

DuMu^X

Ein Open-Source-Simulator zur Modellierung von Strömungs- und Transportprozessen in porösen Medien für komplexe Ingenieur Anwendungen

Das Land oder der Untergrund, auf dem wir uns bewegen, hat als Hydrosystem für den Menschen überragende Bedeutung erlangt. Es birgt Bodenschätze, wird als Speicherort für verschiedene (Abfall-) Stoffe benutzt und enthält vor allem die unendlich wichtige Ressource Grundwasser, die in Deutschland etwa 70 Prozent des Trinkwassers stellt. Die Modellierung und Simulation von Strömungs- und Transportprozessen einer Vielzahl von Hydrosystemen steht im Zentrum der Forschungen am Lehrstuhl für Hydromechanik und Hydrosystemmodellierung (LH2).



1. Forschungsschwerpunkte und Überblick

In einer Vielzahl von Forschungsprojekten werden an der Universität Stuttgart insbesondere grundlegende Methoden entwickelt, um Strömungen in porösen Medien oder im Austausch mit porösen Medien zu beschreiben. Klassische wasserwirtschaftliche und umweltrelevante Anwendungsgebiete sind Strömungen im natürlichen Untergrund. Dies betrifft zum Beispiel Fragen rund um den Schutz und die Bewirtschaftung des Grundwassers, die Sanierung kontaminierter Standorte, die Nutzung des Untergrunds zur Speicherung energierelevanter Gase wie z.B. Kohlendioxid oder Methan, die Gewinnung geothermischer Energie oder die dauerhafte Lagerung von Atommüll. Darüber hinaus

zeigen sich die sogenannten Reservoir-Ingenieure an Strömungen im Untergrund interessiert, insbesondere wenn sie sich mit Techniken zur erweiterten Öl- und Gasförderung beschäftigen. Alle genannten Anwendungsfelder haben gemeinsam, dass eine Interaktion mit dem Grundwasser und damit einer unserer wichtigsten Trinkwasserreserven möglich ist. Will man sie realistisch beurteilen oder aber Effekte und Risiken vorhersagen, sind Modellkonzepte und Methoden erforderlich, die eine Simulation zusammenhängender Prozesse je nach betrachteten Raum- und Zeitskalen effizient und robust ermöglichen.

Der grundlegenden Methodenentwicklung liegt also stets die Vision einer Anwendung für verschiedenste Fragestellungen aus den Ingenieurwissenschaften und die Integration in eine umfassende Simula-

tionsumgebung zugrunde. So wurden in jüngster Zeit verbesserte Ansätze zur Beschreibung von Prozessen auf verschiedenen Skalen (Mehrskalenmodellierung, Upscaling) entwickelt oder die Kopplung von Modellen für unterschiedliche Strömungskompartimente (z.B. poröse Medien mit freien Strömungen) untersucht. Neben dieser Grundlagenarbeit stehen einige bestimmte Anwendungsgebiete im Vordergrund der Forschung, wie z.B. der mögliche Einsatz thermisch unterstützter Sanierungsmethoden für kontaminierte Standorte (in Kooperation mit der Versuchseinrichtung zur Grundwasser- und Altlastensanierung VEGAS) oder die Speicherung von klimaschädlichem Kohlendioxid (CO₂) in tiefen geologischen Formationen.

Neben SimTech ist ein Großteil der Forschung im internationalen Graduiertenkolleg NUPUS (Non-Linearities and Upscaling in Porous Media) vernetzt.

Innerhalb der LH2-Arbeitsgruppe wird im Rahmen des DuMu^x-Projekts eine umfassende Toolbox für die Simulation von Strömungen durch poröse Medien entwickelt. Das Projekt ist beispielhaft für moderne Open-Source-Entwicklung, gewährleistet sie doch eine nachhaltige Verfügbarkeit und Benutzbarkeit des Simulators und erleichtert so den fachlichen Austausch. Ziel unserer Arbeit ist es, DuMu^x als ein Werkzeug für wissenschaftliches Arbeiten zu etablieren, das eine flexible Integration neuer Simulationskonzepte und -methoden erlaubt, aber auch ein leistungsfähiges Softwarepaket für Anwendungen in relevanten, realistischen Größenordnungen darstellt. Wie genau das gelingen kann, sollen der folgende Überblick über den Simulator und die zu Grunde liegenden Entwicklungsmethoden sowie ausgewählte Beispiele aktueller Entwicklungen und Ingenieur Anwendungen deutlich machen.

2. DuMu^x

DuMu^x ist eine Simulationssoftware für Mehr- {phasen-, komponenten-, skalen-, physik-, ...} Strömungs- und Transportprozesse in porösen Medien [1]. Das Programmsystem basiert auf der Numerikplattform DUNE, einer C++ Umgebung zur Lösung partieller Differentialgleichungen mit gitter-basierten Methoden (www.dune-project.org). DuMu^x ist eine Open-

SUMMARY

The development of an open-source simulator for complex engineering applications in the field of flow and transport through porous media is the central aim of the DuMu^x project (dumux.org). This article introduces the basic principals for the development of DuMu^x and its field of application. Recent developments of new methods (e.g. model coupling, up-scaling and multi-scale approaches, adaptivity) as well as interesting fields of applications (e.g. CO₂ storage, fuel cells) are discussed by means of illustrated examples. These show that the development of fundamental and theoretical methods is not isolated from the problems and questions of the engineering applications. Moreover, the common implementations in DuMu^x allow the use of recent methodological developments for the applications on a scale which is relevant for the specific problem more easily.

Source-Software, die unter dumux.org frei verfügbar ist. Das Open-Source-Konzept ermöglicht es allen interessierten Nutzern die Software an die eigenen Anforderungen anzupassen, eigene Implementierungen nach Bedarf zu verwirklichen, sowie sich am Entwicklungsprozess zu beteiligen. So leistet DuMu^x einen Beitrag zu mehr Transparenz, die für die Reproduzierbarkeit und Nachhaltigkeit in der modernen Forschung unerlässlich ist. DuMu^x kommt bereits in einer Vielzahl nationaler und internationaler Forschungsprojekte zur Anwendung. Das Spektrum reicht dabei von der Simulation der CO₂-Speicherung in geologischen Formationen, Bio-Clogging, also dem Verschluss von Poren durch einen Biofilm, Verdunstung an der Erdoberfläche, über die Optimierung des Wassermanagements in Brennstoffzellen bis hin zur Untersuchung der Ausbreitung von Medikamenten in Blutgefäßen und Gewebe.

Eine Grundidee der Entwicklung ist es, eine möglichst modulare Struktur zu schaffen, die den flexiblen Einsatz unterstützt. Das Grundgerüst besteht aus Basismodulen die von verschiedenen Modellen gemeinsam genutzt werden können und modell-spezifischen Modulen, die die Spezialisierungen für verschiedene Anwendungsbereiche enthalten. Diese Struktur stellt einerseits sicher, dass möglichst viele Anwender unmittelbar von Verbesserungen der Basismodule profitieren können, und ermöglicht andererseits die einfache Umsetzung neuer spezialisierter Modelle. Bereits bestehende Modelle können dabei auf verschiedenen Skalen, von der kleinen Labor-Skala bis hin zur großflächigen Feld-Skala, angewendet werden. Da DuMu^x auf der DUNE-Plattform aufbaut, die bereits verschiedene lineare Lösungsverfahren

und Gitter-Manager sowie eine parallele Infrastruktur bereitstellt, kann sich die Entwicklung im Wesentlichen auf die Umsetzung und Anwendung der physikalischen Modelle konzentrieren.

2.1 Einsatzmöglichkeiten

DuMu^x konzentriert sich auf die Beschreibung von Strömungs- und Transportprozessen in porösen Medien auf der Darcy/REV Skala. Das Darcy-Gesetz erlaubt eine vereinfachte Beschreibung der Fluidbewegung in einem porösen Medium, bei der die einzelnen Poren nicht im Detail aufgelöst werden müssen. Das heißt, es muss zum Beispiel nicht das Volumen jeder einzelnen Pore, sondern nur der mittlere Hohlraumanteil, die Porosität, bekannt sein. Das repräsentative Volumen, für das die Porosität oder andere Strömungsparameter berechnet werden, heißt „repräsentatives Elementarvolumen“ (REV). Relevante physikalische Strömungs- und Transportprozesse können dann mit Hilfe partieller Differentialgleichungen modelliert werden. Beispielgleichungen wären die Massen-, Impuls-, oder Energieerhaltung, für deren Lösung wiederum weitere grundsätzliche Zusammenhänge wie die Kapillardruck-Sättigungs- oder die Relative-Permeabilitäts-Sättigungs-Beziehung und spezifischen Materialeigenschaften der porösen Medien und der Fluide einbezogen werden.

2.2 Modelle

DuMu^x setzt sich aus verschiedenen „Standardmodellen“ zur Modellierung von Prozessen in porösen Medien zusammen. Diese reichen von isothermen Modellen für Einphasen-Einkomponenten-Strömungen, also zum Beispiel für die Modellierung einer reinen Wasserströmung, bei der nur eine Komponente H₂O bei konstanter Temperatur betrachtet wird, bis hin zu nicht-isothermen Modellen für Dreiphasen-Dreikomponenten-Strömungs- und Transportprozesse. Drei Fluidphasen können zum Beispiel als Wasser, Öl und Luft bei der Betrachtung von kontaminiertem Grundwasser vorkommen. Des Weiteren sind bereits noch komplexere „Nicht-Standard“-Modelle verfügbar, wie etwa ein verallgemeinertes Mehrphasen-Mehrkomponenten-Modell, welches auch die Modellierung eines thermischen Nicht-

Gleichgewichts erlaubt. Zur diskreten Modellierung von Klüften steht ebenso ein Modell bereit wie zur Analyse geomechanischer Vorgänge, mit welchen sich zusätzlich zu Strömungs- und Transportvorgängen die Deformation des porösen Mediums beschreiben lässt. Die Deformation kann wiederum Auswirkungen auf hydraulisch relevante Parameter wie die Porosität und die Durchlässigkeit haben. Für die Beschreibung der Interaktion zwischen Fluiden und der porösen Matrix werden verschiedene grundlegende Beziehungen und Materialeigenschaften benötigt. Hierfür sind Modelle und Parametrisierungen, wie z.B. die Brooks-Corey- oder die van-Genuchten-Parametrisierung implementiert. Für die genaue Charakterisierung der Fluid-Phasen-Eigenschaften sind sogenannte Fluidsysteme für verschiedene Mischungen verfügbar, z.B. für „Wasser-Luft“- oder „Brine(Salzlösung)-CO₂“-Gemische. Darüber hinaus können spezifische Parameter wie Porosität und Permeabilität orts- und problemabhängig definiert werden.

Die physikalischen Modelle sind mit Hilfe verschiedener Diskretisierungsmethoden umgesetzt. Zum Teil kann je nach konkreter Anwendung zwischen verschiedenen Methoden gewählt werden. Es sind sowohl voll-implizite, d.h. Methoden, in denen alle Modellgleichungen gleichzeitig gelöst werden müssen, als auch sogenannte halb-implizite Formulierungen, die eine sequentielle Lösung verschiedener Modellgleichungen erlauben, in DuMu^x implementiert. Bei den räumlichen Diskretisierungsmethoden liegt der Schwerpunkt auf verschiedenen Finite-Volumen Methoden.

Zusätzlich zu den genannten Methoden und Implementierungen werden laufend neue Modelle entworfen oder bestehende Modelle ausgebaut. Diese Neu- oder Weiterentwicklungen werden regelmäßig in den öffentlichen, „stabilen“ Teil von DuMu^x integriert und in halbjährlichen Releases veröffentlicht. Ein Release stellt eine stabile Version für all die Nutzer dar, die nicht sofort auf die aktuellsten Neuerungen angewiesen sind. Die jüngste Version ist seit Oktober 2013 verfügbar. Neue Modelle werden dabei immer möglichst so integriert, dass die modulare Struktur ausgeschöpft und bestehende Interfaces genutzt werden können sowie die Kompatibilität zwischen zumindest zwei direkt aufeinander-

der folgenden Releases gewährleistet bleibt. Zur Zeit liegt der Fokus auf der Entwicklung von Ansätzen zur Modellkopplung und zur Mehrskalen-Mehrphysik-Modellierung.

3. Entwicklungsprinzipien

DuMu^x wird momentan hauptsächlich am Lehrstuhl für Hydromechanik und Hydro-systemmodellierung der Universität Stuttgart entwickelt. Die meisten Entwickler sind Doktoranden, die für drei bis fünf Jahre am Projekt DuMu^x mitwirken. Durch die konsequente Umsetzung von Open-Source-Prinzipien soll erreicht werden, dass Wissenschaftlerinnen und Wissenschaftler der Forschungsgruppe sowie andere Entwickler/ Nutzer sich auf eine gut dokumentierte und getestete Software plus die Korrektheit aktueller Änderungen im Code verlassen können.

3.1 Review und selbstständiges Testen

Das Entwicklungsmodell sieht vor, dass nur positiv getestete Funktionalitäten in den stabilen, öffentlich zugänglichen Zweig von DuMu^x hinzugefügt werden dürfen und bewährte Funktionalitäten und Schnittstellen grundsätzlich nicht leichtfertig verändert werden sollen. Um dieses zu gewährleisten und eine gleichbleibend hohe Qualität sicherzustellen, werden alle geplanten Änderungen vorab durch mindestens einen zweiten Entwickler kontrolliert. Neue Entwürfe werden dafür zunächst in einem separaten, der Öffentlichkeit nicht zugänglichen Entwicklungszweig von DuMu^x implementiert. Nach der Publikation neuer Modelle und der durch sie gewonnenen Erkenntnisse, werden zuverlässig arbeitende, also „stabile“ Modelle oder Module regelmäßig in den öffentlichen Teil von DuMu^x integriert. Externe Kooperationspartner können darüber hinaus nach Absprache auch Zugang zum Entwicklungszweig erhalten. Die Funktionalität des stabilen Bereichs wird automatisch und regelmäßig überprüft. Dabei wird für verschiedene Test-Setups der Code übersetzt und jeweils eine Simulation gestartet. Ist dieser erste Teil des Tests erfolgreich, werden die neuen Simulationsergebnisse anschließend automatisch mit bestehenden Referenzlösungen verglichen. Auf diese Weise können

Fehler minimiert und die Reproduzierbarkeit von Ergebnissen sichergestellt werden.

3.2 Versionsverwaltung, Dokumentation und Issue Tracker

DuMu^x wird unter Versionsverwaltung entwickelt, d.h. alle Veränderungen sowie der aktuelle Fortschritt werden zentral gespeichert und archiviert. Somit kann jeder Anwender jederzeit die Entwicklung der Modelle und Algorithmen im stabilen Zweig zurückverfolgen. Aus der im C++-Code enthaltenen Dokumentation wird automatisch eine gut les- und navigierbare HTML-Dokumentation generiert. Auf diese Weise ist es vergleichsweise einfach, eine aktuelle Dokumentation und damit auch eine komplette Programmierschnittstelle (API) auf der DuMu^x Homepage anzubieten. Die Dokumentation von Fehlern oder Entwicklungsanfragen wird durch ein öffentliches Issue-Tracking-System verwaltet. Dies ermöglicht es auch den Nutzern, Vorschläge oder Fehlermeldungen einzubringen.

3.3 Erweiterung der Nutzer-Community

Wie andere Open-Source Projekte auch, profitiert auch DuMu^x davon, dass möglichst viele Nutzer die Software kostenfrei herunterladen, nutzen, modifizieren und weiter verbreiten. Dabei ist es allerdings wichtig, dass Nutzer ihre Modifikationen ihrerseits wiederum veröffentlichen. So können bestehende Resultate einfach reproduziert und die eigene Forschung auf fortgeschrittener Software aufgebaut werden. Die Voraussetzung, um DuMu^x auszuprobieren ist eine Unix-Umgebung (Linux oder Mac OS X). Die Bedienung läuft über eine Eingabekonsole. Will man über die einfache Bedienung oder die Veränderung einzelner Parameter hinaus selbst aktiv werden und etwa den Code erweitern, sollte man grundlegende Kenntnisse in C++ mitbringen, da DuMu^x nicht über eine grafische Benutzeroberfläche verfügt. Ein eigens herausgegebenes Handbuch beschreibt das schrittweise Vorgehen, so dass sich DuMu^x auch ohne Studienabschluss in Informatik verwenden lässt. Bei offenen Fragen hilft eine Mailing-Liste, für die sich jeder Nutzer einfach und frei registrieren kann.

4. Beispiele für aktuelle Entwicklungen

Zusammenfassend dient der Auf- und Ausbau von DuMu^x der grundsätzlichen (Weiter-) Entwicklung von Methoden sowie dem gezielten Einsatz der Simulationstools für Ingenieur Anwendungen. Über den aktuellen Status quo in der Methodenentwicklung soll nachfolgend ein Überblick gegeben werden, bevor anschließend auf ein repräsentatives Beispiel näher eingegangen wird.

Modelle können stets nur eine Annäherung an die Wirklichkeit liefern. Die erforderliche Komplexität eines Modells hängt dabei von der jeweiligen Fragestellung ab. Ein Modell sollte bestenfalls gerade so komplex sein, dass die zur Beantwortung einer Fragestellung erforderlichen wesentlichen Prozesse abgebildet sind. Dies kann – räumlich und zeitlich verteilt – unterschiedliche Prozesse umfassen und diesen Prozessen können auch völlig verschiedene Modellgleichungen zugrunde liegen. In DuMu^x werden daher auch vielfältige Ansätze zur **Modellkopplung** verfolgt [2], beispielsweise werden poröse Medien mit freien Strömungen räumlich gekoppelt. Sequentielle, d.h. zeitliche Kopplungen können wiederum sinnvoll sein, wenn die Komplexität der Prozesse sich mit der Zeit ändert, wie es bei der CO₂-Speicherung oder der Ausbreitung von Schadstoffen im Boden der Fall sein kann. Unabhängig von der Art der Kopplung muss jedoch immer die Kontinuität der Bilanzgrößen durch geeignete Kopplungsbedingungen gewährleistet werden.

Je nach Art der Ingenieurfragestellung müssen verschiedenste Prozesse berücksichtigt werden, die auf unterschiedlichen Zeitskalen, also schnell oder langsam, und Längenskalen, also großräumig oder lokal begrenzt, zum Beispiel auf einer Kilometerskala gegenüber einer Zentimeterskala, ablaufen können. Diese Skalenabhängigkeit stellt eine große Herausforderung für die Simulation dar. Abhängig von der Größe des zu berechnenden Gesamtsystems erfordert die Beschreibung kleinskaliger Effekte hier oft eine hohe räumliche und zeitliche Auflösung und ist damit sehr rechenintensiv. Um Simulationen effizienter durchführen zu können, benötigt es daher Ansätze um die Auswirkungen kleinskaliger Effekte auch bei größerer Auflösung zu berücksichtigen. Dazu werden in DuMu^x

zwei Ansätze verfolgt. Zum einen werden **Upscaling**-Methoden verwendet, die es ermöglichen, kleinskalige Effekte über effektive Parameter auf einer größeren Skala abzubilden. Klassische Beispiele sind die Kapillardruck-Sättigungs-Beziehung und die relative-Permeabilität-Sättigungs-Beziehung. Zum anderen können über sogenannte **Mehrskalenansätze** lokal kleinskalige Effekte direkt modelliert und mit einem Modell auf größerer Skala gekoppelt werden.

Die **Adaptivität** von Modellen ist ein weites Gebiet und kann die Anpassung von Zeitschrittgrößen, räumlicher Diskretisierungsweite, geeigneten Primärvariablen etc. bedeuten. Diese Anpassung muss immer vor dem Hintergrund entstehen, am Ende ein möglichst genaues, aber auch möglichst effizientes Modell zu erhalten. In DuMu^x werden insbesondere gitteradaptive Ansätze verfolgt, die eine feinere Auflösung von Interfaces oder Ausbreitungsfronten erlauben und so z.B. die numerische Diffusion verringern. Hier kann DuMu^x entscheidend von der ihr zugrundeliegenden Toolbox DUNE profitieren, die Gittermanager zur Verfügung stellt, welche eine entsprechende lokale Adaptierung des Rechengitters ermöglichen. Darüber hinaus lassen sich mit DuMu^x modeladaptive Ansätze umsetzen, also die flexible Kombination verschieden komplexer Modellansätze, die zum Beispiel in der Simulation großräumiger Systeme eingesetzt werden können.

4.1 Repräsentatives Beispiel: Adaptive großskalige Simulation

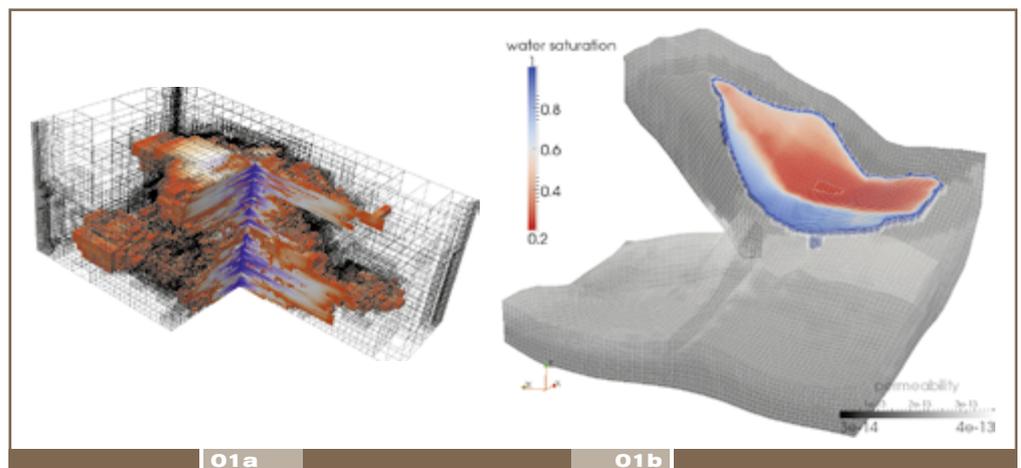
Um wichtige Anwendungsbereiche, wie sie im nachfolgenden Abschnitt beschrieben werden, zufriedenstellend simulieren zu können, müssen zunehmend komplexe physikalische Prozesse mit einer hohen räumlichen Auflösung und für gleichzeitig große Einflussgebiete modelliert werden. Aufgrund beschränkter Hardware-Ressourcen können große Modellgebiete jedoch oft nur auf relativ groben Gittern simuliert werden. Adaptive Methoden sind hier ein vielversprechendes Werkzeug, um die Simulation großskaliger Systeme effizienter zu machen. Dabei wird durch die Anwendung eines adaptiven Gitters versucht, die Zahl der globalen Freiheitsgrade zu minimieren und dennoch eine hohe Genauigkeit der Berechnungen zu er-

reichen. DuMu^x unterstützt dabei sogenannte h-adaptive Gitter, die nichtkonforme Verfeinerung mittels „hängender Knoten“ erlauben. Um auf diesen nichtkonformen Gittern eine hohe Genauigkeit zu erreichen, sind „Standard“-Finite-Volumen-Methoden oft nicht ausreichend. Daher kommen in DuMu^x noch weitere, komplexere Methoden wie eine Finite-Volumen-Methode mit Mehrpunktflussapproximation und eine „Mimetic-Finite-Difference“-Methode zum Einsatz. Um ein adaptives Gitter auch für hoch aufgelöste geologische Modelle verwenden zu können, wurde für DuMu^x ein Mehrskalensatz entwickelt und implementiert. Verschiedene „Upscaling“-Methoden ermöglichen es dabei, feinskalige Parameter auf grobe Gitterzellen zu skalieren. Dadurch ist lokal auch eine adaptive Vergrößerung möglich, die die Anzahl globaler Freiheitsgrade entscheidend reduziert und somit die Voraussetzung für großskalige Berechnungen bei lokal feiner Auflösung schafft: **(01a)** [3]. Neben der räumlichen Auflösung ist die Komplexität der zu modellierenden physikalischen Effekte von großer Bedeutung für die Effizienz der Simulationen. Verschiedene in DuMu^x implementierte Mehrphysikmethoden erlauben es daher die Komplexität der Modelle räumlich adaptiv zu variieren. Dadurch können Bereiche, die mit unnötig komplexen und damit zu rechenintensiven Modellen beschrieben werden, minimiert werden: **(01b)** [4].

5.1 Überblick

Ein verbessertes Verständnis von **Verdunstungsvorgängen aus Böden** ist von großer Bedeutung, um z.B. die Austrocknung von Böden in ariden Regionen sowie einer daraus eventuell resultierenden Versalzung zu verhindern oder entsprechende Gegenmaßnahmen einzuleiten. Mit Hilfe des Modellkopplungs-Tools in DuMu^x können Simulationen der Strömungen im Boden mit freien Strömungen gekoppelt berechnet und die Austauschprozesse so am Interface modelliert werden.

Ein weiteres Beispiel für die flexible Handhabbarkeit von DuMu^x ist der dadurch ermöglichte Erkenntnisgewinn über **Austauschprozesse zwischen Pflanzen und Boden**. Ein großer Anteil des in den Untergrund eindringenden Wassers wird von den Pflanzenwurzeln zunächst aufgenommen und durch die damit verbundene Pflanzentranspiration anschließend zurück an die Atmosphäre gegeben. Die Modellierung der Wasseraufnahme der Wurzeln ist daher wichtig für viele umweltrelevante



5. Beispielszenarien für Ingenieur Anwendungen

Dank seiner methodischen Vielseitigkeit und Flexibilität kann DuMu^x für eine Vielzahl von Problemen – von akademischen ein-dimensionalen Studien bis hin zu angewandten Berechnungen auf der Feld-Skala – eingesetzt werden. Die folgenden Beispiele geben einen Eindruck der momentanen Einsatzmöglichkeiten von DuMu^x bei aktuellen wissenschaftlichen Fragestellungen, die im Wesentlichen aus dem Bereich des Umweltingenieurwesens kommen.

und landwirtschaftliche Fragestellungen. Viele praktische Anwendungen, wie Vorhersagen zu Ernteerträgen, der Schadstoffverteilung in Feldern oder auch dem geeignetsten Bewässerungsmanagement, setzen ein tiefgehendes Verständnis der Interaktionen zwischen Bodenwasser und Pflanzenwurzeln voraus. Die Anwendung hoch entwickelter Modellansätze fördert genau dieses Wissen. In einer Kooperation mit dem Forschungszentrum Jülich wird in DuMu^x derzeit ein hochauflösendes Boden-Wurzel-Modell entwickelt, welches Wasser- und Stofftransportprozesse in der ungesättigten Bodenzone mit dem Wasser-

(a) Adaptive Mehrskalensmodellierung von komplexen fein aufgelösten geologischen Modellen: Das Beispiel zeigt eine Wasserinjektion in die Modell-2-Formation des SPE 10 Benchmark Problems [5], einer der meistgerechneten Benchmarkformationen für Mehrskalensmodellierung in porösen Medien.

(b) Unterirdische CO₂ Speicherung: Fahne einer Simulation über fünfzig Jahre auf einem adaptiv verfeinertem Gitter. Lediglich der komplexeste Teilbereich des Mehrphysikansatzes ist sichtbar.

transport in einem explizit aufgelösten Wurzelnetzwerk verbindet. Dieses Modell wird im Anschluss dazu genutzt, z.B. die Effekte der Bodenheterogenität auf die Pflanzenwasseraufnahme, die Kombination von Wasser- und Stoffaufnahme der Wurzeln oder die Salzablagerung in der Wurzelzone zu untersuchen.

Ein hochaktuelles Forschungsthema ist die **CO₂-Speicherung** in tiefen geologischen Formationen mit dem Ziel das Treibhausgas CO₂ in der Atmosphäre zu reduzieren. Die verschiedenen Mechanismen, die das CO₂ daran hindert, an die Atmosphäre zurück zu gelangen sowie die dazugehörigen Vorgänge im Untergrund können mithilfe von DuMu^x grundlegend analysiert werden. Die Modellierung und Simulation ist für Voraussagen über z.B. die Ausbreitung des CO₂ und Abschätzungen der mit der Speicherung verbundenen Risiken sehr wichtig. Hierfür müssen viele unterschiedliche Prozesse beschrieben werden. DuMu^x bietet die Möglichkeit je nach Fragestellung unterschiedliche Komplexitätslevel einzubinden, etwa Mehrphasen-Strömungen, Mehrkomponenten-Transport, geochemische Vorgänge oder geochemische Prozesse.

Ein weiteres Treibhausgas rückt in den Fokus von DuMu^x: Methan. Die Wirkung dieses Treibhausgases ist weitaus stärker als beispielsweise die Wirkung von CO₂. Die Erforschung der Mechanismen, die zu einer **Migration von** biogenem oder geogenem **Methan** aus dem Untergrund in die Atmosphäre führen und damit letztlich zur Erderwärmung beitragen, ist somit von immenser Bedeutung. Dabei spielen Anwendungen wie die unkonventionelle Gasförderung („Hydraulic Fracturing“), aber auch die Emission aus Kohleflözen oder die mikrobielle Methanerzeugung eine Rolle. Durch die Modellierung der Methanmigration und den Vergleich mit vorhandenen Messwerten können neue Erkenntnisse über den Ablauf und die Relevanz der verschiedenen Prozesse gewonnen werden. DuMu^x bietet hierfür verschiedene Werkzeuge, um die Ausbreitung von gasförmigem Methan im Untergrund zu simulieren. Auch hier kann dank der flexiblen und modularen Struktur sehr gut auf die jeweils erforderlichen Komplexitätslevel eingegangen werden.

Eine Anwendung, die beispielsweise im Zusammenhang mit der Speicherung von CO₂ untersucht wird, ist die Verwendung

von Biofilmen zur gezielten Veränderung von hydraulischen Eigenschaften im Untergrund. Dieses „**Bio-Clogging**“ genannte Verfahren ermöglicht es durch den Aufbau von Biofilmen und die gezielte, mikrobiell induzierte Ausfällung von Carbonaten natürlich oder künstlich erzeugte Fließpfade abzudichten. Um die Abdichtungswirkung und Beständigkeit einer solchen Biomineralisierung vorherzusagen zu können, müssen die verschiedenen biogeochemischen Reaktionen und der Transport der einzelnen beteiligten Komponenten berechnet werden. In Zusammenarbeit mit der Montana State University werden dazu komplexe Modelle entwickelt, die einerseits das Biofilm-Wachstum und die Kinetiken der Reaktionen sowie andererseits die Strömungs- und Transportprozesse miteinander koppeln müssen.

Nachhaltigkeit im Umgang mit bestehenden Ressourcen und Ausbau neuartiger Technologien steht gleichfalls im Vordergrund eines weiteren, durch DuMu^x simulierbaren Forschungsfeldes: den **Brennstoffzellen**. Diese erzeugen Strom und Wärme aus der chemischen Reaktion zwischen Wasserstoff und Luft. Da als einziges Abfallprodukt Wasser entsteht, werden Brennstoffzellen als Zukunftstechnologie betrachtet, mit der emissionsarm Autos angetrieben, Gebäude geheizt und Computer betrieben werden können – vorausgesetzt, es werden erneuerbare Energien zur Erzeugung des Brennstoffs (Wasserstoff oder Alkohol) genutzt. Lebensdauer, Effizienz und Produktionskosten sind Schlüsselfaktoren für den erfolgreichen kommerziellen Einsatz. Das bei der Reaktion entstehende Wasser hat wiederum großen Einfluss auf die Effizienz und Lebensdauer der Brennstoffzellen. Simulationen können nun helfen, die Strömungsprozesse und die Verteilung des Wassers in den einzelnen Brennstoffzellenkomponenten besser zu verstehen und zu optimieren. In DuMu^x steht ein Modell zur Verfügung, welches die chemische Reaktion, die resultierende Stromdichte und die Wassermenge sowie die Ausbreitung des Wassers beschreibt und so einen Beitrag zur Weiterentwicklung dieser Technologie leistet.

5.2 Aktuelle Beispiele aus der Praxis

Zwei aktuelle Anwendungsgebiete der DuMu^x-Simulationen sollen hier genauer vorgestellt werden: CO₂-Speicherung und Wassermanagement in Brennstoffzellen.

Die geologische **Speicherung von CO₂** ist das zentrale Thema der im Exzellenzcluster Simulation Technology (SimTech) verfolgten Vision „Umwelttechnik“. Gleichwohl die CO₂-Speicherung vor allem in Deutschland höchst umstritten und gesellschaftlich derzeit nicht mehrheitsfähig ist, besitzt das Thema für die Umwelttechnik eine gleichbleibend hohe Relevanz. Eine Reihe von Anwendungen und Ingenieurproblemen lassen sich mit sehr ähnlichen Methoden, wie sie eben auch von DuMu^x bereitgestellt werden, beschreiben und behandeln, z.B. Untersuchungen zum Hydraulic Fracturing (Fracking) oder die dauerhafte Lagerung nuklearer Abfälle im Untergrund.

Den hier aufgeführten Problemstellungen ist gemein, dass Simulationswerkzeuge unverzichtbar sind, um Fragen zu auftretenden Risiken, zur Machbarkeit oder zum Design konkreter Projekte zu beantworten. Sie haben damit eine hohe gesellschaftliche Relevanz und sind für die fundierte Abwägung unterschiedlichster Methoden der Energieerzeugung und ihrer Umweltfolgen unabdingbar. Die unmittelbare Vernetzung von Sozialwissenschaftlern mit Ingenieurwissenschaftlern in gemeinsamen Projekten zur CO₂-Speicherung ist ein besonderes Merkmal der Arbeit im Rahmen von SimTech. Aus einer SimTech-Kooperation ist inzwischen ein neues Forschungsverbundvorhaben mit der Bundesanstalt für Geowissenschaften und Rohstoffe (BGR, Hannover) entstanden. Ziel ist es hier, einen partizipativen Modellierungsansatz zu verfolgen, der Stakeholder-Gruppen in verschiedenen Stufen des Modellierungsprozesses miteinbezieht, um einerseits die Rezeption von Modellierung und Simulation sowie deren Ergebnisse zu verbessern und andererseits Wege zu erforschen, wie sich die Transparenz beim Zustandekommen von Simulationsergebnissen und deren Interpretation optimieren lässt.

Der Pilotstandort Ketzin (www.co2ketzin.de), 40 Kilometer westlich von Berlin gelegen, ist die momentan einzige CO₂-Speicherstätte in Deutschland. Hier wurden

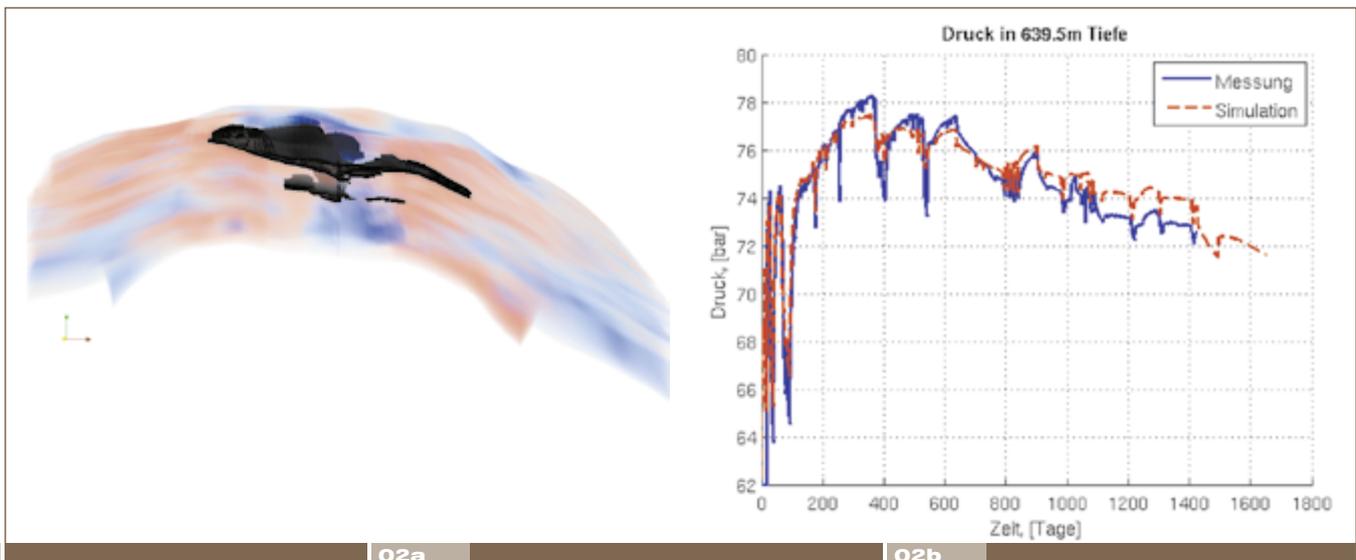
unter Leitung des Deutschen GeoForschungsZentrums GFZ von 2008 bis 2013 insgesamt knapp 70.000 Tonnen CO₂ gespeichert mit dem Ziel, das Wissen über die Speicherung von CO₂ und über die Prozesse, die dabei im Untergrund auftreten, zu erweitern sowie Erfahrungen mit der praktischen Umsetzung der Technologie zu sammeln. Das CO₂ wird dabei unterhalb eines ehemaligen Erdgasspeichers in 630 bis 650 Metern Tiefe in porösen Sandsteinschichten gespeichert.

Im Jahr 2004 wurde mit den vorbereitenden Arbeiten an der Speicherstätte begonnen. Unter anderem wurden drei Bohrungen, eine für die Injektion des CO₂ (Ktzi 201) und zwei weitere für das Monitoring und die Datenanalyse (Ktzi 200, Ktzi 202), errichtet. Die Beobachtungsbohrungen wurden in den Jahren 2011 und 2012 um zwei weitere ergänzt.

Im Juni 2008 wurde begonnen in die Bohrung Ktzi 201 CO₂ zu injizieren. Die Injektion wurde Ende August 2013 planmäßig nach der Einführung von 67.271 t CO₂ beendet. Für das Monitoring wurde der Druck an der Bohrung Ktzi 201 gemessen und CO₂-Sensoren in den beiden Beobachtungsbohrungen Ktzi 200 und Ktzi 202 angebracht, um so die Ankunftszeiten des CO₂ an den einzelnen Beobachtungsbohrungen zu bestimmen.

Über den gesamten Zeitraum, d.h. bereits beginnend mit der Vorbereitungsphase vor der Injektion wurden begleitende numerische Simulationen durchgeführt. Zunächst wurden Querschnittsaufgaben, wie die Untersuchung von Temperatureffekten angegangen. Diese unterstützten die Entwicklung des geologischen Modells, das auf Grundlage der Ergebnisse aus der Bohrkernanalyse und den seismischen Untersuchungen erstellt werden konnte. Das geologische Modell beinhaltet Daten über die Porositäts- und Permeabilitätsverteilung im Reservoir und es weist u.a. vergleichsweise gut durchlässige Sandkanäle auf, in welchen sich das CO₂ bevorzugt verteilen kann.

Mit dem bis dahin bestehenden geologischen Modell konnte die Ankunftszeit an der ersten Beobachtungsbohrung – Ktzi 200 – sehr gut abgeschätzt werden. Allerdings wurde der Druck an der Injektionsbohrung sowie die Ankunftszeit an der zweiten Beobachtungsbohrung stark unterschätzt. Eine zentrale Aufgabe der dynamischen Modellierung war das History



02

02a

02b

(a) Simulation der Ausbreitung von Kohlendioxid im Pilotspeicherstandort Ketzin nach 1652 Tagen. In blau und rot sind die unterschiedlichen Durchlässigkeiten der Speicherformation dargestellt.

(b) Vergleich zwischen berechnetem und gemessenem Druck im Injektionsbrunnen.

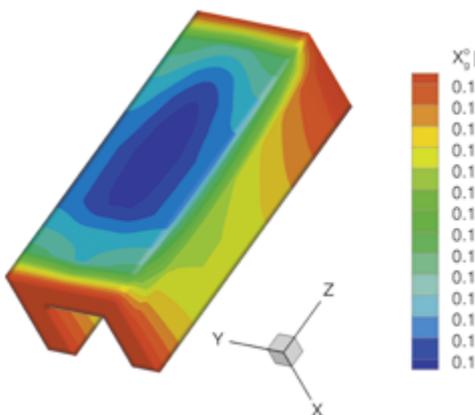
Matching für den Druck und die Ankunftszeiten mit dem laufend aktualisierten geologischen Modell [6]. Hierfür können verschiedene Herangehensweisen gewählt werden, die im Reservoir-Engineering zum Teil seit Jahren eingesetzt werden. Bei dem von uns gewählten Ansatz wurde das Modell zunächst durch inverse Modellierung kalibriert und anschließend ein geologisches Features (Sandkanals bzw. Ablagerung) lokal modifiziert. Dadurch konnte sowohl der Druck als auch die beiden Ankunftszeiten im numerischen Modell abgebildet werden.

Das **Wassermanagement** in Brennstoffzellen hat eine herausragende Bedeutung für das Leistungsverhalten einer Brennstoffzelle. Bei PEM (Polymer-Elektrolyt-Membran) Brennstoffzellen reagieren Sauerstoff und Wasserstoff zu Wasser. Die Membran leitet die Protonen von der Anodenseite zur Kathodenseite, wo ausreichend Sauerstoff vorliegen muss, um eine erfolgreiche Reaktion zu erzielen. Durch das Reaktionsprodukt Wasser werden die Porenräume auf

der Kathodenseite jedoch gefüllt, so dass es unter Umständen zu einer Limitierung des Sauerstofftransports vom kathodischen Gaskanal kommt. Dieser kann seinerseits nicht als ein poröses Medium beschrieben werden, da dort eine Gasströmung bei kleinen bis moderaten Reynolds-Zahlen statt-

findet. Die Aufgabe des Gaskanals ist es neben der Versorgung mit Sauerstoff auch für den Abtransport von Wasser (in Form von Dampf oder Tröpfchen) zu sorgen. Die Beschreibung der dort entstehenden Wassertropfen und der Interaktion zwischen Tropfen, Gasströmung und porösem Medium ist Gegenstand aktueller Forschung. Ein bestehendes Modell zur Kopplung freier und poröser Strömung wird dabei um Tropfenbildung, Tropfenwachstum und Ablösung erweitert. Darauf aufbauend soll der Transport der Tropfen in der Gasströmung und die Interaktion mit den hydrophilen Wänden des Gaskanals beschrieben werden.

Besonderes Augenmerk bei der Modellierung liegt daher auf der Grenzfläche zwischen poröser Gasdiffusionsschicht und Gaskanal. Dort kommt es zu Austauschprozessen und Tropfenbildung, wodurch die Wasserverteilung und damit die Leistung der Brennstoffzelle signifikant beeinflusst werden. Eine Herausforderung besteht in der Beschreibung eben dieser Grenzfläche, an der die unterschiedlichen Strömungskompartimente (poröses Medium – freie Strömung) zusammentreffen. Des Weiteren gilt es die vorwiegend hydrophoben Eigenschaften der Gasdiffusionsschicht zu beschreiben. Während der natürliche Untergrund typischerweise hydrophil ist, sodass Wasser in der Regel immer diejenige Fluidphase ist, die die Porenoberfläche am stärksten benetzt, ist dies in der Gasdiffusionsschicht einer Brennstoffzelle infolge der hydrophoben Beschichtung genau umgekehrt. Dem



03

Zu sehen ist der Sauerstoffanteil in der Gasphase im simulierten Modellgebiet einer PEM Brennstoffzelle. Dieses umfasst einen Ausschnitt der Gasdiffusionsschicht mit zwei halben Gaskanälen. Durch die Reaktion, welche in der Reaktionsschicht – der nach oben gewandten Fläche – stattfindet, wird die Sauerstoffkonzentration reduziert.

ZUSAMMENFASSUNG

Die Entwicklung eines Open-Source-Simulators zur Modellierung von Strömungs- und Transportprozessen in porösen Medien für komplexe Ingenieur Anwendungen ist das zentrale Anliegen des Projekts DuMu^x (dumux.org). In diesem Beitrag werden das Entwicklungskonzept vorgestellt und Einsatzmöglichkeiten aufgezeigt. Anhand von Beispielen werden einerseits aktuelle Methodenentwicklungen (z.B. Kopplung von Modellen, Upscaling und Multi-Skalen-Ansätze, Adaptivität) und andererseits interessante Anwendungsbereiche (z.B. CO₂-Speicherung, Brennstoffzellen) diskutiert. Daran wird deutlich, dass die Entwicklung grundlegender Methoden nicht isoliert von den Problemen der Anwendungsbereiche erfolgt, und dass durch die Implementierung in DuMu^x eine Anwendung auf problemrelevanter Skala leichter realisiert werden kann.

muss in entsprechend angepassten Konstitutivbeziehungen für relative Permeabilität und Kapillardruck Rechnung getragen werden. Die zuverlässige Bestimmung dieser Beziehungen ist allerdings noch ein weitgehend ungelöstes Problem.

Schlussbemerkungen

Mit DuMu^x, so konnte gezeigt werden, können also unterschiedlichste Strömungs- und Transportprozesse in porösen Medien simuliert werden und für diverse Anwendungen nutzbar gemacht werden. Die Einhaltung von Open-Source-Entwicklungsprinzipien garantiert, dass die Software nachhaltig für jeden interessierten Nutzer zur Verfügung steht. Damit schafft DuMu^x eine Grundlage für mehr Transparenz und Reproduzierbarkeit der durchgeführten Simulationen. Die Simulationstechnologie benötigt dringend diese Transparenz, um in Zeiten immer komplexer werdender Rechenmodelle und anwachsender Datenmengen glaubhaft und nachvollziehbar zu bleiben. •

Bernd Flemisch,
Holger Class,
Markus Wolff,
Lena Walter,
Rainer Helmig

Referenzen

- [1] Flemisch, B., Darcis, M., Erbertseder, K., Faigle, B., Lauser, A., Mosthaf, K., Müthing, S., Nuske, P., Tatomir, A., Wolff, M. and R. Helmig. DuMu^x: DUNE for Multi-Phase, Component, Scale, Physics ... } Flow and Transport in Porous Media. *Advances in Water Resources* 34, 110–1112, (2011).
- [2] Helmig, R., Flemisch, B., Wolff, M., Ebigbo, A. und H. Class: Model coupling for multiphase flow in porous media. *Advances in Water Resources* 51, 52–66, (2013).
- [3] Wolff, M., Flemisch, B., and R. Helmig. An adaptive multi-scale approach for modeling two-phase flow in porous media including capillary pressure. *Water Resources Research*, accepted.
- [4] Faigle, B., Helmig, R., Aavatsmark, I., and B. Flemisch. Efficient multi-physics modelling with adaptive grid-refinement using a MPFA method. *Computational Geosciences*, submitted.
- [5] Christie, M. A., and M. J. Blunt. Tenth SPE comparative solution project: A comparison of upscaling techniques. *SPE Reservoir Evaluation & Engineering*, 4, 308–317, (2001).
- [6] Kempka, T., Class, H., Görke, U.-J., Norden, B., Kolditz, O., Kühn, M., Walter, L., Wang, W. und B. Zehner. A dynamic flow simulation code intercomparison based on the revised static model of the Ketzin pilot site. *Energy Procedia* 40, 418–427 (2013).

DIE AUTOREN



BERND FLEMISCH

studierte von 1997 bis 2001 an der Universität Augsburg und der Iowa State University Mathematik. Zwischen 2001 und 2006 war er wissenschaftlicher Mitarbeiter an der Universität Stuttgart und promovierte dort Ende 2006 im Bereich Angewandte Mathematik. Seit 2007 ist er am Lehrstuhl für Hydromechanik und Hydrosystemmodellierung tätig und leitet dort die Entwicklung von DuMu^x (*dumux.org*). Er habilitierte sich im Jahr 2013.



HOLGER CLASS

studierte von 1992 bis 1997 an der Universität Stuttgart Bauingenieurwesen, promovierte an der Technischen Universität Braunschweig im Jahr 2000. Seitdem arbeitet er an der Universität Stuttgart und habilitierte sich dort im Jahr 2008. Er ist u.a. verantwortlich für die Arbeitsgruppe CO₂-Speicherung innerhalb des Lehrstuhls für Hydromechanik und Hydrosystemmodellierung.



MARKUS WOLFF

studierte von 2002 bis 2008 an der Universität Stuttgart Umweltschutztechnik und promovierte im Jahr 2013 im Bereich der Simulationstechnik für Strömungsprozesse in porösen Medien am Lehrstuhl für Hydromechanik und Hydrosystemmodellierung.



LENA WALTER

studierte von 2003 bis 2008 an der Universität Stuttgart Umweltschutztechnik und promovierte im Jahr 2013 am Lehrstuhl für Hydromechanik und Hydrosystemmodellierung über die Risikoabschätzung der CO₂-Speicherung mit Hilfe von Simulationsmodellen.



RAINER HELMIG

leitet den Lehrstuhl für Hydromechanik und Hydrosystemmodellierung seit dem Jahr 2000. Zuvor war er nach Promotion an der Universität Hannover (1993) und Habilitation an der Universität Stuttgart (1996) in den Jahren 1997 bis 2000 Professor an der TU Braunschweig. Er ist Mitglied des Direktoriums von SimTech und Sprecher des Internationalen Graduiertenkollegs Nupus.

Kontakt

Universität Stuttgart, Institut für Wasser- und Umweltsystemmodellierung, Lehrstuhl für Hydromechanik und Hydrosystemmodellierung
 Pfaffenwaldring 61, D-70569 Stuttgart
 Tel. +49 (0) 711/685-64749, Fax +49 (0) 711/685-60430
 E-Mail: rainer.helmig@iws.uni-stuttgart.de
 Internet: <http://www.hydrosys.uni-stuttgart.de>