

Aufgabenstellung im Modul  
„Interdisziplinäres Projekt“  
für  
Frau/Herrn xxx xxx  
Matr.-Nr.: xxx

FAKULTÄT FÜR BAUINGENIEURWESEN  
UND GEODÄSIE

Institut für Strömungsmechanik und  
Umwelphysik im Bauwesen

---

Tag der Ausgabe:	xx.xx.2023	Bearbeitungsumfang:	360 Stunden
Tag der Abgabe (vorläufig):	xx.xx.2023		
Prüfer/in:	Thomas Graf		
Betreuer/in:	Thomas Graf		

---

bearbeitet von:  
Thomas Graf  
Tel. +49 511 762 4786  
E-Mail: graf@hydromech.  
uni-hannover.de

**Titel:** Numerische Implementierung unterschiedlicher Sorptions-Isotherme bei advektiv-dispersivem instationärem Transport

07.17.2023

Numerical implementation of different sorption isotherms for advective-dispersive transient transport

### Aufgabenstellung

Der Transport gelöster Stoffe findet hauptsächlich per Advektion und Dispersion statt. Einige Stoffe (insbesondere Kationen) untergehen zusätzlich Sorptionsprozessen an Kornoberflächen. Sorption wird mit sogenannten Isothermen beschrieben. Isotherme beschreiben die Funktion zwischen an der Kornoberfläche adsorbierter relativer Masse  $S$  ( $S$ =Stoffmasse/Kornmasse) und Konzentration  $C$  des Stoffes. Es existieren drei Sorptions-Isotherme mit zunehmender Komplexität:

Henry-Isotherme:  $S = K_D \cdot C$

Freundlich-Isotherme:  $S = K_D \cdot C^n$

Langmuir-Isotherme:  $S = \frac{S_{max} \cdot K_D \cdot C}{1 + K_D \cdot C}$

Die meisten Transport-Modelle, die Sorption berücksichtigen, implementieren die Henry-Isotherme. Die dann entstehende Transportgleichung ist linear und kann in einem Schritt gelöst werden. Implementieren der anderen beiden Isotherme (Freundlich und Langmuir) führt zu einer nicht-linearen Transportgleichung, die iterativ gelöst werden muss.

### Ziele dieser Arbeit

1. Präsentation und Beschreibung der Prozesse Adsorption und Resorption.
2. Definition von geeigneten Parameterwerten des instationären Transportproblems.
3. Implementierung der drei Isotherme. Diskretisierung mit der finiten Differenzen Methode.
4. Linearisierung mit der Picard- oder Newton-Raphson-Methode (oder beiden).
5. Numerische Simulation des Transportes mit den unterschiedlichen Isothermen. Vergleich der Ergebnisse.
6. Erstellen von Abbildungen, die die Konzentrationsverteilungen zeigen.
7. Diskussion der Ergebnisse

Der fertigen Arbeit ist jeweils eine Kurzfassung in deutscher und englischer Sprache voranzustellen. Zusätzlich sind jeweils fünf, den Inhalt der Arbeit beschreibende, Schlagwörter anzugeben. Die Arbeit ist als pdf-Datei abzugeben, die Aufgabenstellung ist mit einzubinden.

Bei der Erstellung der Arbeit wird insbesondere auf erläuternde Kommentare zu den berücksichtigten Parametern, die prägnante Darstellung theoretischer Grundlagen und die übersichtliche Darstellung der ermittelten Ergebnisse Wert gelegt. Während der Arbeit auftretende Fragestellungen können in Absprache mit der betreuenden Person zusätzlich

bearbeitet werden. Der Umfang der einzelnen Teilaufgaben ist bearbeitungsbegleitend mit der betreuenden Person abzustimmen. Die Ergebnisse der Arbeit sind in einem schriftlichen Bericht aufzuarbeiten und in einer Präsentation mit anschließender Diskussion zu präsentieren (ca. 15-minütiger Vortrag über Fragestellung, Methoden und Ergebnisse der Arbeit).

apl.-Prof. Dr. Thomas Graf