

Kleine Körner – großer Einfluss?

Mit Hilfe von Hochleistungssimulationen auf den Spuren der Flussbettkolmation

Tobias Schruff, Holger Schüttrumpf und Roy M. Frings

Abstract

The Riverbed plays an important role in the field of integrated river management, due to its relevance as an interface between surface water and groundwater and ecotone for many organisms. The suitability of riverbed deposits as a habitat for organisms and functionality as an exchange medium strongly depends on the internal pore space of the riverbed which determines the riverbed porosity and permeability. If the riverbed however becomes clogged through input and deposition of fine sediments within the pores, the resulting porosity and permeability decrease has potential for economic and ecological ramifications. We use a combination of two three-dimensional pore-scale numerical simulation techniques to generate virtual riverbeds, determine their porosity and permeability, and to simulate fine sediment infiltration into these riverbeds. Due to the high computational footprint, simulations run on the JUQUEEN supercomputer at Jülich Supercomputing Centre, Germany. Simulation results for the generated riverbed porosity and permeability are promising as they compare well with traditional methods and laboratory measurements. A small-scale simulation study on fine sediment infiltration also shows great potential for larger scale applications involving millions of moving fine sediment particles.

Zusammenfassung

Das Flussbett, oder die Gewässersohle, nimmt sowohl aufgrund seiner Funktion als Schnittstelle zwischen Oberflächen- und Grundwasser sowie auch als Lebensraum für viele Organismen eine bedeutende Position beim integrierten Gewässermanagement ein. Die Eignung des Flussbetts als Habitat für Organismen wie auch für die Funktionalität als Austauschmedium zwischen Fließgewässer und Aquifer hängt erheblich von dem Vorhandensein von Porenräumen zwischen den Sedimenten ab, welche großen Einfluss auf die Porosität und Permeabilität des Flussbetts haben. Kommt es im Rahmen der Flussbettkolmation zu einer Reduzierung der Porosität und Permeabilität, hat dies weitreichende Folgen für die zuvor genannten Funktionen des Flussbetts. In diesem Artikel kommen zwei innovative Simulationsmethoden zum Einsatz, mithilfe derer virtuelle Gewässersohlen erzeugt werden können, die Permeabilität dieser Gewässersohlen bestimmt und die Kolmation jener Sohlen durch Feinsedimenteintrag simuliert werden kann. Aufgrund des enormen Rechenbedarfs dieser beiden Methoden werden

die Simulationen auf dem JUQUEEN Supercomputer des Jülich Supercomputing Centre in Jülich, Deutschland, durchgeführt. Ergebnisse der Generierung von virtuellen Gewässersohlen und der Bestimmung deren Permeabilität zeigen eine gute Übereinstimmung mit traditionellen Methoden und Ergebnissen aus Labormessungen. Eine klein-skalige Simulationsstudie zur Infiltration von Feinsedimenten, lässt auf die Durchführbarkeit groß-skaliger Simulationen mit mehreren Millionen Feinsedimentkörnern schließen.

1 Einleitung und Zielsetzung

Die Gewässersohle oder das Flussbett ist eine überaus komplexe Struktur. Diese Komplexität resultiert zum einen aus der großen lokalen Variabilität der Größe der Poren zwischen den abgelagerten Sedimentkörnern sowie dem Vernetzungsgrad der Poren untereinander. Auf der anderen Seite findet auch eine Vielzahl von unterschiedlichen Austauschprozessen im Flussbett statt, vorwiegend angetrieben durch den Austausch von Oberflächen- und Grundwasser.

Der Umfang dieses Austauschs wird maßgeblich bestimmt durch die Permeabilität K [m²] des Flussbetts. Die Permeabilität wiederum ist ein Materialparameter des Flussbetts welcher sich zum Beispiel über die Korngrößenverteilung der Sedimente bestimmen lässt. Die Permeabilität der Gewässersohle ist vor allem im Bereich der technischen Anwendungen eine entscheidende Größe. So wird durch sie zum Beispiel die Leistungsfähigkeit von Flusswasseraufbereitungsanlagen beeinflusst. Quantitativ lässt sich die Permeabilität durch

$$K = -\frac{\mu \mathbf{u}}{\nabla p} \quad (1)$$

bestimmen, wobei μ die dynamische Viskosität des Wassers, \mathbf{u} die Fließgeschwindigkeit und ∇p den Druckgradienten entlang der Strömungsrichtung darstellt. Diese Beziehung wurde zuerst von Darcy (1857) auf Grundlage experimenteller Untersuchungen bestimmt und ist gültig für das Stokes Regime, welches durch $Re \ll 1$ definiert ist, wobei $Re = d u/\nu$ die Reynoldszahl darstellt, basierend auf dem charakteristischen Korndurchmesser d , der kinematischen Fluidviskosität ν und $u = |\mathbf{u} \cdot \mathbf{i}|$ der skalaren Fließgeschwindigkeit in Strömungsrichtung \mathbf{i} . Gleichung (Gl. 1) kann zur Bestimmung der Permeabilität nur genutzt werden wenn der Druckgradient ∇p und die Fließgeschwindigkeit \mathbf{u} bestimmt werden können, z. B. mit Hilfe von Labor- oder Feldmessungen. Dies ist jedoch häufig sehr zeit- und kostenintensiv und liefert nur bedingt zuverlässige Ergebnisse, die wiederum nicht auf andere poröse Medien übertragen werden können.

Da die Permeabilität eine Materialgröße darstellt, ist es auch möglich, sie auf Grundlage geometrischer Kenngrößen des porösen Mediums zu beschreiben. Die Carman-Kozeny Gleichung (Gl. 2) stellt dabei die am weitesten verbreitete Gleichung zur Be-

stimmung der Permeabilität basierend auf geometrischen Größen dar und ist gültig für poröse Medien mit $n < 0,5$ (Bear, 1972; Dullien, 1979):

$$K = \frac{1}{c_k} \frac{1}{S_0^2} \frac{n^3}{(1-n)^2} \quad (2)$$

wobei die Kozeny-Konstante c_k definiert ist durch

$$c_k = c_0 \tau^2 = c_0 \left(\frac{L_e}{L} \right)^2 \quad (3)$$

In Gleichung (Gl. 2) steht n für die Porosität des Mediums, welche definiert ist als der relative Porenvolumenanteil, S_0 für die spezifische Oberfläche der Sedimentmischung, c_0 ist ein Faktor zur Berücksichtigung der Porenform und τ berücksichtigt den Vernetzungsgrad der Poren, definiert durch das Verhältnis von effektiver Fließweglänge L_e zur Länge des porösen Mediums in Fließrichtung L .

Obwohl die Carman-Kozeny für die Bestimmung der Permeabilität poröser Medien weit verbreitet ist, haben mehrere Autoren von starken Abweichungen zwischen Carman-Kozeny Berechnungen und Ergebnissen von Labormessungen berichtet und neue Ansätze oder Erweiterungen der Carman-Kozeny Formulierung, basierend auf weiteren geometrischen Beschreibungen, vorgeschlagen, z. B. (Dullien, 1979; Vidal et al., 2009).

Die Gewässersohle stellt nicht nur ein bedeutendes Austauschmedium, sondern auch einen unersetzlichen Lebensraum für viele Lebewesen dar und wird in diesem Zusammenhang oft als hyporheisches Interstitial bezeichnet. So siedeln sich in den oberen 5–10 cm des hyporheischen Interstitials vor allem Vertreter des sogenannten Makrozoobenthos, also Krebse, Muscheln, und Insektenlarven an und verbringen ihr ganzes Leben oder zumindest einen Teil davon in den Porenräumen des Flussbetts. Andere Arten, wie zum Beispiel die Salmoniden, nutzen die Sohle von Kies- und Sandflüssen oft zur Ablage ihres Laichs. Der Laich verbringt mehrere Wochen bis Monate im oberen Bereich der Sohle und die Jungfische halten sich ebenfalls über einen Zeitraum von mehreren Monaten in den Porenräumen der Sohle auf nachdem sie geschlüpft sind. Alle Bewohner des hyporheischen Interstitials sind dabei vor allem auf ein ausreichendes Angebot an gut verbundenen Porenräumen sowie eine Versorgung dieser Porenräume mit Sauerstoff und den Abtransport von Stoffwechselprodukten angewiesen.

Der Eintrag und die Ablagerung von Feinsedimenten in die Porenräume der Gewässersohle stellt dabei eine Bedrohung dieses Lebensraums dar. Obwohl der Eintrag von Feinsedimenten und deren Ablagerung in der Gewässersohle ein natürlicher Prozess ist, der vor allem saisonalen Abflusscharakteristiken und dem wiederkehrenden Auftreten von Hochwasserereignissen geschuldet ist, kann es aufgrund von anthropogenen Einflüssen auch zu einem übermäßig hohen Angebot an Feinsedimenten und einer

erhöhten Ablagerungsrate dieser Sedimente kommen. So führen vor allem land- und forstwirtschaftliche Maßnahmen in ufernahen Bereichen zu erhöhter Oberflächenerosion und somit einem erhöhten Feinsedimenteintrag in das Gewässer. In durch Querbauwerken regulierten Gewässerabschnitten kommt es dann aufgrund langfristig reduzierter Abflüsse und dem Ausbleiben von Hochwasserereignissen zu einer erhöhten Ablagerung der Feinsedimente was auch als Kolmation bezeichnet wird.

Durch übermäßige Ablagerungen feiner Sande und anderer Feinsedimente, oder auch durch starken Algenbewuchs in den Porenräumen der Gewässersohle, kommt es zu einer Abnahme des Anteils freier Porenräume wie auch zu einer Verringerung der Größe der Poren. Beides führt zu einer Reduktion der Porosität und der Permeabilität der Gewässersohle und bedroht damit sowohl die technische Nutzung der Gewässersohle wie auch die Überlebens- und Fortpflanzungschancen seiner Bewohner.

Obwohl der Prozess der Gewässerkolmation, insbesondere die Kolmation von Fließgewässersohlen, seit einigen Jahren wissenschaftlich untersucht wird, sind die Abläufe und Einflussfaktoren des Kolmationsprozesses noch nicht hinreichend verstanden. So wurden zum Beispiel der Einfluss der Kornform und der hydraulischen Parameter auf den Kolmationsprozess bisher nicht untersucht. Bezüglich des Einflusses der Korngrößenverteilung und der Infiltrationsrate von Feinsedimenten existieren zwar Daten, diese sind jedoch nicht ausreichend belastbar. Auch die Fragen bezüglich der Auswirkungen der Flussbettkolmation auf die technische Nutzbarkeit und die Qualität der Gewässersohle als Lebensraum für Organismen sind nicht zufriedenstellend beantwortet. So gibt es derzeit keine Methode, den Einfluss der Kolmation auf die Porosität oder die Permeabilität der Gewässersohle zu quantifizieren.

Die Methoden, die dabei im Wesentlichen zur Untersuchung des Kolmationsprozesses zur Anwendung kommen, sind physikalische Modellversuche (Schälchli, 1992; Schälchli, 1993; Schälchli, 1995) und theoretische Modelle, die auf geometrischen Beschreibungen der Gewässersohle basieren (Cui et al., 2008; Wooster et al., 2008).

In diesem Beitrag werden zwei innovative physikalisch basierte numerische Verfahren vorgestellt, mit deren Hilfe zum einen virtuelle Gewässersohlen erzeugt werden können, zum anderen aber auch der Prozess der Feinsedimentinfiltration sowie die Durchströmung dieser virtuellen Gewässersohlen untersucht werden können. Das Ziel der numerischen Untersuchungen ist es, sowohl den Kolmationsprozess wie auch die Auswirkungen der Kolmation auf die genannten Bereiche systematisch zu untersuchen.

Beide Verfahren arbeiten auf einer, für wasserbauliche Untersuchungen eher unüblichen, äußerst kleinen räumlichen Skala (Millimeterbereich), im Folgenden als Porenskala bezeichnet, und lösen hierfür sogar die Geometrie einzelner Sedimentkörner auf. Da durch so eine Art der Betrachtung eine Vielzahl an Informationen bei der Berechnung zu berücksichtigen sind, ist aufgrund begrenzter Rechen- und Speicherkapazitäten von üblichen Workstation-PCs der Einsatz von Hochleistungscomputern, in diesem

Beitrag des JUQUEEN Supercomputers des Jülich Supercomputing Centre (JSC), Forschungszentrum Jülich, erforderlich. Der Einsatz eines solchen Supercomputers bietet unter anderem den Vorteil, dass Berechnungen auf einer Vielzahl von Rechenkernen, bis zu 458 752 bei der JUQUEEN, gleichzeitig ausgeführt und damit schneller abgeschlossen werden können.

In den folgenden Kapiteln werden das Vorgehen und die Ergebnisse der computersimulationsbasierten Generierung von virtuellen Gewässersohlen (Kapitel 2.1), der Bestimmung der Permeabilität dieser Gewässersohlen (Kapitel 2.2) und einer ersten Simulationsstudie zur Feinsedimentinfiltration vorgestellt und beschrieben. Eine Zusammenfassung der beschriebenen Verfahren und gezeigten Ergebnisse folgt in Kapitel 3. Mit Kapitel 4 schließt der Artikel mit einem Ausblick auf noch bevorstehende Simulationen ab.

2 Untersuchungsmethoden und -ergebnisse

Für die systematische numerische Untersuchung des Kolmationsprozesses sowie dessen Auswirkung auf die Porosität und Permeabilität der Gewässersohle sind drei Simulationsschritte notwendig, die unabhängig voneinander durchgeführt werden.

Zunächst wird eine virtuelle Gewässersohle mit vorgegebener Korngrößenverteilung generiert. Im zweiten Schritt wird die Porosität und mithilfe einer Strömungssimulation die Permeabilität dieser Gewässersohle bestimmt. Im dritten Schritt wird die Infiltration und Deposition von Feinsedimenten, wiederum mit beliebiger Korngrößenverteilung, in die zuvor generierte Gewässersohle simuliert. Mithilfe der erneuten Bestimmung der Porosität und Permeabilität der nun kolmatierten Gewässersohle lässt sich die Reduktion der beiden Größen bestimmen. In den folgenden Kapiteln werden die Konzepte und Simulationsmethoden der einzelnen Untersuchungsschritte genauer erläutert.

2.1 Generierung virtueller Gewässersohlen

2.1.1 Computergestützte Packungsgenerierung

Die computergestützte Packungsgenerierung mithilfe von numerischen Methoden hat bereits eine lange Geschichte vorzuweisen (Jia & Williams, 2001). Mit dem Begriff „Packungsgenerierung“ ist hierbei gemeint, dass das Ziel der numerischen Algorithmen darin besteht, eine endliche Anzahl von Körpern mit individueller Form und Größe, in einem endlichen, oft durch einen Behälter begrenzten Raum, anzuordnen. Dabei müssen bestimmte Nebenbedingungen, wie zum Beispiel das Vermeiden von Überschneidungen zwischen einzelnen Körpern, eingehalten werden. Die Anwendung dieser Algorithmen ist überaus vielseitig. So wurde zum Beispiel untersucht, wie sich industrielle Pulver möglichst dicht packen lassen (Jia et al., 2007).

Verfahren wie Laserscan oder Computertomographie machen es darüber hinaus auch möglich, äußerst komplexe Formen wie zum Beispiel echte Sedimentkörner zu digitalisieren (Abb. 1). Diese digitalen Geometrien können dann in Packungssimulationen genutzt werden. Obwohl mittlerweile relativ einfach und kostengünstig solche digitalen Geometrien erzeugt werden können, ist es nicht ohne Weiteres möglich, die Bewegung und Kollision solcher komplexer Körper mit anderen Körpern zuverlässig zu bestimmen. In den von uns durchgeführten Simulationen kommen daher ausschließlich kugelförmige Körper zum Einsatz, da diese zum einen der Form von natürlichen Sedimentkörnern relativ ähnlich sind, zum anderen sehr genaue und effiziente Aussagen über Bewegungs- und Kollisionsverhalten zulassen.



Abb. 1: Mit einem Computertomographen digitalisiertes Sedimentkorn vom Rhein

Die Algorithmen, die dabei zum Einsatz kommen, lassen sich in zwei Kategorien einteilen: physikalische und nicht-physikalische Verfahren.

Nicht-physikalische, wie z. B. stochastische Verfahren, haben oft den Vorteil, dass sie ein Problem in kürzerer Zeit lösen können, da sie mit vereinfachten mathematischen Beziehungen für die Bewegungsbeschreibung von Körpern arbeiten (Jia & Williams, 2001). Der Nachteil von nicht-physikalischen Verfahren ist jedoch, dass sie häufig nur bei bestimmten Problemstellungen, also bestimmten Packungsprozessen, anwendbar sind und bei Packungsprozessen, für die sie nicht ausgelegt wurden, zu falschen Ergebnissen führen können. So sind bestimmte stochastische Verfahren zum Beispiel nur für die Erzeugung von lockeren Packungen geeignet (Liang et al., 2015).

Physikalische Verfahren haben hingegen den Vorteil, dass mit ihnen die Untersuchung aller physikalisch basierten Packungsprozesse möglich ist, da sie auf den allgemeinen Newtonschen Bewegungsgleichungen beruhen. Da vor allem die physikalisch korrekte

Kollisionserkennung und -behandlung bei diesen Verfahren sehr aufwendig ist, benötigen physikalische Verfahren häufig eine wesentlich längere Rechenzeit und sind teilweise auch numerischen Stabilitätsproblemen unterworfen (Kleinert et al., 2013).

Das wohl bekannteste physikalische Verfahren zur Simulation von Mehrkörpersystemen und damit auch zur Packungsgenerierung ist die Discrete Element Method (DEM). Die Popularität der DEM ist vermutlich der schnell umsetzbaren Implementierung im Computercode und der simplen Formulierung des Kontaktmodells geschuldet, welches auf einem mechanischen Feder-Dämpfer-System beruht (Ghaboussi & Barbosa, 1990). Mit der DEM kann eine große Vielzahl von Problemstellungen untersucht werden, so sind zum Beispiel reibungsbehaftete, kohäsive oder starre Kollisionen zwischen Körpern möglich. Auch bei Form und Größe der simulierten Körper gibt es mittlerweile kaum noch Einschränkungen. Ein nicht zu vernachlässigender Nachteil der DEM ist jedoch, dass die Zeitschrittweite Δt in Abhängigkeit der kleinsten zu simulierenden Körper gewählt werden muss, um numerische Instabilität zu vermeiden. Dies führt bei weitgestuften Korngrößenverteilungen zu sehr kleinen Werten für Δt und dementsprechend sehr langen Rechenzeiten.

Das Verfahren der Non-Smooth Granular Dynamics (NSGD) hingegen bleibt bei dieser Art von Problemstellung selbst mit großen Werten für Δt stabil. Das NSGD ist ebenfalls ein physikalisch basiertes Verfahren zur Lösung von dynamischen Mehrkörpersystemen, welches jedoch einen anderen Ansatz bei der Behandlung von Körperkollisionen verfolgt. Im Unterschied zur DEM, wo einzelne Kollisionen isoliert betrachtet werden, löst das NSGD zu jedem Zeitschritt alle Kollisionen mithilfe eines iterativen Verfahrens gleichzeitig auf, was zu einer größeren Stabilität führt (Kleinert et al., 2013; Preclik & Råde, 2015). Auch weitgestufte Korngrößenverteilungen stellen kein Problem im Sinne der numerischen Stabilität dar.

Bei unseren Packungssimulationen kommt das NSGD auf Grundlage der Implementierung in der *pe* (physics engine) zum Einsatz. Das Software-Framework *pe* wird vom Lehrstuhl für Informatik 10 (Systemsimulation) der Universität Erlangen-Nürnberg entwickelt und steht als Open-Source Software zur Verfügung (Iglberger & Råde, 2009; Iglberger & Råde, 2010). Das Ziel der *pe* ist es, große dynamische Mehrkörpersysteme zu lösen. Der Schwerpunkt der Anwendung liegt dabei auf dem massiv parallelen Softwaredesign, was Simulationen auf tausenden von Rechenkernen ermöglicht (Preclik & Råde, 2015).

2.1.2 Simulationen

Für die Generierung einer virtuellen Gewässersohle wird eine zuvor festgelegte Anzahl von Körpern mit beliebiger Korngrößenverteilung schrittweise einem dreidimensionalen Simulationsgebiet mit einer Kantenlänge von 640 mm in alle drei Richtungen vom oberen Gebietsrand hinzugefügt. Aufgrund der vorgegebenen Schwerkraft beginnen die Körper in Richtung des unteren Gebietsrands zu fallen, bis sie am unteren Gebietsrand

oder aufgrund der Kollision mit anderen Körpern zum Stillstand kommen. Die seitlichen Gebietsränder sind dabei so definiert, dass Körper, die das Gebiet über einen Rand teilweise oder komplett verlassen, auf dem gegenüberliegenden Rand wieder in dem Simulationsgebiet hinzugefügt werden. Diese Art des Gebietsrands wird auch als periodischer Rand bezeichnet und dient vor allem dazu, ungewollte Randeffekte, die die Packungsstruktur stören, zu vermeiden. Es wird quasi ein sich unendlich wiederholendes Gebiet in horizontaler Ausdehnung betrachtet.

Das Ergebnis der Packungssimulation mit einer logarithmisch-normalverteilten Korngrößenverteilung mit $GM = 8$ mm (geometrischer Mittelwert) und $GSA = 1.6$ (geometrische Standardabweichung) ist in Abbildung 2 dargestellt.

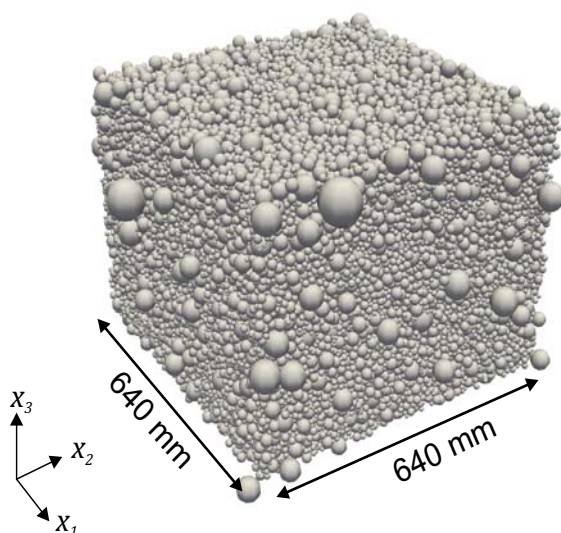


Abb. 2: Mit dem NSGD generierte virtuelle Gewässersohle. Die Höhe der Packung beträgt hier etwa 320 mm

Insgesamt wurden 24 Packungssimulationen mit unterschiedlichen Korngrößenverteilungen durchgeführt und ausgewertet. Die mittleren Körperdurchmesser (GM) lagen zwischen 8–22 mm und GSA -Werte variierten zwischen 1.0–1.6. Die kleinsten Körper hatten einen Durchmesser von 2 mm und die größten Körper einen Durchmesser von 64 mm. Die generierten virtuellen Gewässersohlen können damit als reine Kiessohlen charakterisiert werden. Die Ergebnisse der Porositätsbestimmung der 24 virtuellen Gewässersohlen sind, zusammen mit Ergebnissen von in-situ Porositätsmessungen am Rhein (Frings et al., 2011) in Abbildung 3 dargestellt. Generell lässt sich eine gute Übereinstimmung der Ergebnisse der Simulationen und der Messungen beobachten. Die Streuung der Ergebnisse der Simulationen lässt sich auf unterschiedliche mittlere Durchmesser der Körper (GM) zurückführen.

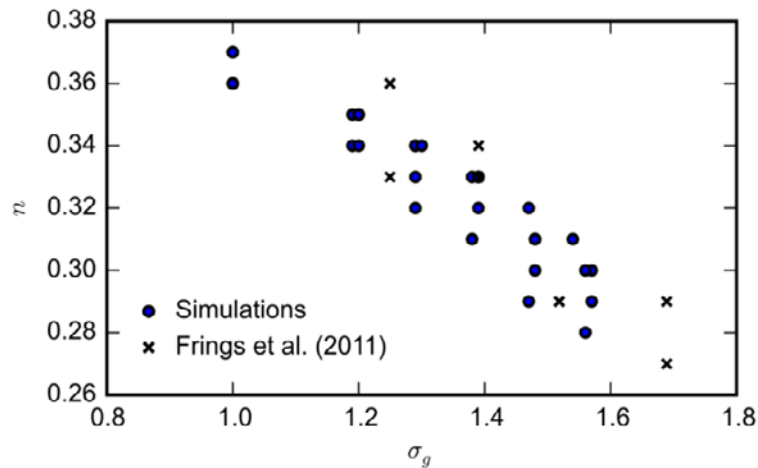


Abb. 3: Ergebnisse der Porositätsbestimmung (n) der 24 virtuellen Gewässersohlen aufgetragen über die geometrische Standardabweichung der entsprechenden Korngrößenverteilung im Vergleich mit Porositätsmessungen an Rheinsedimenten (Frings et al., 2011)

Die Packungssimulationen wurden aufgrund der hohen Anzahl zu berücksichtigender Körper (bis zu 855 600) auf dem JUQUEEN Supercomputer am JSC durchgeführt und nutzten dabei bis zu 4096 Rechenkerne. Die in Abbildung 3 dargestellten Ergebnisse belegen zusammen mit einer in Schruff et al. (subm.) dokumentierten Validierung des NSGD die Eignung des Verfahrens für die akkurate und effiziente Erzeugung von realistischen virtuellen Gewässersohlen.

In einem weiteren Simulationsschritt wird die Permeabilität der virtuellen Gewässersohlen bestimmt (vgl. Kapitel 2.2). Außerdem können auf Grundlage der detaillierten Simulationsergebnisse, aus denen die Position jedes simulierten Körpers bestimmt werden kann und somit umfangreiche Aussagen über die räumliche Verteilung von Porenräumen, deren Form und Vernetzungsgrad möglich sind, Indikatoren für die Eignung der Gewässersohle als Lebensraum für Organismen abgeleitet werden.

2.2 Permeabilität virtueller Gewässersohlen

2.2.1 Gitter-Boltzmann Methode

Neben den in Kapitel 1 genannten Verfahren zur Bestimmung der Permeabilität von porösen Medien, gibt es weitere Methoden, basierend auf der Anwendung numerischer Simulationen. Besonders die Gitter-Boltzmann-Methode (GBM) wurde in den vergangenen Jahrzehnten intensiv auf ihre Anwendbarkeit bei dieser Problematik untersucht. Für den interessierten Leser nachfolgend ein kleiner Auszug der jüngeren Literatur zur Anwendung der GBM bei der Simulation der Durchströmung poröser Medien: Succi, 2001; Pan et al., 2006; White et al., 2006; Chen et al., 2008; Vidal et al., 2009; Narváez et al., 2010; Narváez & Harting, 2013; Schruff et al., subm.

Die Popularität der Gitter-Boltzmann-Methode (GBM) beruht vor allem auf der Schlichtheit ihrer mathematischen Beschreibung, Genauigkeit, parallelen Effizienz und unkomplizierten Berücksichtigung komplexer Randbedingungen und Mehrphasenströmungen. Historisch gesehen entspringt sie dem Lattice Gas Cellular Automata (LGCA) (Frisch et al., 1986). Es wurde jedoch auch gezeigt, dass die Gitter-Boltzmann-Gleichung (GBG) direkt aus der Boltzmann-Gleichung hergeleitet werden kann (He & Luo, 1997a; He & Luo, 1997b). Außerdem wurde gezeigt, dass die GBG einer expliziten, erster Ordnung in Zeit und zweiter Ordnung in Raum abgeleiteten, finiten Differenzen Näherung der inkompressiblen Navier-Stokes (NS) Gleichung entspricht (Junk & Klar, 2000). Aufgrund des kinetischen Ursprungs der GBM existieren jedoch auch einige fundamentale Unterschiede zu den traditionellen Methoden der Computational Fluid Dynamics (CFD), die auf der Diskretisierung der NS-Gleichungen basieren. So werden zum Beispiel die gesuchten makroskopischen Größen Fluidichte und Fluidgeschwindigkeit über das Lösen der kinematischen Gleichungen für die Verteilungsfunktion und das Auswerten der hydrodynamischen Momente dieser Verteilungsfunktion bestimmt. Die Verteilungsfunktion $f_\alpha(\mathbf{x}, t_n)$ ist dabei eine Funktion, die beschreibt, mit welcher Wahrscheinlichkeit sich ein hypothetischer Partikel (nicht gleichbedeutend mit Sediment- oder Wasserpartikeln) mit einer bestimmten Geschwindigkeit \mathbf{e}_α an dem Ort \mathbf{x} zum Zeitpunkt t_n befindet. Hier wie auch im Folgenden werden fettgedruckte mathematische Symbole zur Bezeichnung von Vektoren genutzt.

Bei der GBM kommt eine vereinfachte Version der Boltzmann-Gleichung zum Einsatz, bei der sich Partikel nur entlang einem Satz von diskreten Geschwindigkeiten \mathbf{e}_α , mit $\alpha = 0, 1, \dots, N$ bewegen können, die die Knoten eines regulären Gitters (engl. lattice), die den konstanten Abstand von δ_x aufweisen, miteinander verbinden. Im Folgenden wird ein dreidimensionales Gitter mit 19 diskreten Geschwindigkeiten, das sogenannte D3Q19 Modell (Qian et al., 1992) verwendet. Es existiert zwar eine Vielzahl von verschiedenen Geschwindigkeitsmodellen, das D3Q19 zeichnet sich jedoch durch ein ausgewogenes Verhältnis von Effizienz und numerischer Genauigkeit aus.

Mit einer Zeitschrittweite von $\delta_t = t_{n+1} - t_n$, kann die semi-diskrete Gitter-Boltzmann-Gleichung wie folgt formuliert werden

$$f_\alpha(\mathbf{x} + \mathbf{e}_\alpha \delta_t, t_{n+1}) - f_\alpha(\mathbf{x}, t_n) = \Omega_\alpha(\mathbf{f}) \quad (4)$$

Der linke Term in Gleichung (4) wird hierbei oft als Strömungsoperator und der rechte Term als Kollisionsoperator bezeichnet. Üblicherweise wird Gleichung (4) entsprechend dieser beiden Operatoren in zwei Gleichungen aufgeteilt:

$$\tilde{f}_\alpha(\mathbf{x}, t_{n+1}) = f_\alpha(\mathbf{x}, t_n) + \Omega(f_\alpha) \quad (5)$$

$$f_\alpha(\mathbf{x} + \mathbf{e}_\alpha \delta_t, t_{n+1}) = \tilde{f}_\alpha(\mathbf{x}, t_{n+1}) \quad (6)$$

wobei \tilde{f}_α die Partikelverteilungsfunktion nach Ausführen des Kollisionsoperators bezeichnet. Gleichung (5) wird dann als Kollisionsschritt (engl. collision step) und Gleichung (6) als Strömungsschritt (engl. streaming step) bezeichnet.

Unter der Annahme, dass sich das betrachtete Fluid nahe dem Gleichgewichtszustand befindet, schlugen Bhatnagar et al. (1954) vor, den Kollisionsoperator wie folgt zu lösen

$$\Omega_\alpha(\mathbf{f}) = -\frac{1}{\tau} \left(f_\alpha(\mathbf{x}, t_n) - f_\alpha^{eq}(\mathbf{x}, t_n) \right) \quad (7)$$

wobei τ die Relaxationszeit und $f_\alpha^{eq}(\mathbf{x}, t_n)$ die Maxwell'sche Gleichgewichtsverteilung darstellt, die wie folgt berechnet wird:

$$f_\alpha^{eq}(\mathbf{x}, t_n) = w_\alpha \left[\rho + \rho_0 \left[c_s^{-2} \mathbf{e}_\alpha \mathbf{u} + \frac{1}{2} c_s^{-4} (\mathbf{e}_\alpha \cdot \mathbf{u})^2 - \frac{1}{2} c_s^{-2} (\mathbf{u} \cdot \mathbf{u}) \right] \right] \quad (8)$$

Hierbei ist w_α ein Satz von Wichtungsfaktoren, der vom gewählten Geschwindigkeitsmodell abhängt, ρ ist die makroskopische Fluidichte, \mathbf{u} ist die makroskopische Fluidgeschwindigkeit, ρ_0 ist die mittlere frei wählbare Fluidichte (im Folgenden $\rho_0 = 1$) und c_s ist die Gitter-Schallgeschwindigkeit, ebenfalls abhängig vom gewählten Geschwindigkeitsmodell und $c_s = 1/\sqrt{3}$ für das D3Q19. Die makroskopische Fluidichte und -geschwindigkeit werden berechnet zu:

$$\rho = \sum_{\alpha=0}^{18} f_\alpha, \quad \mathbf{u} = \rho_0^{-1} \sum_{\alpha=0}^{18} \mathbf{e}_\alpha f_\alpha. \quad (9)$$

Dieser Ansatz zur Lösung des Kollisionsoperators wird auch BGK Approximation – nach seinen Verfassern Bhatnagar, Gross und Krook (1954) – oder SRT (single relaxation time) genannt und stellt aufgrund seiner einfachen Implementierbarkeit den am weitesten verbreiteten Ansatz dar. Ein entscheidender Nachteil des SRT ist jedoch, dass bei der Simulation der Durchströmung von porösen Medien numerische Artefakte aufgrund einer ungenauen Behandlung fester Randbedingungen, namentlich an den Rändern von Sedimentkörnern, auftreten, was eine Abhängigkeit der Permeabilität von der Viskosität des Fluides nach sich zieht.

Pan et al. (2006) zeigten jedoch, dass ein anderer Kollisionsoperator, nämlich der TRT (two relaxation time) Kollisionsoperator (Ginzburg et al., 2008), in der Lage ist, genauere und stabilere Strömungssimulationen insbesondere im Fall der Durchströmung von porösen Medien durchzuführen, ohne dabei an Effizienz zu verlieren (Godenschwager et al., 2013).

Im Gegensatz zu traditionellen CFD-Methoden setzt sich die GBM mit Partikelverteilungsfunktionen an den Gebietsrändern statt mit makroskopischen hydrodynamischen Variablen wie Fluidichte oder -geschwindigkeit auseinander. Das Problem bei der Formulierung von Randbedingungen bei der GBM ist daher, die aus dem Simulations-

gebiet hinausragenden Verteilungsfunktionen in Abhängigkeit der hineinragenden zu beschreiben, um eine bestimmte physikalische Formulierung zu erfüllen.

In der GBM wird der Flüssigkeitsdruck p in Abhängigkeit der Flüssigkeitsdichte ρ über die Zustandsgleichung

$$p = \rho c_s^2 \quad (10)$$

beschrieben. Bei Druckrandbedingungen wird bei der GBM dementsprechend anstelle des Drucks eine bestimmte Dichte an der Randbedingung angesetzt.

Bei der einfachsten Formulierung der Druck-(Dichte-)Randbedingung werden lediglich Gleichgewichtsverteilungen (Gl. 8) an den Randzellen angesetzt, was in manchen Fällen zu numerischen Artefakten im Simulationsgebiet führen kann. Um diese Artefakte zu vermeiden, wurden neue Formulierungen der Druckrandbedingung vorgeschlagen, unter anderem Skordos (1993), Noble et al. (1995) und Zou & He (1997), von denen die Randbedingung von Zou & He (1997) aufgrund ihrer simplen Formulierung und der Vermeidung von Interpolation die am weitesten verbreitete ist.

Im folgenden Kapitel wird der Aufbau und Ablauf der GBM-Simulationen zur Bestimmung der Permeabilität von virtuellen Gewässersohlen beschrieben. In den Simulationen kommen dabei die zuvor erwähnten Methoden, namentlich der TRT-Kollisionsoperator und die Druckrandbedingung nach Zou & He (1997) zum Einsatz. Als Software wird das Framework *waLBerla* eingesetzt, welches vom Lehrstuhl für Informatik 10 (Systemsimulation) der Universität Erlangen-Nürnberg entwickelt wird und als Open-Source Software kostenfrei zu Verfügung steht (Schornbaum et al., 2013; Godenschwager et al., 2013).

2.2.2 Simulationen

Das Simulationsgebiet X (Abb. 4) hat bei der Bestimmung der Permeabilität die Abmessungen $[X_1 \times X_2 \times X_3] = [640 \times 640 \times 320]$ mm, eine Gitterauflösung von $\delta_x = 1$ mm und setzt sich aus zwei Teilgebieten zusammen: Das Teilgebiet S repräsentiert alle festen Gitterzellen (alle Gitterzellen die innerhalb oder am Rand von Sedimentkörpern liegen) und Teilgebiet F repräsentiert alle Fluidzellen, wobei gilt $S \cup F = X$ und $S \cap F = \emptyset$.

Zur Erzeugung einer vertikalen Durchströmung der virtuellen Gewässersohle wird ein Druckgradient mithilfe von Druckrandbedingungen, wie in Kapitel 2.2.1 beschrieben, am oberen und unteren Gebietsrand, aufgebracht. Querschnitte durch das Simulationsgebiet, orthogonal zur Strömungsrichtung, werden angegeben mit

$$C(a) = \{x \in X : x_3 = a\} \quad (11)$$

Die Fluidichte am unteren (Einstrom-) und oberen (Ausstrom-) Rand wurden berechnet zu $\rho_{in} = \rho_0 + \Delta\rho/2$ und $\rho_{out} = \rho_0 - \Delta\rho/2$, wobei $\Delta\rho$ eine benutzerdefinierte totale

Dichtedifferenz (im Folgenden gewählt zu $\Delta\rho = 10^{-5}$) darstellt. Die seitlichen Simulationsränder wurden als periodische Ränder (vgl. Kapitel 2.1.2) angesetzt.

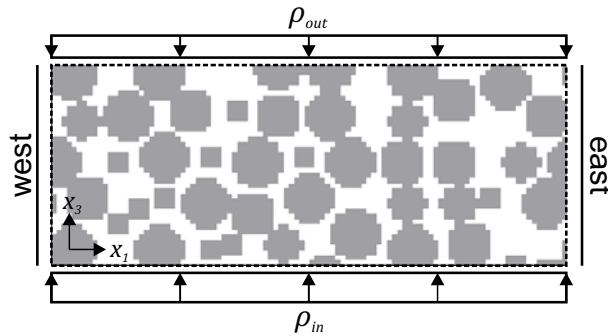


Abb. 4: Schematische Querschnittsansicht (x_1 - x_3) des Simulationsgebiets bei der Simulation der Durchströmung der virtuellen Gewässersohlen. Die Gebietsgrenzen sind durch gestrichelte Linie angedeutet. Weiße Bereiche kennzeichnen Fluidzellen (F) und graue Bereiche kennzeichnen Sedimentkörper (S). Die vertikale Durchströmung der Gewässersohle wird durch Aufbringen eines vertikalen Dichtegradients (x_3 -Achse) erreicht.

Die Bestimmung der Permeabilität erfolgte durch Anwendung der Gleichung (1). Dabei wurde in festgelegten zeitlichen Abständen die volumen-gemittelte Fließgeschwindigkeit entlang der Hauptströmungsrichtung (x_3 -Achse)

$$\langle u_{x_3} \rangle_D = \frac{\sum_{j \in F} u_{x_3,j}}{X_1 X_2 X_3} \quad (14)$$

bestimmt. Der Druckgradient entlang der Hauptströmungsrichtung wurde berechnet zu

$$\nabla p_{x_3} = \frac{\langle p \rangle_{C(x_3)} - \langle p \rangle_{C(0)}}{X_3} \quad (15)$$

Die Permeabilität wurde dann auf Grundlage von Gleichung (16) ermittelt,

$$K = - \frac{\nu \rho_0 \langle u_{x_3} \rangle_D}{\nabla p_{x_3}} \quad (16)$$

wobei ν die Viskosität des Fluides in Gittereinheiten darstellt, die berechnet wird durch

$$\nu = \frac{1}{3} \left(\frac{1}{\tau} - \frac{1}{2} \right) \quad (17)$$

Der Simulationsalgorithmus wurde solange durchlaufen, bis sich eine stationäre Strömung einstellte, definiert durch folgendes Kriterium:

$$\epsilon_c = \frac{\langle u_{x_3} \rangle_D - \langle u_{x_3} \rangle_{\bar{D}}}{\Delta t_c} < \alpha_c \quad (18)$$

wobei das hochgestellte „-“ Werte der vorhergehenden Berechnung, Δt_c das Berechnungsintervall der Permeabilitätsbestimmung in Zeitschritten und α_c das benutzerdefinierte Konvergenzkriterium (hier gewählt zu $\alpha_c = 10^{-15}$) kennzeichnet.

Zur besseren Einordnung der Simulationsergebnisse wurden die Permeabilitäten der 24 virtuellen Gewässersohlen ebenfalls mithilfe der Carman-Kozeny Gleichung (Gl. 2) bestimmt. Die spezifische Oberfläche der Sedimentkörper [m^{-1}] wurde dabei folgendermaßen berechnet:

$$S_0 = \sum_{k=1}^{128} S_k q_k \quad (19)$$

wobei k die Korngrößenfraktion, $S_k = 6/d_k$ die spezifische Oberfläche der Fraktion k , d_k den charakteristischen Korndurchmesser der Fraktion k und q_k den relativen Massenanteil der Fraktion k darstellt. Entsprechend den Beziehungen aus Engelhardt & Pitter (1951) wurde die Kozeny-Konstante zu $c_K = 5$ berechnet.

Die Ergebnisse der Simulationen K_{sim} und der Carman-Kozeny Berechnungen K_{CK} , jeweils angegeben in der Einheit [m^2], sind in Abbildung 5 gegenübergestellt.

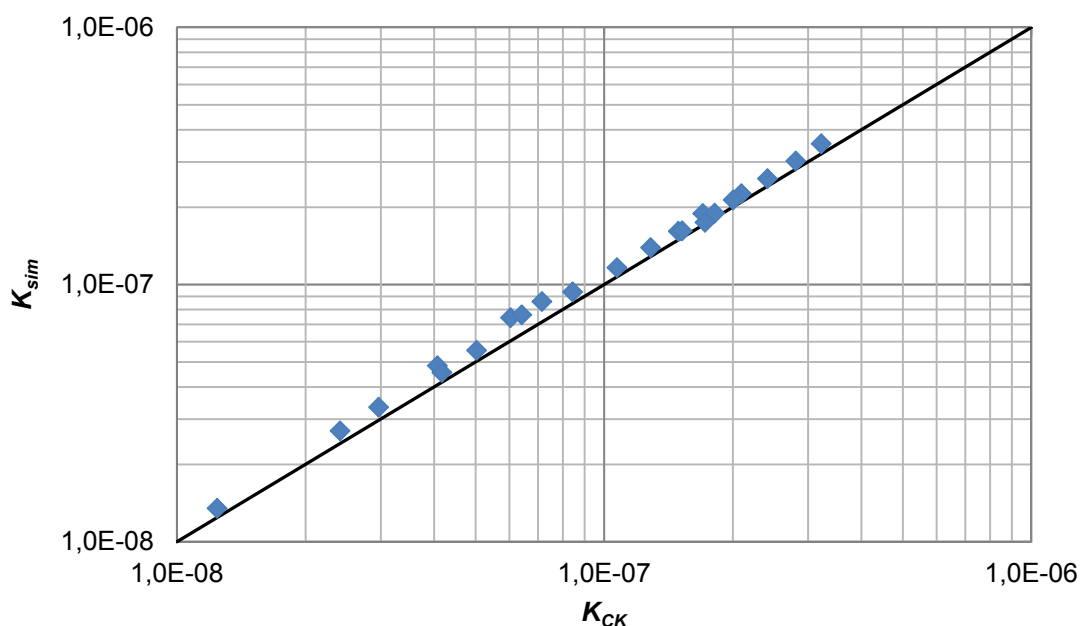


Abb. 5: Ergebnisse der Permeabilitätssimulationen (K_{sim}) aufgetragen über die Berechnungsergebnisse auf Grundlage der Carman-Kozeny Gleichung (K_{CK})

Es kann eine gute Übereinstimmung der Werte beobachtet werden, was durch ein Bestimmtheitsmaß von $R^2 = 0.986$ und eine mittlere quadratische Abweichung von $MSE = 2,0 \cdot 10^{-8}$ untermauert wird. Darüber hinaus haben weitere Validierungsstudien, bei denen Simulationsergebnisse mit analytischen Berechnungsergebnissen für vereinfachte Geometrien verglichen wurden, die Annahmen bestätigt, dass die GBM verläss-

liche Ergebnisse für die Bestimmung der Permeabilität von komplexen porösen Medien liefern kann.

2.3 Simulation der Infiltration und Deposition von Feinsedimenten

Für die Simulation des Feinsedimentinfiltrations- und Depositionsprozesses werden die beiden zuvor vorgestellten Simulationsmethoden gekoppelt. Das Ergebnis der Kopplung ist eine sogenannte Rigid-Fluid-Simulation (Rigid Body = Festkörper) in der die Interaktion zwischen Fluidströmung und Bewegungsverhalten von Sedimentkörnern und umgekehrt untersucht werden kann.

Die Kopplungsmethode basiert dabei auf dem von Zhang et al. (2014) vorgestellten Ansatz der Particulate Immersed Boundary Method (PIBM). In der PIBM wird die geometrische Komplexität von Festkörpern auf eine Punktmasse reduziert, welche durch Anwendung der Impulserhaltungsgleichungen mit dem es umgebenden Fluid interagieren kann. Da in unseren Simulationen nur Feinsedimente mit einem charakteristischen Durchmesser $d_c < 2$ mm über diesen Kopplungsansatz mit der Strömung interagieren, während die gröbereren Sedimente der Gewässersohle als unbeweglich betrachtet werden, wird diese Vereinfachung als ausreichend angenommen. Eine einzelne Gitterzelle der GBM-Strömungssimulation kann bei Anwendung der PIBM mehrere Festkörper beinhalten, während Festkörper bei anderen Methoden, z. B. Ladd (1993), Ladd (1994), Niu et al. (2006) oder Galindo-Torres (2013) aufgrund numerischer Stabilitätskriterien einen Mindestdurchmesser von mehreren Gitterzellen aufweisen müssen. Die PIBM kann also im Vergleich zu anderen Kopplungsmethoden eine größere Anzahl von Festkörpern mit der Strömungssimulation koppeln (Zhang et al., 2014; Zhang et al., 2015). Da bei der Infiltrationssimulation mehrere Millionen Feinsedimentkörper betrachtet werden müssen, ist dies ein entscheidender Vorteil der PIBM gegenüber den zuvor genannten Methoden.

In Abbildung 6 ist der zeitliche Verlauf einer Simulationsstudie mit vereinfachter Gewässersohlgeometrie dargestellt. Die Feinsedimente (blau) haben hier alle den gleichen Durchmesser, es handelt sich also um eine uniforme Korngrößenverteilung. Generell sind aber, wie in Kapitel 2.1 erläutert, beliebige Korngrößenverteilungen möglich. Die größeren Sedimentkörper der Gewässersohle (rot) sind über den Simulationsverlauf unbeweglich, Kollisionen zwischen Feinsedimenten und Sohlsedimenten sind jedoch möglich. Das würfelförmige Simulationsgebiet ist bei den Infiltrationssimulationen komplett mit einer Flüssigkeit gefüllt, die in ihren Eigenschaften Wasser entspricht und zu Simulationsbeginn völlig in Ruhe ist. In dieser Studie ist das Simulationsgebiet darüber hinaus mit festen undurchdringlichen Rändern begrenzt. Es kann also kein Wasser ein- oder austreten. Generell sind jedoch auch andere Randbedingungen, die zum Beispiel hydrostatische (z. B. Druckverteilung) oder hydrodynamische (z. B. Geschwindigkeitsprofil) Eigenschaften aufweisen, möglich. Die in Abbildung 6 veranschaulichte Simulation verläuft folgendermaßen: Feinsedimentkörper im mittleren Be-

reich des Simulationsgebiets beginnen aufgrund der Schwerkraft zu Boden zu sinken und bringen dadurch die Flüssigkeit in Bewegung. Es entstehen kreisförmige Strömungen die in der Gebietsmitte nach unten und an den Rändern nach oben gerichtet sind, was dazu führt, dass Feinsedimentkörper am Gebietsrand zunächst leicht nach oben steigen. Das Strömungsbild wird zunehmend chaotisch und auch die äußeren Feinsedimentkörper sinken jetzt zu Boden. Am Ende der Simulation bildet sich um die größeren Sohlsedimente eine Dichte Ablagerung aus Feinsedimenten.

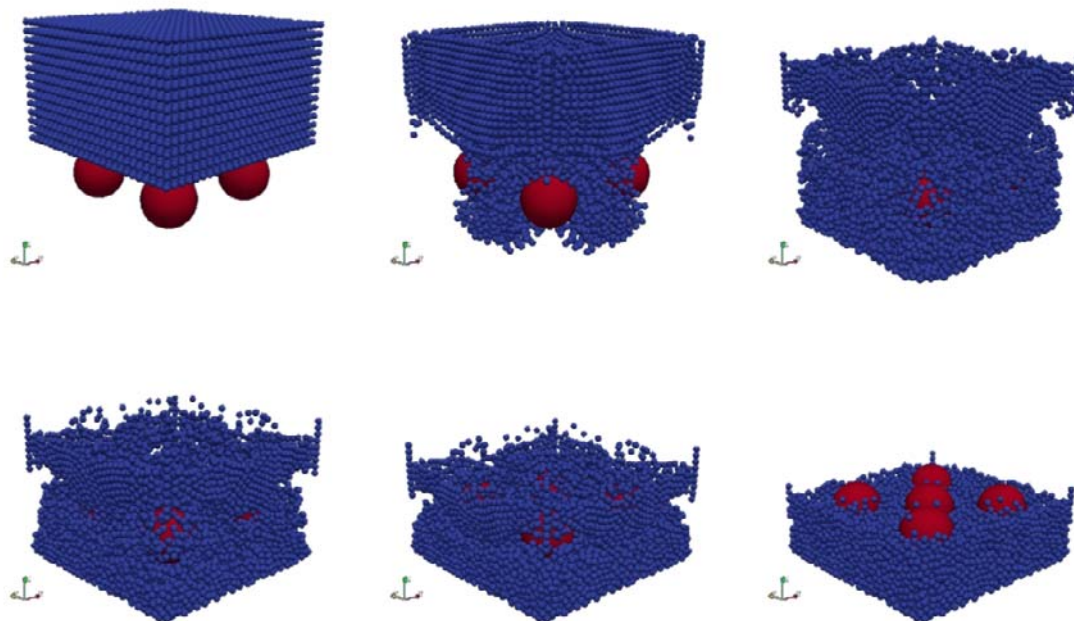


Abb. 6 Zeitlicher Verlauf der Simulationsstudie zur Feinsedimentinfiltration mit vereinfachter Gewässersohlgeometrie. Das würfelförmige Simulationsgebiet ist vollständig mit Wasser gefüllt. Feinsedimente (blau) sind mit der Strömungssimulation (GBM) gekoppelt. Gewässersohlsedimente (rot) sind nicht gekoppelt und unbeweglich.

3 Zusammenfassung

Die bisher durchgeführten Simulationen beschränkten sich zum großen Teil auf die Validierung der zur Anwendung kommenden Simulationsmethoden. Es konnte gezeigt werden, dass das NSGD in der Lage ist, Schüttungen mit komplexen weitgestuften Korngrößenverteilungen zu generieren. Die Genauigkeit des Verfahrens wurde auf Grundlage des Vergleichs von simulierten und gemessenen Porositäten festgestellt. Außerdem konnten bisher 24 virtuelle Gewässersohlen mit unterschiedlichen Korngrößenverteilungen generiert werden, die im weiteren Verlauf der Untersuchung noch von Bedeutung sind. So wurden Simulationen zur Durchströmung der virtuellen Gewässersohlen durchgeführt, im Rahmen derer die Permeabilitäten dieser Gewässersohlen bestimmt wurden. Auch die Genauigkeit der Durchströmungssimulation wurde einer Validierung unterzogen, welche mit zufriedenstellenden Ergebnissen abgeschlossen

wurde. Die Simulation der Feinsedimentinfiltration konnte zwar bisher aufgrund von unzureichenden rechnerischen Kapazitäten noch nicht abgeschlossen werden, eine erste klein-skalige Simulationsstudie lieferte jedoch vielversprechende Ergebnisse hinsichtlich der Durchführbarkeit der geplanten Simulationen.

4 Ausblick

Obwohl schon einige Simulationsergebnisse vorliegen, die neue Erkenntnisse im Bereich der Porosität und Permeabilität der Gewässersohle ermöglichen, können bisher noch keine Aussagen über den Ablauf oder die Auswirkungen des Kolmationsprozesses getroffen werden. Die dafür notwendigen Simulationen konnten bisher aufgrund unzureichender Rechenkapazitäten nicht durchgeführt werden. Die bevorstehenden Ziele unserer Untersuchung sind daher die Durchführung der ausstehenden Simulationen sowie die anschließende Auswertung der kolmatierten Gewässersohlgeometrien hinsichtlich der Änderung der Porosität und Permeabilität.

5 Literatur

Bear, J. (1972): Dynamics of fluids in porous media. New York, NY, USA: Dover Publications Inc.

Bhatnagar, P. L., Gross, E. P., Krook, M. (1954): A Model for Collision Processes in Gases. I. Small Amplitude Processes in Charged and Neutral One-Component Systems. *Physical Review* 94 (3): 511–25.

Chen, C., Packman, A.I., Gaillard, J.F. (2008): Pore-scale analysis of permeability reduction resulting from colloid deposition. *Geophys. Res. Lett.*, 35, L07404.

Cui, Y., Wooster, J.K., Baker, P.F., Dusterhoff, S.R., Sklar, L.S., Dietrich, W.E. (2008): Theory of fine sediment infiltration into immobile gravel bed. *Journal of Hydraulic Engineering* 134 (10): 1421–29.

Darcy, H.P.G. (1857): *Recherches Experimentales Relatives au Mouvement de L'Eau dans les Tuyaux*. Paris: Mallet-Bachelier.

Dullien, F.A.L. (1979): *Porous media - fluid transport and pore structure*. New York, NY, USA: Academic Press.

Engelhardt, W.V., Pitter, H. (1951): Über die Zusammenhänge zwischen Porosität, Permeabilität und Korngröße bei Sanden und Sandsteinen. *Heidelberger Beiträge zur Mineralogie und Petrographie* 2 (6): 477–91.

Frings, R.M., Schüttrumpf, H., Vollmer, S. (2011): Verification of Porosity Predictors for Fluvial Sand-Gravel Deposits. *Water Resources Research* 47 (7).

- Frisch, U., Hasslacher, B., Pomeau, Y. (1986): Lattice-Gas Automata for the Navier-Stokes Equation. *Physical Review Letters* 56 (14): 1505–8.
- Galindo-Torres, S.A. (2013): A coupled Discrete Element Lattice Boltzmann Method for the simulation of fluid–solid interaction with particles of general shapes. *Computer Methods in Applied Mechanics and Engineering* 265 (Oktober): 107–19.
- Ghaboussi, J., Barbosa, R. (1990): Three-Dimensional Discrete Element Method for Granular Materials. *International Journal for Numerical and Analytical Methods in Geomechanics* 14 (7): 451–72.
- Ginzburg, I., Verhaeghe, F., d’Humières, D. (2008): Two-Relaxation-Time Lattice Boltzmann Scheme: About Parametrization, Velocity, Pressure and Mixed Boundary Conditions. Februar. <https://lirias.kuleuven.be/handle/123456789/218788>.
- Godenschwager, C., Schornbaum, F., Bauer, M., Köstler, H., Rüde, U. (2013): A Framework for Hybrid Parallel Flow Simulations with a Trillion Cells in Complex Geometries. In *Proceedings of SC13: International Conference for High Performance Computing, Networking, Storage and Analysis*, 35:1–35:12. SC ’13. New York, NY, USA: ACM.
- He, X., Luo, L.S. (1997a): Lattice Boltzmann model for the incompressible Navier–Stokes equation. *Journal of Statistical Physics* 88 (3-4): 927–44.
- He, X., Luo, L.S. (1997b): A priori derivation of the lattice Boltzmann equation. *Physical Review E* 55 (6): R6333–36.
- Iglberger, K., Rüde, U. (2009): Massively Parallel Rigid Body Dynamics Simulations. *Computer Science - Research and Development* 23 (3-4): 159–67.
- Iglberger, K., Rüde, U. (2010): Massively Parallel Granular Flow Simulations with Non-Spherical Particles. *Computer Science - Research and Development* 25 (1-2): 105–13.
- Jia, X., Gan, M., Williams, R.A., Rhodes, D. (2007): Validation of a digital packing algorithm in predicting powder packing densities. *Powder Technology* 174 (1-2): 10–13.
- Jia, X., Williams, R.A. (2001): A packing algorithm for particles of arbitrary shapes. *Powder Technology* 120 (3): 175–86.
- Junk, M., Klar, A. (2000): Discretizations for the Incompressible Navier–Stokes Equations Based on the Lattice Boltzmann Method. *SIAM J. Sci. Comput.* 22 (1): 1–19.
- Kleinert, J., Obermayr, M., Balzer, M. (2013): Modeling of large scale granular systems using the discrete element method and the non-smooth contact dynamics method: a comparison. In *Proceedings of the ECCOMAS Multibody Dynamics Conference*, Zagreb.
- Ladd, A.J.C. (1993): Numerical Simulations of Particulate Suspensions via a Discretized Boltzmann Equation Part I. Theoretical Foundation. arXiv:comp-gas/9306004, Juli.

- Ladd, A.J.C. (1994): Numerical simulations of particulate suspensions via a discretized Boltzmann equation. Part 2. Numerical results. *Journal of Fluid Mechanics* 271: 311–39.
- Liang, R., Schruff, T., Jia, X., Schüttrumpf, H., Frings, R.M. (2015): Validation of a stochastic digital packing algorithm for porosity prediction in fluvial gravel deposits. *Sedimentary Geology* 329 (November): 18–27.
- Narváez, A., Zauner, T., Raischel, F., Hilfer, R., Harting, J. (2010): Quantitative analysis of numerical estimates for the permeability of porous media from lattice-Boltzmann simulations. *J. Stat. Mech.*, 2010, P11026.
- Narváez, A., Harting, J. (2013): Evaluation of pressure boundary conditions for permeability calculations using the lattice-Boltzmann method. *Advances in Applied Mathematics and Mechanics*.
- Noble, D.R., Chen, S., Georgiadis, J.G., Buckius, R.O. (1995): A consistent hydrodynamic boundary condition for the lattice Boltzmann method. *Physics of Fluids* (1994-present) 7 (1): 203–9.
- Niu, X.D., Shu, C., Chew, J.T., Peng, Y. (2006): A momentum exchange-based immersed boundary-lattice Boltzmann method for simulating incompressible viscous flows. *Physics Letters A* 354 (3): 173–82.
- Pan, C., Luo, L.-S., Miller, C.T. (2006): An evaluation of lattice Boltzmann schemes for porous medium flow simulation. *Comput. Fluids*, 35, 898–909.
- Prelik, T., Rüde, U. (2015): Ultrascale Simulations of Non-smooth Granular Dynamics. arXiv:1501.05810 [physics], Januar. <http://arxiv.org/abs/1501.05810>.
- Qian, Y. H., d’Humières, D., Lallemand, P. (1992): Lattice BGK Models for Navier-Stokes Equation. *EPL (Europhysics Letters)* 17 (6): 479.
- Schälchli, U. (1992): The Clogging of Coarse Gravel River Beds by Fine Sediment. *Hydrobiologia* 235-236 (1): 189–97.
- Schälchli, U. (1993): Die Kolmation von Fließgewässersohlen: Prozesse und Berechnungsgrundlagen. Dissertation, Eidgenössische Technische Hochschule Zürich, Zürich, Schweiz.
- Schälchli, U. (1995) Basic Equations for Siltation of Riverbeds. *Journal of Hydraulic Engineering* 121 (3): 274–87.
- Schornbaum, F., Godenschwager, C., Bauer, M., Markl, M., Rüde, U. (2013): waLBerla: Developing a Massively Parallel HPC Framework. gehalten auf der SIAM CS&E 2013, Boston, USA, Februar 26. http://www10.informatik.uni-erlangen.de/Publications/Talks/2013/Schornbaum_CSE_Boston_2013-02-26.pdf.
- Schruff, T., Schornbaum, F., Godenschwager, C., Rüde, U., Frings, R.M., Schüttrumpf, H. (2015): Numerical Simulation Of Pore Fluid Flow And Fine Sediment Infiltration Into

The Riverbed. In Proceedings of 11th International Conference in Hydroinformatics. New York, New York, USA.

Schruff, T., Liang, R., Råde, U., Schüttrumpf, H., Frings, R.M. (subm.): Generation of digital sedimentary deposits for porosity analysis - assessment of large-scale non-smooth granular dynamics. *Granular Matter*.

Skordos, P. A. (1993): Initial and boundary conditions for the lattice Boltzmann method. *Physical Review E* 48 (6): 4823–42.

Succi, S. (2001): The lattice Boltzmann equation: for fluid dynamics and beyond. Oxford University Press.

Vidal, D., Ridgway, C., Pianet, G., Schoelkopf, J., Roy, R., Bertrand, F. (2009): Effect of particle size distribution and packing compression on fluid permeability as predicted by lattice-Boltzmann simulations. *Computers & Chemical Engineering* 33, 256–266.

White, J.A., Borja, R.I., Fredrich, J.T. (2006): Calculating the effective permeability of sandstone with multiscale lattice Boltzmann/finite element simulations. *Acta Geotechnica*, 1, 195–209.

Wooster, J.K., Dusterhoff, S.R., Cui, Y., Sklar, L.S., Dietrich, W.E., Malko, M. (2008): Sediment Supply and Relative Size Distribution Effects on Fine Sediment Infiltration into Immobile Gravels. *Water Resources Research* 44 (3): W03424.

Zhang, H., Trias, F.X., Oliva, A., Yang, D., Tan, Y., Shu, S., Sheng, Y. (2014): PIBM: Particulate immersed boundary method for fluid-particle interaction problems. Juli. <http://arxiv-web3.library.cornell.edu/abs/1407.6704>.

Zhang, H., Yuan, H., Trias, F.X., Yu, A., Tan, Y., Oliva, A. (2015): Particulate immersed boundary method for complex fluid-particle interaction problems with heat transfer. arXiv preprint arXiv:1502.01159. <http://arxiv.org/abs/1502.01159>.

Zou, Q., He, X. (1997): On pressure and velocity boundary conditions for the lattice Boltzmann BGK model. *Physics of Fluids (1994-present)* 9 (6): 1591–98.

Anschrift der Verfasser

Dipl.-Ing. Tobias Schruff

Univ.-Prof. Dr.-Ing. Holger Schüttrumpf

Dr. Roy M. Frings

Lehrstuhl und Institut für Wasserbau und Wasserwirtschaft, RWTH Aachen University

Mies-van-der-Rohe-Str. 17

52056 Aachen