus. Wieder wird die Beobachtung mit den Ergebnissen des idealen Falles verglichen. In einem homogenen Medium läßt sich der advective Fall schreiben als (vgl. (4.9))

$$\frac{d}{dt}c = -v \cdot \frac{d}{dy}c - K_{resp} \cdot \frac{c}{c + km}, \quad (4.12)$$

wobei  $v$  die Fließgeschwindigkeit bezeichnet und  $\frac{d}{dt}c = 0$  für den stationären Zustand gilt. Für  $c \gg km$  wird dies zu

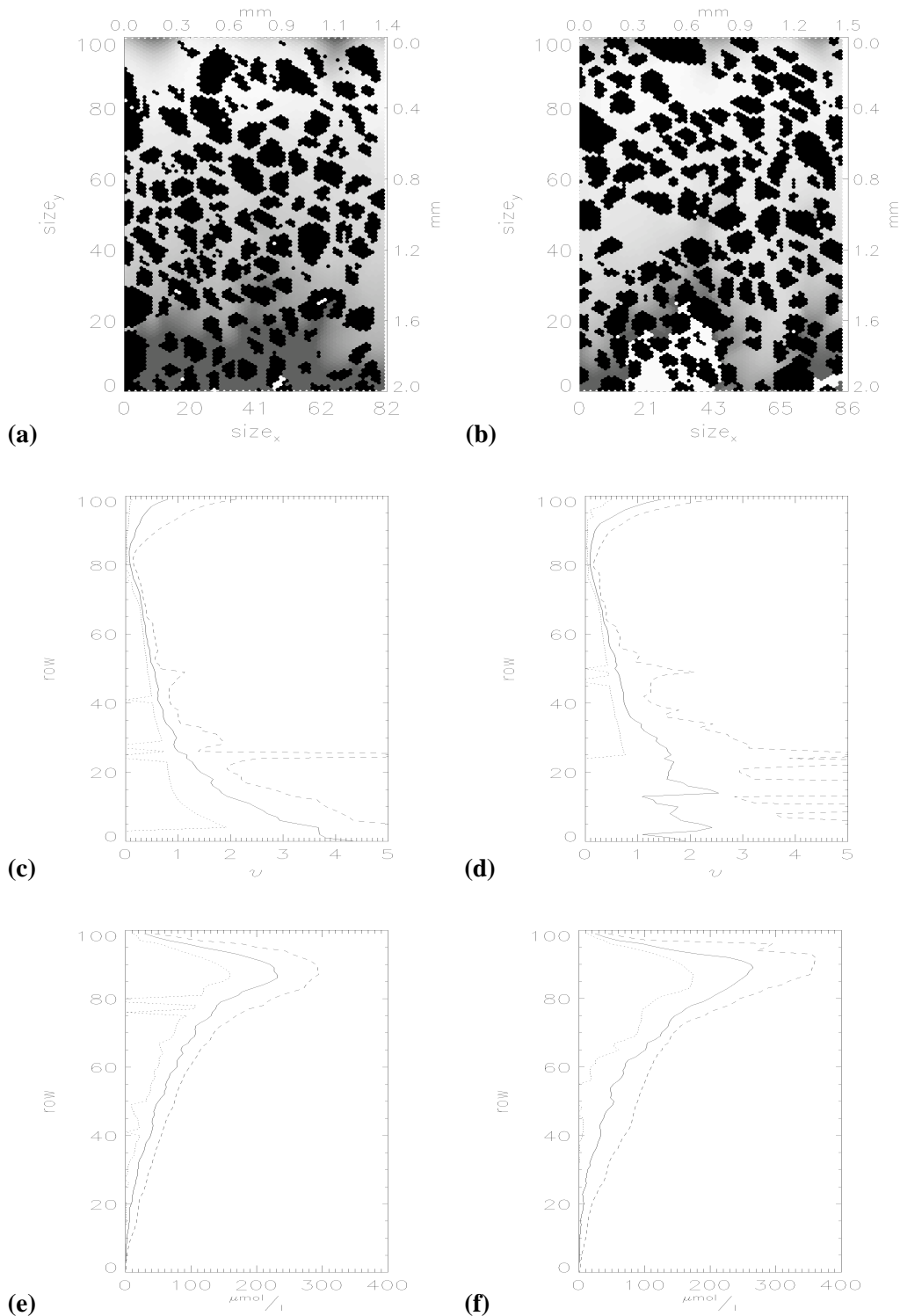
$$0 = -v \frac{d}{dy}c - K_{resp} \frac{c}{c + km} \implies c(y) = c_0 - \frac{K_{resp}}{v} y \text{ (linear)}. \quad (4.13)$$

Für  $c \ll km$  erhält man entsprechend

$$0 = -v \frac{d}{dy}c - K_{resp} \frac{c}{km} \implies c(y) = c_0 \cdot e^{-\frac{K_{resp}}{v} y} \text{ (exponentiell)}. \quad (4.14)$$

Wird die Sauerstoffkonzentration über eine Tidenperiode gemittelt, so resultiert ein geglättetes Profil mit exponentieller Abnahme in der Tiefe (siehe Abb. 4.10(e),(f)) und zeigt damit diffusiven Charakter (siehe oben). Analoge Aussagen gelten für die Profile der minimalen und maximalen Konzentration (gepunktete bzw. gestrichelte Kurven in Abb. 4.9(b)-(f) und 4.10(e),(f)), es können jedoch auf sehr kurzen Distanzen (weniger als  $100\mu\text{m}$ ) Konzentrationsunterschiede von Faktoren  $> 10^2$  auftreten (vgl. Abb. 4.9(d)). Betrachtet man das Profil der Varianzen (Abb. 4.10(c),(d)), so zeigt sich, daß die Sauerstoffkonzentration im oberen Bereich relativ kleinen und im unteren Bereich relativ hohen Schwankungen unterliegt. Außerdem fällt auf, daß die Varianz am oberen Rand ebenfalls merkbar variiert. Allgemein kann angenommen werden, daß die tiefere Sedimentzone für große Zeiträume anoxische Bedingungen aufweist. Einen Hinweis gibt hierauf die Betrachtung lokaler Konzentrationschwankungen im Sediment (siehe Abb. 4.11).

Die unterschiedlichen Permeabilitäten der beiden Proben verursachen unterschiedliche maximale Wasserflüsse gekoppelt mit einem unterschiedlichen Sauerstofftransport. Als Folge davon erreicht in der advektiven Phase ein signifikanter Teil des Sauerstoffs in Probe *A* den unteren Modellrand, wohingegen in Probe *B* selbst bei höchstem Druckgradienten der Sauerstoff praktisch vollständig konsumiert wird, bevor er den unteren Gitterrand erreicht.



**Abbildung 4.10: Sauerstoffverteilung im Tidenzyklus II.** Wieder zeigt die linke Spalte die Situation in Probe A und die rechte die von Probe B. (a) und (b) bzw. (c) und (d) zeigen die relative Varianz der Sauerstoffkonzentration  $v(z) = \frac{1}{T} \int_{t=0}^T (1 - \frac{c_t(z)}{\bar{c}(z)})^2 dt$ , wobei  $\bar{c}(z)$  die durchschnittliche Konzentration in  $z \in \mathcal{Z}$  und  $T$  die Dauer eines Tidenzyklus bezeichnet. (e) und (f) zeigen den zeitlich gemittelten Sauerstoffgradienten. In den Abbildungen steht die durchgezogene Linie für den Mittelwert (pro Zeile), die gestrichelte Linie für den Maximal- und die gepunktete für den Minimalwert.

#### 4.2.4 Ergebnisse

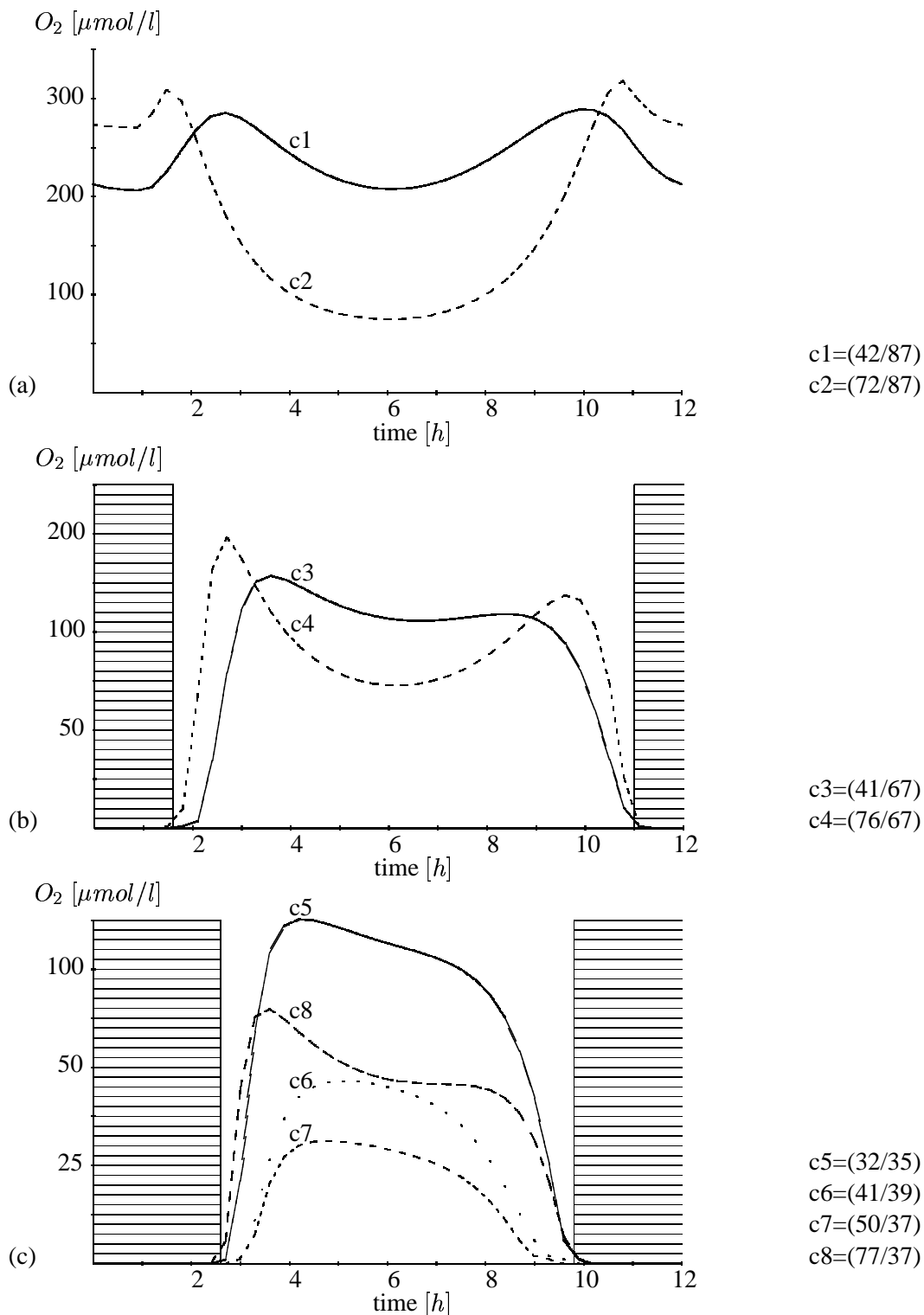
Die Ergebnisse dieses Modellansatzes führen zu einigen Schlußfolgerungen bezüglich dynamischer Prozesse in tidalen Sedimenten; insbesondere das Zwischenspiel mikrobieller, geochemischer und hydrodynamischer Prozesse wird klarer:

1. Die mikrobiellen Bedingungen direkt unter der Sedimentoberfläche sind stabiler als in tieferen Bereichen, an denen, bedingt durch die tidalen Einflüsse, ein Wechsel zwischen oxidischer und anoxischer Situation stattfindet. Es ist deshalb möglich, daß aerobe und anaerobe Metabolismen alternieren oder bestimmte physiologische Aktivitäten von Mikroorganismen während der oxidischen Phase limitiert oder unterbunden werden (Fründ und Cohen 1992; Jørgensen und Revsbech 1983). Es wurde gezeigt, daß diese Periode abhängig ist von der lokalen und der globalen Porenraumgeometrie, wobei die globale Porenraumgeometrie ganz wesentlich die Eindringtiefe des *in situ* produzierten Sauerstoffs beeinflußt. Dies ist ein Beispiel für das Phänomen, daß strukturabhängige Nährstoff-/Komponentenverteilung mikrobielle Kolonisierung impliziert.
2. Die Modelluntersuchungen zeigen, daß mikrobielle Aktivitäten, strukturelle Eigenschaften sowie zeitenabhängige Variationen des hydraulischen Impulses die Verteilungsmuster gelöster Substanzen entscheidend in ihrer Dynamik beeinflussen; für eine genauere Analyse dieser Prozesse bedarf es jedoch umfangreicher experimenteller Meßdaten mit hoher zwei- bzw. dreidimensionaler räumlicher Auflösung. Analysegeräte, die hierzu in der Lage sind, werden zur Zeit auf der Basis von methodischen Voruntersuchungen mit vielversprechenden Ergebnissen entwickelt (DeLeo et al. 1997; Glud et al. 1996) und standen deshalb noch nicht zur Verfügung. Neben tidalen Einflüssen kann ein (nicht notwendig vertikaler) advektiver Fluß auch durch topographische Reliefvariationen an der Sedimentoberfläche hervorgerufen werden (Huettel et al. 1998).
3. Das zeitlich gemittelte Konzentrationsprofil (Abb. 4.10(e) bzw. (f)) scheint ein diffusiv kontrolliertes System widerzuspiegeln, obwohl es eine signifikante advektive Phase gibt. In geochemischen Studien über Substanzen im Porenwasser werden gemessene Gradienten dazu verwendet, die Diffusionskonstante zu bestimmen (Jørgensen und Revsbech 1983). Die Austauschraten, die mit diesen Werten berechnet werden, weisen jedoch Diskrepanzen mit der beobachteten Flußmenge auf, da der wesentliche Einfluß der advektiven Phase nicht berücksichtigt wird. Hier liefert das Modell eine mögliche Erklärung für diese Differenzen. Zudem ist die Penetrationstiefe des Sauerstoffs ausschließlich durch die interne Struktur in der advektiven Phase bestimmt.

Der globale diffusive Charakter des Systems zeigt, daß ein Modellansatz durch diffusive Terme durchaus brauchbare Ergebnisse liefern kann, wenn Diffusionskonstante und Raumskalierung entsprechend gewählt werden. Sollen jedoch Prozesse auf mikroskaligem Raum untersucht werden, so muß der advektive Charakter berücksichtigt werden.

4. Transportexperimente mit gelöstem Sauerstoff in realen Sedimentstrukturen liefern qualitativ gleichwertige Ergebnisse (Glud et al. 1996; Ziebis et al. 1996). Dennoch decken die gemachten Modellannahmen das gesamte Spektrum der intrinsischen Prozesse bei weitem nicht ab. Nicht berücksichtigt wurden beispielsweise
  - tidale Strömungen, die einen Transport und Austausch innerhalb der Wassersäule sowie einen partikulären Transport induzieren,

- Oszillationen in der Strömung, die durch Wind und Wellen verursacht werden und ähnlichen Einfluß wie die Gezeiten aufweisen (Rutgers van der Loeff 1981; Glud et al. 1994),
- Tag-Nacht-Zyklen sowie wechselnde Wetterbedingungen, die die Sauerstoffproduktion *in situ* zusätzlich beeinflussen,
- wechselnde Porosität verbunden mit Variationen des Druckgradienten als eine Funktion von Wassertiefe und -strömungen (Amos et al. 1998).



**Abbildung 4.11: Lokale Konzentrationen im Tidenzyklus.** Die Abbildungen (a)-(c) zeigen die Sauerstoffkonzentration ausgewählter Zellen (Angabe in Gitterkoordinaten) im Porenraum. (a) Konzentrationsverhalten nahe der Sedimentoberfläche (0.26mm): permanente Sauerstoffpräsenz. (b) Konzentrationsverhalten in der oberen Sedimentschicht (0.68mm): kurze anoxische Situation. (c) Konzentrationsverhalten in der unteren Sedimentschicht (1.3mm): Wechsel zwischen oxidischer und anoxischer Situation. Die schraffierte Fläche in (b) und (c) kennzeichnet die anoxische Phase.

# Kapitel 5

## Strukturverändernde Prozesse

Neben den vorgestellten chemischen Reaktionen gibt es eine Reihe physikalischer Prozesse, die ebenfalls einen wesentlichen Einfluß auf die Bildung von Konzentrationsmustern im Sediment haben. Hierzu gehören beispielsweise Ausfällungs- und Lösungsprozesse, die den Porenraum nachhaltig in seiner Struktur verändern können (siehe Beispiel in 5.6). Weiter existieren viele Bakterienarten, die sich durch die Bildung eines Biofilmes in ihrer Umgebung ein Habitat schaffen, in dem sie in, unter normalen Umständen, toxischen bzw. stark variablen Umgebungen überleben können (Jørgensen und Revsbech 1983).

### 5.1 Der Durchlässigkeitswert

So unterschiedlich diese Prozesse auch sein mögen, sie haben den gleichen Effekt: eine Strukturänderung des Porenraumes. Spontan könnte man Bedingungen bilden, unter denen *freie* und *Hinderniszellen* ineinander übergehen. Dies hat jedoch den Nachteil, daß zur Simulation von teildurchlässigen Bereichen komplizierte Belegungsmuster im Porenraum erzeugt werden müssen. Dies verlangt nicht nur immens große Gitter und einen erheblichen Implementierungsaufwand<sup>1</sup>, sondern stellt sich als äußerst problematisch dar, wenn die Durchlässigkeit beliebig geändert werden soll. Hier bietet es sich an, eine Durchlässigkeit  $w \in ]0, 1[$  für die teildurchlässigen Zellen zu setzen. Die herabgesetzte Zellporosität bedeutet (auf die ganze Zelle bezogen) eine geringere Dichte  $\rho(z) = \rho \cdot w(z)$ . Die Zellstruktur aus (Def. 2.6) wird entsprechend erweitert:

**Definition 5.1:** *Durchlässigkeitswert*

Eine Zelle mit Durchlässigkeitswert  $w = \begin{Bmatrix} ]0, 1[ \\ 1 \\ 0 \end{Bmatrix}$  heißt  $\begin{Bmatrix} \text{durchlässig} \\ \text{belegt} \\ \text{Hindernis} \end{Bmatrix}$ , bzw.  $\begin{Bmatrix} d \\ b \\ H \end{Bmatrix}$  wenn der Anteil der transportierten Partikel  $w$  und der Anteil reflektierter Partikel  $1 - w$  beträgt. Im weiteren heißt die Menge  $Struc = \{\text{durchlässig}, \text{belegt}, \text{Hindernis}\}$  bzw.  $Struc = \{d, b, H\}$  Zellstruktur.

**Bemerkung 5.1:** Die Unterscheidung zwischen durchlässigen und Hinderniszellen erfolgt aus Stabilitätsgründen. Die Einführung des Zustandes *belegt* sei hier vorweggenommen, siehe dazu Abschnitt 5.2.

---

<sup>1</sup>Geschicktes Anordnen von *freien* und *Hinderniszellen* erlaubt die Konstruktion geringerer Porositäten. Da jedoch der gesamte Porenraum verbunden sein muß, ist die Anzahl der realisierbaren Durchlässigkeiten geprägt durch die Gittergröße.

Zur Berechnung der Strömung muß die Transitionsfunktion der Bewegung erweitert werden. Die Kollisionsfunktion bleibt erhalten, jedoch müssen im LBA für durchlässige Zellen mit  $w < 1$  jeweils neue Kollisionsmatrizen berechnet werden, da diese dichteabhängig sind. Zu große Dichteabweichungen führen im LBA zu Skalierungsproblemen (siehe Glg. (2.20)).

Die Transitionsfunktion der Bewegung aus Def. 2.7 wird erweitert zu

$$(T'_B(h_0, \dots, h_6))_i = \begin{cases} f_{i,0}, & \text{falls } s_0 = H \\ f_{|i+3|,0}, & \text{falls } s_0 = d \wedge s_i = H \\ f_{|i+3|,i}, & \text{falls } s_0 = d \wedge w_0 = w_i \\ f_{|i+3|,i} + \left(1 - \frac{w_i}{w_0}\right) f_{|i+3|,0}, & \text{falls } s_0 = d \wedge w_0 > w_i \\ f_{|i+3|,i} \cdot \frac{w_0}{w_i}, & \text{falls } s_0 = d \wedge w_0 < w_i \end{cases} \quad (5.1)$$

Die durch die Durchlässigkeit simulierte verringerte Zellfläche muß auch bei den Transportprozessen beachtet werden. Bezeichne hier  $c_i$  eine Stoffkonzentration in der Zelle  $c(z + p_i)$ , dann wird die Diffusion zu (vgl. Glg. 3.5)

$$Diffusion(z, z + p_i, t) = c_i^{t+\Delta t} - c_0^t = \Delta t \cdot c_{Diff} \frac{D_c}{w_0^t} \cdot (c_i^t w_i^t - c_0^t w_0^t) \quad (5.2)$$

und die Advektion entsprechend zu (vgl. Glgn 3.8 und 3.10)

$$Advektion(z, z + p_i, t) = \Delta t c_{Adv} \frac{1}{w_0^t} (f_{f_{ix}, |i+3|, i}^t - f_{f_{ix}, i, 0}^t) \cdot \gamma_i^t, \\ \text{mit } \gamma_i^t = \begin{cases} c_0^t w_0^t, & \text{falls } v_{z \rightarrow p_i} \geq 0 \\ c_i^t w_i^t & \text{sonst.} \end{cases} \quad (5.3)$$

Da sich die Reaktionen auf die Stoffkonzentrationen beziehen, bleiben diese invariant. In einem nächsten Schritt lassen sich strukturverändernde Prozesse integrieren.

Es kommt zur Ausfällung einer chemischen Substanz, wenn die maximale Konzentration (etwa das doppelte der Sättigungsgrenze) überschritten wird. Ein Teil der Substanz wird abgelagert, wodurch die Konzentration des gelösten Materials sowie die Durchlässigkeit abnimmt. Wie stark die Durchlässigkeit zurückgeht, hängt von dem Volumen ab, daß die ausgefallene Substanz verdrängt. Sinkt die Konzentration unterhalb eines Minimums kehrt sich der Prozeß um.

Bei der Bildung von Biofilmen findet ein recht ähnlicher Prozeß statt. Bildet sich ein ausreichend großer Bakterienstamm, so fixiert sich der abgesonderte Film an den umliegenden Sedimenten. Das Sekret senkt die lokale Durchlässigkeit herab und je nach Art der Mikroorganismen ändern sich auch die Diffusionseigenschaften innerhalb des Filmes (Jørgensen 1982). Sterben die Bakterien ab, so wird das ausgesonderte Sekret nicht mehr erneuert und baut sich ab.

Im Unterschied zur Ausfällung bleiben die Mikroorganismen auch nach dem „Festsetzen“ aktiv und nehmen an den Reaktionen teil. Die Durchlässigkeit sinkt bei vollständiger Ablagerung nicht auf Null, sondern auf den Durchlässigkeitswert des Biofilmes. Beide Prozesse finden vorwiegend auf Oberflächen von Sedimenten statt. Es bleibt zu klären, ob diese Eigenschaft zusätzlich zu implementieren ist, oder sich bereits aus den lokalen Strömungsbedingungen ergibt.

Ein dritter Anwendungsbereich ist die Simulation poröser Medien, deren Feinstruktur die Zellgröße weit unterschreitet (siehe Abb. 6.1). Die Durchlässigkeit kann in diesem Fall auch Informationen über die invariante Struktur enthalten. Aus diesem Grund wird für die durchlässigen Zellen eine Anfangsdurchlässigkeit  $w_0 \in ]0, 1]$  gesetzt (für Hinderniszellen sei  $w_0 = 0$ ).

Generell lassen sich diese Prozesse koppeln, es sei jedoch die Einschränkung gemacht, daß innerhalb der Biofilme keine Ablagerungen stattfinden.



## 5.2 Strukturmodifikation

Zur Herleitung der Transitionsfunktion strukturverändernder Prozesse zunächst folgende Definition.

### Definition 5.2: Strukturmodifikation

Für das Transport-Reaktions-Modell mit Strukturmodifikation werden die Stoffkonzentrationen aus (3.1) erweitert zu

$$\bar{c} := \{c \in \bar{c}_1 \times \bar{c}_2 \times \dots \times \bar{c}_k \mid \bar{c}_i = [0, \infty[, i = 1, \dots, k\}$$

Zusätzlich wird der Variablenraum erweitert um die Ablagerungskonzentrationen (bezogen auf die Zellfläche)

$$\mathcal{D} := \{d \in \mathcal{D}_1 \times \mathcal{D}_2 \times \dots \times \mathcal{D}_k \mid \mathcal{D}_i = [0, \frac{\rho_i}{M_i}], i = 1, \dots, k\}.$$

sowie den aktuellen ( $w^t \in [0, 1]$ ) und den Anfangsdurchlässigkeitswert ( $w_0 \in [0, 1]$ ). Der Variablenraum wird somit zu

$$\bar{\mathcal{V}} := [0, 1]^7 \times Struc \times \bar{c} \times \mathcal{D} \times [0, 1]^2$$

Es bezeichnet  $k$  die Anzahl der im Modell vorkommenden Stoffe (vgl. Glg. 3.1),  $\rho_i$  die Dichte und  $M_i$  die Molmasse der  $i$ . Komponente. Ferner bezeichne

$$\mathfrak{W} := \{\mathfrak{w}_1, \dots, \mathfrak{w}_k\} \text{ mit } \mathfrak{w}_i = \begin{cases} ]0, 1[, & \text{falls } i. \text{ Komponente Mikroorganismus} \\ 0 & \text{sonst} \end{cases}$$

die Durchlässigkeit bei vollständiger Strukturmodifikation (Ablagerung bzw. Biofilmproduktion). Als Durchlässigkeit  $w_f$  sei der Anteil der Zelle bezeichnet, der nicht durch Strukturmodifikation beeinflusst ist, d.h.

$$w_f^t(z) := w^t(z) - \sum_{i=1}^k d_i^t(z) \frac{M_i}{\rho_i} \mathfrak{w}_i.$$

**Bemerkung 5.2:** An dieser Stelle sei darauf hingewiesen, daß  $\mathfrak{w}$  eine Konstante beschreibt, die von der Eigenschaft einer Komponente abhängt, während  $w$  die Durchlässigkeit einer Zelle bezeichnet, die sich u.a. aus den lokalen Werten aller Komponenten ergibt.

**Bemerkung 5.3:** Während  $c$  die Stoffkonzentration der Zelle bezogen auf die zur Verfügung stehende Zellfläche ( $w$ ) angibt, bezeichnet  $d$  die Konzentration bzgl. der gesamten Zellfläche. Wichtig ist die Erweiterung des Definitionsbereiches der Konzentrationen der gelösten Substanzen, die erst die Strukturmodifikation ermöglicht. Es sei jedoch angemerkt, daß Überschreitungen der maximalen Konzentration bei der Berechnung eines Iterationsschrittes vorkommen können. Diese werden in den folgenden Rechnungen berücksichtigt.

**Bemerkung 5.4:** Die Ablagerungskonzentrationen  $d \in \mathcal{D}$  erfüllen die Bedingungen

$$\forall t \geq 0, z \in \mathcal{Z} : d_i^t(z) \frac{M_i}{\rho_i} \leq w_0(z) \wedge \sum_{i=1}^k d_i^t(z) \frac{M_i}{\rho_i} \leq w_0(z). \quad (5.4)$$

Die Durchlässigkeit sowie freie Durchlässigkeit lassen sich explizit angeben mit

$$\begin{aligned} w(z) &= w_0(z) - \sum_{i=1}^k d_i^t(z) \frac{M_i}{\rho_i} (1 - \mathfrak{w}_i) \\ w_f(z) &= w_0(z) - \sum_{i=1}^k d_i^t(z) \frac{M_i}{\rho_i} \end{aligned} \quad (5.5)$$

Eine Strukturveränderung tritt auf, falls die maximale Konzentration überschritten bzw. eine minimale Konzentration unterschritten wird. Die Konzentrationsänderung im Struktur-Iterationsschritt läßt sich dann formulieren mit

$$\begin{aligned} c^t(z) > c^{max} &\Rightarrow c^{t+1}(z) = c^t(z) - \alpha c^{max}, \\ c^t(z) < c^{min} &\Rightarrow c^{t+1}(z) = c^t(z) + \beta c^{min}, \end{aligned} \quad (5.6)$$

wobei  $0 < \alpha, \beta < c^{max}$  zu bestimmende Werte beschreiben. Zur Vermeidung alternierender Modifikationen muß gelten

$$(1 + \beta)c^{min} < c^{min} < (1 - \alpha)c^{max} < c^{max} \implies \begin{cases} 0 < \alpha < 1 - \frac{c^{min}}{c^{max}} \\ 0 < \beta < (1 - \alpha) \frac{c^{max}}{c^{min}} - 1. \end{cases} \quad (5.7)$$

Eine Strukturveränderung bewirkt ebenso eine Änderung des (freien) Zellvolumens, wodurch sich die Konzentrationen sämtlicher gelöster Stoffe ändern. Aus diesem Grund kann z.B. die Ablagerung einer Substanz die Ablagerung einer zweiten zur Folge haben, wenn die zweite eine Konzentration nahe des Maximums aufweist. Die Umsetzung aller Substanzen in einem Transport-Reaktionsschritt wird erreicht, indem man die Strukturveränderungen so lange wiederholt, bis keine Substanz mehr ein Kriterium aus (5.6) erfüllt. Für jeden Prozeß (Ablagerung und Auslösung) gilt es zudem Bereichsfehler zu vermeiden. Der Struktur-Iterationsschritt läßt sich formulieren zu

**Satz 5.1: Strukturmodifikation**

Seien  $\bar{\mathcal{S}}, \bar{\mathcal{C}}, \mathcal{D}$  und  $\mathfrak{W}$  aus Def. 5.2,  $\phi_i := \frac{M_i}{\rho_i} (1 - \mathfrak{w}_i)$  und sei  $\mathcal{L} : \bar{\mathcal{V}} \rightarrow \bar{\mathcal{V}}$  der Strukturschritt, wobei für  $z \in \mathcal{Z}$  und  $t \in \mathbb{N}$  gelte

$$\mathcal{L}(a) = \begin{cases} \mathcal{L}(L_1(a, i)), & \text{falls } \exists i \in \{1, \dots, k\} : c_i^t(z) > c_i^{max} \\ \mathcal{L}(L_2(a, i)), & \text{falls } \exists i \in \{1, \dots, k\} : c_i^t(z) < c_i^{min} \\ a, & \text{sonst} \end{cases}$$

Die Funktion  $L_1$  beschreibt dann den Fall der Konzentrationsüberschreitung und  $L_2$  den Fall der Konzentrationsunterschreitung und es gilt

$$L_1(a, i) = \begin{cases} \bar{f} = f, \bar{s} = s \\ \bar{c}_i = c_i - \Delta_i^{(1)} \\ \bar{c}_j = c_j (1 - \delta_i^{(1)} \phi_i)^{-1}, \text{ f.a. } j \neq i \\ \bar{d}_j = d_j, \text{ f.a. } j \neq i \\ \bar{d}_i = d_i + \delta_i^{(1)} w \\ \bar{w} = w (1 - \delta_i^{(1)} \phi_i) \end{cases}$$

mit

$$\Delta_i^{(1)} := \begin{cases} \min\{\alpha c_i^{max}, \frac{\rho_i}{M_i} \frac{w_f(1-\phi_i c_i)}{w-w_f+\mathfrak{w}_i}\}, & \text{falls } \mathfrak{w}_i > 0 \\ \alpha c_i^{max} & \text{sonst} \end{cases} \quad \text{und} \quad \delta_i^{(1)} = \frac{\Delta_i^{(1)}}{1 - \phi_i(c_i - \Delta_i^{(1)})}.$$

Analog gilt

$$L_2(a, i) = \begin{cases} \bar{f} = f, \bar{s} = s\bar{c}_i = c_i + \Delta_i^{(2)} \\ \bar{c}_j = c_j(1 + \delta_i^{(2)}\phi_i)^{-1}, \text{ f.a. } j \neq i \\ \bar{d}_j = d_j, \text{ f.a. } j \neq i \\ \bar{d}_i = d_i - \delta_i^{(2)}w \\ \bar{w} = w(1 + \delta_i^{(2)}\phi_i) \end{cases}$$

mit

$$\Delta_i^{(2)} := \min\{\beta c_i^{min}, d_i \frac{1 - \phi_i c_i}{w + \phi_i d_i}\} \quad \text{und} \quad \delta_i^{(2)} = \frac{\Delta_i^{(2)}}{1 - \phi_i(c_i + \Delta_i^{(2)})}.$$

**Beweis:** Im Fall der Konzentrationsüberschreitung gilt für ein entsprechendes  $i \in \{1, \dots, k\}$  in einer Zelle nach (5.6)

$$\bar{c}_i = c_i - \Delta_i^{(1)}, \quad \Delta_i^{(1)} \leq \alpha c_i^{max} \quad (5.8)$$

$$\bar{c}_j = c_j \frac{w}{\bar{w}}, \text{ f.a. } j \neq i \quad (5.9)$$

$$\bar{c}_i = (c_i - \delta_i^{(1)}) \frac{w}{\bar{w}}, \quad \delta_i^{(1)} > 0 \quad (5.10)$$

$$\bar{d}_j = d_j, \text{ f.a. } j \neq i \quad (5.11)$$

$$\bar{d}_i = d_i + \delta_i^{(1)}w, \quad \delta_i^{(1)} > 0 \quad (5.12)$$

$$\bar{w} = w_0 - \sum_{i=1}^k \bar{d}_i \phi_i \quad (5.13)$$

Aus (5.12) und (5.13) folgt unmittelbar

$$\bar{w} = w_0 - \sum_{i=1}^k d_i \phi_i - w \delta_i^{(1)} \phi_i = w(1 - \delta_i^{(1)} \phi_i). \quad (5.14)$$

(5.8) und (5.10) führen zu

$$\begin{aligned} (c_i - \Delta_i^{(1)}) &= (c_i - \delta_i^{(1)}) \frac{w}{\bar{w}} \\ \Leftrightarrow (c_i - \Delta_i^{(1)})(1 - \delta_i^{(1)} \phi_i) &= c_i - \delta_i^{(1)} w \\ \Leftrightarrow \delta_i^{(1)} &= \Delta_i^{(1)} (1 - \phi_i(c_i - \Delta_i^{(1)}))^{-1}. \end{aligned} \quad (5.15)$$

Ein Bereichsfehler tritt auf, wenn  $\bar{w}_f < 0$  bzw. die Bedingung (5.4) nicht erfüllt ist, d.h. es muß gelten

$$\begin{aligned} \sum_{i=1}^k \bar{d}_i \frac{M_i}{\rho_i} &\leq w_0 \\ \Leftrightarrow \delta_i^{(1)} &\leq \frac{\rho_i}{M_i} \frac{1}{w} (w_0 - \sum_{i=1}^k d_i \frac{M_i}{\rho_i}) = \frac{\rho_i}{M_i} \frac{w_f}{w}. \end{aligned} \quad (5.16)$$

Einsetzen in (5.15) und umformen führt zu

$$\begin{aligned} \Delta_i^{(1)} \left( \frac{w}{w_f} - 1 + \mathfrak{w}_i \right) &\leq \frac{\rho_i}{M_i} (1 - \phi_i c_i) \\ \mathfrak{w}_i > 0 \quad \Delta_i^{(1)} &\leq \frac{w_f}{w - w_f + \mathfrak{w}_i} \frac{\rho_i}{M_i} (1 - \phi_i c_i) \end{aligned} \quad (5.17)$$

woraus die Behauptung folgt.

Im Fall der Konzentrationsunterschreitung gilt für ein entsprechendes  $i \in \{1, \dots, k\}$  in eine Zelle nach (5.6)

$$\bar{c}_i = c_i + \Delta_i^{(2)}, \quad \Delta_i^{(2)} \leq \beta c_i^{min} \quad (5.18)$$

$$\bar{c}_j = c_j \frac{w}{\bar{w}}, \quad \text{f.a. } j \neq i \quad (5.19)$$

$$\bar{c}_i = (c_j + \delta_i^{(2)}) \frac{w}{\bar{w}}, \quad \delta_i^{(2)} > 0 \quad (5.20)$$

$$\bar{d}_j = d_j, \quad \text{f.a. } j \neq i \quad (5.21)$$

$$\bar{d}_i = d_i - \delta_i^{(2)} w, \quad \delta_i^{(2)} > 0 \quad (5.22)$$

$$\bar{w} = w_0 - \sum_{i=1}^k \bar{d}_i \phi_i \quad (5.23)$$

Analog zu oben folgt aus (5.22) und (5.23) unmittelbar

$$\bar{w} = w(1 + \delta_i^{(2)} \phi_i) \quad (5.24)$$

sowie mit (5.18) und (5.20)

$$(c_i + \Delta_i^{(2)}) = (c_i + \delta_i^{(2)}) \frac{w}{\bar{w}}$$

$$\Leftrightarrow (c_i + \Delta_i^{(2)})(1 + \delta_i^{(2)} \phi_i) = c_i + \delta_i^{(2)} \quad (5.25)$$

$$\Leftrightarrow \delta_i^{(2)} = \Delta_i^{(2)} (1 - \phi_i (c_i + \Delta_i^{(2)}))^{-1}.$$

Bei dem Auslösungsprozeß können die Ablagerungskonzentrationen negativ werden, da sich  $\delta_i^{(2)}$  aus den gelösten Konzentrationen berechnet. Vermieden wird dies durch die Forderung

$$\bar{d}_i \geq 0 \quad (5.26)$$

Einsetzen in (5.25) und umformen führt schließlich zu

$$\Delta_i^{(2)} \leq d_i \frac{1 - \phi_i c_i}{w + \phi_i d_i}. \quad (5.27)$$

q.e.d.

**Bemerkung 5.5:** Im Fall  $k = 1$  ergibt sich die Ablagerungskonzentration direkt aus der Zelldurchlässigkeit

$$d_1 = \frac{\rho_1}{M_1} \frac{w_0 - w}{1 - \mathfrak{w}_1}, \quad w_f = w - (w_0 - w)\mathfrak{w}_1.$$

Für die Abschätzungen aus Satz 5.1 gilt bei Biofilmen ( $\mathfrak{w}_i > 0$ )

$$\begin{aligned} \Delta_1^{(1)} &\leq \frac{\rho_i}{M_i} \frac{w - (w_0 - w)\mathfrak{w}_1}{w_1 + (w_0 - w)\mathfrak{w}_1} (1 - \phi_1 c_1) && \text{(Überschreitung)} \\ \Delta_1^{(2)} &\leq \frac{\rho_1}{M_1} \frac{w_0 - w}{w_0(1 - \mathfrak{w}_1)} (1 - \phi_1 c_1) && \text{(Unterschreitung)} \end{aligned} \quad (5.28)$$

und bei der Mineralisierung ( $\mathfrak{w}_1 = 0$ )

$$\begin{aligned} \Delta_1^{(1)} &= \alpha c_1^{max} && \text{(Überschreitung)} \\ \Delta_1^{(2)} &\leq \frac{w_0 - w}{w_0} \left( \frac{\rho_1}{M_1} - c_1 \right) && \text{(Unterschreitung)} \end{aligned} \quad (5.29)$$

Eine Mehrfachanwendung des Strukturschrittes entfällt, d.h.

$$\exists i \in \{1, \dots, k\} \text{ nach Satz 5.1} \Rightarrow \mathcal{L}(a) = L_j(a, i), \quad j \in \{1, 2\}.$$

**Bemerkung 5.6:** Eine Änderung der Zelldurchlässigkeit bedeutet eine Änderung von Zelldichte und -masse. Die Partikelbewegung in (5.1) beschreibt den Zustand bei konstanter Zelldichte. Die Dichtenänderung erfolgt in einem Iterationsschritt, wodurch eine Massenkorrektur nötig wird.

### 5.3 Transformation des Porenraumes

Numerisch kritisch bleibt der Fall  $w_f \rightarrow 0$ , da die Faktoren  $(1 - \delta_i^{(1)} \phi_i)$  bei zunehmender Ablagerung gegen Null streben, falls vorwiegend eine Substanz deponiert wird. Liegt kein Biofilm vor, so folgt aus der Beziehung  $w = w_f$  eine Polstelle im Grenzfall für die Strömungs- und Transportiterationen (5.1–5.3). Vermeiden läßt sich dieses, indem man eine untere Schranke für  $w_f$ , den *minimalen Durchlässigkeitswert*  $\varepsilon_w$ , einführt, der die Bedingung

$$0 \leq \min_{z \in \mathcal{Z}} \{w_f(z)\} < \varepsilon_w \leq \min_{z \in \mathcal{Z}} \{w_0(z)\} \quad (5.30)$$

erfüllt. Bei Unterschreiten dieser Schranke wird in einem Schritt eine vollständige Ablagerung der Substanz vorgenommen, die die höchste relative Konzentration aufweist, d.h. für  $c_{i^*}$  mit

$$i^* := \max_{i=1, \dots, k} \left\{ i \mid \frac{c_i}{c_i^{max}} \right\}. \quad (5.31)$$

Die Konzentration der Zelle wird auf Null gesetzt ( $\bar{c}_{i^*} = 0$ ) und die Ablagerung maximiert ( $\sum_i \bar{d}_i \frac{M_i}{\rho_i} = w_0$ ). Die Ablagerungsmenge bzw. die Konzentrationsänderung der Ablagerungsmenge beträgt dann (vgl. Satz 5.1)

$$\delta_{i^*}^{(T1)} w = \frac{\rho_{i^*}}{M_{i^*}} w_f, \quad \Delta_{i^*}^{(T1)} = c_{i^*}. \quad (5.32)$$

Hierbei ist es möglich, daß in der Zelle selbst nicht ausreichend Substanz vorhanden ist, da dieser Schritt unterhalb des Konzentrationsmaximums stattfindet. Deshalb werden die Konzentrationen der Nachbarzellen entsprechend herabgesetzt<sup>2</sup>. Eine solche Zelle ist dann vollständig mit einem Biofilm

<sup>2</sup>Die Diffusion gewährleistet in der Regel ausreichende Substratmengen in der Zellnachbarschaft.

und/oder Mineralen belegt und weist eine geringe Durchlässigkeit auf bzw. ist vollständig mineralisiert. Die Zellstruktur wird auf *belegt* gesetzt (vgl. Def. 5.1) und wird dann in den Iterationsschritten teils als durchlässige, teils als Hinderniszelle behandelt:

$s(z) = b$	$w(z) > 0$	$w(z) = 0$
LBA/LBGK	durchlässig	Hindernis
Transport	durchlässig	Hindernis
Reaktionen	durchlässig, beschränkt	Hindernis
Strukturmodifikation	Hindernis	Hindernis

**Tabelle 5.1: Auswertung belegter Zellen.** Hinderniszellen verhalten sich allen aufgeführten Iterationsschritten gegenüber invariant. Die Reaktionen werden für den Fall  $w(z) > 0$  bzgl. der Maximalkonzentration begrenzt, so daß es zu keiner weiteren Überschreitung kommen kann. Diese Annahme ist sinnvoll, wenn man bedenkt, daß eine Zelle mit maximalem Biofilm keinen Platz mehr für weitere Biomasse besitzt.

Dieser Prozeß läßt sich durch die folgenden zwei Funktionen beschreiben. Dabei steht  $M_1^Z$  für die Änderung des Zellzustandes in  $z$  und  $M_1^N$  für die Änderung in den Zuständen der Nachbarzellen  $z + p_j$ ,  $j = 1, \dots, 6$ .

$M_1^Z : \bar{\mathcal{V}} \rightarrow \bar{\mathcal{V}}$  mit

$$M_1^Z(a) := \begin{cases} \bar{f} = f, \bar{s} = \text{belegt} \\ \bar{c}_{i^*} = 0, \forall j \neq i^* : \bar{c}_j = \begin{cases} 0, & \text{falls } \bar{w} = 0 \\ \min\{c_j^{max}, c_j \frac{w}{\bar{w}}\} & \text{sonst} \end{cases} \\ \bar{d}_{i^*} = d_{i^*} + \frac{\rho_{i^*}}{M_{i^*}} w_f, \forall j \neq i^* : \bar{d}_j = d_j \\ \bar{w} = w_0 - \sum_{i=1}^k \bar{d}_i \frac{M_i}{\rho_i} (1 - \mathbf{w}_i) = w - w_f (1 - \mathbf{w}_{i^*}) \end{cases} \quad (5.33)$$

und

$M_1^N : (\bar{\mathcal{S}}^7, \{1, \dots, 6\}) \rightarrow \bar{\mathcal{S}}$  mit

$$M_1^N(a_0, \dots, a_6, j) := \begin{cases} \bar{f}(z + p_j) & = f(z + p_j) \\ \bar{s}(z + p_j) & = s(z + p_j) \\ \bar{c}_{i^*}(z + p_j) & = c_{i^*}(z + p_j) \left(1 - \left(\frac{\rho_{i^*}}{M_{i^*}} w_f(z) - c_{i^*}(z) w(z)\right) SC_{i^*}^{-1}(z)\right) \\ \bar{c}_i(z + p_j) & = c_i(z + p_j) + \gamma_i(z) (c_i^{max} - c_i(z + p_j)) SMC_i^{-1}(z) \\ & \text{f.a. } i \neq i^* \\ \bar{d}_i(z + p_j) & = d_i(z + p_j) \\ \bar{w}(z + p_j) & = w(z + p_j) \end{cases} \quad (5.34)$$

wobei  $a_i := a(z + p_i)$ ,  $\gamma_i(z) := \max\{c_i(z) w(z) - c_i^{max} \bar{w}(z), 0\}$ ,

$$SC_i(z) := \sum_{j=1}^6 c_i(z + p_j) w(z + p_j) \\ s(z + p_j) = d$$

und

$$SMC_i(z) := \sum_{j=1}^6 (c_i^{max} - c_i(z + p_j)) w(z + p_j) \\ s(z + p_j) = d$$

**Bemerkung 5.7:** Für  $c_{i^*}$  werden die zur Ablagerung benötigten Stoffmengen gleichmäßig (in Relation) aus den anliegenden Zellen abgezogen bzw. überschüssige Konzentrationen verbleibender Stoffe  $j \neq i^*$  in der Zelle  $z$  gleichmäßig (in Relation) auf die anliegenden Zellen verteilt. Dieser Schritt ist notwendig, da f.a.  $i = 1, \dots, k$  die Bedingung  $c_i(z) \in C_i$  gelten muß und belegte Zellen im weiteren Iterationsschritt nicht mehr berücksichtigt werden.

Es treten in den angrenzenden Zellen keine Bereichsfehler in den Konzentrationen auf, wenn gilt

$$\bar{c}_{i^*}(z + p_j) \geq 0 \left( \stackrel{(5.34)}{\iff} SC_{i^*}(z) \geq \frac{\rho_{i^*}}{M_{i^*}} w_f(z) - c_{i^*}(z) w(z) \right) \quad (5.35)$$

und

$$\bar{c}_i(z + p_j) \leq c_i^{max} \left( \stackrel{(5.34)}{\iff} SMC_i(z) \geq \gamma_i(z) \text{ f.a. } i \neq i^* \right). \quad (5.36)$$

Die umgekehrte Strukturtransformation von *belegt* nach *durchlässig* soll erfolgen, wenn in der belegten Zelle eine Substanz  $i^*$  abgelagert ist und Nachbar einer Zelle ist, in der die minimale Konzentration von  $c_{i^*}$  unterschritten wird und keine Substanz mehr abgelagert ist ( $d_{i^*} = 0$ ).

**Bemerkung 5.8:** Diese Annahme bewirkt, daß die Porenraumstruktur robust gegenüber Konzentrationsfluktuationen reagiert und gewährleistet die Stabilität der Geometrie.

Da die belegten Zellen bei der Iterationsberechnung nicht berücksichtigt werden wird beim folgenden Ansatz die Situation von einer durchlässigen Zelle aus betrachtet. Es sei  $z$  eine solche durchlässige Zelle mit

$$s(z) = d \quad \wedge \quad c_{i^*}(z) < c_{i^*}^{min} \quad \wedge \quad d_{i^*}(z) = 0 \quad \wedge \quad \exists j : (s(z + p_j) = b \wedge d_{i^*}(z + p_j) > 0). \quad (5.37)$$

Die Lösung in  $z$  wird in Anlehnung zur Konzentrationsunterschreitung in Satz 5.1 formuliert:

$$M_2^Z : (\bar{V}^7) \rightarrow \bar{V} \text{ mit}$$

$$M_2^Z(a_0, \dots, a_6) := \begin{cases} \bar{f}(z) & = f(z) \\ \bar{s}(z) & = s(z) \\ \bar{c}_{i^*}(z) & = c_{i^*}(z) + \Delta_{i^*}^{(T2)}(z, z + p_j) \\ \bar{c}_i & = c_i(1 + \delta_{i^*}^{(T2)}(z, z + p_j)\phi_{i^*})^{-1} \text{ f.a. } i \neq i^* \\ \bar{d}_i(z) & = d_i(z) \text{ f.a. } i \\ \bar{w} & = w(1 + \delta_{i^*}^{(T2)}(z, z + p_j)\phi_{i^*})^{-1} \end{cases} \quad (5.38)$$

mit

$$\Delta_{i^*}^{(T2)}(z, z + p_j) := \min\left\{ \beta c_{i^*}^{min}, d_{i^*}(z + p_j) \frac{1 - \phi_{i^*} c_{i^*}(z)}{w + \phi_{i^*} d_{i^*}(z + p_j)} \right\} \quad (5.39)$$

und

$$\delta_{i^*}^{(T2)}(z, z + p_j) := \frac{\Delta_{i^*}^{(T2)}(z, z + p_j)}{1 - \phi_{i^*}(c_{i^*}(z) - \Delta_{i^*}^{(T2)}(z, z + p_j))}. \quad (5.40)$$

**Bemerkung 5.9:** Die Konzentrationsänderung der Strukturmodifikation und der Porenraumtransformation stehen in der Beziehung

$$\Delta_i^{(1)} = \min\{\alpha c_i^{max}, \Delta_i^{(T1)}\}; \Delta_i^{(2)} = \Delta_i^{(T2)}(z, z).$$

Die belegte Zelle ändert ihre Zellstruktur von *belegt* nach *durchlässig* und kann nun ihrerseits Substanzen lösen. Hierzu läßt sich die bereits definierte Strukturmodifikation verwenden

$$M_2^N : \begin{cases} (\bar{\mathcal{V}}^7, \{1, \dots, 6\}) & \rightarrow \bar{\mathcal{V}} \\ (a_0, \dots, a_6, j) & \mapsto \mathcal{L}(\bar{a}) \end{cases} \text{ mit} \quad (5.41)$$

$$\bar{a} := \begin{cases} \bar{f}(z + p_j) & = f(z + p_j) \\ \bar{s}(z + p_j) & = \text{durchlässig} \\ \bar{c}_i(z + p_j) & = c_i(z + p_j)(1 + \delta_{i^*}(z, z + p_j)\phi_{i^*})^{-1} \text{ f.a. } i \\ \bar{d}_{i^*}(z + p_j) & = d_{i^*}(z + p_j) - \delta_{i^*}(z, z + p_j)w(z + p_j) \\ \bar{d}_i(z + p_j) & = d_i(z + p_j) \text{ f.a. } i \neq i^* \\ \bar{w}(z + p_j) & = w(z + p_j)(1 + \delta_{i^*}(z, z + p_j)\phi_{i^*})^{-1} \end{cases}$$

mit  $\Delta_{i^*}(z, z + p_j)$  und  $\delta_{i^*}(z, z + p_j)$  wie oben. Die Strukturtransformationen zwischen *belegt* und *durchlässig* lassen sich zu einer Funktion zusammenfassen.

**Definition 5.3:** *Strukturtransformation*

Bezeichne  $a = (a_0, a_1, \dots, a_6)$  mit<sup>3</sup>  $a_i := a(z + p_i) \in m\bar{cV}$ , so heißt die Funktion  $\mathcal{M} : \bar{\mathcal{V}}^7 \rightarrow \bar{\mathcal{V}}^7$  *Strukturtransformation* mit

$$\mathcal{M}(a) := \begin{cases} (M_1^Z(a_0), \mathcal{M} \circ \mathcal{L} \circ M_1^N(a, 1), & \text{falls } s(z) = d \wedge w_f < \varepsilon_w \\ \dots, \mathcal{M} \circ \mathcal{L} \circ M_1^N(a, 6)) & \\ (M_2^Z(a_0), a_1, \dots, & \text{falls } s(z) = d \wedge \exists i, j \in \{1, \dots, 6\} : \\ a_{j-1}, M_2^N(a_j), a_{j+1}, \dots, a_6) & (c_i(z) < c^{min} \wedge d_i(z) = 0 \\ & \wedge s(z + p_j) = b \wedge d_i(z + p_j) > 0) \\ a & \text{sonst} \end{cases}$$

**Bemerkung 5.10:** Die Verknüpfung  $\mathcal{M} \circ \mathcal{L} \circ M_1^N$  im ersten Fall gewährleistet, daß Bereichsfehler in den Nachbarzellen durch entsprechende Strukturmodifikationen und –transformationen vermieden werden. Im zweiten Fall werden Bereichsfehler durch die Bedingung (5.39) vermieden.

**Bemerkung 5.11:** Die Integration der Bedingungen (5.35) und (5.36) in den Algorithmus ist ratsam, um rekursive Iterationsberechnungen zu vermeiden und um den Rechenaufwand zu begrenzen. Es gilt

$$\mathcal{M} \circ \mathcal{L} \left| \begin{array}{l} (5.35) \\ (5.36) \end{array} \right. \equiv id.$$

<sup>3</sup>entsprechend Bem. 2.3



Bezeichne  $id_{\mathcal{D}} = \times_{\mathcal{D}_i \in \mathcal{D}} id_{\mathcal{D}_i}$  die Identitätsfunktion auf den Ablagerungskonzentrationen  $\mathcal{D}$  und  $id_{[0,1]}$  die Identitätsfunktion auf dem Intervall  $[0, 1]$ . Die Transitionsfunktion wird für den Fall der Strukturmodifikation auf dem Resultat der bisherigen Funktion  $T^*$  ausgeführt.

$$\begin{aligned} \bar{T} &= (\mathcal{L} \circ (T^*, id_{\mathcal{D}}, id_{[0,1]}, id_{[0,1]})) \\ &= (\mathcal{L} \circ (T_K \circ T_{BS}, id_{Struc}, \times_{c_i \in \mathcal{C}} T_{c_i}, id_{\mathcal{D}}, id_{[0,1]}, id_{[0,1]})). \end{aligned} \quad (5.42)$$

Zur Vermeidung numerischer Fehler muß der Definitionsbereich der Transitionsfunktion jedoch erweitert werden zu  $\bar{T} : \bar{\mathcal{V}}^n \rightarrow \bar{\mathcal{V}}^n$ , wobei  $n = |\mathcal{P}|$  die Anzahl der relativen Nachbarn bezeichnet. So formuliert sich diese bei der Verwendung von Strukturtransformationen entsprechen zu

$$\begin{aligned} \bar{T} &= (\mathcal{M} \circ (T^*, id_{\mathcal{D}}, id_{[0,1]}, id_{[0,1]})) \\ &= (\mathcal{M} \circ (T_K \circ T_{BS}, id_{Struc}, \times_{c_i \in \mathcal{C}} T_{c_i}, id_{\mathcal{D}}, id_{[0,1]}, id_{[0,1]})). \end{aligned} \quad (5.43)$$

## 5.4 Technische Umsetzung

Bei der Umsetzung muß bedacht werden, daß jede Änderung im Porenraum eine Korrektur der Strömung erforderlich macht und in der Praxis einen hohen Rechenaufwand bedeutet. Dieser läßt sich in einem sinnvollen Rahmen halten, wenn die Korrekturen nur bei markanten Änderungen vorgenommen werden. Hier sei die Idee kurz skizziert:

Jeder Zelle wird neben dem Durchlässigkeitswert  $w$  ein zweiter Wert  $w_{akt}$  angeordnet. Während  $w$  dann die Durchlässigkeit bzgl. des Strömungsmusters beschreibt, gibt  $w_{akt}$  die aktuelle Durchlässigkeit bzgl. der Strukturmodifikation an. Überschreitet die Differenz  $|w - w_{akt}|$  einen vorgegebenen Schwellenwert, so erfolgt eine Korrektur der Strömung und der Gelöstkonzentrationen sowie ein Angleichen der Durchlässigkeiten (siehe Anhang B.7).

Der implementierte Algorithmus (Anhang B.8–B.10) verwendet diese Methode und beschränkt sich auf die Simulation von Mineralisierungs- und Lösungsprozessen einer Substanz, wodurch sich die Ablagerungskonzentration direkt aus dem Durchlässigkeitswert  $w$  (bzw.  $w_{akt}$ ) berechnen läßt (vgl. Bem. 5.5).

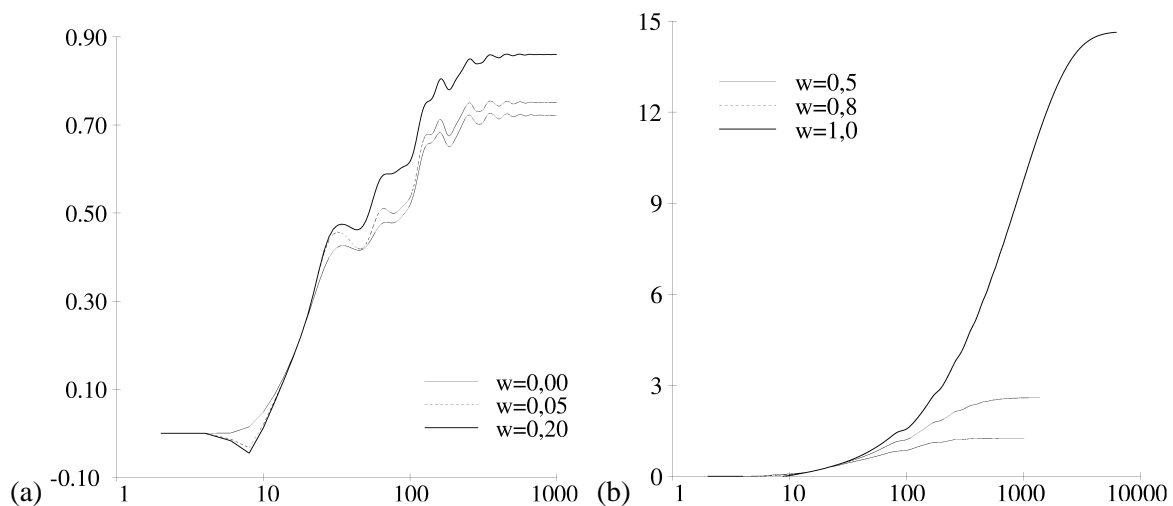
Der Datentyp Zelle ist dazu vollständig definiert mit:

```
typedef struct zelle
{
    char          inhalt;           Zellstruktur (frei, Hindernis)
    double        f[7];           Partikelbelegung  $f = (f_0 \dots, f_6)$ 
    struct zelle *nb[6];         Zeiger auf die Nachbarzellen
    float         c[k];           Konzentration der  $k$  Substanzen
                                   in mmol/l
    float         d[1];           Ablagerungskonzentration
                                   in mmol/l
    float         rvel[6];         $f_j(z)$ 
    float         w0, w, w_akt;   Durchlässigkeit(en)
} typ_zelle, *ptr_to_zelle;
```

## 5.5 Verifikation

Zur Validierung der modifizierten Strömungssiteration aus Gleichung (5.1) wird der Fluß in einem zweidimensionalen Rohr mit eingebettetem Kreis variabler Durchlässigkeit berechnet (siehe Abb. 5.2). Als Referenz dienen die Fälle, in denen der Kreis aus *freien* ( $w = 1$ ) bzw. aus *Hinderniszellen* ( $w = 0$ ) besteht. Beim Vergleich der Strömungsbilder erkennt man klar, wie sich der Fluß mit abnehmender Durchlässigkeit zunächst gering ( $1 \geq w \geq 0,8$ ), dann jedoch deutlich dem Hindernis anpaßt (siehe Abb. 5.2). Vergleicht man dazu die Ergebnisse in Tabelle 5.2, so zeigt sich, daß sich das Hindernis bei hohen Durchlässigkeitswerten vor allem auf die Fließgeschwindigkeit auswirkt. Hierbei spielt die Plazierung und der Querschnitt des Kreises eine wesentliche Rolle.

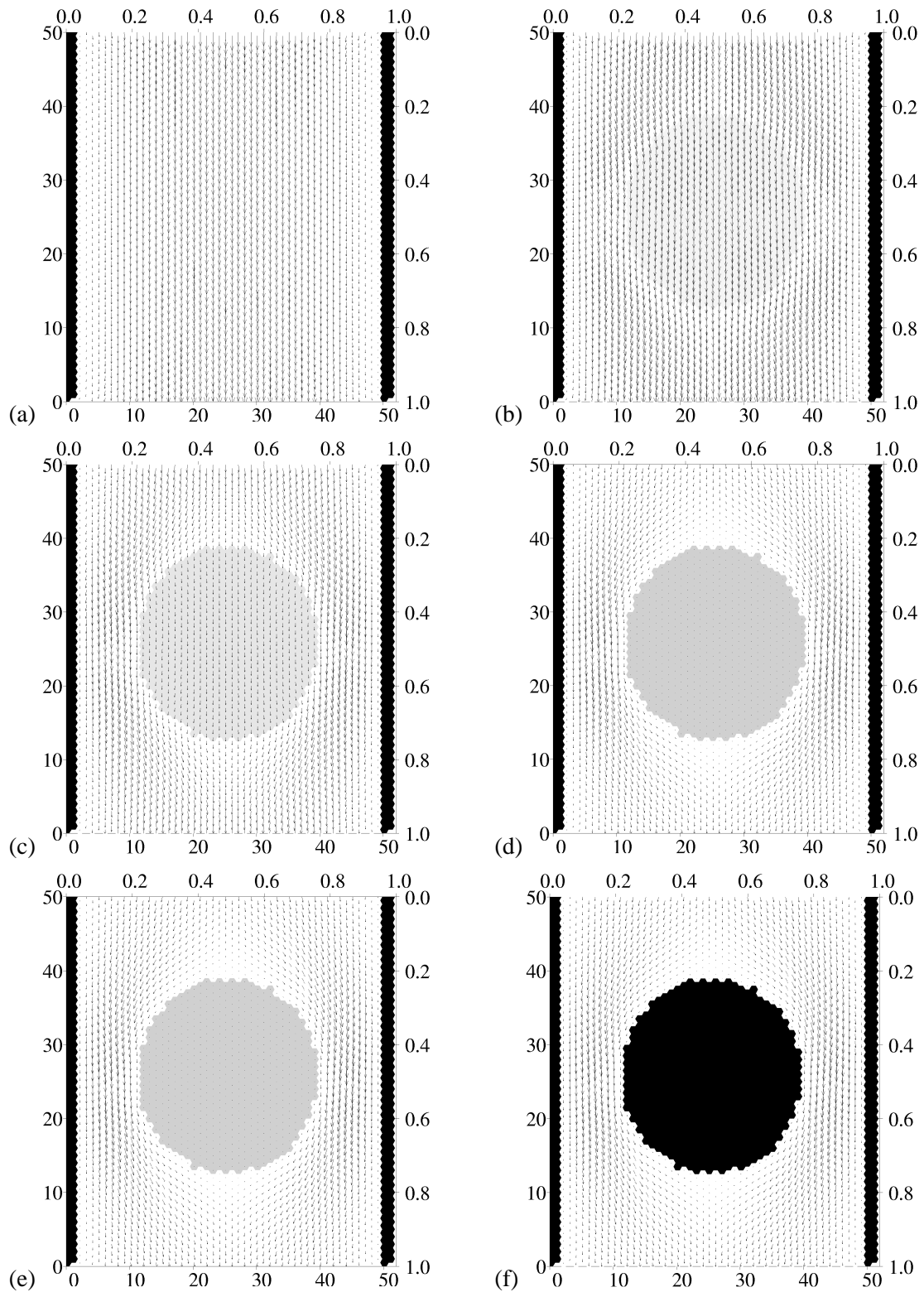
Zur Untersuchung der Stabilität wird das Konvergenzverhalten der Fließgeschwindigkeit für die Fälle aus Abbildung 5.2 aufgetragen (siehe Abb. 5.1). Die Integration des Durchlässigkeitswertes weist in keinem Fall kritisches Verhalten auf. Es zeigt sich ein sehr gutes Grenzverhalten für  $w \rightarrow 1$  und  $w \rightarrow 0$ . Allein die erhöhte Anzahl an Iterationen bei  $w = 1 \cdot 10^{-6}$  im Vergleich zu  $w = 0,001$  bzw.  $w = 0$  ist ein Indiz für numerische Instabilität bei kleinen Durchlässigkeiten, weshalb  $\varepsilon_w \geq 1 \cdot 10^{-6}$  für die minimale Durchlässigkeit in (5.30) gewählt werden sollte.



**Abbildung 5.1: Konvergenz bei unterschiedlichen Durchlässigkeiten.** Das Konvergenzverhalten der durchschnittlichen Fließgeschwindigkeit ( $m/s$ ) ist in (a) und (b) für die sechs Fälle aus Abbildung 5.2 aufgetragen.

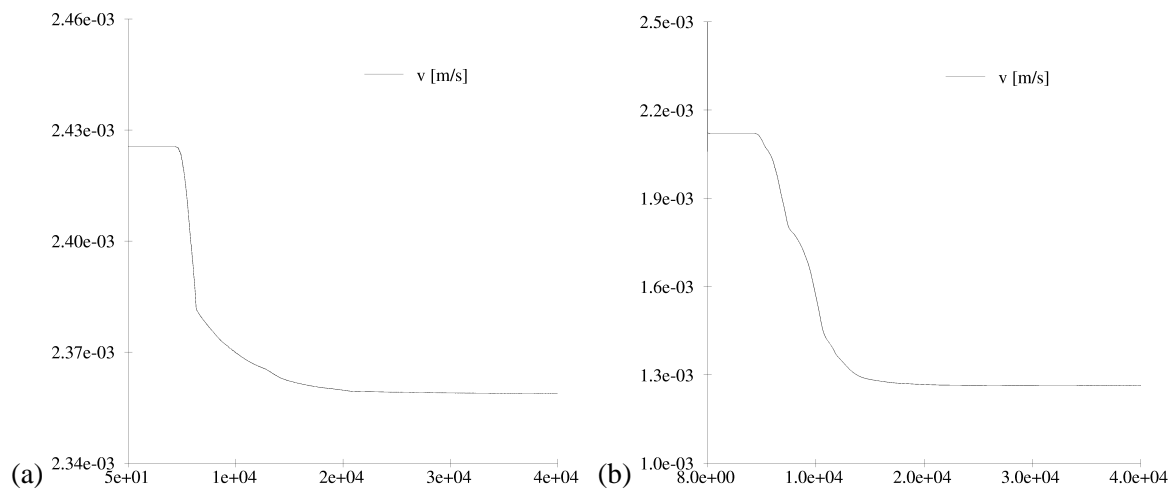
Bild Nr.	(a)		(b)	(c)	(d)	(e)			(f)
$w$	1,0	0,99	0,8	0,5	0,2	0,05	0,001	$1 \cdot 10^{-6}$	0
$\varepsilon$	0,905	0,902	0,860	0,792	0,724	0,690	0,679	0,679	0,679
$\bar{v}$ [m/s]	14,63	11,65	2,58	1,26	0,86	0,75	0,723	0,722	0,722
Iterationen	6157	5118	1366	816	1105	1232	1083	1238	1032

**Tabelle 5.2: Variation des Durchlässigkeitswertes.** Die Tabelle zeigt einige Simulationsergebnisse des Modells aus Abbildung 5.2. Neben der Durchlässigkeit  $w$  sind Porosität  $\varepsilon$ , durchschnittliche Fließgeschwindigkeit  $\bar{v}$  und Anzahl der Iterationen bis zur Konvergenz aufgetragen.



**Abbildung 5.2: Variation des Durchlässigkeitswertes.** Die Abbildungen (a) bis (f) zeigen ein  $50 \times 50$  Zellen ( $1 \times 1 \text{ cm}$ ) großes zweidimensionales Rohr. Die Vektoren kennzeichnen die relative Geschwindigkeit und Richtung innerhalb einer Gitterzelle. In der Mitte ist ein Kreis mit abnehmender Durchlässigkeit eingebettet. (a)  $w=1$ ; (b)  $w=0,8$ ; (c)  $w=0,5$ ; (d)  $w=0,2$ ; (e)  $w=0,05$ ; (f)  $w=0$ .

## 5.6 Anwendungsbeispiel Kalzifizierung

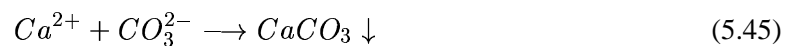


**Abbildung 5.3: Einfluß der Mineralisierung auf die Fließgeschwindigkeit.** Die Bilder zeigen die Entwicklung der durchschnittlichen Fließgeschwindigkeit für die Mineralisierungsprozesse aus Abbildung 5.4. (a): Sediment 1; (b): Sediment 2.

Als Beispiel für einen Mineralisierungsprozeß sei die Kalzifizierung genommen. Hierzu wird ein stark vereinfachtes Reaktionssystem verwendet, bestehend aus der Gleichgewichtsreaktion der Kohlensäure



und der Kalzifizierung

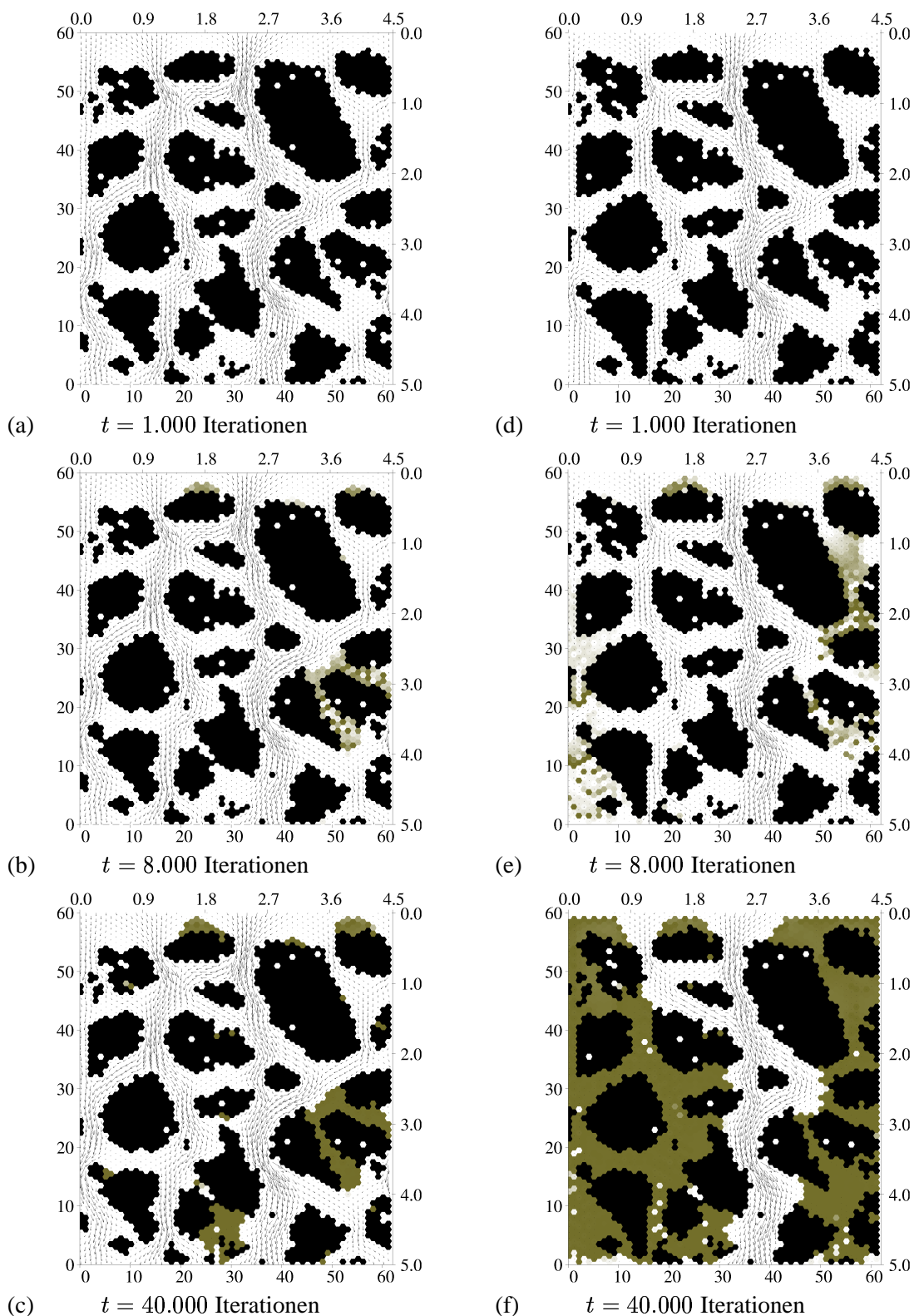


Die Komponenten  $HCO_3$  und  $Ca$  werden dem System permanent vom oberen Modellrand aus zugeführt. Zur Vermeidung überhöhter Kalzifizierung direkt am Systemrand wird die Reaktion durch das  $HCO_3$  limitiert (siehe Anhang C.4). Die Modellparameter werden derart gewählt, daß die vollständige Mineralisierung einer Zelle in wenigen Schritten erfolgt<sup>4</sup>. Da an dieser Stelle nur der Prozeß untersucht werden soll, orientieren sich die Werte nicht an realistischen Größen.

Es wurden zwei sehr ähnliche Sedimentgeometrien mit annähernd gleichen Modellparametern gewählt. Vergleicht man die Ergebnisse, so fällt auf, daß die Mineralisierung generell in Bereichen mit geringer Fließgeschwindigkeit stattfindet. Während in Sediment 1 mehrere betonte Fließpfade vom oberen zum unteren Gitterrand erkennbar sind (Abb. 5.4(a)), weist Sediment 2 nur einen ausgeprägten Strom in der Bildmitte auf (Abb. 5.4(b)). Dieser Unterschied schlägt sich deutlich in den Ergebnissen nieder: In Sediment 1 findet die Kalzifizierung in relativ kleinen Bereichen statt und die Fließgeschwindigkeit ändert sich nur marginal (Abb. 5.3(a)). Im Gegensatz dazu mineralisiert in Sediment 2 das Kalzit nahezu überall, wodurch die Fließgeschwindigkeit stark reduziert wird. Eine sehr interessante Beobachtung ist, daß die Ablagerungen vorwiegend an der Oberfläche der Sedimente auftreten; ebenso erkennt man ein „Wachstum“ von Mineralablagerungen. Dieses Verhalten geht konform mit Prozessen in realen Systemen. Es bleibt zu untersuchen, ob bei größeren Gittern und kleineren Strukturmodifikationsschritten noch deutlichere Aussagen getroffen werden können. Problematisch ist hierbei jedoch der Rechenaufwand<sup>5</sup>.

<sup>4</sup>In einem Strukturmodifikationsschritt wird die Durchlässigkeit der Zelle um 0,1 bis 0,2 herab bzw. herauf gesetzt.

<sup>5</sup>Die hier vorgestellten „einfachen“ Simulationen benötigen jeweils etwa 24 Stunden.



**Abbildung 5.4: Mineralisierung.** Auf zwei ähnlichen Sedimenten (Sediment 1:(a)–(c); Sediment 2:(d)–(f)) wird ein Mineralisierungsprozeß simuliert. (a) und (d) zeigen die Ausgangssituationen vor der Mineralisierung. Die Vektoren zeigen Fließgeschwindigkeit und -richtung. Sedimente sind schwarz gezeichnet, verringerte Durchlässigkeiten und belegte Zellen grau.

Kritisch zeigte sich auch die Wahl der minimalen Durchlässigkeit  $\varepsilon_w$ . Der Quotient zwischen der Größe der Strukturmodifikationsschritte und des minimalen Durchlässigkeitswertes bestimmt im wesentlichen die numerische Stabilität des Algorithmus. Im vorliegenden Fall wurde  $\varepsilon_w = 0,07$  gewählt.

Es sei bemerkt, daß die Modelle mit statischen Druckgradienten gerechnet wurden. Spektakuläre Änderungen im Strömungsbild sind daher nicht zu erwarten gewesen. Eine entsprechende Dynamisierung des Druckgradienten und evtl. der Nährstoffversorgung wird zweifellos zu markanten Änderungen im Strömungsmuster führen.

## 5.7 Zusammenfassung

Die Verwendung von Durchlässigkeitswerten hat nur geringen Einfluß auf die numerische Stabilität der LBE Automaten. Feine Sedimentstrukturen lassen sich nach dem Satz über die Austauschbarkeit (siehe Satz 2.3) durch Bereiche mit verringerter Durchlässigkeit simulieren. Mineralisierungs- und Wachstumsprozesse werden mit Hilfe der Durchlässigkeit beschrieben und für den einfachsten Fall anhand zweier Beispiele demonstriert. Die Ergebnisse führen zu der Vermutung, daß Adsorptionsprozesse, zumindest teilweise, bereits durch die Strömungs-, Transport- und Strukturmodifikationsprozesse beschrieben werden.

# Kapitel 6

## Fazit und Ausblick

### 6.1 Mächtigkeit des Modells

Das Modell basiert auf der inzwischen weit verbreiteten Lattice-Boltzmann Technik und es existieren bereits eine Reihe von theoretischen Arbeiten, die sich mit Beweisen zur Stabilität des Verfahrens und Methoden zur Verfahrensverbesserung auseinandersetzen (Ancona 1994; Sterling und Chen 1996; Karlin und Succi 1998; Martys et al. 1998; Shan und He 1998; Chen et al. 1997). Die schrittweise Ergänzung des Modells durch Transport-, Reaktions- und strukturverändernde Prozesse erlaubt die Simulation beliebiger Reaktionssysteme und ermöglicht zudem den effektiven Einsatz von Rechnerressourcen. Die Idee der Trennung von Transport- und Reaktionsprozessen ist dabei nicht neu. So wurde z.B. bereits von Liu und Narasimhan (1989) ein entsprechendes Modell vorgestellt, allerdings ohne Berechnung einer Strömung.

In Kapitel 4 wurde anhand zweier konkreter Beispiele ein Einsatzbereich des Modells vorgestellt. Dabei konnte die in der Geologie und Biologie wichtige Frage nach der Bedeutung der Porenraumgeometrie in Bezug auf Konzentrationsverteilungen im Sediment geklärt werden. Des weiteren bietet das Modell eine mögliche Erklärung für Diskrepanzen bei der Bestimmung von Diffusionskonstanten. In Kapitel 5 wurden Wachstums- und Mineralisierungsprozesse für die Automaten hergeleitet. Dabei erweist sich die Verwendung von Durchlässigkeitswerten als hervorragende Methode zur Beschreibung von Übergängen zwischen *freien* und *Hinderniszellen*. Anhand von Beispielen wurde gezeigt, daß diese Strukturveränderungen adäquat simuliert werden können, wodurch sich ein breites Anwendungsspektrum für das Modell eröffnet.

### 6.2 Grenzen des Modells und zukünftige Entwicklungen

Insgesamt stellt sich jedoch die Verifizierung der Modelldaten als sehr schwierig heraus, da hochauflösende Sedimentbilder schwer zugänglich sind und nur begrenzte Informationen liefern. Die direkte Messung von lokalen Prozeßraten im Sediment ist mit den heutigen Meßapparaten nahezu ausgeschlossen, wodurch man gezwungen ist, globale Größen wie die Permeabilität oder Konzentrationsgradienten als Bewertungsgrundlage zu nehmen.

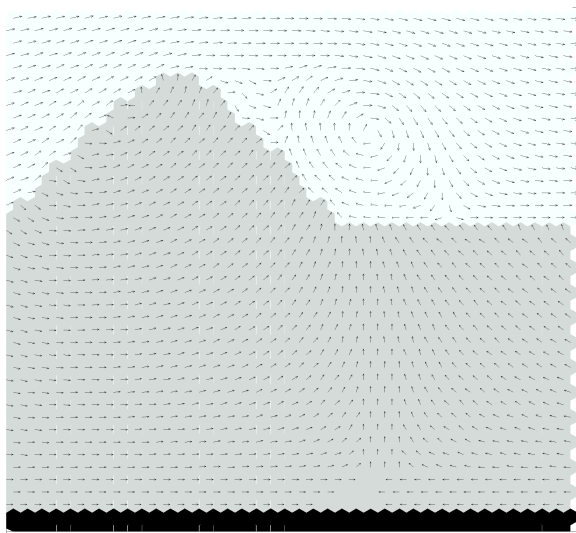
Eine wesentliche Schwäche des Automaten ist die Zweidimensionalität. Die Permeabilität liegt jedoch bereits in den zweidimensionalen Dimensionen in der richtigen Größenordnung (vgl. Abschnitt 2.4), woraus man durchaus schließen kann, daß die Ergebnisse im dreidimensionalen Raum qualitativ gleichwertig sind. Der enorme Rechenaufwand, der mit der dritten Dimension erforderlich wird, findet dennoch bereits Anwendung, vor allem zur Berechnung turbulenter Strömungen (Uchida et al.

1999). Die Erweiterung der Strömung zur dritten Dimension kann auf verschiedene Weisen realisiert werden:

- Der einfachste Weg wäre die Ergänzung um zwei weitere zweidimensionale Schichten und geeigneter Ergänzung der Nachbarschaft. Dieser Schritt ist relativ einfach implementierbar und erhöht den Rechenbedarf um das drei- bis vierfache. Die Ergebnisse zeigen jedoch nicht die Qualität einer dreidimensionalen Strömung, sondern repräsentieren nur eine Zwischenlösung.
- Eine bessere Lösung bietet die Konstruktion dreidimensionaler Zellen in Form von Quadern. Ein solcher 6, 18 bzw. 26-Nachbar Automat läßt sich leicht in zweidimensionalen Schnitten darstellen, hat jedoch den Nachteil nichtäquidistanter Nachbarn. Derzeit wird in einem anlaufenden Projekt im ICBM damit begonnen den Automaten entsprechend zu ändern.
- Eine vielversprechende Lösung bietet die Implementierung des in Kapitel 2 vorgestellten vierdimensionalen 24-Nachbar FCHC, da die Zellen, wie das Hexagon in der zweidimensionalen Ebene, äquidistante Entfernungen zu den angrenzenden Nachbarn haben.

Die Erweiterung der anderen Prozesse auf ein dreidimensionales Gitter stellt kein großes Problem dar, da die Transport-, Reaktions- und strukturverändernden Prozesse unabhängig von der Zellgeometrie formuliert wurden. In den Definitionen ändert sich allein die Anzahl der Zellnachbarn.

Nicht simuliert werden von dem Modell Flüssigkeitsgemische bzw. Flüssigkeit-Gas-Gemische, wie sie beispielsweise bei Verunreinigungen durch Öle bzw. durch Trockenfallen des Sedimentes bei Ebbe auftreten. Bereits in Vorstufen implementiert ist ein Modul zur Simulation von Sediment- bzw. Partikeltransport sowie die in Kapitel 5 diskutierten Strukturmodifikationen und -transformationen für beliebige Komponenten. Erste Berechnungen zeigen, daß das Modell für die Anwendung auf me-



**Abbildung 6.1: Sandripel.** Das Bild zeigt ein  $45 \times 45$  Zellen großen Ausschnitt aus einem  $80 \times 55$  Gitter. Der Sand-ripel (grau) hat eine Durchlässigkeit von  $w_0 = 0,5$ . Die Pfeile kennzeichnen die Strömungsrichtung. Die Fließgeschwindigkeit an der Oberfläche liegt um etwa zwei Zehnerpotenzen höher als im Sediment.

soskalige Sedimente geeignet ist. Die Sedimentstruktur läßt sich in diesem Fall durch teildurchlässige Zellen ( $w_0 < 1$ ) simulieren. Ein Beispiel hierzu sind die im Watt vorkommenden Sandripel. Man hat erkannt, daß die Oberflächenströmung Grundwasserströme induziert (Wirtz, persönliche Kommunikation). Diese lassen sich auch im Modell erkennen (siehe Abb. 6.1).

Ein weiterer Punkt ist die in Abschnitt 5.6 beobachtete Adsorption. Es stellt sich die Frage, inwiefern das Modell tatsächlich Adsorption beschreibt. Wenn dies der Fall ist, eröffnet sich eine ganz



andere Fragestellung: Ist die Adsorption wirklich ein eigenständiger Prozeß oder handelt es sich hierbei, zumindest teilweise, um eine Kopplung aus Strömung und Ausfällung? In diesem Zusammenhang muß auch die Hindernisreflexion aus Abschnitt 2.2.1 berücksichtigt werden.

Zur Berechnung und Darstellung der vorgestellten Modelle wurde das Softwaretool DySTReM entwickelt. Es soll daher kurz auf das Entwicklungsumfeld sowie die Funktionalität eingegangen werden.

### 6.3 Softwarepaket DySTReM

Neben dem vorgestellten Modell wurde eine grafische Oberfläche realisiert, die die Parametereingabe der Modelle vereinfacht und die Auswertung der Ergebnisse ermöglicht. Zur Implementierung der Oberfläche wurde das für die Programmiersprachen C und C++ verfügbare *Gimp Tool Kit (GTK)* verwendet (Harlow 1999), daß sich (neben *Qt*, siehe (Lehner 1999)) als Standard unter Linux durchgesetzt hat und mit dem beispielsweise die Gnome-Umgebung (Pennington 1999) entwickelt wurde. Aktuelle Entwicklungen finden sich hierzu auf den entsprechenden Entwickler Homepages [www.gtk.org](http://www.gtk.org) bzw. [www.kde.org](http://www.kde.org). Das Programm wurde strikt modular aufgebaut und weitestgehend allgemein gehalten, wodurch sich neue Funktionen relativ leicht ergänzen lassen. DySTReM ist im wesentlichen gekennzeichnet durch:

- **die Parametereingabe**

Logische Abhängigkeiten zwischen einzelnen Parametern werden aufgelöst, wodurch die Übersichtlichkeit verbessert wird. Die Komponenten werden in Form einer Liste erfaßt, auf die bei der Reaktionseingabe zurückgegriffen wird. Zweidimensionale Datenbilder, z.B. Konzentrationsverteilungen, können auf einfache Weise integriert werden. Reaktionen lassen sich leicht erstellen, werden beim Modellstart in C Sourcecode übersetzt und mit dem Modell kompiliert. Während des Modellaufes können Kontrolldaten wie z.B. die durchschnittliche Fließgeschwindigkeit protokolliert werden. Eine Modellrechnung kann mit geänderten Parametern fortgesetzt werden.

- **die Ergebnisdarstellung**

Zum einen können die Ergebnisdaten auf dem zweidimensionalen Gitter dargestellt werden, zum anderen können die ausgewählten Kontrolldaten sowie Schnitte oder Lokalinformationen aus dem zweidimensionalen Modellgitter angezeigt werden. Es besteht auch die Möglichkeit zur Einbindung von Meßdaten.

- **die Analysemethoden**

Alle Datensätze lassen sich miteinander verknüpfen. Es können z.B. Mittelwerte und absolute bzw. relative Abweichungen bestimmt werden. In der Arbeit nicht besprochen wurden Methoden zum Vergleich von realen Geometrien mit den Simulationsergebnissen. Eine vielversprechende Methode ist die (Multi-)fraktalanalyse, die einige Informationen über Verteilung und Musterbildung liefert (Kropp und Klenke 1997). DySTReM bietet bereits die Möglichkeit zur (multi-)fraktalen Analyse beliebiger digitaler Bilddateien.

Mit Hilfe dieser Oberfläche ist das Modell für den Einsatz im wissenschaftlichen Alltag geeignet. Vor allem durch die individuelle Modellanpassung bzgl. der Komponenten und Reaktionen lassen sich mit DySTReM beliebige Reaktionssysteme realisieren. Derzeit existiert das GTK-Paket nur unter Linux/Unix. Aktuelle Entwicklungen zeigen jedoch auf, daß dieses Softwarepaket in absehbarer Zeit auch unter Windows erhältlich sein wird, wodurch sich die Einsatzmöglichkeit erheblich erweitert.

Ein weiterer großer Vorteil ist die (unter Linux) freie Verfügbarkeit der vom Programm verwendeten Sprache C und des Entwicklungstools GTK. DySTReM wird als (freies) Linuxpaket veröffentlicht unter [www.sourceforge.net](http://www.sourceforge.net).

# Anhang A

## DySTReM Kurzreferenz

Parallel zur theoretischen Modellentwicklung entstand das Softwarepaket DySTReM. Dieses besteht zum einen aus einer graphischen Oberfläche und dem eigentlichen Zellulären Automaten Modell. Die Oberfläche ist anfangs zur Vereinfachung der Parametereingabe und zur Darstellung der Simulationsergebnisse entwickelt worden, da keine entsprechende Software zur Verfügung stand. Im Laufe der Zeit hat sich das Programm weiter entwickelt und wurde um zahlreiche Tools zur Auswertung erweitert, so daß es inzwischen vom Funktionsumfang her mit kommerzieller Software konkurrieren kann.

Das Zelluläre Automaten Modell ist allein in C implementiert und läßt sich generell unabhängig von der graphischen Oberfläche mit Hilfe von ASCII Dateien steuern. Die Oberfläche verwendet mehrere Linux Pakete, die vor der Benutzung bereits installiert sein müssen. DySTReM läßt sich generell auf allen Linux/Unix Systemen verwenden.

Da die Entwicklung DySTReMs einen beträchtlichen Teil der Forschungstätigkeit in Anspruch genommen hat und eine Integration in den wissenschaftlichen Alltag der mathematischen Modellierung im ICBM vorgesehen ist, werden in diesem Kapitel wesentliche Funktionen des Programms vorgestellt.

### A.1 Programmstart

Das Softwarepaket kann unter [www.sourceforge.net/projects/dystrem](http://www.sourceforge.net/projects/dystrem) bezogen werden. Dort finden sich ebenfalls Beschreibungen zur Installation.

Nach dem Programmstart erscheint das Hauptmenü (Abb. A.1). Modellprojekte können unter **Project/New** oder **Parameter ...** erstellt und gestartet werden (siehe Abschnitt A.2). Zur Auswertung der Modellergebnisse dienen die drei Buttons **Results ...**, **Lattice ...** und **Graphs ...**. **Results ...** zeigt ein Textfenster an, daß alle Ausgaben, die während eines Modellaufes vom Programm produziert werden, ausgibt. Hierzu gehören statistische Daten über Laufzeit, Porosität, Permeabilität, Fließgeschwindigkeit, usw. Ebenso wird festgehalten, wann bei strukturverändernden Prozessen Strömungskorrekturen vorgenommen wurden. Die unter **Lattice ...** erreichbare Gitterdarstellung wird automatisch

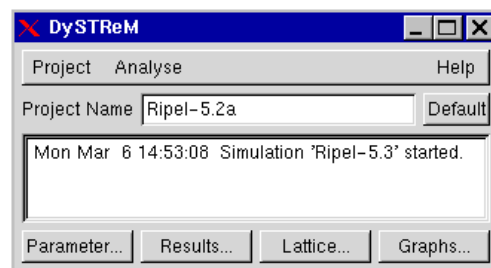


Abbildung A.1: Hauptmenü.

geöffnet, wenn ein Projekt geladen wird. Es zeigt Informationen des zweidimensionalen Gitters (siehe Abschnitt A.3). **Graphs ...** öffnet ein Fenster zur allgemeinen Darstellung von (zweidimensionalen) Funktionen. Dies können Daten sein, die während des Modellaufes protokolliert werden (siehe Abschnitt A.2), Werte, die aus dem Modellgitter extrahiert werden oder beliebige Kombinationen mehrerer Graphen (siehe Abschnitt A.4). Unter dem Menüpunkt **Analyse/MFA display** läßt sich ein Fenster zur fraktalen Analyse digitaler Graubilder aufrufen. Die Ergebnisse lassen sich ebenfalls im Fenster **Graphs ...** darstellen. Der Menüpunkt **Help/Manual** führt zu einem Online Handbuch.

## A.2 Parametereingabe

Das Parameterfenster ist in vier Unterfenster eingeteilt. Im ersten Fenster (Abb. A.2) werden **global**e Modellparameter eingegeben.

Hierzu zählt der *model name* und die *sediment structure*, die als digitale schwarz/weiß Bilddatei vorliegen muß<sup>1</sup>. Die Dimension des Bildes wird in *real height* eingegeben. Optional lassen sich weitere Bilder einladen, die entweder eine veränderte Porosität und/oder Konzentrationen eines unter **Transport** eingetragenen Stoffes aufweisen. Die Gittergröße (*site<sub>y</sub>*) wird mit *model height* angegeben und das Bild wird mit dem Wert *filter* (entspricht  $\phi$  aus Abschnitt 2.4) in das Gitter übertragen. *Boundary* bestimmt die Randbedingung am linken/rechten Rand. In der Arbeit wurden ausschließlich periodische Randbedingungen gewählt.

Hier lassen sich außerdem *limited* (zurückstoßen) und *unlimited* (Fortsetzung) einstellen. Zum oberen und unteren Gitterrand werden *top* bzw. *bottom* Zeilen hinzugefügt. Die Modellaufzeit nach der Initialisierung wird in *simulation time* eingestellt und die Anzahl der Ausgabebilder entsprechend in *output pictures*.

Während des Simulationslaufes können optional globale Modelldaten protokolliert werden. Sie werden unter *output parameter* ausgewählt und können zu jeder Zeit des Laufes in der Graphendarstellung eingesehen werden.

Unter **LBA** (Abb. A.3) lassen sich Einstellungen zur Strömungssimulation vornehmen. Zunächst

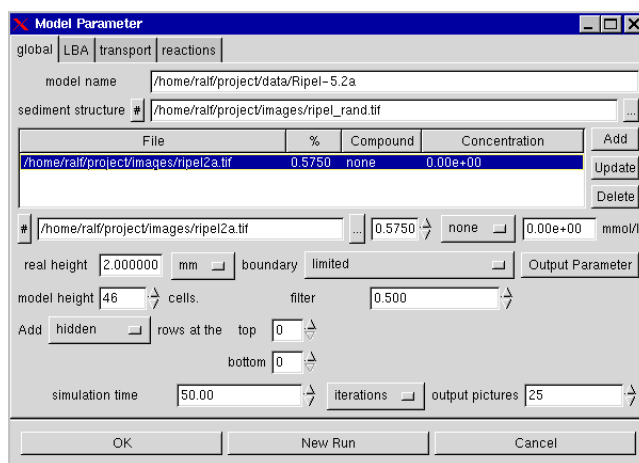


Abbildung A.2: Globale Parameter.

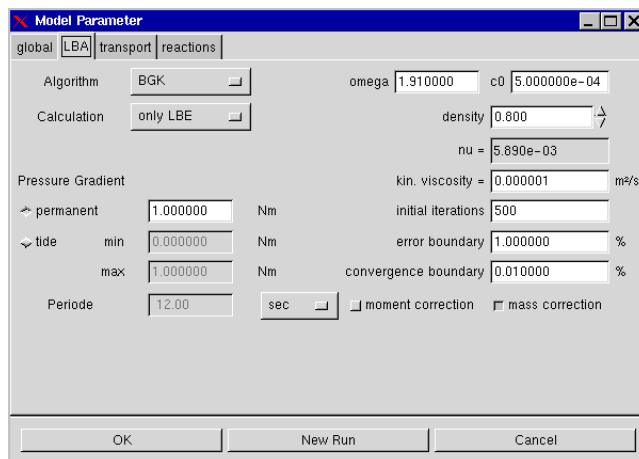


Abbildung A.3: LBE spezifische Parameter.

<sup>1</sup>Graubilder werden nach schwarz/weiß gewandelt.

wird der Algorithmus bestimmt (LBA oder LBGK) sowie der fixe Druckgradient  $c_0$ , die Dichte  $\rho$  und ggf. der Relaxationsfaktor  $\omega$ .

In Kapitel 2 wurde bereits erläutert, daß die Simulation sehr kleiner Viskositäten numerisch kritisch ist. Im laminaren Fall läßt sich dies durch einfache Skalierung beheben. Hierzu steht die vom Modell simulierte Viskosität unter *nu*. Die reale Viskosität wird bei *kin. viscosity* eingetragen. Der reale Druckgradient kann entweder zeitlich konstant (*permanent*) oder als Sinusschwingung zwischen Minimal- und Maximalwert (*tide*) gewählt werden. Für die Strömungsinitialisierung entscheidend ist die Anzahl der maximalen Iterationen (*initial iterations*) und die Abbruchkriterien (*error boundary* – unzulässige Fehler – und *convergence boundary*).

Ein Massenverlust kann, da das Modell bei periodischen Randbedingungen zum Torus verknüpft ist, nur durch numerische Rundungsfehler auftreten. Diese werden durch Hinzunahme einer Massenkorrektur (*mass correction*) minimiert. Bei der Simulation turbulenter Ströme kann, je nach Art der Simulation, die Verknüpfung des oberen und unteren Randes zu unerwünschten Rückkopplungseffekten führen. Die Impulskorrektur (*moment correction*) homogenisiert in solchen Fällen den vertikalen Fluß am oberen Modellrand.

Mit *Calculation* werden die unterschiedlichen Modellmechanismen aktiviert bzw. deaktiviert. *Only LBE* steht für die alleinige Simulation der Strömung, es werden weder Transport und Reaktionen noch Strukturveränderungen berechnet. Evtl. definierte Komponenten bzw. Reaktionen werden ignoriert. Mit der Wahl *only T/R* wird die Strömung zunächst initialisiert. Nachfolgend werden nur Transport und Reaktionen berechnet. Diese Einstellung eignet sich zur Simulation invarianter Sedimentstrukturen (siehe Kapitel 4).

Da sich das Strömungsmuster bei kleinen Reynoldszahlen linear verhält (siehe Satz 2.4), lassen sich mit *only T/R* auch Gezeiten simulieren.

Die Einstellung *LBE & T/R/S* bewirkt die Simulation aller Prozesse. Finden strukturverändernde Prozesse statt, so wird bei Bedarf der LBE Algorithmus aktiviert und korrigiert die Strömung. Werden in *simulation time* reale Zeiten gewählt, paßt sich die Laufzeit des LBE dem Transportschritt (vgl. Abschnitt 3.1.3) an; ansonsten werden die Parameter der Initialisierungsphase verwendet. Die im Modell simulierten Stoffe werden unter **Transport** eingegeben. Diese werden in Form einer Liste dargestellt (siehe Abb. A.4). Zu jeder Komponente müssen Bezeichner *compound*, Diffusionskonstante  $D_c$ , maximale Gelöstkonzentration  $c^{max}$  und Stoffeintrag *entry* definiert werden. Eine negative Diffusionskonstante unterbindet vollständig den Transport einer Komponente; es findet kein Stoffeintrag für  $entry \leq 0$  statt. Der *modifier* bestimmt, ob die Komponente mineralisiert oder einen Biofilm mit verringerter Durchlässigkeit bildet<sup>2</sup>. Im Fall der Mineralisierung muß die maximale Ablagerungskonzentration (Komponentendichte geteilt durch molekulare Masse) angegeben werden. Bei Biofilmen muß zusätzlich die Durchlässigkeit des Filmes und der Grad der Diffusionsminderung spezifiziert

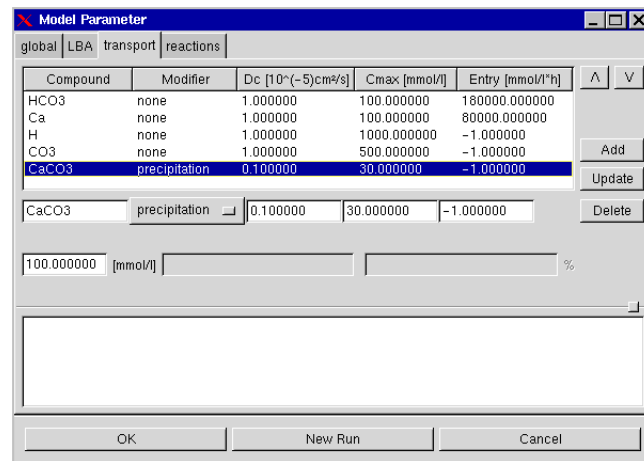


Abbildung A.4: Modellierte Stoffkomponenten.

<sup>2</sup>Zur Zeit wird vom Modell höchstens ein Mineralisierungsprozeß simuliert.

werden. Ist kein Modifier gewählt, so werden die Reaktionen beschränkt durch den Maximalwert  $c^{max}$  (vgl. Abschnitt 3.2).

Auf der letzten Seite **Reactions** sind die Reaktionen aufgelistet (Abb. A.5). Die Eingabe neuer Reaktionen erfolgt durch einfaches Anwählen der Komponenten. Reaktionskonstanten lassen sich auch nachträglich ändern. Die kinetische Gleichung wird vom Programm entsprechend Abschnitt 3.2 ermittelt und angezeigt.

Nach Angabe aller Parameter läßt sich das Modell mit **New Run** starten. Im Startfenster läßt sich der Programmaufruf des Modells unter **Project/Properties** einstellen. Beispielsweise bewirkt der Eintrag 'model %s &', daß das Modell im Hintergrund abläuft, wodurch mehrere Modelle gleichzeitig gestartet werden können. Wurde bereits eine Simulation durchgeführt, so erscheint die zusätzliche Option **Continous Run**, die eine weiterführende Simulation startet. Wichtig hierbei ist die Beibehaltung des Modellnamens, der Komponenten und der Ausgabeparameter!

Für jedes Modell wird ein Verzeichnis angelegt, in dem die Parameter als ASCII Dateien unter 'Name.info' und 'Name.reactions' abgelegt werden. Bei Modellstart wird die Datei 'Name.reactions' in C Source übersetzt, kompiliert und an das Modell gelinkt.

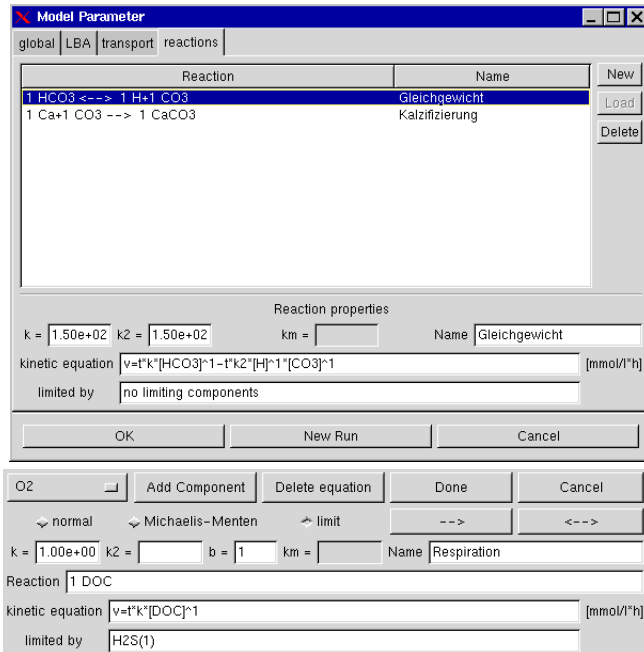


Abbildung A.5: Modellierte Reaktionen. (a): Reaktionsliste; (b) Reaktionseditor.

### A.3 Gitterdarstellung

Das Modell schreibt die Simulationsergebnisse unter Angabe der Bildnummer in ASCII Dateien, z.B. wird das Bild Nr. 3 in 'Name.003' abgelegt.

Im **Lattice display** lassen sich die Bilder visualisieren (Abb. A.6). Ins **Lattice display** gelangt man vom Startmenü aus über **Analyse/Lattice display** oder direkt über den Button **Lattice ...**. Im Menü **Display** wird der gewünschte Datensatz gewählt. **Velocity Field** gibt das normierte Geschwindigkeitsfeld aus. Es erscheint ein Regler, mit dem sich die Vekorenlänge einstellen läßt sowie ein Button, der eine logarithmische Darstellung bewirkt. Die Sedimentgeometrie ist schwarz dargestellt, ebenso werden belegte Zellen farbig markiert. Optional kann unter **Setup ...** – **Misc** auch der Durchlässigkeitswert farbig hervor gehoben werden. Alle weiteren Datensätze werden durch Färbung der Zellen dargestellt. Hierzu erscheint ein Farbintervall in der rechten oberen Ecke sowie ein Button *set color*. Die Einstellung *absolute* zeigt den Wert der Zelle ( $x$ ) im Verhältnis zum definierten Maximum (siehe Transportkomponenten) und *relative* den Wert im Verhältnis zum Minimum und Maximum des dargestellten Bildes ( $col = \frac{x - min}{max - min}$ ). Zu den farbigen Darstellungen zählen: **Density**: Zelldichte; **Equilibrium**: Gleichgewicht zwischen interzellularen Flüssen ( $\sum f_i(z) - \sum f_i^*(z + p_i)$ );

**Concentration:** Es erscheint ein Untermenü mit den definierten Komponenten. Die Konzentration der ausgewählten Komponente wird angezeigt; **Reactionrate:** Es erscheint ein Untermenü mit den definierten Reaktionen. Die Rate der ausgewählten Reaktion wird angezeigt.

Zwei Datensätze des gleichen Typs (Velocity Field, Density, Equilibrium, Concentration oder Reactionrate) lassen sich mit *operation* durch eine Basisoperation (+, -, \*, /) verknüpfen. Dazu wird die Operation ausgewählt und danach der zweite Datensatz. Das Ergebnis erscheint im Display und ist danach unter **Display/Concatenation** sowie in der Graphendarstellung verfügbar.

Rechts neben dem Menü **Display** läßt sich das Ausgabebild entweder explizit angeben oder mit den Auswahlbuttons  und  durchblättern.  springt auf das erste Bild zurück und  zeigt alle Bilder in Form einer Animation.

Die Darstellung des Displays wird über das Fenster  gesteuert (siehe Abb. A.7). Die Achsenbeschriftung wird in  bzw.  festgelegt. Wird die Einstellung *auto scale* deaktiviert, so kann ein Ausschnitt des Gitters betrachtet werden. Das Ausgabeformat der Achsenbeschriftung erfolgt nach dem Format-syntax in C. Unter  werden Titel, Fonttyp und -größe sowie die Farbverläufe eingestellt. Wird kein expliziter Titel eingegeben, so erscheint ein Defaultname. Mit *color equilibrium* (*eq*) und *color exponent* (*p*) können die Farbverläufe beeinflusst werden. Bezeichne  $x \in [0, 1]$  das relative Datum und  $col \in [0, 1]$  den relativen Farbwert, so wird *col* bestimmt durch

$$col = \begin{cases} eq \cdot \left(\frac{x}{eq}\right)^p, & \text{falls } x \leq eq \\ 1 - (1 - eq) \cdot \left(\frac{1-x}{1-eq}\right)^p, & \text{sonst} \end{cases}$$

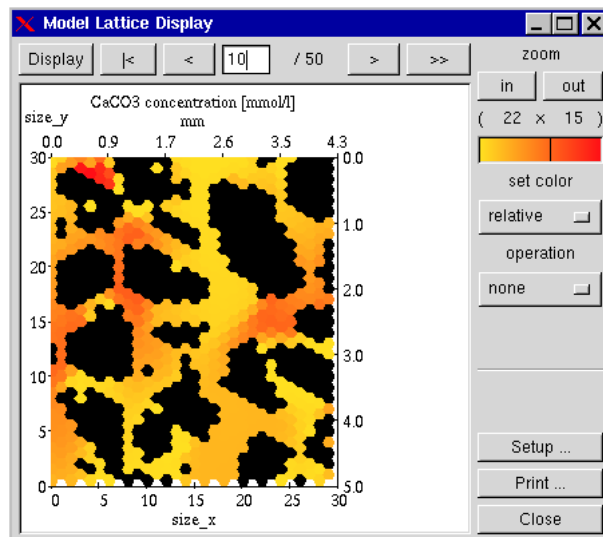
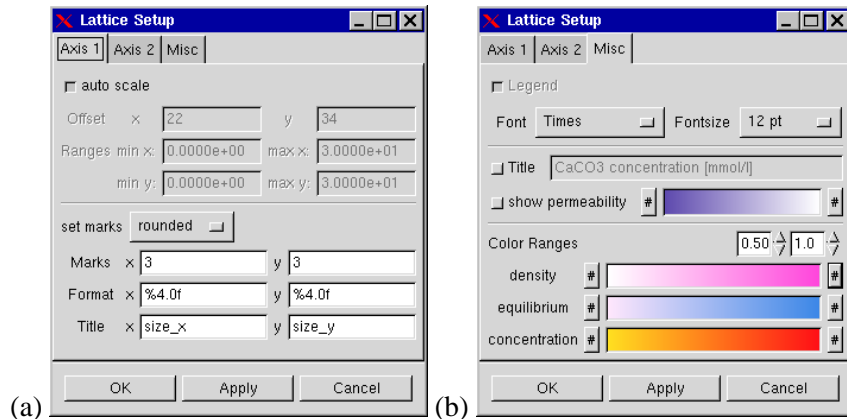


Abbildung A.6: Gitterdarstellung.

## A.4 Graphendarstellung

Vom Startfenster aus gelangt man über **Graphs ...** bzw. **Analyse/Graph display** zur Funktionendarstellung (Abb. A.8).

Unter dem Menü **Select function** kann eine spezifische Funktion zur Darstellung ausgewählt werden. Generell werden Funktionen mit freier Variablen auf der 1. und Funktionen mit freier Variablen auf der 2. Achse unterschieden. Es werden nur Funktionen mit gleicher freier Variable dargestellt! Die Optionen unter **Select function** im einzelnen:



**Abbildung A.7: Lattice Setup.** (a) Axis description, (b) color settings and modifiers.

- Unter **Lattice Data** werden Daten aus dem berechneten Gitter (siehe oben) angezeigt. Für die Spezifizierung der Daten dienen die Eingabefelder *No.* (Nummer des gewünschten Ausgabebildes), *x,y* (Koordinate der gewünschten Zelle bzw. Spalte/Reihe) und *Select lattice data*. Diese Einstellungen werden automatisch aktualisiert, wenn eine entsprechende Auswahl im Gitterfenster erfolgt. *Select lattice data* entspricht dabei der Wahl im **Display** Menü der Gitterdarstellung. Wird ein Funktionswert aus einer Datenmenge bestimmt, so wird die im Menü markierte Operation darauf angewandt. Hierbei bedeutet *average over pores* Mittel über alle durchlässigen Zellen (relatives Mittel), *average over all* Mittel über alle Zellen (Mittel/Fläche) und schließlich läßt sich Minimum und Maximum bestimmen. *row (cell)* liefert Zelldaten in der *y*-ten Reihe, *row(column)* die operierten Spaltendaten (horizontaler Gradient) und *row(time)* die operierte Spalte (*y*) aufgetragen über alle Simulationsbilder. Entsprechend beziehen sich *column(cell)*, *column(row)*, *column(time)* auf die Reihen. *cell(time)* trägt das Datum der Zelle (*x, y*) über alle Simulationsbilder auf und *global(time)* den über das gesamte Bild operierten Datensatz.
- Mit **Image Analysis** wird eine multifraktale Analyse des im MFA display dargestellten Bildes vorgenommen. Diese Funktion kann nur aufgerufen werden, wenn zuvor dort ein Bild geladen wurde.
- **Load Data** erlaubt das Laden einer ASCII Datei. Die Datei besteht aus einem Header, in dem der Funktionstyp<sup>3</sup>, die Anzahl der Funktionen und evtl. weitere Informationen angegeben werden. Die erste Spalte beinhaltet den Wert der freien Variable, die andere(n) den/die Funktionswert(e).
- Unter **Function operation** können Funktionen miteinander Verknüpft werden. Die Option benötigt aktives *multiple* (siehe unten). Mit *add* bzw. *multiply* werden alle dargestellten Funktionen miteinander addiert bzw. multipliziert, *mediate* mittelt sämtliche Funktionswerte und speichert zusätzlich den größten Abstand vom Mittelwert (Fehlerbalken).

<sup>3</sup>D.h. 0 für *x*, 1 für *y*, 2 für *x* und Fehlerinformation, 3 für *y* und Fehlerinformation.



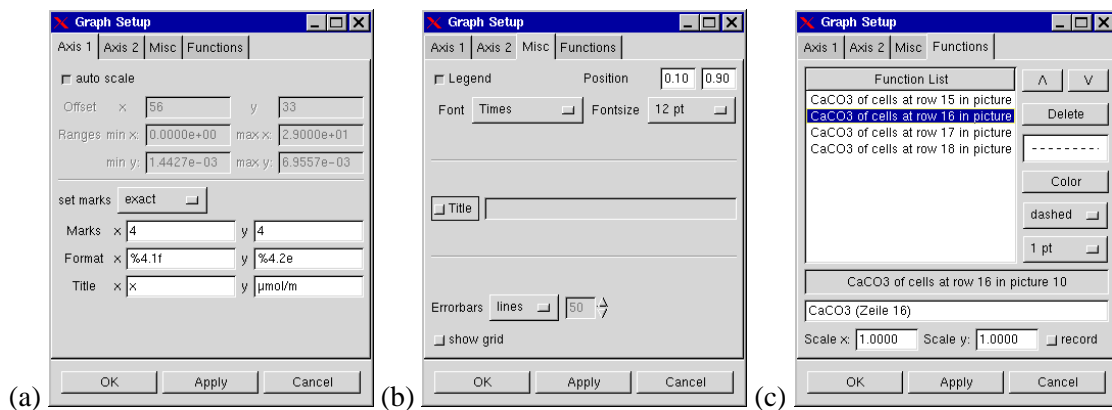


Abbildung A.9: Graph Setup.

- Im Menü **Output functions** erscheint die Liste von Modelldaten, deren Werte während des Simulationslaufes mitberechnet wurden (siehe A.2).

Mit *multiple* können mehrere Funktionen gleichzeitig angezeigt werden. Wurde bei der Achsenbeschriftung *auto scale* aktiviert, so werden diese automatisch skaliert. Jede Funktion erhält eine vorgegebene Charakteristika (Form und Farbe). Ist *multiple* aktiviert und wird in den Eingabefeldern *No.,x* oder *y* ein Bereich der Form  $a - b$  eingegeben, so werden alle Funktionen von  $a$  bis  $b$  angezeigt (siehe Abb. A.7). Ein Mausklick auf *log x/y* trägt die Funktion logarithmisch auf bzw. *derivation* zeigt die Ableitung. Im **Setup ...** wird, wie bei der Gitterdarstellung, die Achsenbeschriftung festgelegt (siehe Abb. A.7). Zusätzlich können Fehlerbalken<sup>4</sup> oder Fehlerbereiche angezeigt werden. Unter **Functions** werden die dargestellten Funktionen aufgelistet. Hier können die Eigenschaften der Funktion manipuliert werden und es können, bei aktiviertem *multiply*, neue Funktionen über *record* definiert werden. Die Funktionen können mit den Operatoren  $+$ ,  $-$ ,  $*$ ,  $/$  beliebig verknüpft werden. Zusätzlich können auf eine Funktionenmenge die Operationen Minimum, Maximum, Durchschnitt sowie Durchschnitt mit maximaler Abweichung angewandt werden.

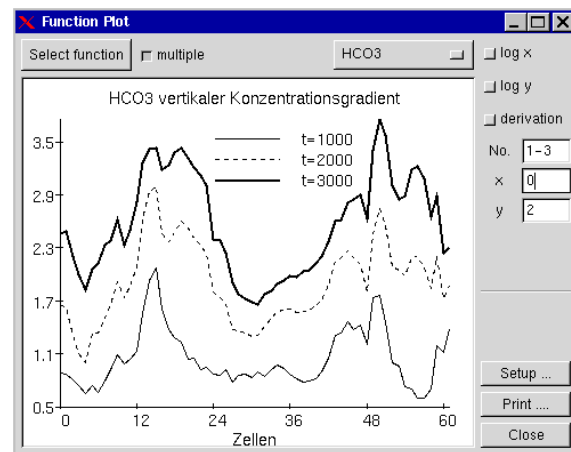


Abbildung A.8: Funktionendarstellung.

Damit sind alle wesentlichen Funktionen des Programms umrissen. Dem interessierten Leser sei empfohlen, die Online Hilfe von DySTReM für weitere Informationen zu konsultieren. Dem Basispaket sind einige Beispielmuster beigefügt, die einen guten Einblick in die Funktionsweise des Modells liefern. Ebenso sei auf die Parametersätze in Anhang C verwiesen.

<sup>4</sup>Nur für Funktionen vom Typ 2 oder 3 möglich (siehe **Load Data**).



## Anhang B

# Quellcode

Nachfolgend sind die wichtigsten ProgrammROUTINEN des Modells aufgeföhrt. Die rechenintensivsten Programmschritte wurden optimiert.

### B.1 Verknüpfung der Zellen

```
...
for (y=0; y<size_y; y++) for (x=0; x<size_x; x++)
{
  xr=(x+1)%(size_x);
  yu=(y+((x+1)%2))%(size_y);
  xl=(x+(size_x)-1)%(size_x);
  yo=(size_y-1+y+((x+1)%2))%(size_y);
  cell[x][y].nb[0]=&cell[xr][yu];
  cell[x][y].nb[1]=&cell[x ][(y+1)%(size_y)];
  cell[x][y].nb[2]=&cell[xl][yu];
  cell[x][y].nb[3]=&cell[xl][yo];
  cell[x][y].nb[4]=&cell[x ][(size_y-1+y)%(size_y)];
  cell[x][y].nb[5]=&cell[xr][yo];
}
...
```

x-Position der Nachbarn  $p_1$  und  $p_6$   
y-Position von  $p_2$   
x-Position von  $p_3$  und  $p_4$   
y-Position von  $p_5$

### B.2 Einheitlicher Schleifenrumpf für LBA und LBGK

```
...
for (y=0; y<size_y; y++) for (x=0; x<size_x; x++)
  if (!bound(cell[x][y]))
  {
    neu[0]=cell[x][y].p[0];
    for (i=1; i<7; i++)
    {
      if (bound((*neighbour(cell[x][y],i)))) neu[i]=reflect(cell[x][y],i);
      else neu[i]=particle_transport(cell[x][y],i);
    }
    equilibrium(neu,&feq,algorithm);
    iteration(neu,cell[x][y].w,feq,algorithm);
  }
...
```

Hinderniszellen sind invariant  
*neu* bezeichnet den Folgezustand

Berechnen des Gleichgewichts  
Iterationsschritt

```

typ_zelle* neighbour(typ_zelle c, int direction) Nachbarzelle
{
    return c.nb[fnb[direction]];                 $f_{nb}[i] = f_i^*$ 
}
double reflect(typ_zelle c, int direction)      Reflektion
{
    return c.p[1+fnb[direction]];
}
double particle_transport                      Transport zwischen Zellen
    (typ_zelle c, int direction)              gleicher und unterschiedlicher
{                                              Permeabilitäten
    typ_zelle nc;

    nc=*c.nb[fnb[direction]];
    if (c.w == nc.w) return c.nb[fnb[direction]]->p[direction];
    if (c.w < nc.w) return nc.p[direction]*c.w/nc.w;
    return reflect(c,direction)*(1-nc.w/c.w)+c.nb[fnb[direction]]->p[direction];
}

```

Der Ausdruck bound gibt an, ob die Zelle ein Hindernis darstellt. Hierzu zählen neben den Sedimenten auch belegte Zellen mit Durchlässigkeit  $w = 0$  (siehe Kapitel 5):

```
#define bound(A) (A.inhalt == Hindernis || (A.inhalt == belegt && A.w == 0))
```

### B.3 Berechnung des Gleichgewichtszustandes

```

void equilibrium(double neu[7],double *feq,char algorithm);
{
    int i;
    double vx,vy,pv[6],rho,v2,sq3=sqrt(3.0);

    rho=f[0]; for (i=1; i<7; i++) rho+=f[i];    Berechnung der Zelldichte
    vx=sq3*0.5*(neu[1]+neu[6]-neu[3]-neu[4])/rho;
    vy=(0.5*(-neu[1]-neu[3]+neu[4]+neu[6])+neu[5]-neu[2])/rho;
    pv[0]=0.5*(sq3*vx-vy);                     $(p_i v) = -(p_{i+3} v), i = 1, 2, 3$ 
    pv[1]=-vy;
    pv[2]=0.5*(-sq3*vx-vy);
    for (i=0; i<3; i++) pv[i+3]=-pv[i];
    if (algorithm == LBA)
    {
        *feq=0.0;
        for (i=1; i<7; i++) { feq++; *feq=pv[i]*pv[i]; }
    }
    else if (algorithm == LBGK)
    {
        v2=0.25-0.5*(vx*vx+vy*vy);             $(1/4)(1 - 2v^2)$ 
        *feq=2.0*rho*v2;                     $(1/2)\rho(1 - 2v^2)$ 
        rho /= 3.0;                           $\rho$  wird zur Hilfsvariablen.
        for (i=1; i<7; i++) { feq++; *feq=rho*(pv[i]+2.0*pv[i]*pv[i]+v2); }
    }
}

```

## B.4 Berechnung des Iterationsschrittes

```

void iteration(double neu[7],float w,double feq[7],char algorithmus);
{
  int i;
  double m,sm;
  matrix Klokak;
  extern matrix Kglobal;           Kollisionsmatrix  $\Delta^{Boltz}$ 
  extern double G,d0,d1,omega;
  extern model_parameter para;

  if (algorithmus == LBA)
  {
    sm=0.0;           m bezeichnet das Argument zur Matrizenmultiplikation
    if (w<1.0) { Klokak=make_matrix(w*para.rho/7.0); G=Klokak.G0;}
    else G=Kglobal.G0;
    for (i=0;i<6;i++) {m[i]=neu[i+1]-G*feq[i+1]; sm += m[i];};   G = G( $\rho_0$ )
    if (w<1.0) verringertes Durchlässigkeit (Kapitel 5)
    {
      ncell[x][y][0]=neu[0]+Klokak.d0*neu[0]+Klokak.d1*sm;
      for (i=1; i<7; i++)
      {
        ncell[x][y][i]=Klokak.c1*neu[0]+neu[i];
        for (j=0; j<6; j++) ncell[x][y][i] += Klokak.D[i-1][j]*m[j];
      }
    }
  }
  else           freie Zelle (Kapitel 2-4)
  {
    ncell[x][y][0]=neu[0]+Kglobal.d0*neu[0]+Kglobal.d1*sm; ncell bezeichnet das neue
    for (i=1; i<7; i++)                                     Gitter
    {
      ncell[x][y][i]=d1*neu[0]+neu[i];
      for (j=0; j<6; j++) ncell[x][y][i] += Kglobal.D[i-1][j]*m[j];
    }
  }
}
else if (algorithmus == LBGK)
{
  for (i=0; i<7; i++) ncell[x][y][i]= neu[i] + omega * (feq[i] - neu[i]);
}
}

```

## B.5 Advektiver und diffusiver Transport einer Zelle

```

double STrans(typ_zelle zelle,int ri,int stoff, double diff, double t)
{
  /* ri      = Bewegungsrichtung
  stoff     = transportierte Substanz (Nummer)
  diff     = Diffusionskorrektur
  t        = (Real)Zeit des Iterationsschrittes
  Cta     = Advektionskorrektur */

```

```

double erg,v,k;

if (bound(zelle) || bound(zelle.nb[ri-1])) kein Transport in/aus Hindernissen
v=-zelle.rvel[ri-1];
if (v >= 0.0) k=zelle.nb[ri-1]->k[stoff];
if (v < 0.0) k=zelle.k[stoff];
erg=t*(Cta*v*k+diff*(zelle.nb[ri-1]->k[stoff]-zelle.k[stoff]));
return erg;
}

```

Der Ausdruck bound ist in Anhang B.2 definiert.

## B.6 Berechnung des Transportiterationsschrittes

```

void transport(void)
{
float nKonz[XMAX][YMAX],dummy[XMAX];
int i,x,y,stoff;
double k,diff=0;

set_transport_constant();
for(stoff=0;stoff<para.comp_nr;stoff++) if (para.comp[stoff].dc >= 0)
{
diff=Ctd*para.comp[stoff].dc;
/* letzte Zeile berechnen */
y=para.size_y-1;
künstliche Gradientenforsetzung des unteren Randes in der ersten Zeile erzeugen
for (x=0; x<para.size_x; x++)
{
cell[x][0].k[stoff] = min(0.99*cell[x][y].k[stoff],
max(0,cell[x][y].k[stoff]-fabs(cell[x][y].k[stoff]-cell[x][y-1].k[stoff])));
}
for (x=0; x<para.size_x; x++)
{
nKonz[x][y] = cell[x][y].k[stoff];
for (i=1;i<7;i++) nKonz[x][y] += STrans(cell[x][y],i,stoff,diff,data.t2scale);
}
künstliche Gradientenforsetzung des oberen Randes in der ersten Zeile erzeugen
for (x=0; x<para.size_x; x++)
cell[x][0].k[stoff] = min(0.99*cell[x][1].k[stoff],
max(0,cell[x][1].k[stoff]-fabs(cell[x][1].k[stoff]-cell[x][2].k[stoff])));
berechnen der restlichen Zeilen !!! 1. Zeile wird nicht berechnet !!!
for (x=0; x<para.size_x; x++) for (y=1; y<para.size_y-1; y++)
{
nKonz[x][y] = cell[x][y].k[stoff];
for (i=1;i<7;i++) nKonz[x][y] += STrans(cell[x][y],i,stoff,diff,data.t2scale);
}
Konzentrationen umkopieren
for (x=0; x<para.size_x; x++) for (y=1; y<para.size_y; y++)
{
cell[x][y].k[stoff]=nKonz[x][y];
}
}
}

```

```
}

```

## B.7 Dichte- und Konzentrationskorrektur einer Zelle

```
void correct_cell_properties(typ_zelle *cell)
{
    int i,status=0;
    double dw=0.001;
    double w_min=0.01;

    if (cell->w-cell->w_akt > dw)
    {
        status=1;
        for (i=0; i<MAXSTOFFE; i++)
        {
            if (cell->w_akt > 0)
            {
                cell->k[i] *= cell->w/cell->w_akt;
                if (para.comp[i].density <= 0) cell->k[i]=min(cell->k[i],para.comp[i].max);
            }
            else cell->k[i] = 0;
        }
    }
    else if (cell->w_akt-cell->w > dw)
    {
        status=1;
        for (i=0; i<MAXSTOFFE; i++) cell->k[i] *= cell->w/cell->w_akt;
    }
    Dichteanpassung
    if (status == 1) for (i=0; i<7; i++)
    {
        if (cell->w > w_min) cell->p[i] *= cell->w_akt/cell->w;
        else switch (para.algorithm)
        {
            case 0: cell->p[i] = (para.rho/7.0)*cell->w_akt; break;
            case 1: if (i == 0) cell->p[i] = (para.rho/2.0)*cell->w_akt;
                    else cell->p[i] = (para.rho/12.0)*cell->w_akt;
                    break;
        }
    }
    cell->w=cell->w_akt;
}

```

## B.8 Einheitlicher Schleifenrumpf für Strukturveränderungen

```
void struc_modify(void)
{
    int x,y;
    int status=0;

    for (x=0; x<para.size_x; x++) for (y=0; y<para.size_y; y++)
        if (cell[x][y].inhalt == durchlässig || cell[x][y].inhalt == belegt)

```

```

{
  while ((status=modifying(&cell[x][y]))==1) Strukturmodifikation & -transformation
    correct_cell_properties(&cell[x][y]);
}
/* Korrektur der globalen Masse */
data.gm0=global_mass(&cell[0][0], para);
}

int modifying(typ_zelle *cell)
{
  int i,j=0;
  int status=0; /* Änderungsstatus */
  double w_min=0.01; /* minimale Durchlässigkeit von Strukturtransformati-
on */
  double c_min=0.01; /* c_min*c_max= minimale Konzentration zur Auslösung */

  for (i=0; i<para.comp_nr; i++)
  {
    if (cell->k[i]>para.comp[i].max && cell->inhalt != belegt) Ablagerung nach L1
    {
      /* keine Ablagerung vorgesehen, falls Dichte=0 */
      if (para.comp[i].density <= 0) cell->k[i]=para.comp[i].max;
      else
      /* Ablagerungskomponente(n) */
      {
        while (cell->k[i]>para.comp[i].max && cell->inhalt != belegt)
        {
          if (cell->w_akt>w_min) /* Strukturmodifikation (Überschreitung) */
          { cell=L1(cell,i); status=1; }
          else /* Strukturtransformation durchlässig -> belegt */
          {
            M1(cell,i);
          }
        }
      }
    }
    else if (para.comp[i].density > 0 && cell->k[i]<c_min*para.comp[i].max
      && cell->w_akt<1)
    {
      modifying(L2(cell,i));
      status=1;
      break;
    }
    else if (para.comp[i].density > 0 && cell->inhalt == belegt)
    {
      /* Testen, ob freier Nachbar mit geringer Konzentration existiert */
      for (j=0; j<6; j++) if (cell->nb[j]->inhalt == durchlässig
        && cell->nb[j]->k[i]<c_min*para.comp[i].max)
      {
        M2(cell,i,j);
        break;
      }
    }
  }
}

```



```

    }
    return status;
}

```

## B.9 Strukturmodifikation

```

typ_zelle* L1(typ_zelle *cell, int i)
{
    double d,alpha=0.3, w_min=0.01;

    d=min(alpha*para.comp[i].max,para.comp[i].density*cell->w_akt/cell->w);
    cell->k[i] -= alpha*para.comp[i].max;
    cell->w_akt-= (alpha*para.comp[i].max*cell->w)/para.comp[i].density;
    cell->d[0] = para.comp[i].density*(1.0-cell->w_akt);
    return cell;
}

typ_zelle* L2(typ_zelle *cell, int i)
{
    double c_min=0.01; /* c_min*c_max= minimale Konzentration zur Auslösung */
    double d,beta=20.0;

    d=min(beta*c_min*para.comp[i].max,cell->d[0]/cell->w);
    cell->k[i] += d;
    cell->w_akt += d*cell->w/para.comp[i].density;
    cell->d[0] = para.comp[i].density*(1.0-cell->w_akt);
    return cell;
}

```

## B.10 Porenraumtransformation

```

void M1(typ_zelle *cell, int i)
{
    int j,k;

    cell->k[i] -= para.comp[i].density*cell->w_akt/cell->w;
    cell->d[0] = para.comp[i].density;
    if (cell->w*cell->k[i]+SC1(cell,i) < 0) cell->k[i]=-SC1(cell,i)/cell->w;
    for (j=0; j<para.comp_nr; j++) if (para.comp[j].density <= 0)
    {
        if (cell->w*cell->k[j] > SMC1(cell,j)) cell->k[j]=SMC1(cell,j)/cell->w;
    }
    for (k=0; k<6; k++) if (cell->nb[k]->inhalt == durchlässig)
    {
        cell->nb[k]->k[i] += cell->w*cell->k[i]*(cell->nb[k]->k[i]/SC1(cell,i));
        cell->k[i] =0;
        for (j=0; j<para.comp_nr; j++) if (para.comp[j].density <= 0)
        {
            cell->nb[k]->k[j] += cell->w*cell->k[j]*(para.comp[j].max-cell->nb[k]-
            >k[j])
                /SMC1(cell,j);
            cell->k[j]=0;
        }
    }
}

```

```

    }
  }
  cell->inhalt=belegt;
}

double SC1(typ_zelle *cell, int i)
{
  int j;
  double SC=0;

  for (j=0; j<6; j++) if (cell->nb[j]->inhalt == durchlässig)
    SC += cell->nb[j]->k[i]*cell->nb[j]->w;
  return SC;
}

double SMC1(typ_zelle *cell, int i)
{
  int j;
  double SMC=0;

  for (j=0; j<6; j++) if (cell->nb[j]->inhalt == durchlässig)
    SMC += (para.comp[i].max-cell->nb[j]->k[i])*cell->nb[j]->w;
  return SMC;
}

void M2(typ_zelle *cell, int i, int j)
{
  double c_min=0.01; /* c_min*c_max= minimale Konzentration zur Auslösung */
  double d,beta=20.0;

  d=min(beta*c_min*para.comp[i].max,para.comp[i].density/cell->nb[j]->w);
  cell->nb[j]->k[i] += d;
  cell->w_akt = d*cell->nb[j]->w/para.comp[i].density;
  cell->d[0] = para.comp[i].density*(1.0-cell->w_akt);
  cell->w=1.0; /* forciert Korrektur */
  cell->inhalt=durchlässig;
}

```

# Anhang C

## Parametersätze

Im folgenden sind die Parametersätze sämtlicher Simulationsläufe für DySTReM aufgeführt. Als reale Viskosität wird in allen Modell die von Wasser bei Raumtemperatur gewählt ( $\nu = 1 \cdot 10^{-6} m^2/s$ ).

### C.1 Modelle zu Kapitel 2

Zur Herleitung der  $\alpha$ -Korrektur wurden die Modelle LBA bzw. LBGK für  $size_y = 10, \dots, 200$  unter Verwendung des gleichen Parametersatzes verwendet.

Modell	LBA	LBGK
Probe	ProbeM1.tif	ProbeM1.tif
Tiefe	2 mm	2 mm
$size_y$	100 (150)	100 (150)
Filter	0,6	0,6
Top	5	5
Bottom	5	5
Ausgabe	1 Bild	1 Bild
Simulation	1 Iteration	1 Iteration
Algorithmus	LBA	LBGK
Berechnung	nur Strom	nur Strom
Massenkorrektur	ein	ein
$\rho$	1,1	1,1
$\omega$	—	0,47
$c_0$	$1 \cdot 10^{-7}$	$1 \cdot 10^{-7}$
$\partial P$	0,5 Nm	0,5 Nm
Initialisierung	10.000 Iterationen	10.000 Iterationen
Fehlertoleranz	1%	1%
Konvergenzgrenze	0.01%	0.01%

### C.2 Modelle zu Kapitel 3

Nach der Initialisierungsphase wird für die Advektion die Konzentration eines Stoffes  $c$  der mittleren Zelle in der obersten Reihe auf  $1 \text{ mmol/l}$  gesetzt. Für die Diffusion wird die Zelle in der Bildmitte

( $size_x/2, size_y/2$ ) auf 1 mmol/l gesetzt.

<b>Modell</b>	<b>Advektion</b>	<b>Diffusion</b>
<b>Probe</b>	Rohr.tif	Rohr.tif
<b>Tiefe</b>	2 mm	2 mm
<b>size<sub>y</sub></b>	100	100
<b>Filter</b>	0,5	0,5
<b>Top</b>	5	5
<b>Bottom</b>	5	5
<b>Ausgabe</b>	30 Bilder	30 Bilder
<b>Simulation</b>	30 Sekunden	60 Sekunden
<b>Algorithmus</b>	LBA	LBA
<b>Berechnung</b>	nur T/R	nur T/R
<b>Massenkorrektur</b>	ein	ein
<b><math>\rho</math></b>	1,1	1,1
<b><math>\omega</math></b>	—	—
<b><math>c_0</math></b>	$1 \cdot 10^{-8}$	$1 \cdot 10^{-8}$
<b><math>\partial P</math></b>	$2,7 \cdot 10^{-4}$ Nm	0,0 Nm
<b>Initialisierung</b>	5.000 Iterationen	10 Iterationen
<b>Fehlertoleranz</b>	1%	1%
<b>Konvergenzgrenze</b>	0.005%	0.005%

Für beide Modelle wird ein fiktiver Stoff  $c$  definiert.

<b>Komponente <math>c</math></b>	<b>Advektion</b>	<b>Diffusion</b>
<b>Diffusionskonstante</b>	$0 \text{ cm}^2/\text{s}$	$1 \cdot 10^{-5} \text{ cm}^2/\text{s}$
<b>max. Konzentration</b>	$1 \text{ mmol}/\text{l}$	$1 \text{ mmol}/\text{l}$
<b>Eintrag</b>	$0 \text{ mmol}/\text{l} \cdot \text{h}$	$0 \text{ mmol}/\text{l} \cdot \text{h}$

### C.3 Modelle zu Kapitel 4

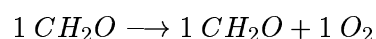
Die Modelle in den Abschnitten 4.1 (Geom A und B) und 4.2 (Tide A und B) unterscheiden sich allein in der Wahl des Druckgradienten und der Laufzeit.

Modell	Geom A (B)	Tide A (B)
Probe	ProbeM1.tif (ProbeM2.tif)	ProbeM1.tif (ProbeM2.tif)
Tiefe	2 mm	2 mm
$size_y$	100	100
Filter	0,6	0,6
Top	5	5
Bottom	5	5
Ausgabe	1 Bild	98 Bilder
Simulation	30.000 Iteration	24 Stunden
Algorithmus	LBGK	LBGK
Berechnung	nur T/R	nur T/R
Massenkorrektur	ein	ein
$\rho$	1,0	1,0
$\omega$	1,85	1,85
$c_0$	$1 \cdot 10^{-10}$	$1 \cdot 10^{-10}$
$\partial P$ (perm.)	0,5 Nm	—
$\partial P$ (min/max)	—	0 Nm/0,5 Nm
$\partial P$ (Periode)	—	12h
Initialisierung	10.000 Iterationen	10.000 Iterationen
Fehlertoleranz	1%	1%
Konvergenzgrenze	0.01%	0.01%

Für alle Modelle werden folgende Stoffe und Reaktionen definiert:

Komponente	Cyano ( $CH_2O$ )	$O_2$	$CO_2$
$D_c$ [ $cm^2/s$ ]	-1	$1 \cdot 10^{-5}$	$1 \cdot 10^{-5}$
$c^{max}$ [ $mmol/l$ ]	$1 \cdot 10^3$	0,48	10
Eintrag [ $mmol/l \cdot h$ ]	-1	-1	-1

- Produktion

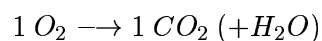


Kinetische Gleichung:

$$v = t \cdot k \cdot c_{CH_2O}$$

mit  $k = 1,0 \left[ \frac{1}{h} \right]$ .

- Respiration



Kinetische Gleichung:

$$v = t \cdot k \cdot \frac{c_{O_2}}{km + c_{O_2}}$$

mit  $k = 7,2 \left[ \frac{mmol}{l \cdot h} \right]$  und  $km = 1,42 \cdot 10^{-3} \left[ \frac{mmol}{l} \right]$ .

Da das  $H_2O$  keinerlei Auswirkungen auf die Ergebnisse hat, wird es bei den Modellrechnungen weggelassen. Das  $CO_2$  ist nötig, um eine Reaktion in DySTReM zu definieren und dient gleichzeitig als Kontrollvariable zur Massenerhaltung.

## C.4 Modelle zu Kapitel 5

Modell zur Verifikation der modifizierten Strömungssiteration:

Modell	Kreis-xxx
Probe	rohr.tif
Extra	circle.tif
Tiefe	1 cm
$size_y$	50
Filter	0,5
Top	5
Bottom	5
Ausgabe	1 Bild
Simulation	1 Iteration
Algorithmus	LBA
Berechnung	T/R/S
Massenkorrektur	ein
$\rho$	1,1
$c_0$	$1 \cdot 10^{-8}$
$\partial P$	10 Nm
Initialisierung	10.000 Iterationen
Fehlertoleranz	1%
Konvergenzgrenze	0.01%

Die Modelle 'xxx' simulieren verschiedene Durchlässigkeiten. Dem hinzugefügten Bild 'circle.tif' werden die Durchlässigkeiten  $w = 0; 1 \cdot 10^{-6}; 0,001; 0,05; 0,2; 0,5; 0,8; 0,99; 1$  zugewiesen.

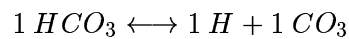
Modelle zur Kalzifizierung:

Modell	Calzit 5.3	Calzit 5neu
Probe	ProbeM1d.tif (Sediment 1)	ProbeM1c.tif (Sediment 2)
Tiefe	5 mm	5 mm
$size_y$	60	60
Filter	0,7	0,7
Top	4	4
Bottom	4	4
Ausgabe	20 Bilder	20 Bilder
Simulation	20.000 Iteration	20.000 Iterationen
Algorithmus	LBGK	LBGK
Berechnung	T/R/S	T/R/S
Massenkorrektur	aus	aus
$\rho$	1,0	1,0
$\omega$	0,441	0,441
$c_0$	$5 \cdot 10^{-7}$	$5 \cdot 10^{-7}$
$\partial P$ (perm.)	1,4 Nm	1,6 Nm
Initialisierung	30 Iterationen	30 Iterationen
Fehlertoleranz	1%	1%
Konvergenzgrenze	0.01%	0.01%

Für beide Modelle werden folgende Stoffe und Reaktionen definiert:

Komponente	$HCO_3$	$Ca$	$H$	$CO_3$	$CaCO_3$
$D_c [cm^2/s]$	$1 \cdot 10^{-5}$	$1 \cdot 10^{-5}$	$1 \cdot 10^{-5}$	$1 \cdot 10^{-5}$	$1 \cdot 10^{-6}$
$c^{max} [mmol/l]$	$5 \cdot 10^2$	$1 \cdot 10^2$	$1 \cdot 10^3$	$5 \cdot 10^2$	$2 \cdot 10^{-2}$
Eintrag [ $mmol/l \cdot h$ ]	$1,8 \cdot 10^5$	$1,2 \cdot 10^5$	-1	-1	-1
Dichte/Molmasse [ $mmol/l$ ]	-	-	-	-	0,12

- Gleichgewichtsreaktion der Kohlensäure

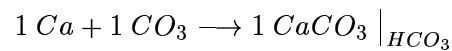


Kinetische Gleichung:

$$v = t \cdot k \cdot c_{HCO_3} - k_2 \cdot c_H \cdot c_{CO_3}$$

mit  $k = 2,7 \cdot 10^2 [\frac{1}{h}]$ ;  $k_2 = 2,7 \cdot 10^2 [\frac{l}{h \cdot mmol}]$  für Sediment 1 und  $k = 5 \cdot 10^2 [\frac{1}{h}]$ ;  $k_2 = 5 \cdot 10^2 [\frac{l}{h \cdot mmol}]$  für Sediment 2.

- Kalzifizierung



Kinetische Gleichung:

$$v = t \cdot k \cdot c_{Ca} \cdot c_{CO_3}$$

mit  $k = 22 [\frac{l}{h \cdot mmol}]$  und einen Hemmungsgrad für  $HCO_3$  von  $R_H = 4$ .

# Literatur

- Adler C., Boghosian B., Flekkøy E., Margolus N. und Rothman D. (1995): Simulating three-dimensional hydrodynamics on a cellular-automata machine. *Journal of Statistical Physics* 81: 105–128.
- Amos C., van Wagoner N. und Daborn G. (1998): The influence of subaerial exposure on the bulk properties of fine-grained intertidal sediment from Minas Basin, Bay of Fundy. *Estuarine, Coastal and Shelf Science* 27: 1–13.
- Ancona M.G. (1994): Fully-Lagrange and Lattice-Boltzmann methods for solving systems of conservation equations. *Journal of Computational Physics* 115: 107–120.
- Anderson F. und Meyer L. (1986): The interaction of tidal currents on a disturbed intertidal bottom with a resulting change in particulate matter quantity, texture and food quality. *Estuarine, Coastal and Shelf Science* 22: 19–29.
- Balasubramanian K., Hayot F. und Saam W. (1987): Darcy's law from lattice-gas hydrodynamics. *Physical Review A* 36(5): 2248–2253.
- Benzi R., Succi S. und Vergassola M. (1992): The lattice Boltzmann equation: Theory and applications. *Physics Reports* 222(3): 145–197.
- Bernsdorf J. (1994): *Computersimulation von Strömungen in komplexen Geometrien mittels Lattice – Boltzmann – Automaten*. Diplomarbeit in Physik, Carl von Ossietzky Universität Oldenburg, Oldenburg.
- Berthe-Corti L. und Ebenhöf W. (1999): A mathematical model of cell growth and alkane degradation in Wadden Sea sediment suspensions. *Biosystems* 49: 161–189.
- Bhatnagar P., Gross E. und Krook M. (1954): A model for collision in gases. I. small amplitude processes in charged and neutral one-component systems. *Physical Review A* 94(3): 511–525.
- Braun J. und Sambridge M. (1995): A numerical method for solving partial differential equations on highly irregular evolving grids. *Nature* 376(24): 655–660.
- Breves W. (1997): *Schwarze Flecken: ein mathematisches Modell*. Diplomarbeit in Marine Umweltwissenschaften, Carl von Ossietzky Universität Oldenburg, Oldenburg.
- Chen H., Chen S. und Matthaeus W.H. (1992): Recovery of the Navier-Stokes equations using a lattice-gas Boltzmann method. *Physical Review A* 45(8): R5339–R5342.
- Chen H., Teixeira C.M. und Molvig K. (1997): Digital physics approach to computational fluid dynamics: Some basic theoretical features. *International Journal of Modern Physics C* 8(4): 675–684.



- Chen S., Chen H. und Doolen G.D. (1989): How the lattice gas model for the Navier-Stokes equation improves when a new speed is added. *Complex Systems* 3: 243–251.
- Codd E.F. (1968): *Cellular Automata*. Academic Press, New York.
- Crank J. (1975): *The Mathematics of Diffusion*. Clarendon Press, Oxford, 2 ed.
- Cunningham A., Characklis W., Abedeen F. und Crawford D. (1991): Influence of biofilm accumulation on porous media hydrodynamics. *Environmental Science Technology* 25: 1305–1311.
- Cunningham A. und Wanner O. (1994): Modelling microbial processes in porous media with application to biotransformation. In: *Hydrological, chemical and biological processes of transformation and transport of contaminants in aquatic environments*, (ed. N.P. et al.), vol. 219. Proc. symposium, Rostov-on-Don, 1993, IAHS Publications, Center for Interfacial Microbial, Montana State University, Bozeman, MT 59717-0398, USA.
- Dardis O. und McCloskey J. (1998): Lattice Boltzmann scheme with real numbered solid density for the simulation of flow in porous media. *Physical Review E* 57(4): 4834–4837.
- Davies A. und Lawrence J. (1994): Examining the influence of wind and wind wave turbulence on tidal currents, using a three-dimensional hydrodynamic model including wave-currents interaction. *Journal of Physical Oceanography* 24: 2441–2460.
- DeLeo P., Baveye P. und Ghiorse W. (1997): Use of confocal laser scanning microscopy on soil thin-sections for improved characterization of microbial growth in unconsolidated soils and aquifer materials. *Journal of Microbiological Methods* 30: 193–203.
- DeMasi A., Esposito R., Lebowitz J. und Presutti E. (1989): Hydrodynamics of stochastic cellular automata. *Commun. Math. Phys.* 125: 127–145.
- d’Humières D. und Lallemand P. (1987): Numerical simulations of hydrodynamics with lattice gas automata in two dimensions. *Complex Systems* 1: 598.
- d’Humières D., Lallemand P. und Frisch U. (1986): Lattice gas models for 3d hydrodynamics. *Europhysics Letters* 2: 291–297.
- Di Pietro L.B., Melaya A. und Zaleski S. (1994): Modelling water infiltration in unsaturated porous media by interacting lattice gas-cellular automata. *Water Resources Research* 30(10): 2785–2792.
- Diemer K., Hunt K., Chen S., Shimomura T. und Doolen G. (1989): Density and velocity dependence of Reynolds numbers for several lattice gas models. In: *Lattice Gas Methods for Partial Differential Equations*, (ed. G. Doolen). Addison-Wesley, Reading, MA.
- Domenico P.A. und Schwartz F.W. (1998): *Physical and Chemical Hydrogeology*. John Wiley and Sons, New York, 2. ed.
- Droz M. und Chopard B. (1988): Chaos and complexity. In: *Nonequilibrium phase transitions and cellular automata*, (ed. R. Livi). World Scientific, Singapore.
- Emerton A., Coveney P. und Boghosian B. (1997): Lattice-gas simulations of domain growth, saturation, and self-assembly in immiscible fluids and microemulsions. *Physical Review E* 55(1): 708–720.
- Forkel C. (1999): Möglichkeiten und Grenzen von mathematisch-numerischen Grundwassermodellen in der Praxis. *Wasser und Boden* 51(4): 14–18.

- Freed D.M. (1998): Lattice Boltzmann method for macroscopic porous media modeling. *International Journal of Modern Physics C* 9(8): 1491–1503.
- Frisch U., d’Humières D., Hasslacher B., Lallemand P., Pomeau Y. und Rivet J.P. (1987): Lattice gas hydrodynamics in two and three dimensions. *Complex Systems* 1: 649–707.
- Frisch U., Hasslacher B. und Pomeau Y. (1986): Lattice-gas automata for the Navier-Stokes equation. *Physical Review Letters* 56(14): 1505–1508.
- Fründ C. und Cohen Y. (1992): Diurnal cycles of sulfate reduction under oxic conditions in cyanobacterial mats. *Applied and Environmental Microbiology* 58(1): 70–77.
- Gatignol R. (1975): Théorie cinétique des gazes à répartition discrète de vitesse. *Lecture Notes Physique* 36.
- Gerdes G., Claes M., Dunaitshik-Piewak K., Riege H., Krumbein W.E. und Reineck H.E. (1993): Contribution of microbial mats to sedimentary surface structures. *Facies* 29: 61–74.
- Gerdes G., Krumbein W. und Reineck H. (1985): The depositional record of sandy, versicolored tidal flats (Mellum Island, Southern North Sea). *Journal of Sedimentary Petrology* 55: 265–278.
- Giraud L., d’Humières D. und Lallemand P. (1998): A lattice Boltzmann model for Jeffreys viscoelastic fluid. *Europhysics Letters* 42(6): 625–630.
- Glud R., Gundersen J., Jørgensen B., Revsbech N. und Schulz H. (1994): Diffusive and total oxygen uptake of deep-sea sediments in the eastern South Atlantic Ocean: In situ laboratory measurements. *Deep-Sea Research* 41: 1767–1788.
- Glud R., Ramsing N., Gundersen J. und Klimant I. (1996): Planar optodes: a new tool for fine scale measurements of two-dimensional  $O_2$  distribution in benthic communities. *Marine Ecology Progress Series* 140: 217–226.
- Gonnella G., Orlandini E. und Yeomans J. (1998): Lattice Boltzmann simulations of lamellar and droplet phases. *Physical Review E* 58(1): 480–485.
- Hardy J., Pomeau Y. und de Pazzis O. (1973): Time evolution of two-dimensional model system i: invariant states and time correlation functions. *Journal of Mathematical Physics* 14: 1746–1759.
- Harlow E. (1999): *Developing Linux Applications with GTK Plus and GDK*. New Riders, 488p.
- Haußels R. (1997): *Modellierung der Hexadekan-Mineralisierung in Sedimentsuspensionen in Abhängigkeit von der Gelöstsauerstoffkonzentration und der Hexadekankonzentration*. Diplomarbeit in Mathematik, Carl von Ossietzky Universität Oldenburg, Oldenburg, 72S.
- Haußels R., Klenke T., und Ebenhöf W. (1998): Simulation von geologischen und biologischen Prozessen in Porenräumen mittels zellulärer Automaten. *Terra nostra* 3: 124.
- Haußels R., Klenke T., und Ebenhöf W. (1999): Simulation strukturabhängiger geo-biologischer Prozesse in porösen Medien mittels zellulärer Automaten-Modelle. *Sediment '99* : 105–107.
- Haußels R., Klenke T., Kropp J. und Ebenhöf W. (2000): Dynamic distribution patterns of dissolved oxygen in tidal sediments – effects of tides and pore geometries studied by a cellular automaton model. *ingesandt an Hydrogeology Journal* .
- Haußels R., Klenke T., Kropp J. und Ebenhöf W. (2001): Investigations on the influence of pore space geometry on concentration patterns and transport properties of dissolved oxygen in a

- bioactive sandy sediment by a Lattice Boltzmann Automaton model. *Hydrological Processes* 15: 81–96.
- He X. und Luo L.S. (1997): Theory of the lattice Boltzmann method: From the Boltzmann equation to the lattice Boltzmann equation. *Physical Review E* 56(6): 6811–6817.
- Higuera F. und Succi S. (1989): Simulating the flow around a circular cylinder with a lattice Boltzmann equation. *Europhysics Letters* 8(6): 517–521.
- Higuera F., Succi S. und Benzi R. (1989): Lattice gas dynamics with enhanced collision. *Europhysics Letters* 9(4): 345–349.
- Höpner T. (1996): Schwarze Flecken im Watt: neue Dimensionen. *Mitteilungen / Deutsche Gesellschaft für Meeresforschung* 2: 2.
- Hou S., Sterling J., Chen S. und Doolean G.D. (1996): A Lattice Boltzmann subgrid model for high reynolds number flows. *Fields Institute Commun.* 6: 151.
- Huettel M. und Gust G. (1992): Impact of bioroughness on interfacial solute exchange in permeable sediments. *Marine Ecology Progress Series* 62: 241–248.
- Huettel M., Ziebis W., Forster S. und Luther III G. (1998): Advective transport affecting metal and nutrient distributions and interfacial fluxes in permeable sediments. *Geochimica et Cosmochimica Acta* 62(4): 613–631.
- Illangasekare T.H. und Döll P. (1989): A discrete method of characteristics model of solute transport in water table aquifers. *Water Resources Research* 25(5): 857–867.
- Jørgensen B. (1982): Ecology of the bacteria of the sulphur cycle with special reference to anoxic-oxic interface environments. *Phil. Trans. Soc. London B* 298: 543–561.
- Jørgensen B. und Des Marais D. (1990): The diffusive boundary layer of sediments: oxygen microgradients over a microbial mat. *Limnology and Oceanography* 35: 1343–1355.
- Jørgensen B. und Revsbech N. (1983): Colorless sulfur bacteria *beggiatoa* spp. and *thiovulum* spp., in  $O_2$  and  $H_2S$  microgradients. *Applied and Environmental Microbiology* 45(4): 1261–1270.
- Jørgensen B.B. (1996): Material flux in the sediment. *Coastal and Estuarine Studies* 52: 115–135.
- Karlin I.V. und Succi S. (1998): Equilibria for discrete kinetic equations. *Physical Review E* 58(4): R4053–R4056.
- Keen T. und Glenn S. (1995): A coupled hydrodynamic-bottom boundary layer model of storm and tidal flow in the middle Atlantic height of North America. *Journal of Physical Oceanography* 25: 391–406.
- Koolman J. und Röhm K.H. (1998): *Taschenatlas der Biochemie*. Georg Thieme Verlag, Stuttgart, 2. ed.
- Koponen A., Kataja M. und Timonen J. (1997): Permeability and effective porosity of porous media. *Physical Review E* 56(3): 3319–3325.
- Kougias C.F. (1991): *Simulating a Small-Scale Oceanic Front of River Discharge Type with the Lattice Gas Automata Method*. Doktorarbeit in Physik, Carl von Ossietzky Universität Oldenburg, Oldenburg.
- Kropp J. und Klenke T. (1997): Phenomenological pattern recognition in the dynamical structures of tidal sediments from the German Wadden Sea. *Ecological Modelling* 103: 151–170.

- Kropp J., von Bloh W., Block A., Klenke T. und Schellnhuber H.J. (1997): Multifractal characterization of microbially induced calcite formation in recent tidal flat sediments. *Sedimentary Geology* 109: 37–51.
- Lavallée P., Boon J. und Noullez A. (1991): Boundaries in lattice gas flows. *Physica D* 47: 233–240.
- Lehner B. (1999): *KDE- und Qt-Programmierung*. Addison-Wesley, München, 564p.
- Liu C.W. und Narasimhan T.N. (1989): Redox-controlled multiple-species reactive chemical transport – 1. model development. *Water Resources Research* 25(5): 869–882.
- Luo L.S. (1998): Unified theory of lattice Boltzmann models for nonideal gases. *Physical Review Letters* 81(8): 1618–1621.
- Martys N.S., Shan X. und Chen H. (1998): Evaluation of the external force term in the discrete Boltzmann equation. *Physical Review E* 58(5): 6855–6857.
- Masselot A. und Chopard B. (1998): A lattice Boltzmann model for particle transport and deposition. *Europhysics Letters* 42(3): 259–264.
- Michaelsen M., Hulsch, Höpner T. und Berthe-Corti L. (1992): Hexadecane mineralization in oxygen-controlled sediment-seawater cultivations with autochthonous microorganisms. *Applied and Environmental Microbiology* 58(9): 3072–3077.
- Paterson D.E., Yallop M. und George C. (1994): Stabilization. In: *Biostabilization of Sediments*, (eds. W.E. Krumbein, D.M. Paterson und L.J. Stal). BIS University of Oldenburg, Oldenburg, Germany.
- Pennington H. (1999): *GTK Plus / Gnome Application Development*. New Riders, 492p.
- Qian Y., d’Humières D. und Lallemand P. (1991): In: *Advanced in Kinetic Theory and Continuum Mechanics, Book in honor of H. Cabannes*, (eds. R. Gatignol und Soubbara-Meyer). Springer Verlag.
- Qian Y., d’Humières D. und Lallemand P. (1992): Lattice BGK models for Navier-Stokes equation. *Europhysics Letters* 17(6): 479–484.
- Reid R.C., Prausnitz J.M. und Poling B.E. (1986): *The Properties of Gas and Liquids*. Mc Graw-Hill, USA, 4. ed.
- Reineck H. (1982): *Das Watt: Ablagerungs- und Lebensraum*, chap. I.3 Hydrographie. Kramer, Frankfurt am Main, 3. ed., pp. 12–17.
- Rutgers van der Loeff M. (1981): Wave effects on sediment water exchange in a submerged sand bed. *Netherlands Journal of Sea Research* 15: 100–112.
- Scheidegger A. (1974): *The Physics of Flow Through Porous Media*. University of Toronto Press, 3. ed.
- Shan X. und He X. (1998): Discretization of the velocity space in the solution of the Boltzmann equation. *Physical Review Letters* 80(1): 65–68.
- Smagorinsky J. (1963): General circulation experiments with the primitive equations. i. the basic experiment. *Monthly Weather Rev.* 91: 99.
- Sterling J. und Chen S. (1996): Stability analysis of Lattice Boltzmann methods. *Journal of Computational Physics* 123(1): 196–206.

- Stockman H., Li C. und Wilson J. (1997): A lattice-gas and lattice Boltzmann study of mixing at continuous fracture junctions: Importance of boundary. *Geophysical Research Letters* 24(12): 1515–1518.
- Teixeira C.M. (1997): Digital physics simulation of lid-driven cavity flow. *International Journal of Modern Physics C* 8(4): 685–96.
- Uchida K., Okumura K. und Daihatsu Motor Co., Ltd. (1999): Aerodynamic noise simulation based on lattice Boltzmann method. In: *SAE International Congress and Exposition: Vehicle Aerodynamics*. Paperbound, Detroit, MI, USA.
- Verberg R. und Ladd A. (1999): Simulation of low-Reynolds-number flow via a time-independent lattice-Boltzmann method. *Physical Review E* 60(3): 3366–3373.
- von Neumann J. (1966): In: *Theory of Self-Reproducing Automata*, (ed. A.W. Burks). University of Illinois Press.
- White M. (1994): Tidal and subtidal variability in the sloping benthic boundary layer. *Geophysical Research* 99: 7851–7864.
- Whitehouse R. (1995): Observations of the boundary layer characteristics and the suspension of sand at a tidal site. *Continental Shelf Research* 15: 1549–1567.
- Wolfram S. (1986): Cellular Automaton Fluids 1: Basic theory. *Journal of Statistical Physics* 45(3/4): 471–526.
- Worthing R., Mozer J. und Seeley G. (1997): Stability of Lattice Boltzmann methods in hydrodynamic regimes. *Physical Reviews E* 56(2): 2243–2253.
- Xi H., Peng G. und Chou S.H. (1999): Finite-volume Boltzmann schemes in two and three dimensions. *Physical Review E* 60(3): 3380–3388.
- Ziebis W., Huettel M. und Forster S. (1996): Impact of biogenic sediment topography on oxygen fluxes in permeable seabeds. *Marine Ecology Progress Series* 140: 227–237.

# Index

## Symbole

$(\mathcal{P}, \mathcal{Z}, \mathcal{V}, \Phi)$	..... <i>siehe</i> zellulärer Automat
$(Rf)_j$	..... 8
$(S_k f)_j$	..... 8
$(\mathcal{Z}, dist)$	..... 6
$\mathcal{C}, \bar{\mathcal{C}}$	..... <i>siehe</i> Stoffkonzentration
$\Delta, \Delta^{Boltz}$	..... <i>siehe</i> Kollisionsfunktion
$\mathcal{D}$	..... <i>siehe</i> Ablagerungskonzentration
$D_c$	..... <i>siehe</i> Diffusionskonstante
$K_\alpha$	..... <i>siehe</i> $\alpha$ -Korrektur
$\mathcal{M}$	..... <i>siehe</i> Strukturtransformation
$\mathcal{R}$	..... <i>siehe</i> Modellreaktion
$R_H$	..... <i>siehe</i> Hemmungsgrad
$Re$	..... <i>siehe</i> Reynoldszahl
$Reakt(z, t)$	..... 41
$\mathcal{S}$	..... <i>siehe</i> Zustand
$Struc$	..... 20
$T, T', T^*$	..... <i>siehe</i> Transitionsfunktion
$T_B'$	..... <b>21, 66</b>
$Trans(z + P, t)$	..... 37
$\mathcal{V}, \mathcal{V}', \mathcal{V}^*, \bar{\mathcal{V}}$	..... <i>siehe</i> Variablenraum
$\mathfrak{W}$	..... 67
$\mathcal{Z}$	..... <i>siehe</i> zellulärer Raum
$a$	..... <i>siehe</i> Reflektionsgrad
$\alpha$ -Korrektur	..... <b>31, 101</b>
$\beta$	..... <i>siehe</i> Besetzungswert
$c_{Adv}$	..... 38
$c_{Diff}$	..... 38
$c_i^*$	..... <i>siehe</i> relative Konzentration
$c_i^{max}$	..... 35, 52
$c_s$	..... <i>siehe</i> Schallgeschwindigkeit
$d$	..... <i>siehe</i> Dimension
$\Delta f_{fix}$	..... 26
$\varepsilon$	..... <i>siehe</i> Porosität
$\varepsilon_w$	..... <i>siehe</i> minimaler Durchlässigkeitswert
$\varepsilon_{sys}$	..... <i>siehe</i> Raumskalierungsfaktor
$f_i$	..... 6
$f^{eq}$	..... 13
$f_{fix}$	..... 36

$f_j(z)$	..... <i>siehe</i> relativer Partikelfluß
$\gamma$	..... 39
$k$	..... <i>siehe</i> Permeabilität
$k_R$	..... <i>siehe</i> Reaktionskonstante
$km$	..... <i>siehe</i> Michaelis-Menten
$\mu$	..... 15
$\nu$	..... <i>siehe</i> Viskosität
$\omega$	..... <i>siehe</i> Relaxationsfaktor
$\partial_y P$	..... <i>siehe</i> Druckgradient
$\phi$	..... <i>siehe</i> Filterwert
$q$	..... <i>siehe</i> Iterationskorrektur
$\rho$	..... <i>siehe</i> Dichte
$v$	..... <i>siehe</i> Geschwindigkeit
$v(R)$	..... <i>siehe</i> Reaktionsgeschwindigkeit
$\mathfrak{w}$	..... 67
$w$	..... <i>siehe</i> Durchlässigkeitswert
$w_0$	..... <i>siehe</i> Anfangsdurchlässigkeit
$w_{akt}$	..... 75
$w_f$	..... <i>siehe</i> freie Durchlässigkeit
$z$	..... <i>siehe</i> Zelle

## A

Ablagerungskonzentration	..... 67
Adsorption	..... 80, 82
Advektion	..... <b>36, 47, 66</b>
Anfangsdurchlässigkeit	..... 66
Anfangszustand	..... 4
Aufwandsabschätzung	..... 27
Austauschbarkeit	..... 24, 80
Automat	
face-centered-hypercubic	..... 5
Frisch, Hasslacher und Pomeau	... 5, 6, <b>8</b>
Hardy-Pomeau-Pazzis	..... 5
Lattice-Boltzmann	..... 5, 10, <b>17</b>
Lattice-Boltzmann-Equation	..... 4
Lattice-Gas	..... 4
Lattice BGK	..... 5, 18, <b>18</b>
zellulärer	..... 2, 3, 21

- B**
- Bereichsfehler . . . . . 68, 73  
Besetzungswert . . . . . 27  
Bewegungsgleichung . . . . . 15  
Boltzmann-Maxwell-Verteilung . . . . . 18  
Boltzmann-Transport-Gleichung . . . . . 15
- C**
- Cutoff . . . . . **33**
- D**
- Darcy's Gesetz . . . . . 26, 33, 55  
Dichte . . . . . 11, 14, 26, 67, 87  
Diffusion . . . . . **36, 45, 66**  
    konstante . . . . . 35, 62, 81  
    numerische . . . . . 37  
Dimension . . . . . 3, 37, 81  
Drehoperator . . . . . 8  
Drehung . . . . . 9  
Druck . . . . . 16  
Druckgradient . . . . . 21, 37  
    fixer . . . . . 26, 36  
Durchlässigkeit  
    Anfangs- . . . . . 66  
    freie . . . . . 67  
Durchlässigkeitswert . . . . . **65, 81**  
    minimaler . . . . . **71, 80**  
DySTReM . . . . . 2, 83, 85
- E**
- Enzymreaktion . . . . . 42
- F**
- FCHC . . . . . *siehe* Automat  
Fermi-Dirac . . . . . 13  
FHP . . . . . *siehe* Automat  
FHP-I . . . . . **8**  
Filterwert . . . . . 27, 31, 86  
Finite-Elemente-Methode . . . . . 3
- G**
- Galileische Invarianz . . . . . 15, 18, 33  
Geschwindigkeit . . . . . 11, 36  
Gezeitengang . . . . . 22, 55  
Gimp Tool Kit . . . . . 83  
Gleichgewichtsreaktion . . . . . 42
- H**
- Hemmungsgrad . . . . . 42
- I**
- Hermitesche Polynome . . . . . 23  
Hexagonales Gitter . . . . . **6**  
Hindernis . . . . . 65, 83  
    Erweiterung . . . . . **20**  
HPP . . . . . *siehe* Automat
- K**
- Kollisionsfunktion  
    LBA . . . . . 66  
Kollisionsregel . . . . . 5, 8  
Kontinuitätsgleichung . . . . . 15  
Konzentration  
    gradient . . . . . 44  
    maximale . . . . . 35, 52  
    relative . . . . . 71  
Korrekturfaktor . . . . . 15
- L**
- Lattice-Boltzmann . . . . . *siehe* Automat  
LBA . . . . . *siehe* Automat  
LBE . . . . . *siehe* Automat  
Leitfähigkeit  
    hydraulische . . . . . 19, 51, 56
- M**
- Massenerhaltung . . . . . 8, 10, 21  
Massenkorrektur . . . . . 28, 71, 87  
Michaelis-Menten-Gleichung . . . . . 42  
Modellreaktion . . . . . 43  
Molmasse . . . . . 67  
Multifraktalanalyse . . . . . 83
- N**
- Nachbar  
    relativer . . . . . 4, 5  
Nachbarschaft . . . . . 4, 37  
Navier-Stokes Gleichung . . . . . 15, 23, 31

- P**
- Partikel ..... 4, 10  
 relativer Fluß ..... 38  
 transport ..... 82  
 Permeabilität ..... 19, 26, 31, 56, 81  
 Porenraum ..... 20  
 Porosität ..... 24, 32, 57
- R**
- Randbedingung  
 erweiterte ..... 43  
 periodische ..... 21  
 Randzelle ..... 4  
 Raumskalierungsfaktor ..... 16  
 Reaktionsgeschwindigkeit ..... 41  
 Reaktionshemmer ..... 42  
 Reaktionskonstante ..... 41  
 Reaktionsrate ..... 45  
 Redox-Reaktion ..... 41  
 Reflektionsgrad ..... **24**  
 Relaxationsfaktor ..... 18, 23, 87  
 Reynoldszahl ..... 19, 33
- S**
- Sättigungskonzentration ..... 35  
 Schallgeschwindigkeit ..... 15  
 Sensibilitätsanalyse ..... 53  
 Skalierung ..... 16, 18, 26  
 Smagorinsky-Subgrid-Verfahren ..... 19  
 Spiegelung ..... 9  
 Stabilität ..... 65, 73, 80  
 lokale ..... 40  
 Stoffkonzentration ..... 35, 66  
 Strömung  
 laminare ..... 16, 19, 24  
 modell ..... 3  
 muster ..... 19  
 turbulente ..... 24  
 Strukturmodifikation ..... **67, 68**  
 Strukturtransformation ..... **74**
- T**
- Transition  
 funktion ..... 4, 19, 20, 37, 43, 75  
 schritt ..... 4  
 Transport-Reaktions-Erweiterung ..... **43**  
 Transport-Reaktions-Modell ..... **43, 67**  
 Transportgleichung ..... **37**
- Transportintervall  
 maximales ..... 38  
 Transportschritt ..... 38
- V**
- Variablenraum ..... 4, 20, 35  
 Verknüpfung ..... 21  
 Viskosität ..... 15, 19, 30
- Z**
- Zelle ..... 3  
 belegt ..... **65, 72**  
 durchlässig ..... **65**  
 frei ..... **20, 65**  
 Hindernis ..... **20, 65**  
 Zellstruktur ..... **20, 65**  
 zellulärer  
 Automat ..... **2, 3, 21**  
 Raum ..... 4  
 Zustand ..... 4  
 Anfangs- ..... 4  
 menge ..... 20, 35  
 stationärer ..... **13**



# Lebenslauf

- Persönliche Daten: Ralf Haußels  
geb. am 17.9.1969 im Hamburg  
deutscher Staatsangehöriger
- 1976-1989            Grundschule in Hamburg, Realschule in  
Himmelpforten, Technisches Gymnasium in Stade.  
Abitur im Mai 1989
- 1989-1990            12 Monate Wehrdienst in Stade
- 1990-1997            Mathematik-Studium an der Carl-von-Ossietzky  
Universität in Oldenburg (1990-1994,1995-1997)  
und an der Universität Paul Sabatier in Toulouse,  
Frankreich (1994-1995).  
Diplom im Januar 1997
- 1997-2000            Promotion in Oldenburg bei Prof. Dr. Ebenhöh.  
Wissenschaftlicher Angestellter am ICBM Oldenburg.