

Wachstumsrichtung auf die Spitzen der gegenüber liegenden Risswand zu orientieren.

Die Kontinuumsmodellierung hat ihre Tradition in der Beschreibung von Phasenübergängen und Mikrostrukturausbildungen in metallischen Legierungen. Um das Potential des sehr weit entwickelten Verfahren für Anwendungen in den Geowissenschaften zu nutzen, wurden im Rahmen dieser Arbeit die Konzepte übertragen, weiterentwickelt und erstmalig zur Behandlung von Prozessabläufen in geologischen Materialien eingesetzt. Die dargestellten Zeitsequenzen illustrieren, dass die Methode in der Lage ist, die generellen Phänomene der experimentell beobachteten Kornstrukturen und die Komplexität des polykristallinen Wachstums in numerischen Simulationen zu beschreiben. In den durchgeführten Simulationen wurde eine konstante treibende Kraft für die Kristallisation eingesetzt. Diffusions- und Strömungsprozesse zum Materialtransport wurden nicht berücksichtigt. Diese Erweiterungen besitzen vielseitige Anwendungen und versprechen neue Einblicke in die Entstehungsmechanismen und Strukturbildungsprozesse von Gefügestrukturen in geologischen Gesteinsschichten.

### Danksagung

Das Forschungsvorhaben wurde von der Deutschen Forschungsgemeinschaft im Rahmen des Schwerpunktprogramms 1095 „Mehrskalenprobleme“, Projektnummer Ne 822/1-3 gefördert. Die Verfasser danken für die Unterstützung.

### Literaturangaben

- Beeler, N., Hickman, S. (1997); Crack healing in quartz via solution transport: Experimental observations of healing morphology and kinetic implications. *Eos, Trans. AGU*, F732, 78.
- Bons, P.D., Jessell, M. W. (1997); Experimental simulation of the formation of fibrous veins by localised dissolution-precipitation creep. *Mineralogical Magazine* 61, 53-63.
- Hilgers, Ch. (2000); Vein growth in fractures – experimental, numerical and real rock studies. Dissertation, RWTH Aachen. Shaker Verlag, ISBN 3-8265-7963-1.
- Jessell, M. W. (2004); The numerical simulation of microstructures in geological materials. Recrystallization and Grain Growth, Proceeding of the first joint international conference, Editors: G. Gottstein and D. Molodov, Springer Verlag.
- MPI Forum (2006); Message Passing Interface, <http://www.mpi-forum.org>.
- Nestler, B., Garcke, H., Stinner, B. (2005); Multicomponent alloy solidification: Phase-field modelling and simulations. *Phys. Rev. E* 71, 041609-1.
- OpenMP Forum (2006); OpenMP Standard, <http://www.openmp.org>.

## Phasenfeldsimulation der Korngrenzenbewegung und des Kornwachstums in geologischen Materialien

Frank Wendler, Manuel Zamora-Morschhäuser, Britta Nestler, Michael Selzer

Institut für Angewandte Forschung, Hochschule Karlsruhe  
Moltkestraße 30, D 76133 Karlsruhe

[frank.wendler@hs-karlsruhe.de](mailto:frank.wendler@hs-karlsruhe.de), [manuel@zamora.de](mailto:manuel@zamora.de),  
[britta.nestler@hs-karlsruhe.de](mailto:britta.nestler@hs-karlsruhe.de), [michael.selzer@hs-karlsruhe.de](mailto:michael.selzer@hs-karlsruhe.de)

### Zusammenfassung:

In diesem Beitrag wird ein Phasenfeldmodell zur Beschreibung der Mikrostrukturentwicklung in polykristallinen, geologischen Gefügen vorgestellt. Die Kornzustände und anisotropen, kristallographischen Orientierungen der Körner werden an jedem Ort  $(x,y)$  und zu jedem Zeitpunkt  $t$  durch die Komponenten eines vektoriiellen Ordnungsparameters  $\phi(x,y,t) = (\phi_1(x,y,t), \dots, \phi_N(x,y,t))$  beschrieben. Die einzelnen Feldgrößen  $\phi_i(x,y,t)$  besitzen an den Korngrenzen innerhalb einer diffusen Grenzschicht einen kontinuierlichen Übergang. Das Phasenfeldmodell basiert auf einem freien Energiefunktional, aus dem ein gekoppelter Satz von Evolutionsgleichungen hergeleitet und numerisch gelöst wird. Für die Beschreibung der Formänderung, Migration und Vergrößerung von Liquideinschlüssen in einem Korngefüge wurde eine spezielle Modellvariante formuliert, bei der die Volumina einzelner Phasen (z.B. der Flüssigphase) im Gesamtgebiet erhalten bleiben. Die numerischen Simulationen basieren auf einem expliziten finite Differenzenverfahren mit Performance optimierten und parallelen Algorithmen und zeigen die Korngrenzenbewegung und den Kornwachstumsprozess in geologischen Materialien. Die zeitliche Entwicklung der Kornstruktur und der Liquideinschlüsse wird angetrieben durch eine Verringerung der Korngrenzenenergie. Unter Verwendung einer experimentellen Korngefügeaufnahme wird das Verhalten von Liquideinschlüssen an Korngrenzen und Korngrenztripelpunkten in Simulationen untersucht. Die numerischen Ergebnisse können Auskunft über Vergrößerungsraten, Kornwachstumsmechanismen, über die Verteilung von Korngrößen und Kornformen geben.

### 1 Phasenfeldmethode

Die numerische Simulation von Wachstumsprozessen und allgemeiner von Phasenübergängen ist aus mathematischer Sicht ein freies Randwertproblem, für das sich historisch zwei verschiedene Lösungsansätze entwickelt haben. Ausgehend von einem Sharp-Interface-Modell kann mit Hilfe von front-tracking-Algorithmen die freie Oberfläche verfolgt werden, deren Entwicklung durch physikalische Gesetze an der Phasengrenze bestimmt wird. Ein Beispiel hierfür ist das umfangreiche Softwareprojekt 'Elle' (Jessell (2001) siehe <http://www.micostructure.info/index.php>), das speziell für die Simulation von Kornstrukturen geologisch interessanter Prozesse in 2D entwickelt wurde. Die Nachteile dieses Ansatzes liegen in einem hohen Ressourcenverbrauch. Dieser wird verursacht durch häufiges Einfügen oder Löschen von Oberflächenmarkern und Topologieprüfungen, die durch das Verschmelzen oder Abtrennen von Kornbruchstücken erforderlich sind.

Einen alternativen Ansatz für die Beschreibung von Mikrostrukturausbildungen auf mesoskopischer Längenskala stellen Phasenfeldmodelle dar, die seit etwa 15 Jahren kontinuierlich an Bedeutung gewinnen. Die Topologie der wachsenden Phase bzw. des Kristallkorns wird vollständig durch einen Ordnungsparameter  $\phi(x,y,t)$ , auch Phasenfeldvariable genannt, beschrieben, der von den Ortsvariablen  $(x,y)$  und der Zeit  $t$  abhängt. Die Evolution des Phasenfeldparameters folgt einer parabolischen partiellen Differentialgleichung, die aus einem Funktional der freien Energie oder der Entropie abgeleitet wird. Das Funktional enthält die für das betrachtete Problem wesentlichen Energiebeiträge. Im Gegensatz zum Sharp-Interface-Ansatz werden bei der Phasenfeldmodellierung diffuse Grenzflächen der Breite  $\varepsilon$  eingeführt. Im Bereich der diffusen Grenzschicht variiert die Phasenfeldvariable  $\phi(x,y,t)$  kontinuierlich von einem festen Wert  $\phi(x,y,t) = 0$  außerhalb des Kornvolumens zu einem festen Wert  $\phi(x,y,t) = 1$  im Innern des Korns. Die scharfe Oberfläche des Korns lässt sich als Niveaufläche  $\phi(x,y,t) = 0.5$  auffassen. Für die räumliche Diskretisierung können reguläre oder adaptiv verfeinerte Gitter verwendet werden. Effektive numerische Lösungsverfahren haben eine Berechnung komplexer Topologien auch in 3D ermöglicht. In Boettinger (2000) wird ein ausführlicher Überblick über die Entwicklung verschiedener Modelle mit den jeweiligen Referenzen gegeben, die sich im wesentlichen auf Systeme mit zwei verschiedenen Phasen beschränken. Eine Erweiterung auf eine beliebige Anzahl Phasen bzw. Körner stellt das in Nestler (2000), Garcke (2004) und Nestler (2005) entwickelte Multi-Phasenfeldmodell dar. In dem Abschnitt 2.1 werden die Evolutionsgleichungen und die physikalischen Parameter des Modells zusammengefasst.

### 1.1 Modellierung von Kornstrukturen mit einem Multi-Phasenfeldmodell

Aus der Sicht der Kontinuumsthermodynamik wird eine wachsende Körnerfront durch das Wechselspiel aus lokaler Krümmung, aus den einen Phasenübergang antreibenden Kräften und aus der Oberflächenkinetik entsprechend der Gibbs-Thomson-Gleichung beschrieben. Zusätzlich sind für generelle Prozesse wie die Erstarrung aus einer unterkühlten Schmelze lokale Erhaltungsgleichungen für Energie (Wärmediffusion) und Masse (Teilchendiffusion) zu berücksichtigen, die für die oft beobachteten fraktalen Topologien verantwortlich sind. Für die Anwendung des Phasenfeldmodells zur Beschreibung geologischer Kornreifungsprozesse wird in dieser Arbeit von einem nicht Raten limitierten, langsam ablaufenden Wachstum ausgegangen, so dass Diffusionsprozesse nicht betrachtet werden. Kornwachstumsprozesse in der Geologie und in den Materialwissenschaften werden in dem verwendeten Modell durch die Identifikation jedes einzelnen Kristallkorns mit einer eigenen Phasenfeldvariable, d.h. mit einem eigenen Ordnungsparameter beschrieben. Als Grundlage einer thermodynamisch konsistenten Ableitung des Modells wird das folgende Energiedichtefunktional aufgestellt:

$$F(\phi) = \int_V \varepsilon a(\phi, \nabla\phi) + \frac{1}{\varepsilon} w(\phi) + f(\phi) dV$$

Die Volumenbeiträge aller Körner und der Liquidphase sind in der Energiedichte  $f(\phi)$  enthalten, die von einem vektorwertigen Phasenfeldparameter  $\phi_\alpha(x,y,t)$ ,  $\alpha = 1, \dots, N$  abhängt. Die freie Energiedichte  $f$  lässt sich als Interpolation der Energiedichten  $f_\alpha(\phi)$  für alle Körner und die Liquidphase aufstellen und ist die treibende Kraft für das Kornwachstum und für die Korngrenzenbewegung. Für die Beschreibung von Phasenumwandlungsprozessen ist der Energiedichtebeitrag  $f(\phi)$  zusätzlich eine Funktion der Konzentrationen  $c_i$  und der Temperatur  $T$ . Die Oberflächenbeiträge teilen sich auf die Gradientenenergiedichte  $a(\phi, \nabla\phi)$  und das Multiphasenpotential  $w(\phi)$  auf, wobei die erste Funktion für die Verbreiterung und die zweite für eine Limitierung der diffusen Grenzflächendicke verantwortlich ist. Beide Terme beinhalten eine Summation über alle Kornpaarungen  $(\alpha - \beta)$  und bewirken, dass sich eine konstante Grenzflächendicke der Größenordnung  $\varepsilon$  entlang der Korn- und Phasengrenzen einstellt.

Die Gradientenenergiedichte  $a(\phi, \nabla\phi)$  wird über verallgemeinerte Gradientenvektoren  $q_{\alpha\beta}$  als Doppelsumme über alle Korn- und Phasenkombinationen formuliert

$$a(\phi, \nabla\phi) = \sum_{\alpha < \beta} \gamma_{\alpha\beta} a_c^2(\bar{q}_{\alpha\beta}) |\bar{q}_{\alpha\beta}|^2$$

mit

$$\bar{q}_{\alpha\beta} = \phi_\alpha \nabla\phi_\beta - \phi_\beta \nabla\phi_\alpha$$

wobei die Grenzflächenenergien der Korn- und Phasengrenzen in  $\gamma_{\alpha\beta}$  enthalten sind.  $a_c(q_{\alpha\beta})$  beschreibt die Orientierungsabhängigkeit der Grenzflächenenergie. Für die in dieser Arbeit durchgeführten Kornsimulationen wurden die Grenzflächenenergien als isotrop angenommen, d.h.  $a_c = 1$ . Der Vektor  $q_{\alpha\beta}$  steht senkrecht auf einer  $\alpha$ - $\beta$ -Grenzfläche. Für ein System aus zwei Körnern oder Phasen reduziert sich der verallgemeinerte Gradientenvektor zu  $q_{\alpha\beta} = -\nabla\phi_\beta$  (siehe Abb. 1).

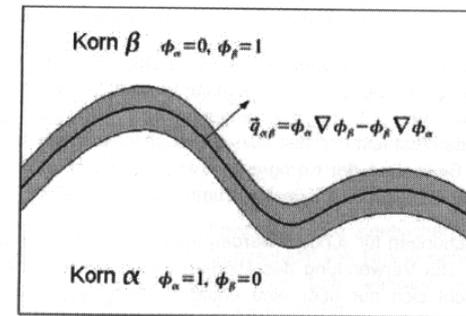


Abbildung 1. Schematische Darstellung einer diffusen  $\alpha$ - $\beta$ -Korngrenze mit dem verallgemeinerten Gradientenvektor  $q_{\alpha\beta}$ .

Für den potentiellen Energiedichtebeitrag  $w(\phi)$  wurde ein Hindernispotential (multi-obstacle potential) gewählt, das einen stark separierenden Charakter besitzt und damit die Zahl der nötigen diffusen Grenzflächen-Gitterzellen reduziert. Das Potential besitzt  $N$  Minima für die Volumenbereiche der Körner und der Liquidphase. In der Potentialmulde ( $0 < \phi_\alpha, \phi_\beta < 1$ ) hat es folgenden Verlauf:

$$w(\phi) = \frac{16}{\pi^2} \sum_{\alpha < \beta} \gamma_{\alpha\beta} \phi_\alpha \phi_\beta + \sum_{\alpha < \beta < \delta} \gamma_{\alpha\beta\delta} \phi_\alpha \phi_\beta \phi_\delta$$

Für Systeme mit mehr als zwei Körnern oder Phasen ist eine genaue Kalibrierung der höheren Ordnungsterme  $\sim \phi_\alpha \phi_\beta \phi_\delta$  mit den Koeffizienten  $\gamma_{\alpha\beta\delta}$  erforderlich, um das spontane Auftreten von Fremdphasen- bzw. Fremdkornanteilen an einer Korngrenze zu unterbinden.

Unter der Voraussetzung einer Energieminimierung lassen sich aus dem Funktional  $F(\phi)$  mit dem Variationsansatz die folgenden allgemeinen Evolutionsgleichungen formulieren

$$\varepsilon \tau \frac{\partial \phi_\alpha}{\partial t} = \varepsilon \left( \nabla \cdot a_{\nabla \phi_\alpha}(\phi, \nabla \phi) - a_{,\phi_\alpha}(\phi, \nabla \phi) \right) - \frac{1}{\varepsilon} w_{,\phi_\alpha}(\phi) - f_{,\phi_\alpha}(\phi) - \lambda$$

Diese Gleichungen ergeben einen Satz partieller Differentialgleichungen für die nicht-erhaltenen Phasenfeldvariablen  $\phi_\alpha(x, y, t)$ ,  $\alpha = 1, \dots, N$ . Eine Methode, die für einzelne Phasenfeldvariablen eine Volumenerhaltung gewährleistet, wird in Abschnitt 2.2 beschrieben.

Der Lagrangeparameter  $\lambda$  enthält die lokale Zwangsbedingung  $\sum \phi_\alpha = 1$ . Der Parameter  $\tau$  ist ein kinetischer Koeffizient, der für eine anisotrope Kinetik von der jeweiligen Korngrenzenorientierung abhängt. Die Indizierung nach  $\phi_\alpha$  (bzw. nach  $\nabla \phi_\alpha$ ) bezeichnet die Ableitung des entsprechenden Energiedichtebeitrags nach der Phasenfeldvariablen (bzw. nach dessen Gradientenkomponenten).

Für die Simulation des Kornreifungsprozesses werden folgende Vereinfachungen postuliert. Der kinetische Koeffizient  $\tau_0$  ist konstant und die Gradientenenergiedichte wird als isotrop,  $a(\phi, \nabla \phi) = \sum \gamma_{\alpha\beta} |q_{\alpha\beta}|$  angenommen. Außerdem gibt es in dem System zwischen den fest-fest und fest-flüssig Grenzflächen keine treibenden Kräfte, d.h.  $f_{,\phi_\alpha} = 0$ . Die Bewegung der Korngrenzen wird gesteuert durch das Bestreben des Systems, einen Zustand mit minimaler Krümmung herzustellen.

Die Evolutionsgleichungen für  $\phi_\alpha(x, y, t)$  werden mit einem finite Differenzenverfahren numerisch gelöst. Die Verwendung des Hindernispotentials  $w(\phi)$  bewirkt, dass die diffuse Grenzschicht sich nur über eine endliche Breite ausdehnt. Daher ist die Berechnung der partiellen Differentialgleichungen nur im Bereich der diffusen Grenzschicht erforderlich. Zur Durchführung komplexer Mikrostruktursimulationen wurde das Soucecode mit MPI- und OpenMP Routinen für Linux-Cluster und Hochleistungsrechner parallelisiert.

## 1.2 Volumenerhaltung der Liquidphase

Eine Voraussetzung zur Beschreibung des Reifungsprozesses von Gesteinskörnern mit Liquideinschlüssen ist ein zeitlich konstantes Volumen der zwischen den Körnern verteilten Flüssigphase. Da sich jedoch das Phasenvolumen des Liquids aufgrund der krümmungsgetriebenen Kräfte verändert (kleine Partikel schrumpfen bevorzugt), musste eine Modellerweiterung zur Volumenerhaltung einzelner Phasen vorgenommen werden.

Ausgangspunkt für die Modellerweiterung ist die auch in anderen geologischen Grundlagenstudien verwendete Annahme einer hohen Permeabilität des Gesteins (Becker (2004)). Die in einem zweidimensionalen Gebiet (Querschiff) auftretenden Flüssigkeitseinschlüsse können über ein poröses Medium in der dritten Raumdimension zusammenhängen. Unter dieser Annahme ist es möglich, eine nichtlokale Zwangsbedingung für das Volumen aufzustellen. Die Volumenerhaltung einer beliebigen Phase  $\phi_\alpha$  entspricht in der Phasenfeldformulierung dem konstanten Integral über das betrachtete Gebiet, d.h. es gilt:

$$\int_{\Omega} \phi_\alpha = \text{const} \quad \Leftrightarrow \quad \partial_t \int_{\Omega} \phi_\alpha = 0$$

Das Erfüllen dieser Zwangsbedingung kann durch Hinzufügen einer treibenden Kraft  $\mu_\alpha h'(\phi_\alpha)$  auf der rechten Seite der Evolutionsgleichung für die Phase  $\phi_\alpha$  erreicht werden:

$$\begin{aligned} \varepsilon \tau \partial_t \phi_\alpha &= \varepsilon \left( \nabla \cdot a_{\nabla \phi_\alpha}(\phi, \nabla \phi) - a_{,\phi_\alpha}(\phi, \nabla \phi) \right) - \frac{1}{\varepsilon} w_{,\phi_\alpha}(\phi) - \mu_\alpha h'(\phi_\alpha) - \lambda \\ &= r h s_\alpha - \mu_\alpha h'(\phi_\alpha) - \lambda \end{aligned}$$

Dabei repräsentiert  $\mu_\alpha$  für jede Phase mit erhaltenem Volumen die Stärke der neu hinzu gekommenen treibenden Kraft.  $h'(\phi_\alpha)$  ist die erste Ableitung einer geeigneten Interpolationsfunktion (z.B.  $h(\phi_\alpha) = \phi_\alpha^2(3-2\phi_\alpha)$ ), die auch in der freien Energiedichte  $f(\phi)$  den Ausgleich der verschiedenen Korn-/Phasenwerte innerhalb der diffusen Grenzschicht herstellt. Die Größe von  $\mu_\alpha$  wird in jedem Zeitschritt als Verhältnis der folgenden Volumenintegrale berechnet

$$\mu_\alpha := \frac{\int_{\Omega} r h s_\alpha}{\tau} / \frac{\int_{\Omega} h'(\phi_\alpha)}{\tau}$$

Diese Formulierung lässt auch eine Anisotropie des kinetischen Koeffizienten  $\tau$  zu. Da  $h'(\phi_\alpha)$  nur innerhalb der diffusen Grenzschicht von Null verschieden ist, bedeutet dies eine (isotrope) Rückverlagerung des sich während eines Zeitschrittes veränderten Phasenfeldvolumens an die Grenzfläche.

## 2 Simulation von Liquideinschlüssen an Korngrenzen und Tripelpunkten

Das Phasenfeldmodell mit der Erweiterung zur Volumenerhaltung der Liquidphase wurde zur Simulation von Korngefügen mit Flüssigkeitseinschlüssen in zwei Raumdimensionen eingesetzt. Um unerwünschte Randeffekte auf die Entwicklung der Kornstruktur zu vermeiden, wurden periodische Randbedingungen an den Rechengebietsrändern verwendet.

### 2.1 Formänderung einzelner Liquideinschlüsse

In den folgenden Simulationen werden zunächst die Benetzungswinkel und das dynamische Verhalten isolierter Liquideinschlüsse untersucht. Zur Minimierung von Krümmungseinflüssen der Korngrenzen wurde die in der Abbildung 2 gezeigte symmetrische, hexagonale Kornkonfiguration initialisiert. Ohne die Präsenz eines Liquideinschlusses und für identische fest/flüssig- ( $\gamma_{SL}$ ) und fest/fest Grenzflächenenergien ( $\gamma_{SS}$ ) stellen die vier hexagonalen Körner eine zeitlich stabile Konfiguration mit Gleichgewichtswinkeln von  $120^\circ$  dar. Die Bewegung, Form- und Positionsänderungen der Liquideinschlüsse stehen im direkten Zusammenhang mit der anfänglichen Geometrie.

Für die in Abb. 2 dargestellte zeitliche Entwicklung wurde zentral an der mittleren Korngrenze der hexagonalen Struktur ein Bereich mit Flüssigphase gefüllt. Der Liquideinschluss ändert unter Volumenerhaltung seine Form und nimmt eine stabile, tropfenähnliche Gestalt an. Angetrieben durch die Minimierung der Oberflächenkrümmung stellen sich die Winkel an den beiden Tripelpunkten auf die Gleichgewichtswinkel von  $120^\circ$  ein.

Wie in Abb. 3 illustriert, liefert ein Flüssigkeitseinschluss an einem Korngrenztripelpunkt mit  $120^\circ$  Winkeln ebenfalls eine stabile Konfiguration.

Befindet sich der anfängliche Liquideinschluss an der Korngrenze, aber nicht in deren Mitte (Abb. 4), so ist es energetisch günstiger, dass er sich auf den nächstgelegenen Korngrenztripelpunkt zu bewegt und dort eine stabile Position einnimmt. Für den Liquideinschluss liegen am Korngrenztripelpunkt ein Minimum der Gesamtkrümmung und damit ebenfalls ein Minimum der Gesamtenergie vor.

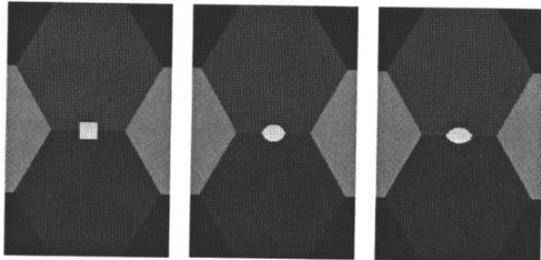


Abbildung 2. Formänderung eines Liquideinschlusses in der Mitte einer Korngrenze mit symmetrischem Abstand zu den benachbarten Korngrenztripelpunkten.

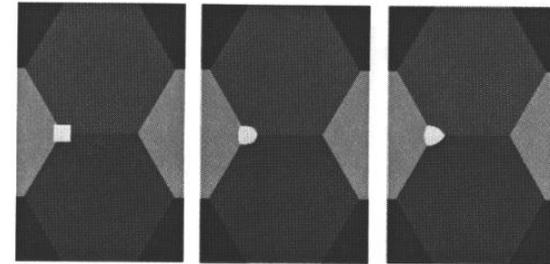


Abbildung 3. Formänderung eines Liquideinschlusses an einem Korngrenztripelpunkt. Während des zeitlichen Verlaufs stellt sich eine stabile Konfiguration mit  $120^\circ$  Winkeln an den Tripelpunkten bestehend aus je zwei Körnern und der Liquidphase ein.

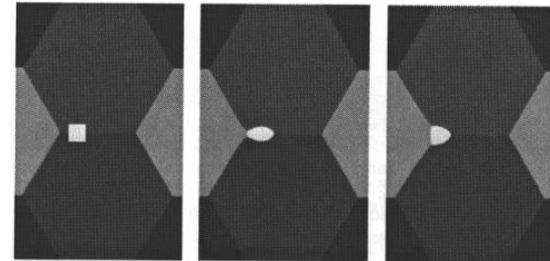


Abbildung 4. Bewegung und Formänderung eines Liquideinschlusses von einer Korngrenze hin zum Korngrenztripelpunkt.

Liquidphase, die auf zwei verschiedenen Positionen entlang einer Korngrenze verteilt ist, zeigt einen Vergrößerungsprozess, bei dem die beiden Bereiche zu einem großen Flüssigkeitseinschluss verschmelzen. In der Phasenfeldsimulation wird der Vergrößerungsprozess der Liquideinschlüsse durch kleine numerische Schwankungen der Oberflächengeometrie ausgelöst. Durch diese Fluktuationen besitzt der linke Tropfen in Abb. ?? lokal eine stärkere Krümmung und beginnt bei gleichzeitiger Vergrößerung des rechten Tropfens zu schrumpfen. Die direkt umliegenden Körner passen ihre Form an und schließen die entstehende Lücke im Simulationsgebiet, bis das Liquid komplett zu einem Einschluss verschmolzen ist. Der Reifungsmechanismus stützt sich auf die Annahme, dass die in der zweidimensionalen Schicht betrachteten Liquideinschlüsse in der dritten Raumdimension verbunden sind. Diese Vorgehensweise modelliert die hohe Permeabilität in einem Gesteinsmaterial.

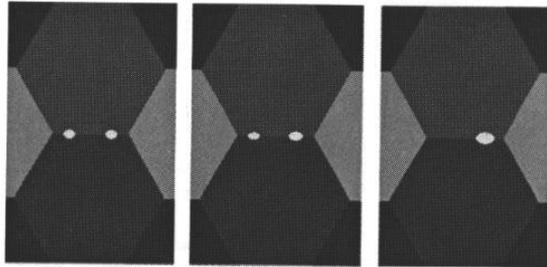


Abbildung 5: Zwei Liquideinschlüsse an einer Korngrenze, die zu einem Tropfen vergrößern.

## 2.2 Winkelauswertung an Korngrenztripelpunkten bei Variation der Grenzflächenenergien

Die Benetzungswinkel der Liquidphasen sind abhängig von dem Verhältnis der Grenzflächenenergien  $\gamma_{SS}$  (fest-fest) und  $\gamma_{SL}$  (fest-flüssig). Die Simulationen in Abb. 6 wurden mit unterschiedlichen fest-flüssig Grenzflächenenergien gerechnet. In der linken Simulation wurde das Verhältnis der Grenzflächenenergien  $\gamma_{SS}/\gamma_{SL} = 1.0$  und in der rechten mit  $\gamma_{SS}/\gamma_{SL} = 1.2$  gewählt. Die Unterschiede der Benetzungswinkel wurden bei beiden Simulationen für denselben Zeitschritt ausgewertet. Bei niedrigerem Wert der fest-flüssig Grenzflächenenergie  $\gamma_{SL}$  (rechtes Bild) sind die Benetzungswinkel spitzer. Der Einschluss benetzt also in einem höheren Maße die Korngrenze. Der Benetzungswinkel  $\theta$  kann mit Hilfe der Gleichung  $2\cos(\theta/2) = \gamma_{SS}/\gamma_{SL}$  berechnet werden (Bulau (1979)). Für das Grenzflächenenergieverhältnis  $\gamma_{SS}/\gamma_{SL} = 1.2$  liefert die exakte Formel für den Benetzungswinkel den Wert  $\theta = 106^\circ$  (abgerundet), der sich auch in der Phasenfeldsimulation ausbildet.

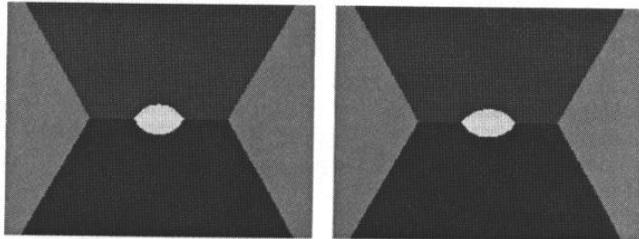


Abbildung 6: Zwei Simulationen mit unterschiedlichen Grenzflächenenergien  $\gamma_{SS}$  (fest-fest) und  $\gamma_{SL}$  (fest-flüssig). Für  $\gamma_{SS}/\gamma_{SL} = 1.0$  (links) sind die Benetzungswinkel  $120^\circ$ , für  $\gamma_{SS}/\gamma_{SL} = 1.2$  (rechts) stellt sich ein Benetzungswinkel von  $106^\circ$  ein.

## 2.3 Simulation der Kornreifung mit Liquideinschlüssen

Die in den Abschnitten 3.1 und 3.2 durchgeführten Berechnungen der einzelnen Liquideinschlüsse zwischen hexagonalen Kornstrukturen bilden die Basis für weitere Simulationen mit größeren Korngefügen, die darauf abzielen, ein genaueres Abbild realer geologischer Strukturen zu erreichen. Es wurden periodische Randbedingungen und ein Grenzflächenenergieverhältnis von  $\gamma_{SS}/\gamma_{SL} = 1.2$  gesetzt. Durch Anwendung eines Voronoi Verfahrens wird das Rechengebiet nach einem Zufallsalgorithmus mit einer Kornstruktur, zunächst ohne Liquideinschlüsse gefüllt. In Abb. 7 ist der Kornvergrößerungsprozess in drei Zeitschritten zu sehen.

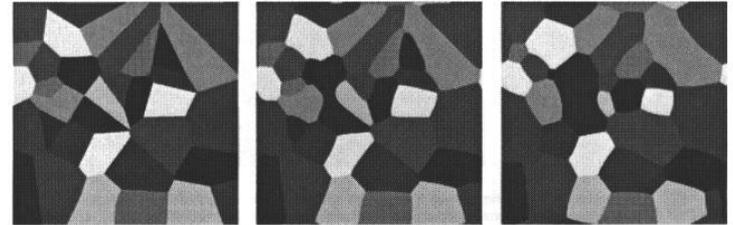


Abbildung 7: Vergrößerung einer Kornstruktur ohne Flüssigkeitseinschlüsse zu drei verschiedenen Simulationsschritten.

Für dieselbe Anfangskornverteilung wurden Liquideinschlüsse an die Tripel- oder Quadrupelpunkte gefüllt (Abb. 8). Das zufällige Kornstrukturmuster verhält sich ähnlich wie die einzelnen hexagonalen Strukturen. Benachbarte kleine Liquideinschlüsse verschmelzen zu einem großen Bereich, aus Quadrupelpunkten werden energetisch günstigere Tripelpunkte und Körner, mit ungünstiger, d.h. starker Oberflächenkrümmung (z.B. kleine Körner) schrumpfen und verschwinden schließlich ganz. Körner, die nicht direkt in Kontakt mit einem Flüssigkeitseinschluss stehen, verhalten sich während der Simulation genau wie in dem Gefüge ohne Liquidphase in Abb. 7. Die Einschlüsse beeinflussen also maßgeblich das Kornwachstum der Kornstrukturen in ihrer direkten Umgebung (Abb. 8).

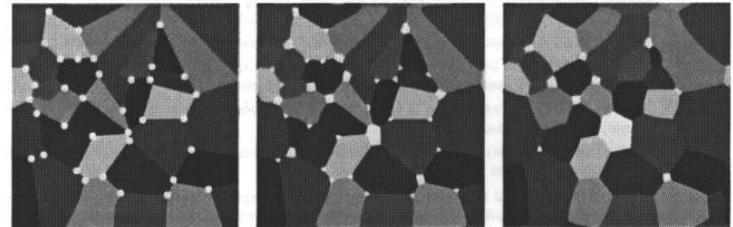


Abbildung 8: Vergrößerung einer Kornstruktur mit Flüssigkeitseinschlüssen zu drei verschiedenen Simulationsschritten.

## 2.4 Simulation einer realen Kornstruktur

Das experimentelle Bild einer realen Kornstruktur mit Liquideinschlüssen in Abb. 9 wurde in einen Simulationsdatensatz konvertiert, als Ausgangskonfiguration in die Simulationssoftware eingelesen und mit den gleichen physikalischen Parametern wie in den bisher dokumentierten Ergebnissen simuliert. Sowohl in der experimentellen als auch in der simulierten Mikrostruktur (Abb. 10) sind Korngrenztripelpunkte mit Winkeln von  $120^\circ$  zu erkennen. Die Zeitsequenz der simulierten Morphologien zeigt eine Vergrößerung der Liquidateile sowie auch der polykristallinen Kornstruktur.

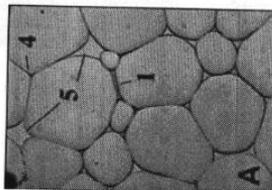


Abbildung 9. Experimentelles Korngefüge mit verschiedenen Liquideinschlüssen an Korngrenzen und an Korngrenztripelpunkten (Bons (2005)).

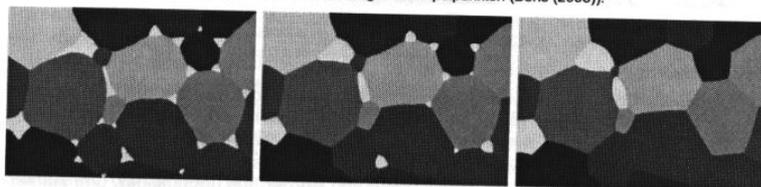


Abbildung 10. Phasenfeldsimulation der zeitlichen Entwicklung des eingelesenen, experimentellen Korngefüges mit Liquideinschlüssen aus Abb. 9.

### Literaturangaben

- Becker, J. K., Koehn, D., Walte, N., Jessell, M. W., Bons, P. D., Passchier, C. W., Evans, L. (2004): Numerical simulation of disequilibrium microstructures in solid-melt systems during grain-growth. *J. Virtual Explorer*, Vol. 14. <http://www.virtualexplorer.com.au/journal/2004/15/becker/>
- Boettinger, W. J., Warren, J. A., Beckermann, C., Karma, A. (2002): Phase-field simulations of solidification. *Annu. Rev. Mater. Res.* 32, 163.
- Bons, P. D., Becker, J. K. (2005): Wissenschaftlicher Austausch und Kooperation.
- Bulau, J. R., Waff, H. S., and Tyburczy, J. A., 1979, Mechanical and thermodynamical constraints on fluid distribution in partial melts. *J. Geophys. Res.*, 84, p. 6102-6108.
- Garcke H., Nestler B., Stinner B. (2004): A diffuse interface model for alloys with multiple components and phases. *SIAM J. Appl. Math.* 64, 775 – 799.
- Jessell, M. W. (2001): The numerical simulation of microstructures in geological materials. *Recrystallization and grain growth. Proceedings of the first Joint International Conference on Recrystallization and Grain Growth*, Aachen (ed. by G. Gottstein and D. A. Molodov), 741-749.
- Nestler B., Wheeler A. A. (2000): A Multi-phase-field model of eutectic and peritectic alloys: Numerical simulation of growth structures. *Physica D* 138, 114 – 133.
- Nestler B., Garcke H., Stinner B. (2005): Multicomponent alloy solidification: Phase-field modelling and simulations. *Phys. Rev. E* 71, 041609.

## SiWaPro DSS – Beratungssystem zur Simulation von Prozessen der unterirdischen Zonen

Peter-Wolfgang Gräber<sup>1</sup>, René Blankenburg<sup>1</sup>  
Oliver Kemmesies<sup>2</sup>, Stefanie Krug<sup>2</sup>

<sup>1</sup> Technische Universität Dresden, Institut für Abfallwirtschaft und Altlasten

<sup>2</sup> KP Ingenieurgesellschaft für Wasser und Boden mbH, Gunzenhausen

[graeber@rcs.urz.tu-dresden.de](mailto:graeber@rcs.urz.tu-dresden.de)

[rene.blankenburg@tu-dresden.de](mailto:rene.blankenburg@tu-dresden.de)

[oliver.kemmesies@ibwabo.de](mailto:oliver.kemmesies@ibwabo.de)

[stefanie.krug@ibwabo.de](mailto:stefanie.krug@ibwabo.de)

### Zusammenfassung

Am Institut für Abfallwirtschaft und Altlasten der TUD in Zusammenarbeit mit der Ingenieurgesellschaft für Wasser und Boden wird gegenwärtig das Programm SiWaPro DSS zur computergestützten Sickerwasserprognose entwickelt. Diese Sickerwasserprognosen sind wichtig bei der Gefahrenbeurteilung für das Schutzgut Grundwasser bei Altlasten, bei der Wiederverwendbarkeit von behandelten Materialien und bei der Wirksamkeitsanalyse von Deponieoberflächenabdichtungen. Diese Problematiken treten auch verstärkt im Zusammenhang mit der Nutzung der Bergbaufolgelandschaften auf. Grundlage für das Programmsystem bilden der Simulationskern SiWaPro zur Nachbildung der zweidimensionalen vertikal-ebenen sowie rotationssymmetrischen Strömungs-, Stofftransport- und Stoffumsatzprozesse in der ungesättigten und gesättigten Zone. Der Simulationskern SiWaPro basiert auf einem Finite-Elemente-Tool. Die Ausgabe erfolgt sowohl in grafischer Animation als auch über ASCII-Dateien zur weiteren Verarbeitung. Zielgruppe sind in erster Linie Fachbehörden und Ingenieurbüros, welche die gesetzlich geforderten Sickerwasserprognosen durchzuführen haben. Damit soll ihnen ein Werkzeug in die Hand gegeben werden, das sie in die Lage versetzt, ohne spezielle Detailkenntnisse der Besonderheiten der Strömungs- und Transportprozesse der ungesättigten Zone sowie der Modellierungstechniken zutreffende Sickerwasserprognosen durchzuführen. Durch das Ingenieurbüro KP Ingenieurgesellschaft für Wasser und Boden mbH werden zurzeit umfangreiche Daten von Großlysimetern mit SiWaPro DSS ausgewertet. Anhand dieser Daten wird das Programmsystem gleichzeitig auch validiert. Auf diese Weise wird SiWaPro DSS einem „Usability“-Test unterzogen, welcher die Vollzugstauglichkeit des Programms unter Beweis stellen soll.

### 1 Einleitung

Die Durchführung von Sickerwasserprognosen ist für die Bewertung der Gefahr für das Grundwasser durch die Kontamination des Bodens erforderlich. Die Schadstoffquelle wird durch den zeitlichen Verlauf der Konzentration im Sickerwasser oder im Boden selbst beschrieben. Während des Transports des kontaminierten Materials