

# **Die Bedeutung perkolierender und nichtperkolierender Phasen bei Mehrphasenströmungen in porösen Medien auf Laborskala**

Von der Fakultät Mathematik und Physik der Universität Stuttgart  
zur Erlangung der Würde eines Doktors der  
Naturwissenschaften (Dr. rer. nat) genehmigte Abhandlung

Vorgelegt von  
Florian Doster  
aus Ludwigsburg

Hauptberichter: Prof. Dr. Dr. Rudolf Hilfer  
Mitberichter: Prof. Dr. Hans-Rainer Trebin

Tag der mündlichen Prüfung: 23. März 2011

Institut für Computerphysik der Universität Stuttgart, 2011



---

# Inhaltsverzeichnis

<b>Symbolverzeichnis</b>	<b>XV</b>
<b>Abkürzungsverzeichnis</b>	<b>XXVI</b>
<b>Zusammenfassung</b>	<b>XXIX</b>
<b>Abstract</b>	<b>XXXI</b>
<b>1 Einleitung und Fazit</b>	<b>1</b>
1.1 Motivation . . . . .	1
1.2 Definition der Problemstellung . . . . .	4
1.3 Struktur der Dissertation . . . . .	5
1.4 Zusammenfassung und Fazit . . . . .	7
<b>2 Grundlagen</b>	<b>9</b>
2.1 Strömungen in porösen Medien . . . . .	9
2.2 Mathematik partieller Differentialgleichungen . . . . .	26
<b>I Das Modell</b>	<b>36</b>
<b>3 Grundlegende Gleichungen</b>	<b>39</b>
3.1 Definition der Feldvariablen . . . . .	39
3.2 Erhaltungssätze . . . . .	39
3.3 Konstitutivannahmen . . . . .	40
3.4 Schließbedingung . . . . .	44
<b>4 Näherungen</b>	<b>47</b>
4.1 Vernachlässigbare Trägheit . . . . .	47
4.2 Viskose Dominanz im Impulsaustausch . . . . .	48
4.3 Immobile nichtperkolierende Phasen . . . . .	48
4.4 Kleine Grenzflächenspannungen . . . . .	50

4.5	Keine Körperkräfte . . . . .	50
<b>5</b>	<b>Analytische Umformungen</b>	<b>52</b>
5.1	Eingesetzte Impulsbilanzen . . . . .	52
5.2	Flussgradienten in den Massenaustauschtermen . . . . .	54
5.3	Fraktionale Flussformulierungen für immobile nichtperkolierende Phasen . . . . .	55
5.4	Fraktionale Flussformulierung für einen hyperbolischen Limes . . . . .	62
<b>II</b>	<b>Analytische und quasianalytische Lösungen</b>	<b>64</b>
<b>6</b>	<b>Allgemeine Lösung für eine hyperbolische Differentialgleichung</b>	<b>66</b>
6.1	Methode der Charakteristiken . . . . .	66
6.2	Sprungunstetigkeiten in den Sättigungen . . . . .	69
6.3	Räumliche Unstetigkeiten in der Flussfunktion . . . . .	70
<b>7</b>	<b>Verallgemeinertes Buckley-Leverett-Problem</b>	<b>72</b>
7.1	Anfangs- und Randbedingungen und Parameter . . . . .	72
7.2	Räumliche Unstetigkeiten für monotone fraktionale Flussfunktionen . . . . .	73
7.3	Vorwärts gerichteter Fluss . . . . .	78
7.4	Umkehr der Strömungsrichtung . . . . .	86
7.5	Parameterstudie . . . . .	91
<b>8</b>	<b>Schwerkraftgetriebene Umverteilung</b>	<b>98</b>
8.1	Anfangs- und Randbedingungen und Parameter . . . . .	98
8.2	Räumliche Unstetigkeiten für nichtmonotone Flussfunktionen . . . . .	99
8.3	Allgemeine Lösung . . . . .	111
8.4	Beispiele . . . . .	114
<b>9</b>	<b>Verallgemeinertes McWhorter-Sunada-Problem</b>	<b>121</b>
9.1	Problemstellung . . . . .	121
9.2	Allgemeine Lösung . . . . .	122
9.3	Numerischer Algorithmus . . . . .	125
9.4	Beispiele . . . . .	127
<b>10</b>	<b>Verallgemeinertes Philip-Problem</b>	<b>132</b>
10.1	Problemstellung . . . . .	132
10.2	Allgemeine Lösung . . . . .	133
10.3	Implementierung . . . . .	138

---

10.4 Beispiele . . . . .	138
<b>III Numerische Algorithmen</b>	<b>141</b>
<b>11 AMG9</b>	<b>144</b>
11.1 Überblick über den zugrunde liegenden Löser . . . . .	144
11.2 Anpassung der Gleichungen . . . . .	146
11.3 Implementierung des Modells . . . . .	150
11.4 Randbedingungen . . . . .	151
11.5 Anfangsbedingungen . . . . .	153
11.6 Überprüfung des Algorithmus . . . . .	153
11.7 Vor- und Nachteile von AMG9 . . . . .	155
<b>12 AMG3+1</b>	<b>157</b>
12.1 Anpassung der Gleichungen . . . . .	157
12.2 Implementierung des Modells . . . . .	162
12.3 Randbedingungen . . . . .	163
12.4 Anfangsbedingungen . . . . .	164
12.5 Überprüfung des Algorithmus . . . . .	165
12.6 Vor- und Nachteile von AMG3+1 . . . . .	173
<b>13 SimBL</b>	<b>175</b>
13.1 Definition eines Godunov-Lösers . . . . .	175
13.2 Überblick über CLAWPACK . . . . .	177
13.3 Anpassung der Gleichungen . . . . .	178
13.4 Implementierung des Modells . . . . .	180
13.5 Anfangsbedingungen . . . . .	185
13.6 Randbedingungen . . . . .	186
13.7 Überprüfung des Algorithmus . . . . .	187
13.8 Vor- und Nachteile von SimBL . . . . .	192
<b>14 FlmPSSS</b>	<b>193</b>
14.1 Anpassung der Gleichungen . . . . .	193
14.2 Implementierung des Modells . . . . .	195
14.3 Anfangsbedingungen . . . . .	200
14.4 Randbedingungen . . . . .	201
14.5 Überprüfung des Algorithmus . . . . .	205

14.6 Vor- und Nachteile von FlmPSSS . . . . .	208
---	-----

## **IV Numerische Simulationen** **209**

<b>15 Simulationen von Experimenten mit einer geschlossenen porösen Säule</b>	<b>211</b>
15.1 Randbedingungen . . . . .	212
15.2 Anfangsbedingungen . . . . .	216
15.3 Parameter der Simulationen . . . . .	220
15.4 Aufstellen einer geschlossenen Säule . . . . .	222
15.5 Wiederholtes Umdrehen einer geschlossenen Säule . . . . .	230
15.6 Hinlegen einer zuvor aufgestellten geschlossenen Säule . . . . .	234
15.7 Umverteilung von Wasser und Öl in einer geschlossenen Säule . . . . .	238
15.8 Umverteilung einer Wasser- bzw. Ölblase in einer geschlossenen Säule . . . . .	246
<b>16 Simulationen von Experimenten mit Flussrandbedingungen</b>	<b>255</b>
16.1 Randbedingungen . . . . .	257
16.2 Anfangsbedingungen . . . . .	258
16.3 Parameter der Simulationen . . . . .	259
16.4 Buckley-Leverett-Problem mit Kapillar- und Grenzflächentermen . . . . .	261
16.5 Umströmung einer Blase . . . . .	264
16.6 Vereinigung einer Wasserblase mit einer Wasserfront . . . . .	279
<b>17 Simulationen von Experimenten mit Druckrandbedingungen</b>	<b>284</b>
17.1 Randbedingungen . . . . .	287
17.2 Anfangsbedingungen . . . . .	287
17.3 Parameter der Simulationen . . . . .	287
17.4 Ergebnisse und Vergleich von Simulation und Experiment . . . . .	288
17.5 Parameterstudie . . . . .	296
<b>18 Synopsis auf Englisch</b>	<b>311</b>
18.1 Introduction . . . . .	311
18.2 The model . . . . .	312
18.3 Analytical and quasi-analytical solutions . . . . .	318
18.4 Algorithms . . . . .	322
18.5 Numerical simulations . . . . .	322
18.6 Summary . . . . .	325

---

<b>Anhang</b>	<b>329</b>
<b>A Datei- und Datenstruktur der Simulationsprogramme</b>	<b>329</b>
A.1 AMG9 . . . . .	329
A.2 AMG3+1 . . . . .	332
A.3 SimBL . . . . .	334
A.4 FlmPSSS . . . . .	338
<b>B Benötigte numerische Verfahren</b>	<b>343</b>
B.1 Löser für gewöhnliche Differentialgleichungen . . . . .	343
B.2 Löser für lineare Gleichungssysteme . . . . .	345
B.3 Verfahren für nichtlineare Gleichungen . . . . .	345
<b>Literaturverzeichnis</b>	<b>347</b>

# Abbildungsverzeichnis

2.1	Kapillardrucksättigungsbeziehung nach Brooks und Corey und van Genuchten.	16
2.2	Hysterese in der Kapillardrucksättigungsbeziehung . . . . .	17
2.3	Dynamische Effekte in der Kapillardrucksättigungsbeziehung . . . . .	18
2.4	Relative Permeabilitätsättigungsbeziehungen nach Brooks und Corey und van Genuchten. . . . .	20
2.5	Hysterese in den relativen Permeabilitäten . . . . .	21
2.6	Dynamische Effekte und Einfluss des Viskositätsverhältnis auf relative Permeabilitäten . . . . .	22
2.7	Strömungsabhängige residuale Sättigungen . . . . .	23
2.8	Strömungsabhängige residuale Sättigungen . . . . .	24
5.1	Immobilie nichtperkolierende Phasen: Nichtperkolierende Sättigungen in Abhängigkeit der Wassersättigung . . . . .	57
5.2	Fraktionale Flussfunktion $f_w$ und fraktionale Mobilität $\lambda$ und ihre Ableitungen $df_w/dS_w$ , $d\lambda/dS_w$ . . . . .	60
5.3	Verallgemeinerte Diffusionskoeffizientenfunktion $D(S_w)$ . . . . .	61
7.1	Illustration der bekannten Größen an einer Unstetigkeitsstelle bei monotonen Flussfunktionen. . . . .	75
7.2	Illustration der Konstruktion der Lösung an einer räumlichen Unstetigkeitsstelle bei monotonen Flussfunktionen. . . . .	77
7.3	Illustration der unterschiedlichen Segmente der Sättigungsprofile . . . . .	81
7.4	Sättigungsprofile für primäre und sekundäre Bewässerung. . . . .	82
7.5	Sättigungsprofile für konstante Anfangswassersättigung. . . . .	84
7.6	Vergleich von Sättigungsprofilen für unterschiedliche Massenaustauschparameter $\eta_2, \eta_4$ . . . . .	85
7.7	Sättigungsprofile für vorwärts und rückwärts gerichteten Volumenstrom . . . . .	89
7.8	Projektionen von Charakteristiken für den rückwärts gerichteten Volumenstrom . . . . .	90



7.9	Einfluss des Massenaustauschparameters $\eta_2$ für Wasser auf die Höhe der Sprungunstetigkeit und auf die Stoßwellengeschwindigkeit. . . . .	92
7.10	Einfluss des Massenaustauschparameters $\eta_4$ für Öl auf die Höhe der Sprungunstetigkeit und auf die Stoßwellengeschwindigkeit. . . . .	92
7.11	Einfluss der anfänglichen nichtperkolierenden Wassersättigung in der rechten Hälfte $S_{2r}$ auf die Höhe der Sprungunstetigkeit und auf die Stoßwellengeschwindigkeit. . . . .	93
7.12	Einfluss der anfänglichen nichtperkolierenden Ölsättigung in der rechten Hälfte $S_{4r}$ auf die Höhe der Sprungunstetigkeit und auf die Stoßwellengeschwindigkeit. . . . .	94
7.13	Einfluss der anfänglichen Wassersättigung in der rechten Hälfte $S_r = S_{2r}$ auf die Höhe der Sprungunstetigkeit und auf die Stoßwellengeschwindigkeit. . .	94
7.14	Einfluss der anfänglichen perkolierenden Wassersättigung in der rechten Hälfte $S_1 = S_r - S_{2r}$ auf die Höhe der Sprungunstetigkeit und auf die Stoßwellengeschwindigkeit. . . . .	95
7.15	Einfluss der Grenzsättigung für Öl $S_{\text{Oim}}$ auf die Höhe der Sprungunstetigkeit und auf die Stoßwellengeschwindigkeit. . . . .	96
7.16	Einfluss der Mobilitätskonstante $\Lambda_{11}$ des perkolierenden Wassers auf die Höhe der Sprungunstetigkeit und auf die Stoßwellengeschwindigkeit. . . . .	96
7.17	Einfluss der Mobilitätskonstante $\Lambda_{33}$ des perkolierenden Öls auf die Höhe der Sprungunstetigkeit und auf die Stoßwellengeschwindigkeit. . . . .	97
8.1	Illustration der bekannten Größen an einer Unstetigkeitsstelle bei nichtmonotonen Flussfunktionen. . . . .	100
8.2	Illustration nichtmonotoner Flussfunktionen mit zwei Maxima oder einem singulären Maximum. . . . .	101
8.3	Darstellung der vier unterschiedlichen Fälle anhand von Projektionen der Charakteristiken auf die $(x, t)$ -Ebene . . . . .	102
8.4	Illustration der Konstruktion der Lösung an einer räumlichen Unstetigkeit für Charakteristiken mit gleichem Vorzeichen auf beiden Seiten. . . . .	105
8.5	Illustration der Konstruktion der Lösung an einer räumlichen Unstetigkeit für Charakteristiken mit unterschiedlichen Vorzeichen auf beiden Seiten. . .	109
8.6	Illustration der unterschiedlichen Segmente der Sättigungsprofile . . . . .	115
8.7	Sättigungsprofile für primäre und sekundäre Umverteilung. . . . .	116
8.8	Sättigungsprofile zur Illustration der unterschiedlichen Fälle aus Kapitel 8.2.1 -8.2.3 . . . . .	119

9.1	Sättigungsprofile für eine primäre Bewässerung . . . . .	129
9.2	Sättigungsprofile für eine sekundäre Bewässerung . . . . .	130
9.3	Vergleich von Sättigungsprofilen für eine Bewässerung mit unterschiedlichen anfänglichen Sättigungen der nichtperkolierenden Phasen . . . . .	130
10.1	Der iterative Algorithmus in einer Pseudoprogrammiersprache . . . . .	137
10.2	Sättigungsprofile für eine primäre und eine sekundäre Umverteilung . . . . .	139
10.3	Profile des Volumenstroms für eine primäre und eine sekundäre Umverteilung	140
11.1	Vergleich zwischen Lösungen, die mit AMG9 und AMG3+1 berechnet wurden	154
12.1	Einfluss der Anschaltzeit $\tau_{st}$ . . . . .	167
12.2	Einfluss der Sättigungsregularisierung $\epsilon_S$ . . . . .	168
12.3	Einfluss des künstlichen Diffusionskoeffizienten der nichtperkolierenden Phasen $\epsilon_{np}$ . . . . .	169
12.4	Einfluss der Kapillar- und Grenzflächenterme . . . . .	170
12.5	Einfluss der Anzahl der Gitterpunkte $N_{pts}$ . . . . .	171
12.6	Vergleich von analytischen Lösungen und numerischen Lösungen für die schwerkraftgetriebene Umverteilung . . . . .	172
12.7	Vergleich von quasianalytischen Lösungen und numerischen Lösungen für das McWhorter-Sunada-Problem und das Philip-Problem . . . . .	173
13.1	Einfluss der Anzahl der Zellen $N_{cls}$ und der Courantzahl $Co$ . . . . .	188
13.2	Vergleich von analytischen und numerischen Lösungen für das Buckley-Leverett-Problem . . . . .	189
13.3	Vergleich von analytischen und numerischen Lösungen für das Buckley-Leverett-Problem . . . . .	190
13.4	Vergleich von analytischen und numerischen Lösungen für die schwerkraftgetriebene Umverteilung . . . . .	191
13.5	Illustration des Grundes der numerischen Instabilität in Abb. 13.4d . . . . .	192
14.1	Einfluss der räumlichen Auflösung beim Buckley-Leverett-Problem . . . . .	206
14.2	Einfluss der räumlichen Auflösung beim Philip-Problem . . . . .	206
14.3	Einfluss der numerischen Parameter bei KD-Randbedingungen . . . . .	207
15.1	Illustration der Anfangs- und Randbedingungen von Experimenten mit einer geschlossenen porösen Säule im Schwerfeld . . . . .	212
15.2	Schematische Darstellung des Aufstellens einer geschlossenen Säule . . . . .	222
15.3	Illustration des Zeitverlaufs der Sättigungsprofile beim Aufstellen . . . . .	223

---

15.4	Vergleich der quasistationären Lösungen für unterschiedliche Anfangsbedingungen beim Aufstellen . . . . .	224
15.5	Vergleich der quasistationären Lösungen des neuen Modells und des DBRM-MWBL-Modells beim Aufstellen einer porösen Säule . . . . .	225
15.6	Vergleich der numerischen Lösung mit einer analytischen Lösung für das Aufstellen einer porösen Säule . . . . .	226
15.7	Vergleich von Lösungen für Kapillar- und Grenzflächenterme unterschiedlicher Stärke beim Aufstellen einer porösen Säule . . . . .	228
15.8	Zeitliche Entwicklung von $S_w$ für unterschiedlich starke Kapillar- und Grenzflächenterme beim Aufstellen einer porösen Säule . . . . .	229
15.9	Schematische Darstellung des Aufstellens und wiederholten Umdrehens einer geschlossenen Säule . . . . .	230
15.10	Vergleich der Sättigungsprofile nach dem Aufstellen und nach zwei Rotationen beim wiederholten Umdrehen einer geschlossenen porösen Säule . . . .	231
15.11	Transiente Profile beim wiederholten Umdrehen einer geschlossenen Säule .	232
15.12	Schematische Darstellung des Hinlegens einer zuvor aufgestellten geschlossenen Säule . . . . .	234
15.13	Vergleich der Sättigungsprofile am Ende des Experiments für unterschiedliche Anfangsbedingungen beim Hinlegen einer zuvor aufgestellten geschlossenen porösen Säule . . . . .	235
15.14	Trajektorien der Gitterpunkte beim Hinlegen einer zuvor aufgestellten geschlossenen porösen Säule . . . . .	236
15.15	Schematische Darstellung zur Umverteilung von Wasser und Öl . . . . .	238
15.16	Primäre Umverteilung von Wasser und Öl . . . . .	239
15.17	Sekundäre Umverteilung von Wasser und Öl . . . . .	240
15.18	Vergleich von Gleichgewichtssättigungsprofilen für primäre und sekundäre Umverteilung . . . . .	241
15.19	Farbverlaufsbild für verschwindende Kapillar- und Grenzflächenterme bei der Umverteilung von Wasser und Öl . . . . .	242
15.20	Sättigungsprofile zu ausgewählten Zeitpunkten für verschwindende Kapillar- und Grenzflächenterme bei der Umverteilung von Wasser und Öl . . . . .	244
15.21	Vergleich von Sättigungsprofilen nach dem Aufstellen und nach einer Rotation um $180^\circ$ für die Umverteilung von Wasser und Öl . . . . .	245
15.22	Schematische Darstellung zur Umverteilung einer Wasser- bzw. Ölblase . .	246
15.23	Farbverlaufsbild der Wassersättigung $S_w(x, t)$ zur Umverteilung einer Wasserblase . . . . .	247

15.24	Sättigungsprofile für verschwindende Kapillar- und Grenzflächenkräfte bei der Umverteilung einer Wasserblase . . . . .	249
15.25	Sättigungsprofile für eine schwerkraft-, kapillar- und grenzflächenkräftegetriebene Umverteilung einer Wasserblase . . . . .	250
15.26	Sättigungsprofile für eine Umverteilung einer Wasserblase ohne Schwerkraft.	251
15.27	Gleichgewichtssättigungsprofile für den Parametersatz 1 bei der Umverteilung einer Wasserblase . . . . .	253
15.28	Gleichgewichtssättigungsprofile für einen Parametersatz 2 bei der Umverteilung einer Wasserblase . . . . .	254
15.29	Gleichgewichtssättigungsprofile für den Parametersatz 1 bei der Umverteilung einer Ölblase . . . . .	254
16.1	Illustration der Anfangs- und Randbedingungen für Experimente mit Flussrandbedingungen: . . . . .	256
16.2	Schematische Darstellung des erweiterten Buckley-Leverett-Problems mit Kapillar- und Grenzflächentermen . . . . .	261
16.3	Vergleich von Sättigungsprofilen für Kapillar- und Grenzflächenkräfte unterschiedlicher Stärke für das erweiterte Buckley-Leverett-Problem . . . . .	262
16.4	Vergleich von Farbverlaufsbildern der Wassersättigung für Kapillar- und Grenzflächenkräfte unterschiedlicher Stärke für das erweiterte Buckley-Leverett-Problem . . . . .	263
16.5	Schematische Darstellung der Umströmung einer Blase . . . . .	264
16.6	Farbverlaufsbilder der Wassersättigung für die sekundäre Umströmung einer Wasser- und einer Ölblase . . . . .	265
16.7	Sättigungsprofile für verschwindende Kapillar- und Grenzflächenkräfte bei der Umströmung einer Wasserblase . . . . .	267
16.8	Sättigungsprofile für verschwindende Kapillar- und Grenzflächenkräfte bei der Umströmung einer Ölblase . . . . .	269
16.9	Farbverlaufsbilder der Wassersättigung für eine sekundäre Umströmung einer Ölblase . . . . .	270
16.10	Sättigungsprofile mit Berücksichtigung von Kapillar- und Grenzflächenkräften bei der Umströmung einer Ölblase . . . . .	271
16.11	Vergleich von Sättigungsprofilen mit und ohne Berücksichtigung von Kapillar- und Oberflächenkräften bei der Umströmung einer Ölblase . . . . .	271
16.12	Farbverlaufsbilder für verschwindende Kapillar- und Grenzflächenterme bei der primären Umströmung einer Ölblase . . . . .	273

16.13	Sättigungsprofile am Anfang des Experiments bei der primären Umströmung einer Ölblase . . . . .	274
16.14	Sättigungsprofile während der primären Umströmung einer Ölblase . . . . .	275
16.15	Farbverlaufsbilder für verschwindende und nicht verschwindende Kapillar- und Grenzflächenterme bei der primären Umströmung einer Ölblase . . . . .	276
16.16	Sättigungsprofile zu Beginn einer primären Umströmung einer Ölblase mit und ohne Kapillar- und Grenzflächenkräfte . . . . .	277
16.17	Sättigungsprofile für die primäre Umströmung einer Ölblase mit und ohne Kapillar- und Grenzflächenkräfte . . . . .	278
16.18	Schematische Darstellung der Vereinigung einer Wasserblase mit einer Wasserfront . . . . .	279
16.19	Vereinigung einer Wasserblase mit einer Wasserfront mit Kapillar- und Grenzflächenkräften . . . . .	280
16.20	Vereinigung einer Wasserblase mit einer Wasserfront mit geringen Kapillar- und Grenzflächenkräften . . . . .	281
16.21	Vereinigung einer Wasserblase mit einer Wasserfront mit verschwindenden Kapillar- und Grenzflächenkräften . . . . .	282
16.22	Vergleich von Sättigungsprofilen für unterschiedlich starke Kapillar- und Grenzflächenterme bei der Vereinigung einer Wasserblase mit einer Wasserfront . . . . .	283
17.1	Schematische Darstellung der Anfangs- und Randbedingungen sowie des Verlaufs für Experimente mit einer porösen Säule mit Druckrandbedingungen	286
17.2	Sättigungsprofile für die vier Abschnitte des Experiments . . . . .	289
17.3	Farbverlaufsbilder der Variablen $S_w$ , $S_2$ , $S_4$ und $P_w$ . . . . .	291
17.4	Zeitlicher Verlauf des Drucks $P_1(x_r, t)$ am unteren Ende der Säule . . . . .	292
17.5	Zeitlicher Verlauf der Sättigungen an vier Positionen. . . . .	293
17.6	Zeitlicher Verlauf des Drucks $P_1(x, t)$ am unteren Ende der Säule und an vier Positionen in der Säule. . . . .	294
17.7	Gemessene und simulierte Kapillardrucksättigungsbeziehung an vier Positionen in der Säule. . . . .	295
17.8	Der Einfluss des Parameters $\eta_2$ . . . . .	297
17.9	Der Einfluss des Parameters $\eta_4$ . . . . .	298
17.10	Der Einfluss des Parameters $\alpha$ . . . . .	299
17.11	Der Einfluss des Parameters $P_a$ . . . . .	300
17.12	Der Einfluss des Parameters $\beta$ . . . . .	301
17.13	Der Einfluss des Parameters $P_b$ . . . . .	302

17.14	Der Einfluss des Parameters $\gamma$ . . . . .	303
17.15	Der Einfluss des Parameters $P_2^*$ . . . . .	304
17.16	Der Einfluss des Parameters $\delta$ . . . . .	305
17.17	Der Einfluss des Parameters $P_4^*$ . . . . .	306
17.18	Der Einfluss des Parameters $S_{\text{Oim}}$ . . . . .	307
17.19	Der Einfluss des Parameters $S_{\text{Wdr}}$ . . . . .	308
17.20	Der Einfluss des Parameters $\Lambda_{11}$ . . . . .	309
17.21	Der Einfluss des Parameters $\Lambda_{33}$ . . . . .	310
18.1	Examples for the generalized Buckley-Leverett problem . . . . .	318
18.2	Examples for the generalized gravity-driven redistribution . . . . .	320
18.3	Exemplary saturation profiles for the McWhorter-Sunada and the Philip problem . . . . .	321
18.4	Simulation of an experiment with a closed column . . . . .	324
18.5	Simulation of an experiment with flux boundary conditions . . . . .	324
18.6	Comparison of experimental and simulated data for an experiment with pressure boundary conditions . . . . .	326
A.1	Flussdiagramm zu AMG9 . . . . .	330
A.2	Flussdiagramm zu SimBL . . . . .	335
A.3	Flussdiagramm von FlmPSSS . . . . .	338
A.4	Die Containervariable Para von FlmPSSS . . . . .	339

# Tabellenverzeichnis

5.1	Die Anfangs- und Grenzsättigungen der vier Haupthysteresekurven. . . . .	56
7.1	Zusammenfassung der verwendeten Parameter für die hyperbolischen Anfangs- und Randwertprobleme . . . . .	74
7.2	Die Anfangsbedingungen für die studierten Verdrängungsprozesse . . . . .	81
7.3	Charakteristische Werte der Lösungen aus Abbildung 7.4-7.6 . . . . .	82
8.1	Die Anfangsbedingungen für die studierten Verdrängungsprozesse . . . . .	116
8.2	Charakteristische Werte der Lösungen aus Abbildung 8.7 und 8.8 . . . . .	117
9.1	Zusammenfassung der verwendeten Parameter für das McWhorter-Sunada-Problem und das Philip-Problem. . . . .	127
9.2	Anfangs- und Randbedingungen für das McWhorter-Sunada-Problem mit $S_2 = S_2(S, S_0, S_{20})$ und $S_4 = S_4(S, S_0, S_{40})$ . . . . .	128
9.3	Die Lösungen für die Konstante $\mathcal{A}$ in $10^{-3} \text{ m s}^{-1/2}$ . . . . .	128
10.1	Anfangsbedingungen für das Philip-Problem . . . . .	138
10.2	Werte für den links- und rechtsseitigen Limes der Sättigungen . . . . .	139
11.1	Verwendete numerische Parameter in AMG9 . . . . .	155
12.1	Werte der künstlichen Parameter für AMG3+1 . . . . .	166
12.2	Charakteristische Werte der numerischen Lösungen der schwerkraftgetriebenen Umverteilung . . . . .	174
13.1	Numerische Parameter für SimBL . . . . .	187
13.2	Charakteristische Werte der numerischen Lösungen der schwerkraftgetriebenen Umverteilung . . . . .	189
14.1	Überblick über die beiden Gruppen von Randbedingungen in FlmPSSS . . . . .	204
14.2	Numerische Parameter für FlmPSSS . . . . .	205
15.1	Randbedingungen für AMG9 . . . . .	213

15.2	Anfangsbedingungen für AMG9 . . . . .	217
15.3	Anfangsbedingungen für AMG3+1 . . . . .	218
15.4	Anfangsbedingungen für SimBL und FlmPSSS . . . . .	219
15.5	Die verwendeten Parametersätze . . . . .	220
15.6	Numerische Parameter für AMG3+1 . . . . .	221
16.1	Anfangsbedingungen für SimBL . . . . .	259
16.2	Anfangsbedingungen für FlmPSSS . . . . .	259
16.3	Numerische Parameter für FlmPSSS . . . . .	260
17.1	Anfangsbedingungen für FlmPSSS . . . . .	287
17.2	Numerische Parameter für FlmPSSS . . . . .	288
18.1	Features, advantages and disadvantages of the developed algorithms. . . . .	323



# Symbolverzeichnis

Symbol	Beschreibung
$\mathcal{A}^- \Delta u_{i-1/2}$	nach links laufende Fluktuationen zwischen Zelle $i$ und $i - 1$
$\mathcal{A}^+ \Delta u_{i-1/2}$	nach rechts laufende Fluktuationen zwischen Zelle $i$ und $i - 1$
$\mathcal{A}$	Konstante für den injizierten Fluss des McWhorter-Sunada-Problems
$A$	eine allgemeine Matrixfunktion
$a$	Koeffizient oder Koeffizientenfunktion
$b$	Koeffizient oder Koeffizientenfunktion
$Ca, \overline{Ca}$	Kapillarzahl bzw. makroskopische Kapillarzahl
$Co$	Courant-Zahl
$C$	Zeitentwicklungsmatrix
$C^*$	Integrationskonstante
$c$	Koeffizient oder Koeffizientenfunktion
$\frac{D^i}{Dt}$	materielle Ableitung der Phase $i$
$\mathcal{D}$	ein Gebiet $\mathcal{D} \subset \mathbb{R}^n$
$D(\cdot)$	nichtlineare Diffusionskoeffizientenfunktion aufgrund von Kapillar- und Grenzflächenkräften
$D_\ell, D_r$	linksseitiger bzw. rechtsseitiger Limes der Diffusionskoeffizientenfunktion an einer Unstetigkeitsstelle
$\mathcal{D}_\ell^{BC}, \mathcal{D}_r^{BC}$	Auswahlvektoren $\in [0, 1]^4$ für Dirichlet-Bedingungen am linken bzw. rechten Rand für AMG3+1
$\frac{d}{dt}$	totale Ableitung nach der Zeit
$\frac{d}{d\tau}$	totale Ableitung nach dem Kurvenparameter der Charakteristiken
$\frac{d}{dS_w}$	totale Ableitung nach der Wassersättigung
$F^w$	alternative fraktionale Flussfunktion nach [McWh 90]

Symbol	Beschreibung
$\mathcal{F}^w$	normierte alternative fraktionale Flussfunktion nach [McWh 90]
$\widetilde{F}^w$	alternative fraktionale Flussfunktion nach [Fuci 07]
$F_i$	Körperkraft für Phase $i$
$F_G$	resultierende Schwerkraft aufgrund eines Dichteunterschiedes
$\mathcal{F}(\cdot)$	allgemeines Funktional
$\mathcal{F}_\ell^{\text{BC}}, \mathcal{F}_r^{\text{BC}}$	Auswahlvektoren $\in [0, 1]^4$ für Flussbedingungen am linken bzw. rechten Rand für AMG3+1
$f_w, f_o, f_i$	fraktionale Flussfunktionen für Wasser, für Öl bzw. für Phase $i$
$f$	allgemeine Flussfunktion oder Vektorflussfunktion $f : \mathbb{R}^n \rightarrow \mathbb{R}^n$
$f_\ell, f_r$	allgemeiner Fluss über den linken bzw. rechten Rand eines Gebiets $\mathcal{D}$
$f_b$	allgemeine Funktion zur Bestimmung eines Randwerts
$f_{i-\frac{1}{2}}$	allgemeiner Fluss über die Zellgrenze zwischen Zelle $i$ und $i - 1$
$G$	advektive Flussfunktion
$G_-, G_+$	linksseitiger bzw. rechtsseitiger Limes der advektiven Flussfunktion an einer Unstetigkeitsstelle
$G^d$	advektiver Fluss über eine Unstetigkeitsstelle
$G_-^{(i)}, G_+^{(i)}$	advektive Flussfunktion stromauf- bzw. stromabwärts einer Stoßwelle ( $i$ )
$G_\ell, G_r$	advektive Flussfunktion in der linken Hälfte bzw. rechten Hälfte eines Gebiets $\mathcal{D}$
$G_-^{-1}, G_+^{-1}$	Umkehrfunktion des linksseitigen bzw. rechtsseitigen Limes der advektiven Flussfunktion an einer Unstetigkeitsstelle
$G_\ell, G_c, G_r$	advektive Flussfunktion im Gebiet $\ell, c, r$
$G_{i-\frac{1}{2}}^k$	advektiver Fluss über die Zellgrenze zwischen Zelle $i$ und $i - 1$ zum Zeitpunkt $k$
$\tilde{G}_{i-\frac{1}{2}}^k$	charakteristischer advektiver Fluss zwischen Zelle $i$ und $i - 1$ zum Zeitpunkt $k$
$\hat{G}_i^k$	Extremwert der advektiven Flussfunktion in Zelle $i$ zum Zeitpunkt $k$
$g$	Schwerkraftsbeschleunigung an der Erdoberfläche oder Ableitung der advektiven Flussfunktion nach der Wassersättigung. Die Bedeutung wird im Kontext klar.

Symbol	Beschreibung
$g_-, g_+$	linksseitiger bzw. rechtsseitiger Limes der Ableitung der advektiven Flussfunktion an einer Unstetigkeitsstelle
$g_-^{-1}, g_+^{-1}$	Umkehrfunktion des linksseitigen bzw. rechtsseitigen Limes der Ableitung der advektiven Flussfunktion an einer Unstetigkeitsstelle
$g_\ell, g_r$	Ableitung der advektiven Flussfunktion in der linken Hälfte bzw. rechten Hälfte eines Gebiets $\mathcal{D}$
$g_i^{\text{im}}, g_i^{\text{dr}}$	Be- bzw. Entwässerungslimes der Ableitung der advektiven Flussfunktion am links- bzw. rechtsseitigen Limes einer Unstetigkeitsstelle für die Sättigung $S_{\text{w}0i}$ mit $i \in \{-, +\}$
$H$	Hydraulische Druckhöhenvektor für die vier Phasen der Fluide
$h$	Ableitung der advektiven Flussfunktion nach dem Ort
$h_\ell, h_c, h_r, h_m$	Ableitung der advektiven Flussfunktion im Gebiet $\ell, c, r, m$
$\mathcal{I}$	diskrete Auswertung eines Integrals beim McWhorter-Sunada-Problem
$i$	Index für Phase, Stützstelle, Gitterpunkt, Zelle und Grenzwert
$J$	Jacobi-Matrix einer Funktion $f$
$K$	Permeabilität eines porösen Mediums
$k_{\text{w}}, k_{\text{o}}$	relative Permeabilität für Wasser bzw. Öl
$k$	Index der Zeitdiskretisierung
$M_i$	Quellterm in der Massenbilanz der Phase $i$
$\widetilde{M}_i$	Quellterm in der Massenbilanz der Phase $i$ ohne die Änderungsrate der Wassersättigung $\partial_t S_{\text{w}}$ : $M_i = \widetilde{M}_i \partial_t S_{\text{w}}$
$m_i$	Quellterm in der Impulsbilanz der Phase $i$
$m^{\text{g}}$	van-Genuchten-Parameter
$m$	Index
$N_{\text{cls}}$	Anzahl der Zellen (finiten Volumina)
$N_{\text{PDE}}$	Anzahl der partiellen Differentialgleichungen
$N_{\text{pts}}$	Anzahl der Gitterpunkte
$N_{\text{ts}}$	Anzahl der Zeitschritte
$\mathcal{N}_\ell^{\text{BC}}, \mathcal{N}_r^{\text{BC}}$	Auswahlvektoren $\in [0, 1]^4$ für Neumann-Bedingungen am linken bzw. rechten Rand für AMG3+1

Symbol	Beschreibung
$N_S$	Anzahl der Sättigungsstützstellen beim McWhorter-Sunada-Problem
$n^g$	van-Genuchten-Parameter
$n$	Index
$n_\ell, n_r$	Wert der räumlichen Ableitung am linken bzw. rechten Rand (Neumann-Randbedingung)
$o$	Index
$p$	Exponent zur Bestimmung der Konsistenz- oder Konvergenzordnung eines numerischen Verfahrens
$P$	Druck
$P_0$	Referenzdruck oder Multiplikationsfaktor
$P_0^*$	Verschiebungskonstante für die Kapillardrucksättigungsbeziehung
$P_1, P_3$	Druck der perkolierenden Wasser- bzw. Ölphase
$P_W, P_\circ$	Druck des Wassers bzw. des Öls
$P_c$	(makroskopische) Kapillardrucksättigungsbeziehung
$P_a, P_b$	Parameter für die Kapillarkräfte des Wassers bzw. des Öls
$P_2^*, P_4^*$	Parameter für die Grenzflächenkräfte des Wassers bzw. des Öls
$P_e^b$	Brooks-Corey-Parameter: Eindringdruck
$P_{c-}, P_{c+}$	links- bzw. rechtsseitiger Limes der Kapillardrucksättigungsbeziehung an einer Unstetigkeitsstelle
$P_{c-}^{-1}, P_{c+}^{-1}$	Inverse des links- bzw. rechtsseitigen Limes der Kapillardrucksättigungsbeziehung an einer Unstetigkeitsstelle
$\mathcal{P}_-^+, \mathcal{P}_+^-$	Abbildung vom links- bzw. rechtsseitigen Limes der Sättigung zum rechts- bzw. linksseitigen Limes der Sättigung an einer Unstetigkeitsstelle unter der Annahme, dass der Druck stetig ist
$Q$	Differenz zwischen links- und rechtsseitigem Limes der Volumenstromdichte an einer Unstetigkeitsstelle
$Q$	allgemeine Quelle oder Quellfunktionsvektor für den Löser von partiellen Differentialgleichungen mit mobilem Gitter [Blom 94]
$q$	allgemeine Volumenstromdichte
$q_W, q_\circ, q_i$	Volumenstromdichte des Wassers des Öls bzw. der Phase $i$
$q_{\text{tot}}$	gesamter Volumenstrom

Symbol	Beschreibung
$q_0$	charakteristischer Volumenstrom
$q_\ell, q_r$	Volumenstromfunktion in der linken bzw. rechten Gebietshälfte
$q_-, q_+$	links- bzw. rechtsseitiger Limes der Volumenstromdichte an einer Unstetigkeitsstelle
$R$	Flussfunktionsvektor für den Löser von partiellen Differentialgleichungen mit mobilem Gitter [Blom 94]
$R_{ij}$	viskoser Kopplungskoeffizient zwischen Phase $i$ und $j$
$R_i$	Summe der viskosen Kopplungskoeffizienten für Phase $i$
$\tilde{R}$	verallgemeinerte viskose Kopplungsmatrix
$\mathbb{R}$	reelle Zahlen
$\mathbb{R}_+$	positive reelle Zahlen
$\mathbb{R}^n$	$n$ -dimensionaler Vektorraum der reellen Zahlen
$\mathcal{R}$	Wichtungsfaktor zwischen impermeabler Wand und durchlässiger Wand am rechten Rand des McWhorter-Sunada-Problems [McWh 90]
$r$	Index bei iterativen Lösungsverfahren
$S_{\text{W}}, S_{\text{O}}, S_i$	Sättigung des Wassers, des Öls bzw. der Phase $i$
$S_{\text{W}\ell}, S_{\text{W}r}, S_{2\ell}, S_{2r}, S_{4\ell}, S_{4r}$	anfängliche Wassersättigung, anfängliche Sättigung des nichtperkolierenden Wassers und anfängliche Sättigung des nichtperkolierenden Öls in der linken bzw. rechten Hälfte des Gebiets $\mathcal{D}$
$S_{\text{Oim}}$	charakteristische Ölsättigung bei Bewässerung
$S_{\text{Wdr}}$	charakteristische Wassersättigung bei Entwässerung
$S_{\text{W}}^*, S_{\text{O}}^*$	begrenzende Sättigung für Wasser bzw. für Öl
$S_2^*, S_4^*$	begrenzende Sättigung für nichtperkolierendes Wasser bzw. für nichtperkolierendes Öl
$S_e$	effektive Wassersättigung des DBRMMWBL-Modells
$S_{\text{Wr}}, S_{\text{Or}}$	residuale Wasser- bzw. Ölsättigung des DBRMMWBL-Modells
$S_{\text{W}0}, S_{20}, S_{40}$	anfängliche Sättigung des Wassers, des nichtperkolierenden Wassers und des nichtperkolierenden Öls

Symbol	Beschreibung
$S_-^{(i)}, S_+^{(i)}, S_{2-}^{(i)}, S_{2+}^{(i)}, S_{4-}^{(i)}, S_{4+}^{(i)}$	Wassersättigung, Sättigung des nichtperkolierenden Wassers und Sättigung des nichtperkolierenden Öls stromauf- bzw. stromabwärts einer Sprungunstetigkeit ( $i$ ). Gegebenenfalls werden mehrere Sprungunstetigkeiten durch ( $\ell$ ), ( $r$ ) und ( $s$ ) voneinander unterschieden.
$S_+, S_-$	links- bzw. rechtsseitiger Limes der Wassersättigung an einer Unstetigkeitsstelle beim Philip-Problem
$S_-^d, S_+^d, S_{2-}^d, S_{2+}^d, S_{4-}^d, S_{4+}^d$	links- bzw. rechtsseitiger Limes der Wassersättigung, der nichtperkolierenden Wassersättigung und der nichtperkolierenden Ölsättigung an der Unstetigkeitsstelle $d$ . Gegebenenfalls wird eine zweite Unstetigkeit durch $d_s$ bezeichnet.
$S_{0-}^d, S_{0+}^d$	links- bzw. rechtsseitiger Limes der Anfangswassersättigung an einer Unstetigkeitsstelle
$S_-^{\max}, S_+^{\max}$	Wassersättigung, an der der links- bzw. rechtsseitige Limes der Flussfunktion $G$ an einer Unstetigkeitsstelle maximal wird
$S_\ell^{\max}, S_r^{\max}$	Wassersättigung, an der die Flussfunktion $G_\ell$ bzw. $G_r$ maximal wird
$S_<, S_>$	eine Wassersättigung mit einer negativen bzw. positiven Ableitung $g$ der advektiven Flussfunktion $G$
$\hat{S}_j^k$	Sättigung zum Extremwert der advektiven Flussfunktion in Zelle $j$ zum Zeitpunkt $k$
$S_{\text{wp}}, S_{\text{wb}}, S_{2\text{p}}, S_{2\text{b}}, S_{4\text{p}}, S_{4\text{b}}$	anfängliche Wassersättigung, anfängliche Sättigung des nichtperkolierenden Wassers und anfängliche Sättigung des nichtperkolierenden Öls für das Plateau im Gebiet $[x_0, x_1]$ bzw. für den konstanten Wert im restlichen Gebiet $\mathcal{D} \setminus [x_0, x_1]$ .
$s$	linksseitiger Limes der Wassersättigung an einer Unstetigkeitsstelle nach [Pop 09]
$\underline{s}, \bar{s}$	Unter- bzw. Obergrenze für den linksseitigen Limes der Wassersättigung nach [Pop 09] an einer Unstetigkeitsstelle
$t$	Zeit
$t^k$	$k$ -ter Zeitpunkt
$t_0, t_e$	Anfangs- bzw. Endzeitpunkt
$t_r$	Zeitpunkt der Umkehr des angelegten Volumenstrom an einer Säule
$t^*$	Zeitpunkt, wenn eine Charakteristik die Unstetigkeitsstelle $d$ erreicht

Symbol	Beschreibung
$u$	Variable ( $n = 1$ ) bzw. Variablenvektor ( $n > 1$ ) aus $\mathbb{R}^n$
$\tilde{u}$	stückweise polynomiale Approximation an $u$
$u_\ell, u_r$	Wert der Variablen $u$ am linken bzw. rechten Rand (Dirchlet-Randbedingung) eines Gebiets $\mathcal{D}$
$u_0$	Anfangswert der Variablen $u$
$u_b^{\text{IC}}, u_p^{\text{IC}}$	Vektor für die Anfangsbedingungen für das Plateau im Gebiet $[x_0, x_1]$ bzw. für den konstanten Wert im restlichen Gebiet $\mathcal{D} \setminus [x_0, x_1]$
$V_\phi$	Volumen des Porenraums
$V_{\text{REV}}$	Volumen eines repräsentativen Elementarvolumen
$V_i$	Volumen der Phase $i$
$\mathcal{V}_\ell^{\text{BC}}, \mathcal{V}_r^{\text{BC}}$	Wertevektoren $\in \mathbb{R}^4$ für die linken bzw. rechten Randbedingungen für AMG3+1
$v_i$	Fließgeschwindigkeit von Phase $i$
$v^{(i)}$	Geschwindigkeit, mit der sich eine Sprungunstetigkeit einer Stoßwelle bewegt. Gegebenenfalls werden mehrere Sprungunstetigkeiten durch $(\ell)$ , $(r)$ und $(s)$ voneinander unterschieden.
$v^{\text{max}}$	maximale Geschwindigkeit einer Welle
$v_{i-1/2}^p$	Geschwindigkeit der p-ten Welle zwischen Zelle $i$ und $i - 1$
$v^-, v^+$	negative bzw. positive Geschwindigkeiten
$\mathcal{W}_{i-1/2}^p$	p-te Welle zwischen Zelle $i$ und $i - 1$
$x$	Ort
$x_\ell, x_r$	Position des linken bzw. rechten Rands eines Gebiets $\mathcal{D}$
$x_0$	Referenzpunkt der räumlichen Diskretisierung bzw. Position der ersten Unstetigkeit in Anfangsbedingungen
$x_a, x_b$	charakteristische Variablenwerte bei einem Randwertproblem
$x_i$	Ort des $i$ -ten Gitterpunkts oder des Zentrums der $i$ -Gitterzelle
$x_{\min}^{(i)}, x_{\max}^{(i)}$	lokales Minimum bzw. Maximum in $x(S)$ bei der Konstruktion einer Sprungunstetigkeit $(i)$
$x^{(i)}$	Position der Sprungunstetigkeit einer Stoßwelle $(i)$ . Gegebenenfalls werden mehrere Sprungunstetigkeiten durch $(\ell)$ , $(r)$ und $(s)$ voneinander unterschieden.

Symbol	Beschreibung
$x^d$	Position einer räumlichen Unstetigkeitsstelle
$x_1$	ausgezeichneter Ort bzw. Position der zweiten Unstetigkeit in Anfangsbedingungen
$x_0^{\text{IC}}, x_1^{\text{IC}}$	Vektoren der Positionen des ersten bzw. zweiten Sprungs in den Anfangsbedingungen
$y$	allgemeine Funktion $y : \mathbb{R} \rightarrow \mathbb{R}^n$
$y_a$	charakteristischer Wert einer allgemeine Funktion $y : \mathbb{R} \rightarrow \mathbb{R}^n$
$\alpha^g$	van-Genuchten-Parameter
$\alpha$	Exponent für die Kapillarkräfte des Wassers
$B$	Auswahlvektor für Flussrandbedingungen für den Löser von partiellen Differentialgleichungen mit mobilem Gitter [Blom 94]
$\beta$	Exponent für die Kapillarkräfte des Öls
$\tilde{\Gamma}$	Vektor zur Definition von Differentialgleichungen erster Ordnung auf dem Rand für den Löser von partiellen Differentialgleichungen mit mobilem Gitter [Blom 94]
$\Gamma$	Vektor zur Definition von Funktionen auf dem Rand für den Löser von partiellen Differentialgleichungen mit mobilem Gitter [Blom 94]
$\gamma$	Exponent für die Grenzflächenkräfte des Wassers
$\tilde{\gamma}, \tilde{\gamma}_1, \tilde{\gamma}_2$	Schätzwerte für die anfängliche Ableitung beim Schießverfahren
$\Delta S$	Schrittgröße bei einer Diskretisierung der Sättigungen oder Abstand zwischen zwei Sättigungen
$\Delta t$	Schrittgröße der zeitlichen Diskretisierung oder Abstand zwischen zwei Zeitpunkten
$\Delta u$	Differenz zwischen zwei Variablen $u$
$\Delta x$	Schrittgröße der räumlichen Diskretisierung
$\Delta P$	Unterschied zwischen zwei Drücken
$\partial \mathcal{D}$	Rand des Gebiets $\mathcal{D}$
$\frac{\partial}{\partial t} = \partial_t$	partielle Ableitung nach der Zeit
$\frac{\partial}{\partial x} = \partial_x$	partielle Ableitung nach dem Ort
$\frac{\partial}{\partial S_i}$	partielle Ableitung nach der Sättigung $i$
$\delta$	Exponent für die Grenzflächenkräfte des Öls



Symbol	Beschreibung
$\epsilon_{\text{disc}}^k$	lokaler Diskretisierungsfehler an Gitterpunkt $i$ oder in Zelle $i$ zum Zeitpunkt $k$
$\epsilon_{\text{M}}$	Regularisierungs- bzw. Modellparameter des Massenaustauschs zwischen perkolierenden und nichtperkolierenden Phasen
$\epsilon_{\text{tol}}$	Genauigkeitsschwelle
$\epsilon_{\text{S}}$	Regularisierungsparameter der Sättigung
$\epsilon_{\text{P}}$	Regularisierungsparameter des Drucks
$\epsilon_{\sigma}$	(lineare) Diffusionskonstante der künstlichen Reaktions-Diffusions-Gleichung
$\epsilon_{\text{eq}}$	numerische Schwelle, bei deren Unterschreitung Werte als identisch betrachtet werden
$\epsilon_{\text{di}}$	Verschiebung der Grenze zwischen Be- und Entwässerung für die künstliche Variable $\sigma$ bei AMG3+1.
$\epsilon_{\text{np}}$	künstliche Diffusion für die nichtperkolierenden Phasen
$\epsilon_{\text{der}}$	endliche Schrittgröße zur numerischen Berechnung der Ableitung
$\epsilon_{\text{v}}$	Regularisierungsparameter der Geschwindigkeit für die Richtung der Charakteristiken
$\epsilon_{\partial S}$	Regularisierungsparameter für die Berücksichtigung des Massenaustauschs zwischen perkolierenden und nichtperkolierenden Phasen
$\zeta_{\sigma}$	Zerfallskonstante der künstlichen Reaktions-Diffusions-Gleichung
$\eta_2, \eta_4$	Faktor zur Skalierung des Massenaustausch zwischen perkolierender und nichtperkolierender Phase von Wasser bzw. Öl Skalierungsfaktor Massenaustausch des Öls
$\eta_{\text{W}}^*, \eta_{\text{O}}^*$	Massenaustausch des Wassers bzw. des Öls ohne die Änderungsrate der Wassersättigung und ohne den Skalierungsfaktor $\eta_2$ bzw. $\eta_4$
$\eta$	Ähnlichkeitsvariable
$\eta_{\ell}, \eta_r$	Wert des linken bzw. rechten Rands in der Ähnlichkeitsvariablenformulierung [Pop 09]
$\Theta(x)$	Heaviside-Sprungfunktion
$\tilde{\Theta}$	geglättete Heaviside-Sprungfunktion
$\vartheta$	Winkel der Raumachse zur Schwerkraft

Symbol	Beschreibung
$\kappa^{\text{IC}}$	Glättungsfaktorenvektor für die Heaviside-Sprungfunktion in den Anfangsbedingungen
$\kappa_{\text{sm}}$	Glättungsfaktor der Heaviside-Sprungfunktion in den Anfangsbedingungen
$\kappa$	Monitorfunktion für den Löser von partiellen Differentialgleichungen mit mobilem Gitter [Blom 94]
$\kappa_{\text{di}}$	Glättungsfaktor für die Parameterfunktionen $S_{\text{W}}^*$ , $S_{\text{O}}^*$ , $S_2^*$ , $S_4^*$ bei FlmPSSS
$\kappa_{\text{h}}$	Glättungsfaktor für das CIR-Verfahren bei FlmPSSS
$\kappa$	Viskositätsverhältnis zwischen Wasser und Öl
$\Lambda$	verallgemeinerte Mobilitätsmatrix
$\Lambda^{\text{red}}$	verallgemeinerte Mobilitätsmatrix reduziert auf die perkolierenden Phasen
$\Lambda_{ij}$	Komponenten der inversen Viskositätskopplungsmatrix $[\tilde{R}^{-1}]_{ij}$
$\lambda$	fraktionale Mobilität
$\lambda^{\text{b}}$	Brooks-Corey-Parameter: Porenverteilungsindex
$\lambda_{ij}$	Komponente $ij$ der verallgemeinerten Mobilitätsmatrix $\Lambda$
$\lambda_{\text{tot}}$	Gesamtmobilität
$\lambda_{\text{W}}, \lambda_{\text{O}}, \lambda_i$	Mobilität des Wassers, des Öls und der Phase $i$
$\mu$	allgemeine Viskosität
$\mu_{\text{W}}, \mu_{\text{O}}, \mu_i$	Viskosität des Wassers, des Öls bzw. der Phase $i$
$\nu$	Variable für die Sättigung, über welche integriert wird
$\xi$	Parameter der Anfangsbedingung für Charakteristiken
$\xi_{\ell}, \xi_r$	linker bzw. rechter Rand der Parametrierung der Anfangsbedingung für Charakteristiken
$\varrho_{\text{W}}, \varrho_{\text{O}}, \varrho_i$	Dichte von Wasser, Öl bzw. Phase $i$
$\Sigma_i$	Spannungstensor für Phase $i$
$\sigma_{\text{sm}}$	Glättungsfaktor für den Löser von partiellen Differentialgleichungen mit mobilem Gitter [Blom 94]
$\sigma$	künstliche Variable zur Approximation von $\partial_t S_{\text{W}}$

---

Symbol	Beschreibung
$\tau_r$	Aufstellzeitkonstante für Experimente mit einer geschlossenen porösen Säule
$\tau_{st}$	Zeitkonstante für den Start bei AMG3+1
$\tau_{sm}$	Glättungsfaktor für den Löser von partiellen Differentialgleichungen mit mobilem Gitter [Blom 94]
$\tau$	Kurvenparameter für Charakteristiken
$\tau_0$	Anfangswert des Kurvenparameters der Charakteristiken
$\phi$	Porosität
$\phi_i$	Volumenanteil einer Phase
$\psi$	stetig differenzierbare Testfunktion $\psi : \mathbb{R} \times \mathbb{R}_+ \rightarrow \mathbb{R}^n$

# Abkürzungsverzeichnis

Abkürzung	Beschreibung
AMG3+1	Ein Algorithmus für die fraktionale Flussformulierung mit immobilen nichtperkolierenden Phasen. Er basiert auf dem Löser für partielle Differentialgleichung [Blom 94] mit adaptivem mobilen Gitter.
AMG9	Ein Algorithmus für das vollständige Modell. Er basiert auf dem Löser für partielle Differentialgleichung [Blom 94] mit adaptivem mobilen Gitter.
BL	Randbedingungen zur numerischen Lösung des Buckley-Leverett-Problems in FlmPSSS
CIR-Verfahren	Courant-Isaacson-Rees-Verfahren, auch "Upwinding" genannt
CLAWPACK	Eine Bibliothek zur Implementierung von Godunov-Lösern [LeVe 07]
CFL-Bedingung	Courant-Friedrich-Lewy-Bedingung
DASSL	"public-domain" Zeitintegrator [Petz 83]
DBRMMWBL-Modell	Das traditionelle Modell, das üblicherweise zur Modellierung von Mehrphasenströmungen in porösen Medien verwendet wird. Es wird hier nach den Initialen von Darcy, Buckingham, Richards, Muskat, Meres, Wyckoff Botset und Leverett, die jeweils einen wichtigen Beitrag zum Modell geliefert haben, benannt.
DC	Dirichlet-Randbedingungen in FlmPSSS
FlmPSSS	Ein vollständig impliziter Finite-Volumen-Algorithmus mit den Primärvariablen $P_1$ , $S_1$ , $S_2$ , $S_3$ implementiert in MATLAB
FORTRAN	Programmiersprache
FX	Flussrandbedingungen in FlmPSSS

---

Abkürzung	Beschreibung
KD	Randbedingungen zur Messung der Kapillardrucksättigungsbeziehung in FlmPSSS
MATLAB	Ein Programmpaket für Matrix-Vektor-Operationen und Visualisierung
ODE	gewöhnliche Differentialgleichung
OF	freie Ausflussrandbedingungen in FlmPSSS
PDE	partielle Differentialgleichung
RDA	residuale Entkopplungsnaherung
SimBL	expliziter Godunov-Löser für den hyperbolischen Limes der fraktionalen Flussformulierung mit immobilien nichtperkolierenden Phasen implementiert in der FORTRAN-Variante von CLAWPACK
VEGAS	Versuchseinrichtung zur Grundwasser- und Altlastensanierung an der Universität Stuttgart



# Zusammenfassung

Das Verständnis makroskopischer Phänomene bei Mehrphasenströmungen in porösen Medien ist sowohl von wissenschaftlicher Seite als auch für Anwendungen von großem Interesse. Obwohl seit über einem Jahrhundert intensiv daran geforscht wird und die Phänomene auf der Porenskala durch die Gleichungen der klassischen Hydrodynamik beschrieben werden, ist bis heute keine Theorie vorhanden, die auf Labor- und Feldskala Hysterese und residuale Fluidkonfigurationen bei Mehrphasenströmungen umfassend und physikalisch richtig beschreibt. Die Berücksichtigung der unterschiedlichen hydrodynamischen Eigenschaften von perkolierenden und nichtperkolierenden Fluidanteilen auf makroskopischen Skalen könnte der Schlüssel zu einem besseren Modell sein. Hilfer schlägt ein Modell vor (Phys. Rev. E. 73, 016307 (2006)), in welchem diese Unterschiede nicht ignoriert werden. Erste quasistationäre Lösungen dieses Modells geben Hoffnung, dass durch das Einbeziehen dieser Unterschiede in der Modellbildung Schwachpunkte traditioneller Ansätze behoben werden können. Weitergehende Untersuchungen dieses Modells und seiner Gleichungen bilden die Aufgabenstellung dieser Dissertation.

Um die Gleichungen zu studieren, wurden Umformungen und Näherungen formuliert, die analytische Lösungen ermöglichen. Außerdem wurden Schließbedingungen formuliert, die die Lösung zeitabhängiger Fragestellungen erlauben. Vier Anfangs- und Randwertprobleme wurden analytisch bzw. quasianalytisch gelöst. Sie sind Verallgemeinerungen des Buckley-Leverett-Problems, der schwerkraftgetriebenen Umverteilung, des McWhorter-Sunada-Problems und des Philip-Problems. Ferner wurden vier numerische Algorithmen entwickelt, die Anfangs- und Randwertprobleme für unterschiedliche mathematische Formulierungen und physikalische Näherungen des Modells lösen. Mit diesen Algorithmen wurden Laborexperimente simuliert. Die Experimente können drei Klassen zugeordnet werden. Die erste Klasse bilden Experimente mit einer geschlossenen porösen Säule. In diesen Experimenten bewirken allein die Schwerkraft und Kapillar- und Grenzflächenkräfte eine Umverteilung der Fluide. Die Ergebnisse zeigen, dass das Modell hysteretisches Verhalten in Sättigungsverteilungen beschreiben kann. Sie illustrieren außerdem Gemeinsamkeiten und Unterschiede zu bestehenden Modellen. Die gewonnenen Aussagen können im Labor überprüft werden. Die zweite

Klasse bilden Experimente, bei denen eine poröse Säule von einem von außen aufgeprägten Fluss durchströmt wird. Die Simulationen zeigen, dass die Beschreibung der Dynamik residualer Sättigungen mit diesem Modell möglich ist. Die dritte Klasse bilden Experimente mit Druckrandbedingungen. Solche Experimente werden im Labor zur Bestimmung und Überprüfung von Kapillardrucksättigungsbeziehungen durchgeführt. Die Simulation eines solchen Experiments stimmt gut mit Messwerten aus der Literatur überein.

Die Ergebnisse dieser Dissertation zeigen, dass zumindest einige Schwächen traditioneller Ansätze durch die Berücksichtigung der unterschiedlichen hydrodynamischen Eigenschaften von perkolierenden und nichtperkolierenden Fluidanteilen behoben werden können. Für das neue Modell wurden analytische und quasianalytische Lösungen bestimmt und Verfahren entwickelt, numerische Lösungen zu berechnen. Einige der numerischen Lösungen wurden mit experimentellen Daten verglichen. Es konnte eine gute Übereinstimmung der Ergebnisse gezeigt werden. Die übrigen Lösungen dienen als Vorschlag für Experimentatoren. Eine Durchführung dieser Experimente im Labor würde wichtige Erkenntnisse zur Qualität des Modells liefern.



## Abstract

Understanding macroscopic phenomena of multiphase flow in porous media is of great interest for applications but from a scientific perspective as well. Although it has been a focus of research for more than a century and the dynamics of the fluids on pore-scale are governed by the classical hydrodynamic equations, until now, a theory which predicts comprehensively and physically sound hysteretic phenomena and residual fluid configurations on the laboratory and field scale has not been available. Percolating and nonpercolating fluid parts show fundamentally different hydrodynamic behavior and taking into account these differences on macroscopic scales might be the key to a better model. Hilfer proposes a model (Phys. Rev. E. 73, 016307 (2006)) which treats microscopically percolating fluid regions and nonpercolating regions as distinct phases on a macroscopic scale. In a quasi-stationary limit, the results indicate that the model may solve deficiencies of traditional approaches. Further studies of the proposed model form the objective of this thesis.

The model is investigated by using different strategies including analytical, numerical and modeling techniques. The underlying set of nonlinear, coupled, partial differential equations has been reformulated and approximations have been made to render analytical solutions possible. Closure conditions permitting time-dependent solutions have been proposed. Four initial and boundary value problems have been set and solved analytically and quasi analytically respectively. The problems are generalizations of the Buckley-Leverett problem, the gravity driven redistribution, the McWhorter-Sunada problem and the Philip problem for traditional approaches. Further, four different numerical algorithms have been developed to solve initial and boundary value problems for different mathematical formulations and physical approximations of the model. These algorithms have been used to simulate laboratory experiments. Considered are three different categories of experiments. The first category covers experiments with a closed porous column. In these experiments, gravity as well as capillary and interfacial forces exclusively induce a redistribution of the fluids. The results show that the model predicts hysteresis in the dynamics of the fluids. They illustrate further the similarities and differences to existing models. The results may be checked in the laboratory. The second category covers experiments with a porous column which is streamed by an ex-

ternally applied flux. The simulations show that residual saturation dynamics are described by the model. The third category covers experiments in which the pressure at the boundaries of the porous column is controlled. Such experiments are usually conducted to measure capillary pressure saturation relations. A comparison of simulations and experimental data shows good agreement.

In this thesis, it has been shown that at least some of the deficiencies of traditional approaches are solved by taking into account the distinct hydrodynamic properties of percolating and nonpercolating fluid parts. Analytical and quasi analytical solutions have been found and numerical methods and algorithms have been developed. Some numerical solutions have been compared to experimental data with good agreement. The other solutions suggest experiments to further validate the model.

# 1 Einleitung und Fazit

## 1.1 Motivation

Das Verständnis der Phänomene, die bei Mehrphasenströmungen in porösen Medien auftreten, ist sowohl aus rein theoretischer, akademischer Sicht als auch für praktische Anwendungen von großem Interesse. Die Anwendungsgebiete reichen dabei von der Ölförderung, [Dona 69, Engl 87], Altlastensanierung in kontaminierten Böden [Zhan 02], und CO<sub>2</sub>-Sequestrierung [Ebig 07] über Papierherstellung [Kata 92] und Wassermanagement in Brennstoffzellen [Pasa 04] bis zum Deichbau und zur Entwicklung von Bewässerungsstrategien in der Landwirtschaft. Auch für die Naturwissenschaften ist ein Verständnis der Mehrphasenströmung in porösen Medien z.B. für ein besseres Verständnis des hydrologischen Kreislaufs essentiell. Darüber hinaus sind Erkenntnisse über Skalenwechsel, sowie über Mittelungs- und Homogenisierungsverfahren aus dem Studium der Mehrphasenströmungen in porösen Medien auch für andere Gebiete mit nichtlinearen Prozessen wertvoll. Weiterhin sind aus mathematischer Perspektive die auftretenden nichtlinearen, stark gekoppelten partiellen Differentialgleichungen eine interessante Herausforderung, für die noch keine umfassende Theorie gefunden wurde. Eine bessere physikalische Intuition für Phänomene dieser Nichtlinearitäten ist daher auch für die Mathematik hilfreich.

Die metastabilen und korrelierten Fluid- und Grenzschichtenkonfigurationen bei Mehrphasenströmungen in porösen Medien sind auf makroskopischer Skala noch nicht verstanden, obwohl seit über einem Jahrhundert intensiv daran geforscht wird [Jami 60, Rich 31, Genn 88, Hilf 96, Anto 99, Dijk 02, Fere 04, Bogd 03], und obwohl das gleichzeitige Strömen von zwei nicht mischbaren Fluiden in einem porösen Medium den Gesetzen der klassischen Hydrodynamik gehorcht. Eine makroskopische Theorie, die die hysteretischen Phänomene und die residualen Fluidkonfigurationen korrekt beschreibt, ist bis heute nicht vorhanden und wird in der Literatur intensiv diskutiert [Babc 08, Dein 08, Lehm 08, Naum 08, Cuet 08].

Mangels besserer Alternativen wird zur Modellierung makroskopischer Phänomene meistens

das DBRMMWBL-Modell<sup>1</sup> verwendet, das als Unbekannte die Fluidsättigungen (Volumenanteile der Fluide), gemittelte Drücke und Volumenströme enthält. Dieses Modell wird z.B. zur Simulation der Bewirtschaftung von Ölfeldern, von Schadstofftransport in der ungesättigten Bodenzone oder auch von Risikoszenarien bei der CO<sub>2</sub>-Sequestrierung verwendet. Seine Konstitutivgleichungen, die so genannte Kapillardrucksättigungsbeziehung und die relativen Permeabilitäten, sind jedoch schwierig zu messen [Morr 91] und hängen - im Gegensatz zur Annahme - nicht nur von der Sättigung, sondern ebenso von der Prozessgeschichte [Mual 73, Klou 92], von Strömungsgeschwindigkeiten [Abra 75, Shen 92b], dynamischen Effekten [Hass 02, Tsak 07], Grenzflächen [Marl 82] und der Verbundenheit der Fluide [Avra 95] ab. In fast allen Modellen und Theorien werden außerdem die residualen Sättigungen als Materialkonstante in den relativen Permeabilitäten und der Kapillardrucksättigungsbeziehung verwendet, obwohl bereits Wyckoff und Botset [Wyck 36] die Variation der Anteile von unverbundenen Fluidregionen betonen. Damit sind jedoch aussagekräftige Simulationen mit dem DBRMMWBL-Modell bestenfalls auf einfache Problemstellungen beschränkt, bei denen weder Hysterese noch dynamische Effekte wie Einschlüsse von Blasen, variierende residuale Sättigungen usw. einen bedeutenden Einfluss auf die Lösung haben.

In Anwendungen ist man häufig daran interessiert, aus Informationen über Strömungsprozesse und Materialparameter, die auf Labor- oder Bohrkernskala, also in Bereichen von Zentimetern bis Dezimetern, gewonnen wurden, Aussagen über die Dynamik der Fluide auf Feldskalen, also in Bereichen von einigen Metern bis zu einigen Kilometern, zu machen. Dies stellt eine weitere Herausforderung dar, da die untersuchten Größen schon auf der gemessenen (Labor-) Skala fragwürdig und unsicher sind. Daher müssen auch aufwendige Verfahren des Skalenwechsels [Beli 03, Chri 01, Roye] scheitern. A priori ist außerdem nicht klar, dass auf den unterschiedlichen Skalen (z.B. Labor- oder Feldskala) die Dynamik von denselben Größen geprägt wird. Insbesondere stellt sich natürlich die Frage der Gültigkeit auf mehreren Skalen für Modelle, die schon auf einer Skala Mängel zeigen. Auch rein numerische Fragestellungen sind davon betroffen, wenn Diskretisierungen mit räumlich und zeitlich variabler Auflösung verwendet werden [Efen 02, Chri 96]. Es stellt sich dann die Frage, wie relative Permeabilitäten und Kapillardrucksättigungsbeziehungen adäquat gemittelt werden können.

Diese Schwächen und Grenzen des DBRMMWBL-Modells sind bekannt [Mill 98, Rose 00]. Es gibt daher alternative Modellansätze, die von rein heuristischen Hysterese-Modellen z.B. [Mual 74] über ergänzende Terme in den Parameterfunktionen, um z.B. dynamische Effekte

---

<sup>1</sup>Das Standardmodell wird in dieser Dissertation nach den Initialen der wichtigen Mitentwickler des Modells Darcy, Buckingham, Richards, Muskat, Meres, Wyckoff, Botset und Leverett DBRMMWBL-Modell genannt. Siehe hierzu Kapitel 2.1.4.

zu berücksichtigen [Hass 93], bis hin zu ergänzenden Gleichungen für neue Unbekannte wie z.B. Grenzflächendichten [Nies 08] reichen. Ein zufriedenstellendes Modell konnte so jedoch noch nicht gefunden werden. Die heuristischen Hysterese Modelle haben z.B. das Problem, dass der Charakter des Prozesses, also ob Be- oder Entwässerung vorliegt, ex ante angegeben werden muss. Es ist daher sehr aufwendig bzw. teilweise gar unmöglich, Experimente zu simulieren, bei denen Be- und Entwässerung zur gleichen Zeit an unterschiedlichen Orten oder am gleichen Ort zu unterschiedlichen Zeiten geschehen. In anderen Arbeiten wird versucht, über Mittelungsverfahren der Gleichungen auf Porenskala [Hass 90, Whit 86a, Whit 86b] geeignete makroskopische Gleichungen zu finden. Diese Arbeiten sind teilweise bereits in ihren Ansätzen fragwürdig. Doch auch wenn man jene konzeptionellen Schwierigkeit außen vor lässt, sind die Gleichungssysteme dieser Arbeiten zu groß, um analytisch oder numerisch gelöst zu werden. Auch die Anzahl der Parameter ist zu groß, als dass die physikalische Bedeutung diskutiert werden könnte. Es wird zwar versucht, dem genannten Problem durch Reduktion und Vereinfachung der Gleichungen zu begegnen. Die Vorgehensweise dabei ist allerdings relativ beliebig und erfordert ein tiefes intuitives Verständnis der Prozesse. Daher wird durch die Formulierung des großen Gleichungssystems nur wenig gewonnen.

Ein anderer Ansatz wurde am Institut für Computerphysik der Universität Stuttgart vorgeschlagen [Hilf 06a, Hilf 06b, Hilf 06c, Hilf 09]. Es werden dabei weder eine Kapillardrucksättigungsbeziehung noch relative Permeabilitäten benötigt. Die für das Modell fundamentale Erkenntnis ist, dass Tröpfchen, Blasen oder Ganglien eines Fluids, die in einem anderen Fluid verteilt sind, die Dynamik des anderen Fluids stark beeinflussen [Avra 95] und in Porenenden oder Porenkammern eingeklemmt werden können. Dies gilt nicht für verbundene Fluidphasen. Eine Abbildung wichtiger Eigenschaften der Mehrphasenströmung in porösen Medien durch Modelle, die nicht zwischen den beschriebenen Fluidphasen unterscheiden, ist daher unmöglich. Die Erkenntnis, dass sich verbundene und unverbundene Fluidanteile, also Fluidanteile, die perkolieren bzw. nicht perkolieren, unterschiedlich verhalten [Avra 95, Olbr 96], wurde dadurch berücksichtigt, dass diese Fluidanteile auch auf makroskopischer Skala durch unterschiedliche Phasen beschrieben werden. Auf makroskopischer Skala können beide Phasen an einem Punkt koexistieren. Ein Zweiphasensystem wird daher als Vierphasensystem modelliert und Gleichungen werden mit Hilfe von Massen- und Impulsbilanzgleichungen formuliert [Hilf 98, Hilf 00, Hilf 06a, Hilf 06b, Hilf 06c]. Die jeweils vier Massen- und Impulsbilanzen, die Volumenerhaltung bei inkompressiblen Fluiden und die Konstitutivannahmen bilden einen Satz von stark gekoppelten, nichtlinearen partiellen Differentialgleichungen. Auch wenn keine Kapillardrucksättigungsbeziehung oder relative Permeabilitäten benötigt werden, können diese in der residualen Entkopplungsnäherung (RDA) [Hilf 06b] hergeleitet werden.

## 1.2 Definition der Problemstellung

Den Ausgangspunkt dieser Dissertation stellt ein Modell dar, welches die unterschiedlichen hydrodynamischen Eigenschaften von perkolierenden und nichtperkolierenden Fluidanteilen auf makroskopischen Skalen berücksichtigt und in [Hilf 98, Hilf 00, Hilf 06a, Hilf 06b, Hilf 06c] entwickelt wurde. Es soll untersucht werden, inwieweit jenes Modell über die ersten quasi-stationären Lösungen [Hilf 06b] hinaus einen Beitrag zum besseren Verständnis der Mehrphasenströmungen in porösen Medien leisten kann.

Die Problemstellung lässt sich in zwei Teilgebiete gliedern, denen man die Überschriften “mathematische und technische Aspekte” und “Modellierung und physikalische Aspekte” zuschreiben kann. Von mathematischer bzw. technischer Seite drängen sich die folgenden Fragen auf:

- Ist das System der Gleichungen vollständig oder möglicherweise über- oder unterbestimmt?
- Welche Anfangs- und Randbedingungen führen zu wohlgestellten Problemen?
- Welche mathematischen Ähnlichkeiten bestehen zwischen dem DBRMMWBL-Modell und dem neuen Modell? Lassen sich Methoden und Verfahren für die traditionellen Ansätze übernehmen oder anpassen?
- Gibt es Verfahren, um Anfangs- und Randwertprobleme des Modells - oder vereinfachte Versionen davon - analytisch zu lösen?
- Was sind geeignete numerische Verfahren zur Lösung der gekoppelten nichtlinearen partiellen Differentialgleichungen des Modells?
- Sind die Konstitutivannahmen des Modells mathematisch sinnvoll? Bedarf es Anpassungen? Führen Annahmen zu mathematischen Schwierigkeiten oder gar Inkonsistenzen?

Hinsichtlich der Modellierung und ihren physikalischen Aspekten sind die folgenden Fragen zu beantworten:

- Was sind physikalische Gemeinsamkeiten und Unterschiede zwischen dem DBRMMWBL-Modell und dem neuen Ansatz? Welche Phänomene können in beiden, welche in nur einem und welche mit keinem der beiden Ansätzen beschrieben werden?

- Sind die Konstitutivannahmen des Modells physikalisch sinnvoll? Bedarf es Anpassungen? Führen Annahmen zu Phänomenen in den Lösungen, die physikalisch unplausibel oder gar falsch sind?
- Gibt es Vereinfachungen und Grenzfälle, die sich einfacher lösen lassen?
- Gibt es Experimente, die Unterschiede und Gemeinsamkeiten beider Ansätze illustrieren?
- Lassen sich Lösungen zu Anfangs- und Randwertproblemen mit Experimenten vergleichen? Wie lassen sich Laborexperimente durch Anfangs- und Randbedingungen für die neuen Unbekannten modellieren?

An den Fragen zeigt sich bereits, dass die beiden Gebiete nicht völlig unabhängig bearbeitet werden können. Einige Fragen bedingen sich gegenseitig, andere Fragen lassen sich beiden Untergebieten zuordnen.

Abschließend sei erwähnt, dass das Modell für drei Raumdimensionen formuliert ist. Da grundlegende Phänomene der Mehrphasenströmung bereits an porösen Medien untersucht werden können, die makroskopisch als eindimensional angenähert werden können, soll es in dieser Dissertation genügen, das Modell in einer Raumdimension zu untersuchen. Poröse Säulen, deren Länge sehr viel größer als deren Durchmesser ist und die impermeable Seitenwände haben, sodass ein transversaler Fluss unterbunden wird, können durch ein eindimensionales poröses Medium angenähert werden.

## 1.3 Struktur der Dissertation

Die Dissertation ist in vier Teile gegliedert. Den vier Teilen ist ein einleitendes Kapitel vorangestellt, das die wichtigsten Grundlagen für die Beschreibung von Strömungen in porösen Medien kurz zusammenfasst. Darin werden das DBRMMWBL-Modell vorgestellt und seine Grenzen, Schwierigkeiten und offenen Fragen erläutert. Außerdem werden einige mathematische Werkzeuge zur Lösung von nichtlinearen partiellen Differentialgleichungen präsentiert.

Der erste Teil, “*Das Modell*”, stellt das erweiterte Modell in einer Raumdimension vor. Es werden dort neben den grundlegenden Gleichungen auch Näherungen und analytische Umformungen des Modells diskutiert, die für analytische Lösungen und numerische Algorithmen benötigt werden. Ausschnitte dieses Teils sind in [Hilf 09, Dost 10d, Dost 10a, Dost 10b, Dost 10c] veröffentlicht.

Der zweite Teil, “*Analytische und quasianalytische Lösungen*”, stellt analytische und quasianalytische Lösungen für vier verschiedene Anfangs- und Randwertprobleme vor. Bei allen analytischen und quasianalytischen Lösungsverfahren wird die Näherung “immobiler nichtperkolierende Phasen” verwendet. Das erste Anfangs- und Randwertproblem ist eine Verallgemeinerung des Buckley-Leverett-Problems, das zweite betrachtet schwerkraftgetriebene Umverteilung in einer geschlossenen Säule. Die ersten beiden Anfangs- und Randwertprobleme werden mit der Methode der Charakteristiken analytisch gelöst. Das dritte Anfangs- und Randwertproblem verallgemeinert ein Lösungsverfahren, das McWhorter und Sunada für das DBRMMWBL-Modell entwickelt haben. Es ist quasianalytisch, da eine gewöhnliche Integro-Differentialgleichung numerisch gelöst wird. Ebenso wird das vierte Anfangs- und Randwertproblem quasianalytisch gelöst. Es beschreibt die Umverteilung der Phasen durch Kapillar- und Grenzflächenkräfte. Für das entsprechende Anfangs- und Randwertproblem wurde eine Lösungsmethode, die von Philip für das DBRMMWBL-Modell entwickelt wurde, verallgemeinert. Ausschnitte dieses Teils sind in [Dost 10a, Dost 10b, Dost 10c] veröffentlicht.

Im dritten Teil, “*Numerische Algorithmen*”, werden Algorithmen vorgestellt, die entwickelt wurden, um flexibel bei der Wahl der Anfangs- und Randwertprobleme zu sein und insbesondere auch Experimente modellieren zu können. Es werden vier Algorithmen in jeweils eigenen Kapiteln vorgestellt. Im ersten Kapitel wird der Algorithmus AMG9 vorgestellt, der den vollen Satz von neun partiellen Differentialgleichungen löst. Er ist in [Hilf 09, Dost 10d] veröffentlicht. Der zweite Algorithmus AMG3+1 löst den vereinfachten Satz Gleichungen der Näherung “immobiler nichtperkolierende Phasen mit Flussrandbedingungen”. Diese ersten beiden Algorithmen basieren auf einem allgemeinen Löser für nichtlineare partielle Differentialgleichungen mit einem adaptiven mobilen Gitter. Der dritte Algorithmus ist ein Godunov-Löser und löst eine hyperbolische Näherung mit immobilen nichtperkolierenden Phasen und Flussrandbedingungen. Es werden dabei weder Kapillar- noch Grenzflächenkräfte berücksichtigt. Der Algorithmus ist in FORTRAN mit der Bibliothek CLAWPACK entwickelt. Der vierte Algorithmus ist ein voll gekoppelter, voll impliziter Finite-Volumen-Algorithmus und löst das vollständige Modell. Er ist komplett neu in MATLAB entwickelt und implementiert.

Im vierten Teil, “*Numerische Studien*”, werden die Algorithmen aus Teil III verwendet, um Anfangs- und Randwertprobleme zu lösen, die Laborexperimente modellieren. Die Ergebnisse werden mit experimentellen Daten verglichen, sofern Daten verfügbar sind. Das erste Kapitel beschreibt Simulationen von Experimenten mit einer geschlossenen porösen Säule im Schwerfeld. Das zweite Kapitel beschreibt Simulationen von Experimenten, bei denen ein vorgegebener Volumenstrom durch eine poröse Säule gepumpt wird. Im dritten Kapitel werden Simulationen von Experimenten beschrieben, bei denen der Druck der Fluide an den



Rändern einer Säule eingestellt wird. Für ein solches Experiment existieren experimentelle Daten, sodass eine Überprüfung des Modells vorgenommen werden kann. Ausschnitte von Teil IV sind in [Hilf 09, Dost 10d] veröffentlicht.

## 1.4 Zusammenfassung der Ergebnisse in Bezug auf die Problemstellung und Fazit

In Kapitel 1.2 wurden die zentralen Fragen dieser Dissertation formuliert. Die Ergebnisse der Dissertation werden hier in Bezug auf jene Fragen zusammengefasst.

Die erste Frage der mathematischen Fragestellungen muss differenziert beantwortet werden. Insbesondere ist dabei die physikalische Fragestellung einzubeziehen. Je nach Fragestellung ist das Modell dann über- oder unterbestimmt [Hilf 06a]. Als mögliche Schließbedingung für die Beschreibung stationärer und quasistationärer Phänomene wurde bereits die residuale Entkopplungsnaherung [Hilf 06a, Hilf 06b, Hilf 06c] diskutiert. Für zeitabhängige Phänomene wurden zwei weitere Bedingungen formuliert, die jeweils das Gleichungssystem schließen und weitere sind denkbar. Die erste Schließbedingung verallgemeinert die Annahmen von Buckley und Leverett auf das neue Modell und die zweite verallgemeinert die residuale Entkopplungsnaherung für zeitabhängige Lösungen.

Die zweite Frage wird durch die analytischen, quasianalytischen und numerischen Lösungen, die in den Teilen II und IV vorgestellt werden, anhand von Beispielen beantwortet. Das Finden einer allgemeinen, mathematisch strengen Antwort war beim aktuellen Forschungsstand der Mathematik nichtlinearer partieller Differentialgleichungssysteme nicht zu erwarten.

Die nächsten drei Fragen können gemeinsam beantwortet werden. Es konnten viele mathematische Gemeinsamkeiten zwischen dem DBRMMWBL-Modell und dem neuen Modell gefunden werden. Dabei spielt die fraktionale Flussformulierung eine zentrale Rolle. Mit ihrer Hilfe konnten sowohl analytische, als auch quasianalytische, als auch numerische Verfahren adaptiert werden. Bei den analytischen Verfahren ist die Methode der Charakteristiken und bei den numerischen Verfahren sind Godunov-Löser hervorzuheben.

Die Frage zur Mathematik der Konstitutivannahmen kann nicht umfassend beantwortet werden. Für vereinfachte Varianten des Modells ist der Parameterraum verstanden. Numerische Lösungen des vollen Modells konnten für Ausschnitte aus dem Parameterraum gefunden werden. Dabei ist noch nicht verstanden, ob der Raum der gültigen Parameter durch ungeeignete Algorithmen oder durch die prinzipielle Unlösbarkeit des Anfangs- und Randwertproblems

beschränkt ist. Die Untersuchung von Wellenlösungen der Gleichungen kann hierbei in Zukunft Verständnishilfe leisten.

Die erste Frage zu physikalischen Aspekten bezieht sich auf die Unterschiede und Gemeinsamkeiten des DBRMMWBL-Modells und des neuen Ansatzes. In den Studien ist das DBRMMWBL-Modell vollständige Teilmenge des neuen Modells. Von daher gibt es keine Phänomene, die mit dem DBRMMWBL-Modell aber nicht mit dem neuen Modell beschrieben werden können. Die untersuchten Probleme zeigen außerdem, dass der neue Ansatz erfolgreich Be- und Entwässerungshysterese modelliert. Außerdem kann die Dynamik der residualen Sättigungen beschrieben werden. Auch die Konstitutivannahmen - Gegenstand der zweiten Frage - können aufgrund der bisherigen Ergebnisse als plausibel und sinnvoll angenommen werden, wenn man von einer kleinen Änderung der begrenzenden Sättigungen absieht.

Die dritte Frage kann mit "ja" beantwortet werden. Es wurden physikalisch motivierte Vereinfachungen und Grenzfälle gefunden, die sich deutlich einfacher lösen lassen. Hier ist vor allem die Näherung der immobilen nichtperkolierenden Phasen zu erwähnen. In dieser Näherung sind umfassende analytische Studien möglich.

Unterschiede und Gemeinsamkeiten der Modelle können beim jetzigen Forschungsstand anhand von Experimenten, die Be- und Entwässerungsphänomene zeigen, dargestellt werden. Experimente, bei denen die Volumenstromrichtung durch Steuerung der Drücke an den Rändern mehrmals verändert wird, sind publiziert, und ein Vergleich von experimentellen Daten und Simulationen wurde erfolgreich durchgeführt. Experimente mit einer geschlossenen Säule im Schwerfeld wurden intensiv numerisch studiert. An den Ergebnissen werden die Unterschiede und Gemeinsamkeiten der unterschiedlichen Modelle deutlich. Es liegen dazu jedoch keine experimentellen Daten vor.

Die Ergebnisse dieser Dissertation zeigen, dass zumindest einige Schwächen des DBRMMWBL-Modells durch Berücksichtigung der unterschiedlichen hydrodynamischen Eigenschaften von perkolierenden und nichtperkolierenden Fluidanteilen behoben werden können. Für das neue Modell wurden analytische und quasianalytische Lösungen bestimmt und Verfahren entwickelt, um numerische Lösungen zu berechnen. Einige der numerischen Lösungen wurden mit experimentellen Daten verglichen. Es konnte eine gute Übereinstimmung der Ergebnisse gezeigt werden. Die übrigen Lösungen dienen als Vorschlag für Experimentatoren. Eine Durchführung jener Experimente im Labor würde wichtige Erkenntnisse zur Qualität des Modells liefern.

## 2 Grundlagen

### 2.1 Strömungen in porösen Medien

#### 2.1.1 Definitionen

Der Diskussion der Modelle zu Strömungen in porösen Medien soll eine Reihe von Definitionen und Termen vorangestellt werden, da die Terminologien je nach Fachgebiet, wissenschaftlichem Hintergrund und Anwendungsgebiet verschieden sind und somit nur eingeschränkt auf Standardliteratur verwiesen werden kann.

##### 2.1.1.1 Phase

In der Thermodynamik und Materialwissenschaft ist eine Phase ein räumlicher Bereich, in dem die bestimmenden physikalischen Parameter (Ordnungsparameter) und die chemische Zusammensetzung der Materie homogen, das heißt konstant und einheitlich sind [Bark 99]. Zu den physikalischen Eigenschaften von Materialien gehört insbesondere die Dichte und die chemische Zusammensetzung. Damit sind die Aggregatzustände eines Stoffes wie Eis, Wasser und Wasserdampf genauso unterschiedliche Phasen wie nicht mischbare Flüssigkeiten z.B. Öl und Wasser. Eine Phase kann aber auch über abstraktere Eigenschaften wie die Verbundenheit des Stoffes definiert werden. Dies ist zentral für die Begriffsbildung des untersuchten Modells. Von größeren Skalen (siehe Kapitel 2.1.1.4) aus betrachtet können Phasen in einem Punkt koexistieren. Beispielsweise nimmt man mit dem Auge bei Suspensionen die Feststoffpartikel und das Fluid als eine gemeinsame Phase wahr. Auch bei (Mehrphasen-) Strömungen in porösen Medien ist man unter Umständen nicht an einer Auflösung des Porenraums interessiert. Dann befinden sich an einem Punkt im Raum das feste Skelett der Matrix und das Fluid bzw. die Fluide.

### 2.1.1.2 Poröses Medium und Porösität

Bei der Untersuchung von Strömungen durch poröse Medien wird ein Medium, welches (unstrukturierte) verbundene Hohlräume aufweist, durch die Fluide strömen können als poröses Medium bezeichnet. Als Porösität  $\phi$  wird das Verhältnis des Volumens dieses Hohlraums  $V_\phi$  am Gesamtvolumen  $V_{\text{REV}}$  des Mediums bezeichnet. Es gilt

$$\phi = \frac{V_\phi}{V_{\text{REV}}}. \quad (2.1)$$

Im Sinne der Materialwissenschaften spricht man bei  $\phi$  auch von offener Porösität oder Nutzporösität im Gegensatz zur geschlossenen Porösität, die die unverbundenen Porenvolumina bezeichnet.

### 2.1.1.3 Sättigung

Als Sättigung  $S_i$  einer flüssigen Phase  $i$  wird das Verhältnis des Volumens  $V_i$  der flüssigen Phase  $i$  am offenen Porenvolumen  $V_\phi$  des Mediums bezeichnet, so dass

$$S_i = \frac{V_i}{V_\phi} = \frac{\phi_i}{\phi} \quad (2.2)$$

gilt, wobei  $\phi_i$  den Volumenanteil der Phase  $i$  am Gesamtvolumen bezeichnet. Damit gilt außerdem

$$\sum_{i \in \{\text{Fluide}\}} S_i = 1 \quad (2.3)$$

für inkompressible Medien.

### 2.1.1.4 Skalen

Bei der Beschreibung von Mehrphasenströmungen in porösen Medien werden im Allgemeinen vier Skalen unterschieden:

- Molekularskala
- Porenskala
- Laborskala
- Feldskala

Die Molekularskala bezieht sich auf Größenordnungen von nm, auf denen einzelne Moleküle unterschieden werden können. Die Porenskala reicht dagegen je nach Medium von der Molekularskala bis zu Größenordnungen von mm, wobei sie je nach Modellierungskonzept auch bis in größere Längeneinheiten reichen kann. In der vorliegenden Dissertation wird mit der Porenskala die Skala bezeichnet, auf welcher mit den Navier<sup>1</sup>-Stokes<sup>2</sup>-Gleichungen die Dynamik der Fluide in der durch den Porenraum vorgegebenen Geometrie beschrieben werden kann. Dem gegenüber steht die Laborskala, auf welcher die Porengeometrie nicht mehr aufgelöst ist und nur noch gemittelte Größen wie Porenvolumen, Sättigungen, usw. auftreten. Gleichungen, die mit Hilfe der genannten gemittelten Größen Mehrphasenströmungen auf der Laborskala beschreiben, sind Gegenstand dieser Dissertation. Die Laborskala bezieht sich auf Größenordnungen, wie sie im Labor in Versuchen oder Bohrkernen anzutreffen sind; also typischerweise einige Zentimeter. Eine noch größere Skala stellt die Feldskala mit Größenordnungen von einigen Metern bis Kilometern dar. Es ist dabei gängige Praxis, anzunehmen, dass die Gleichungen für die Labor- und Feldskala identisch sind und lediglich Parameter entsprechend gemittelt werden müssen. Mindestens zwei Gründe lassen an jener Vorgehensweise zweifeln. Zum einen sind zufriedenstellende Gleichungen auf der Laborskala nicht bekannt und zum anderen ist es aufgrund der Nichtlinearitäten in den Gleichungen und der anderen Messmethoden unter Umständen überhaupt nicht zielführend und wünschenswert, identische Gleichungen anzunehmen.

### 2.1.1.5 Repräsentatives Elementarvolumen (REV)

Als repräsentatives Elementarvolumen wird das minimale Volumen bezeichnet, auf welchem Größen wie Sättigung, Porosität usw. sinnvoll definiert werden können, da die Mittelwerte der mikroskopischen Größen bei einer geringen Veränderung des Volumens selbst nur noch geringfügig variieren. Diese Definition kann nur in konstruierten porösen Medien als streng gültig verstanden werden, da in natürlichen porösen Medien im Allgemeinen eine strenge Skalentrennung nicht vorgenommen werden kann. Das REV kann jedoch als theoretisches Konzept verstanden werden, um ein zweites Kontinuum einzuführen, in welchem mehrere Fluide in einem Punkt vorkommen und durch ihre Volumenanteile beschrieben werden können. Diese Definition soll an dieser Stelle genügen. Für Details sei insbesondere auf [Roth 07] verwiesen.

---

<sup>1</sup>Claude Louis Marie Henri Navier (1785-1836), französischer Mathematiker und Physiker

<sup>2</sup>Sir George Gabriel Stokes (1819-1903), irischer Mathematiker und Physiker

## 2.1.2 Kontinuumsmechanik

In der Kontinuumsmechanik wird vom mikroskopischen Aufbau der Materie abgesehen, und der Untersuchungsgegenstand als ein Kontinuum angenähert. Feldvariablen sind dann z.B. die Dichte einer Flüssigkeit oder ihre Strömungsgeschwindigkeit. Die Kontinuumsmechanik ist die - historisch betrachtet - erste Feldtheorie und prägt daher die Terminologie der zeitlich folgenden Feldtheorien wie Elektrodynamik und Quantenfeldtheorie. Die fundamentalen Erhaltungssätze der klassischen Mechanik, Massenerhaltung, Impulserhaltung, Drehimpuls- und Energieerhaltung müssen natürlich auch für ihre Felder gelte und formen daher das Gerüst der Kontinuumsmechanik. Die daraus gewonnenen Gleichungen genügen jedoch nicht, um die Vielzahl an auftretenden Variablen eindeutig zu bestimmen. Es sind daher weitere Konstitutivannahmen nötig, um die Variablen eindeutig festzulegen. Die Aufgabe der kontinuumsmechanischen Modellierung besteht darin, Konstitutivannahmen zu formulieren, die die Materialien, deren Verhalten studiert wird, geeignet beschreiben. Konstitutivannahmen können sowohl aus molekularen Eigenschaften hergeleitet werden als auch makroskopisch postuliert werden. Das Hook'sche Federgesetz wurde z.B. ohne Kenntnis der mikroskopischen Struktur aufgestellt, konnte aber später durch Wechselwirkungspotentiale für Atome in Festkörpern hergeleitet werden. Aufgrund der Myriaden von Lehrbüchern wie z.B. [Alte 94, Beck 75], die zur Kontinuumsmechanik existieren, wird auf eine detaillierte Beschreibung der einzelnen Gleichungen verzichtet.

## 2.1.3 Einphasenströmung

Henry Darcy<sup>3</sup> [Darc 56] beobachtete, dass in einem homogenen und isotropen porösen Medium in einer quasi eindimensionalen Säule der Volumenfluss des Fluids durch das Medium proportional zu einem hydraulischen Potentialabfall über der Säule ist. Das hydraulische Potential setzt sich dabei aus dem hydrostatischen Druck und dem Gravitationspotential zusammen. Weitere experimentelle Untersuchungen zeigen, dass sich für viele poröse Materialien und Fluide der Proportionalitätsfaktor aus der Permeabilität  $K$ , einer Eigenschaft des Mediums und der Viskosität  $\mu$ , einer Eigenschaft des Fluids zusammensetzen lässt. Das Darcy-Gesetz lautet in differentieller Form in einer Dimension

$$q = -\frac{K}{\mu} \left( \frac{\partial P}{\partial x} - \sin \vartheta \rho g \right), \quad (2.4)$$

<sup>3</sup>Henry Philibert Gaspard Darcy (1803-1858), französischer Ingenieur

Für höhere Raumdimensionen werden die Volumenflussdichte  $q$  und die Schwerebeschleunigung  $g$  Vektoren, die räumliche Ableitung des Drucks  $P$  ein Gradient und die Permeabilität  $K$  ein Tensor zweiter Stufe.

Setzt man die Flussdichte  $q$  in die Massenerhaltungsgleichung ein, so erhält man für inkompressible poröse Medien und Fluide eine (lineare) elliptische Differentialgleichung zweiter Ordnung für den Druck.

Obwohl die Differentialgleichung zunächst rein empirisch aufgestellt wurde, kann sie für einfache Geometrien durch Homogenisierung der Stokes-Gleichungen von der Porenskala hergeleitet werden [Bear 90, Auri 02]. Für kompliziertere Geometrien werden ggf. numerische Löser für die Stokes-Gleichungen verwendet [Narv 10, Manw 02, Heim 09], um die Permeabilität zu bestimmen. Das Mittelungsverfahren für Permeabilitäten in einer Dimension ist vergleichbar mit der Reihenschaltung von Widerständen in Stromkreisen und die korrekte Mittelung erfolgt harmonisch gewichtet. Ferner sind die Gültigkeitsgrenzen der Theorie bekannt. Sie sind durch die Gültigkeit der Stokesgleichungen auf der Porenskala gegeben. Erweiterungen über diese Grenzen hinaus existieren. So gilt die Forchheimer<sup>4</sup>-Gleichung [Forc 01, Lass 08] auch bei größeren Reynoldszahlen<sup>5</sup> und die Brinkman-Gleichungen [Brin 49] für große Poren.

### 2.1.4 Mehrphasenströmung

Im vorhergehenden Kapitel wurde ein Modell für die Einphasenströmung in porösen Medien vorgestellt. Es beschreibt die Strömung *eines* Fluids in einem porösen Medium. In der Natur treten in porösen Medien jedoch häufig *mehrere* Fluide gemeinsam auf. In der Hydrologie und Landwirtschaft sind das vor allem Wasser und Luft und bei der Erdölförderung sind die Fluide Erdöl, Erdgas und je nach Fördertechnik gegebenenfalls Luft und Wasser. Diese beiden Anwendungen bilden den historischen Ausgangspunkt für den Bedarf einer Erweiterung der Theorie für Einphasenströmungen auf mehrere Phasen. Im Laufe der Zeit sind aber eine Vielzahl von weiteren Anwendungen hinzugekommen. In der Altlastensanierung kontaminierter Böden sind die Fluide Wasser, Luft und Öle oder andere flüssige Industrieabfälle, in der CO<sub>2</sub>-Speicherung in alten Öllagerstätten oder Aquiferen Wasser, Öl, Erdgas, Luft und superkritisches CO<sub>2</sub>. In Brennstoffzellen werden ebenfalls poröse Medien eingesetzt, um die Knallgasreaktion kontrolliert ablaufen zu lassen. Dort sind die beiden Fluide Wasserstoffgas H<sub>2</sub> bzw. Sauerstoffgas O<sub>2</sub> und Wasser. Auch Hygieneprodukte können als poröse Medien betrachtet werden, auf eine genauere Spezifizierung der Fluide wird hier jedoch verzichtet.

---

<sup>4</sup>Philipp Forchheimer (1852-1933), österreichischer Hydrologe und Ingenieur

<sup>5</sup>Osborne Reynolds (1842-1912), britischer Physiker

Ansätze zu einer verallgemeinerten Theorie für Mehrphasenströmungen machte der Physiker Buckingham<sup>6</sup> [Buck 07] für die Agrarwirtschaft. Er adaptierte die Darcy-Gleichung derart, dass er die Permeabilität des Mediums vom Wassergehalt abhängig vermutete. Aufgrund der Zunahme der Feuchtigkeit im Boden postulierte er außerdem ein Potential, welches ebenfalls vom Wassergehalt abhängt. Erst ein Vierteljahrhundert später formulierte Richards [Rich 31] jene Konzepte in Form von Differentialgleichungen für die beiden Fluide Wasser und Luft in der ungesättigten Bodenzone. Dabei wird angenommen, dass die Luft keine Masse hat und unendlich mobil ist. Letztere Annahme ist durch die deutlich geringere Viskosität von Luft im Vergleich zur Viskosität von Wasser gerechtfertigt. In der heute bekannten Form mit relativen Permeabilitäten wurde ein "echtes" Zweiphasensystem nach Scheidegger [Sche 57] zuerst von Muskat und Meres [Musk 36] formuliert. Die relativen Permeabilitäten wurden erstmals von Wyckoff und Botset [Wyck 36] gemessen. Das Konzept des makroskopischen Kapillardrucks wurde etwas später von Leverett [Leve 41] hinzugefügt. In dieser Dissertation wird das Modell in dieser Form nach den Initialen der Beitragenden als DBRMMWBL-Modell bezeichnet.

#### 2.1.4.1 Allgemeine mathematische Form

Die Gleichungen des DBRMMWBL-Modells werden nun kurz vorgestellt. Das Modell gilt für inkompressible Fluide in einem inkompressiblen porösen Medium. Wie zuvor werden die Gleichungen weiterhin für eindimensionale Medien formuliert. Die beiden Fluide werden durch die Indizes  $\mathbb{W}$  (Wasser) und  $\mathbb{O}$  (Öl) bezeichnet. Diese Indizes sind beispielhaft gewählt und sollen in keiner Weise Beschränkungen andeuten. In der Literatur wird häufig auch von benetzenden und nicht benetzenden Fluiden gesprochen.

Durch die Inkompressibilität der drei Phasen (eine feste und zwei flüssige) bleibt das Gesamtvolumen erhalten. Gemäß Gleichung (2.3) gilt für die Summe der Sättigungen

$$S_{\mathbb{W}} + S_{\mathbb{O}} = 1. \quad (2.5)$$

Öl und Wasser werden als chemisch inert angenommen, so dass ihre Masse erhalten bleibt. Die Massenerhaltung in differenzieller Form lautet

$$\frac{\partial}{\partial t} (\phi \varrho_{\mathbb{W}} S_{\mathbb{W}}) + \frac{\partial}{\partial x} (\varrho_{\mathbb{W}} q_{\mathbb{W}}) = 0, \quad (2.6a)$$

$$\frac{\partial}{\partial t} (\phi \varrho_{\mathbb{O}} S_{\mathbb{O}}) + \frac{\partial}{\partial x} (\varrho_{\mathbb{O}} q_{\mathbb{O}}) = 0. \quad (2.6b)$$

---

<sup>6</sup>Edgar Buckingham (1867-1940), amerikanischer Physiker



Das Darcy-Gesetz (2.4) wird für mehrere Phasen verallgemeinert, in dem für jede Phase eine relative Permeabilität  $k_{\mathbb{W}}, k_{\mathbb{O}}$  und ein Druck  $P_{\mathbb{W}}, P_{\mathbb{O}}$  definiert werden. Damit lautet das erweiterte Darcy-Gesetz

$$q_{\mathbb{W}} = -\frac{K k_{\mathbb{W}}(\cdot)}{\mu_{\mathbb{W}}} \left( \frac{\partial P_{\mathbb{W}}}{\partial x} - \sin \vartheta \varrho_{\mathbb{W}} g \right), \quad (2.7a)$$

$$q_{\mathbb{O}} = -\frac{K k_{\mathbb{O}}(\cdot)}{\mu_{\mathbb{O}}} \left( \frac{\partial P_{\mathbb{O}}}{\partial x} - \sin \vartheta \varrho_{\mathbb{O}} g \right) \quad (2.7b)$$

für die beiden Fluide. Im Unterschied zur Einphasenströmung mit dem Materialparameter Permeabilität  $K$  des porösen Mediums, sind die relativen Permeabilitäten keine Parameter sondern bestenfalls Parameterfunktionen  $k_{\mathbb{W}}(\cdot), k_{\mathbb{O}}(\cdot)$ , die zumindest vom Volumenanteil bzw. der Sättigung  $S_{\mathbb{W}}, S_{\mathbb{O}}$  des dazugehörigen Fluids abhängen. Die fünf Gleichungen (2.5) (2.6), (2.7) mit den sechs Unbekannten  $S_{\mathbb{W}}, S_{\mathbb{O}}, q_{\mathbb{W}}, q_{\mathbb{O}}, P_{\mathbb{W}}, P_{\mathbb{O}}$  sind nicht geschlossen. Um das System zu schließen, wird ein weiteres Funktional

$$\mathcal{F}(S_{\mathbb{W}}, S_{\mathbb{O}}, q_{\mathbb{W}}, q_{\mathbb{O}}, P_{\mathbb{W}}, P_{\mathbb{O}}, \dots) = 0 \quad (2.8)$$

benötigt.

#### 2.1.4.2 Kapillardrucksättigungsbeziehung

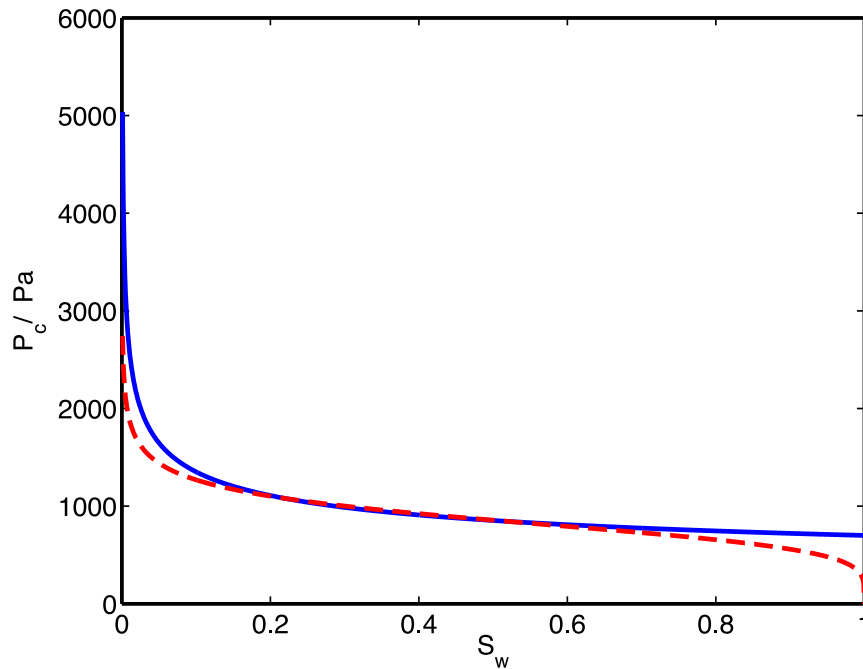
Inspiziert von der Porenskala, auf der Kapillarkräfte die Grenzschicht krümmen und für einen Drucksprung über die Grenzschicht sorgen, wird das System durch eine sogenannte Kapillardrucksättigungsbeziehung  $P_c$

$$\mathcal{F}(S_{\mathbb{W}}, S_{\mathbb{O}}, q_{\mathbb{W}}, q_{\mathbb{O}}, P_{\mathbb{W}}, P_{\mathbb{O}}, \dots) = P_{\mathbb{O}} - P_{\mathbb{W}} - P_c(S_{\mathbb{W}}) = 0 \quad (2.9)$$

geschlossen. Die Druckdifferenz zwischen den Drücken der beiden Fluide hängt also allein von den Sättigungen ab. Man beachte, dass die alleinige Abhängigkeit der Funktion  $P_c(S_{\mathbb{W}})$  von der Wassersättigung  $S_{\mathbb{W}}$  dadurch zustande kommt, dass Gleichung (2.5) bereits berücksichtigt wurde. Völlig äquivalent lässt sich auch  $P_c(S_{\mathbb{O}})$  schreiben. Die Beziehung  $P_c(S_{\mathbb{W}})$  muss experimentell bestimmt werden. Zwei Parametrierungen, deren Parameter an experimentelle Daten angepasst werden, dominieren die Literatur. Brooks und Corey [Broo 64] schlugen die Parametrierung

$$P_c(S_{\mathbb{W}}) = P_e^b S_{\mathbb{W}}^{-\frac{1}{\lambda^b}} \quad (2.10)$$

vor, wobei der Parameter  $P_e^b$  als Eindringdruck und der Parameter  $\lambda^b$  als Porenverteilungsindex bezeichnet werden. Diese Beziehung kann für Kapillarbündelmodelle mit gewissen Ver-



**Abbildung 2.1:** Kapillardrucksättigungsbeziehung nach Brooks und Corey (blau durchgezogene Kurve) und van Genuchten (rot gestrichelte Kurve). Die Parameter sind  $P_e^b = 700$  Pa und  $\lambda^b = 3.5$  bzw.  $\alpha^g = 0.001/\text{Pa}$  und  $n^g = 5$ . Dies sind realistische Werte für Sandschüttungen mit Wasser und Luft.

teilungen der Radien [Dull 92] durch Homogenisierung hergeleitet werden. Poröse Medien, die gut durch Kapillarbündel genähert werden können, lassen sich daher mit dieser Funktion recht gut beschreiben. Eine zweite häufig angetroffene Parametrierung wurde von van Genuchten vorgeschlagen. Sie lautet

$$P_c(S_w) = \frac{1}{\alpha^g} \left[ S_w^{-\frac{1}{m^g}} - 1 \right]^{\frac{1}{n^g}} \quad (2.11)$$

mit den Parametern  $\alpha^g < 0$ ,  $n^g > 1$ ,  $m^g > 0$ . Häufig wird auch eine vereinfachte Variante mit  $m^g = 1 - 1/n^g$  verwendet.

Abbildung 2.1 zeigt die Kapillardrucksättigungsbeziehung nach Brooks und Corey und van Genuchten für Sandschüttungen mit den Fluiden Wasser und Luft. Beide haben eine Singularität bei  $S_w = 0$ . Die Parametrierung nach Brooks und Corey hat einen endlichen Wert  $P_e^b$  bei  $S_w = 1$  wohingegen die Druckdifferenz bei van Genuchten bei  $S_w = 1$  verschwindet. Außerdem zeigt die van-Genuchten-Parametrierung einen Wendepunkt und eine Singularität bei  $S_w = 1$  in der Ableitung  $dP_c/dS_w$ .

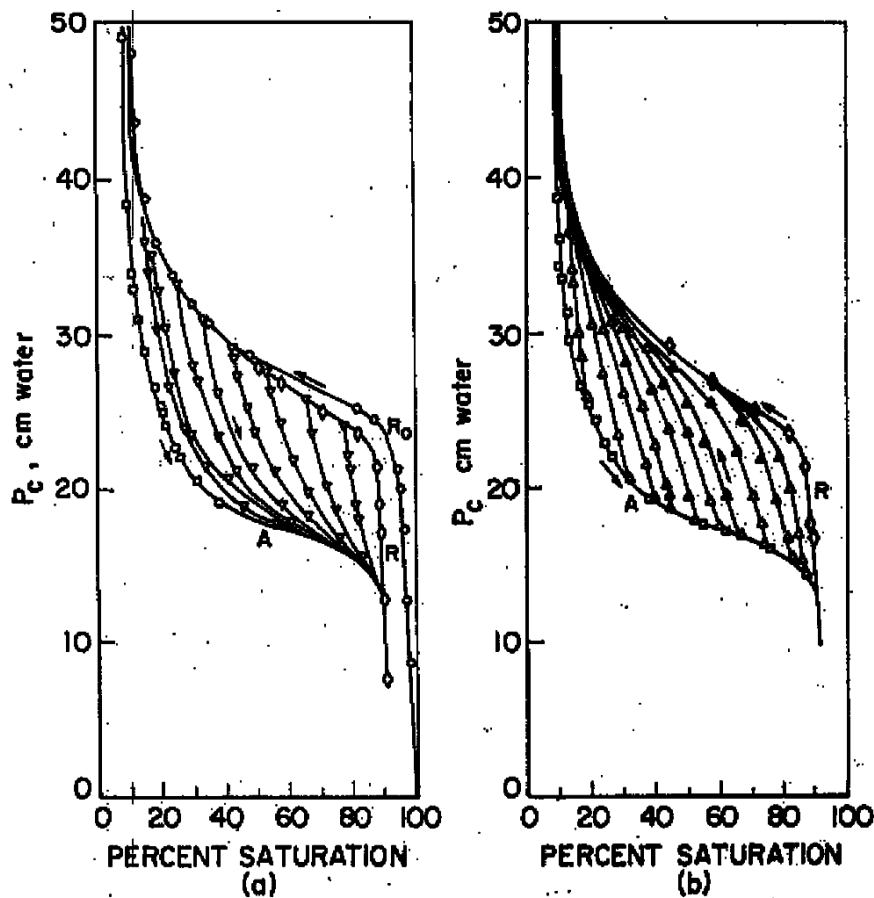


Figure 2.14. (a) Imbibition scanning curves originating from the secondary desaturation curve R (Morrow and Harris, 1965). (b) Desaturation scanning curves originating from the secondary imbibition curve A (Morrow and Harris, 1965).

**Abbildung 2.2:** Hysterese in der Kapillardrucksättigungsbeziehung nach [Morr 65]. Abbildung (a) zeigt die Haupthystereseschleifen, sowie Bewässerungszwischenkurven. Abbildung (b) zeigt die Haupthystereseschleifen und Entwässerungszwischenkurven.

**Schwierigkeiten:** Die Kapillardrucksättigungsbeziehung und ihre Parametrierungen nehmen an, dass die Sättigung die einzige Unbekannte ist, die die Druckdifferenz zwischen den Drücken festlegt. Für das Kapillarbündelmodell [Dull 92] bei stationären Sättigungen mit vollständiger Benetzung ist dies auch der Fall. Versucht man jedoch diese Kurve im Experiment für echte poröse Medien zu messen, so stellt man fest, dass eine Vielzahl von anderen Faktoren die Druckdifferenz beeinflussen und man daher in unterschiedlichen Experimenten unterschiedliche Kapillardrucksättigungsbeziehungen misst.

Die am häufigsten beschriebenen Phänomene sind Hysterese bezüglich Be- und Entwässerung [Morr 65, Park 89, Lenh 91, Papa 08] und dynamische Effekte [Calv 91, Hass 02, Voge 08, Dahl 05]. Es wird jeweils ein Beispiel für Hysterese und eines für dynamische Effekte gegeben.

Abbildung 2.2 zeigt Messungen der Kapillardrucksättigungsbeziehungen [Morr 65]. Das Ex-

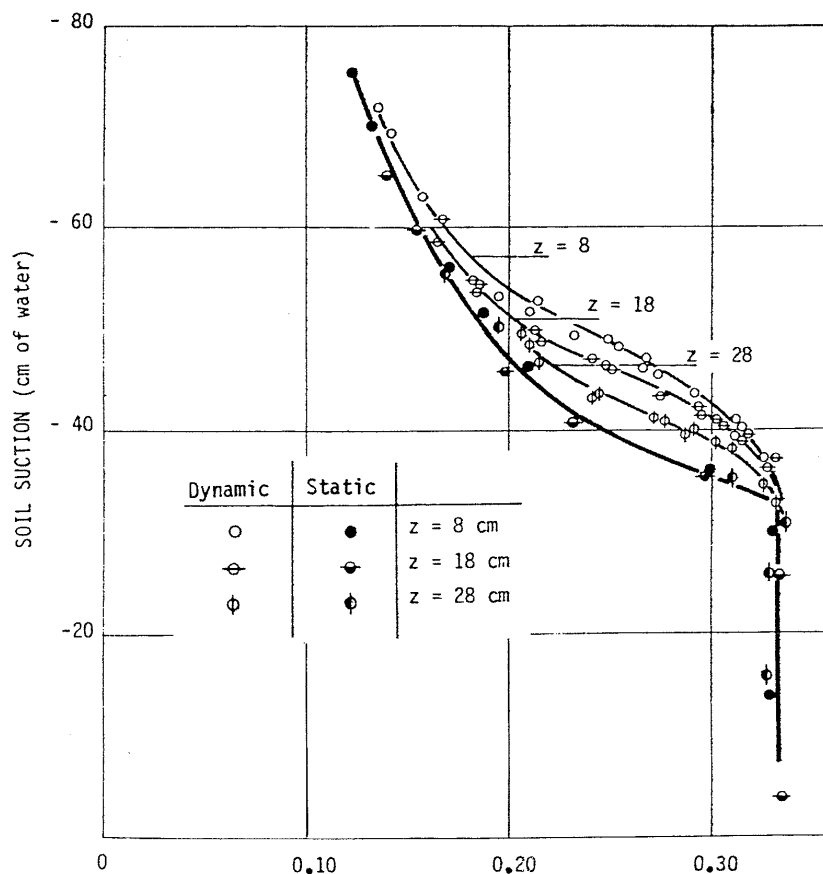


Fig. 7. Capillary pressure head-water content curves in vertical drainage experiments of Vachaud et al. (1972).

**Abbildung 2.3:** Dynamische Effekte in der Kapillardrucksättigungsbeziehung nach [Vach 72]. Gezeigt wird die Kapillardrucksättigungsbeziehung gegen den Volumenanteil  $\phi S_w$  an drei Positionen in einer Säule eines sandigen Bodens für eine statische und eine dynamische Entwässerungen.

periment wird mit einer vollständig wassergesättigten Probe begonnen. Dann wird der Druck des nicht benetzenden Fluids abgesenkt, so dass der Wassergehalt abnimmt. Die gemessene Kapillardrucksättigungsbeziehung ist in Abbildung 2.2a durch  $R_0$  gekennzeichnet. Wenn die minimale mögliche Wassersättigung erreicht wird (siehe auch Kapitel 2.1.4.4), wird der Druck des nicht benetzenden Fluids wieder abgesenkt, so dass der Wassergehalt erneut zunimmt. Die gemessene Kurve ist in der Abbildung 2.2 durch A gekennzeichnet. Die Wassersättigung erreicht allerdings auch bei geringen Drücken nicht mehr  $S_w = 1$ . Wenn sich die Sättigung nicht mehr ändert, wird abermals der Druck erhöht bis sich die Sättigung nicht mehr ändert. Diese Kurve ist durch R bezeichnet. So genannte Bewässerungszwischenkurven werden gemessen, wenn die Kurve R nicht bis zum Ende "abgelaufen" wird, sondern bei größeren Sättigungen der Druck wieder abgesenkt wird. So genannte Entwässerungszwischenkurven werden gemessen, wenn die Kurve A nicht bis zum Ende abgelaufen wird und der Druck bei kleineren Sättigungen bereits wieder erhöht wird. Solche Kurven werden in Abbildung 2.2b gezeigt. Die Kapillardrucksättigungsbeziehung ist also nicht nur eine Eigenschaft des

porösen Mediums und der beiden Fluide sondern auch der Prozessgeschichte.

Abbildung 2.3 zeigt weitere Messungen der Kapillardrucksättigungsbeziehung [Vach 72]. Eine Säule gefüllt mit einem sandigen Boden, wird durch Absenken des Wasserdrucks am unteren Ende entwässert und am oberen Ende kann Luft nachfließen. Gemessen werden die Drücke und die Sättigungen an drei unterschiedlichen Stellen. Das Experiment wurde zweimal durchgeführt. Beim ersten Mal wurde der Druck des Wassers in kleinen Intervallen langsam abgesenkt und beim zweiten Mal wurde er in einem großen Intervall schnell abgesenkt. Die gemessenen Kurven für das langsam durchgeführte Experiment sind an allen drei Stellen identisch. Die Kurven für das schnell durchgeführte Experiment unterscheiden sich sowohl untereinander als auch zum langsam durchgeführten Experiment. Die Kapillardrucksättigungsbeziehung ist also nicht nur eine Eigenschaft des porösen Mediums und der beiden Fluide sondern auch der Geschwindigkeit des Prozesses.

### 2.1.4.3 Relative Permeabilitätsättigungsbeziehung

Neben der expliziten Form des Funktionals (2.8) bzw. der Kapillardrucksättigungsbeziehung  $P_c(S_w)$  müssen auch die in den Gleichungen (2.7) abstrakt eingeführten relativen Permeabilitäten genauer spezifiziert werden. Auch hier werden in der Literatur vor allem Parametrierungen nach Brooks und Corey und van Genuchten verwendet. Die Kapillardrucksättigungskurven können als Annahmen über die Porenradienverteilungen in einfachen Porenstrukturmodellen, wie dem Kapillarbündelmodell gelesen werden. Diese Annahmen bestimmen auch die Form der relativen Permeabilitäten, wenn z.B. von einer Hagen-Poiseuille-Strömung im Kapillarbündelmodell ausgegangen wird. Dabei wird implizit angenommen, dass jede Kapillare entweder mit Wasser oder mit Öl gefüllt ist und die Fluide nicht direkt miteinander wechselwirken.

Die Parametrierung nach Brooks und Corey [Broo 64] lautet

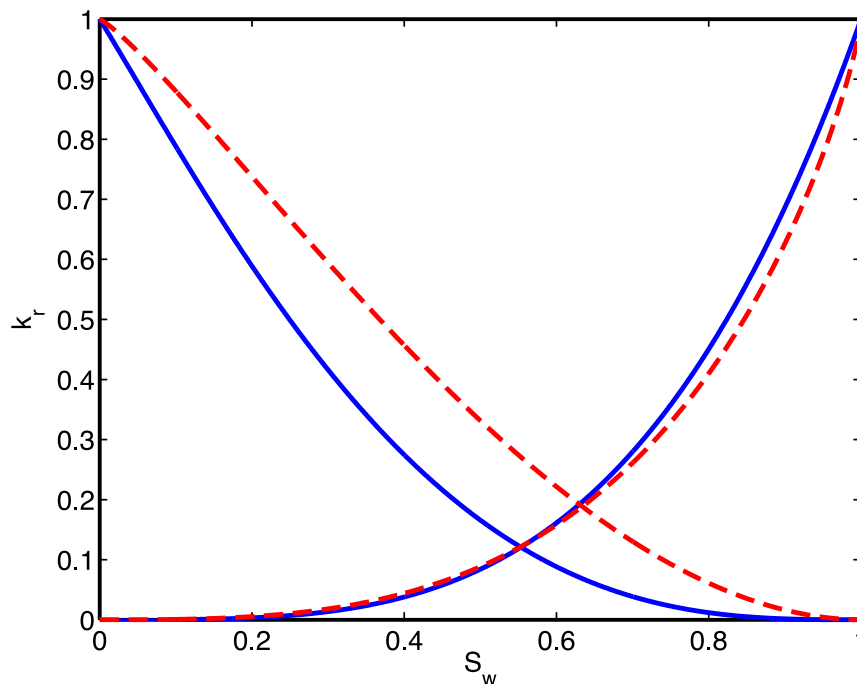
$$k_w(S_w) = S_w^{\frac{2+3\lambda^b}{\lambda^b}}, \quad (2.12a)$$

$$k_o(S_w) = (1 - S_w)^2 \left( 1 - S_w^{\frac{2+\lambda^b}{\lambda^b}} \right). \quad (2.12b)$$

Die Parametrierung nach van Genuchten [Genu 80] lautet

$$k_w(S_w) = \sqrt{S_w} \left[ 1 - \left( 1 - S_w^{\frac{1}{m^g}} \right)^{m^g} \right]^2, \quad (2.13a)$$

$$k_o(S_w) = (1 - S_w)^{\frac{1}{3}} \left( 1 - S_w^{\frac{1}{m^g}} \right)^{2m^g}. \quad (2.13b)$$



**Abbildung 2.4:** Relative Permeabilitätsättigungsbeziehungen nach Brooks und Corey (blau durchgezogene Kurven) und van Genuchten (rot gestrichelte Kurven). Die Parameter sind  $\lambda^b = 3.5$  bzw.  $m^g = 0.8$ . Dies sind realistische Werte für Sandschüttungen mit Wasser und Luft.

Abbildung 2.4 zeigt relative Permeabilitätsättigungsbeziehung nach Brooks und Corey und van Genuchten für Sandschüttungen mit den Fluiden Wasser und Luft. Sowohl für Wasser (ansteigende Kurven) als auch für Luft (fallende Kurven) ist die Permeabilität für kleine Sättigungen des jeweiligen Fluids unterdrückt.

**Schwierigkeiten:** Bei den Parametrierungen der relativen Permeabilitätsättigungsbeziehung wird angenommen, dass die Sättigung die einzige Unbekannte ist. Da im Kapillarbündelmodell [Dull 92] die relativen Permeabilitäten für stationäre Sättigungen direkt aus der Kapillardrucksättigungsbeziehung berechnet werden können, treten die dort diskutierten Schwierigkeiten hier ebenso auf. Allerdings zeigen auch hier Experimente an realen porösen Medien, dass weitere Faktoren Einfluss auf die Form der relativen Permeabilität haben. Dazu gehören Hysterese, Flusstärke und Viskositätsverhältnis. Es werden jeweils Beispiele dazu in den Abbildungen 2.5 und 2.6 gezeigt.

Abbildung 2.5 zeigt Ergebnisse eines Experiments zur Bestimmung von relativen Permeabilitäten in einem Bereasandstein für Wasser und Öl [Dull 92] Fig. 5.80. Die relative Permeabilität einer Phase ist dabei größer, wenn die Sättigung der Phase zunimmt als wenn sie abnimmt. Außerdem ist die Hystereseschleife für Öl deutlich stärker ausgeprägt. Die ge-

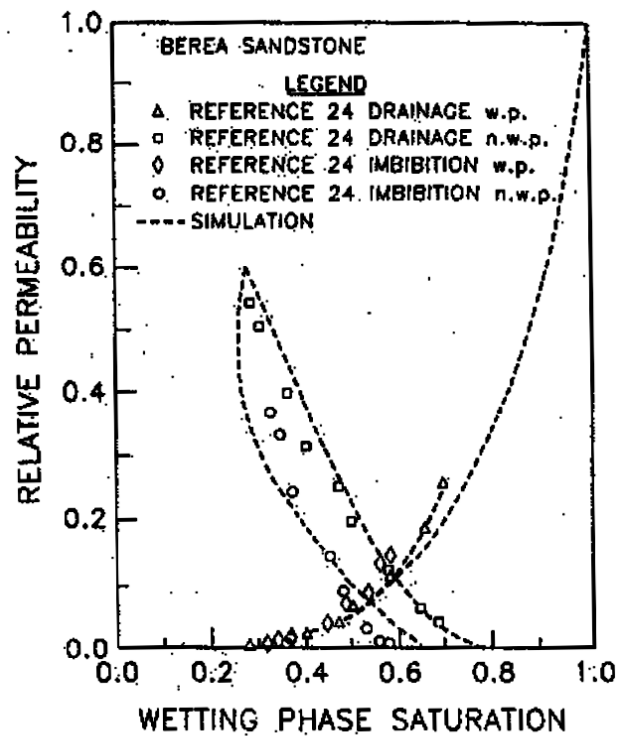


Figure 5.80. Comparison of predicted and measured oil/water relative permeability curves in Berea sandstone (Kantzas and Chatzis, 1988) (Shankar and Dullien, 1979).

**Abbildung 2.5:** Hysterese in den relativen Permeabilitäten für einen Berea Sandstein aus [Dull 92] Fig. 5.80.

strichelten Linien aus einer Simulation sollen hier nicht weiter berücksichtigt und diskutiert werden.

Abbildung 2.6 zeigt dynamische Effekte und den Einfluss des Viskositätsverhältnisses auf relative Permeabilitäten aus [Avra 95] für ein Mikroporennetzmodell aus Glas. Im Experiment wurden nur Ausschnitte aus den möglichen Wassersättigungsintervallen realisiert. Die Intervallgrenzen der Ausschnitte unterscheiden sich außerdem. Dennoch ist klar zu sehen, dass für größere Volumenströme die relative Permeabilität für beide Phasen zunimmt. Die Zunahme kann nicht einer Zunahme der absoluten Permeabilität zugerechnet werden, da der Einfluss nichtlinear ist. Auch das Verhältnis der Viskositäten beider Fluide hat einen deutlichen Einfluss auf die Form der relativen Permeabilitäten. Bei den gewählten Fluiden und Strömungen fällt auf, dass der Einfluss der Strömung bei der relativen Permeabilität für Wasser nahezu für eine Parallelverschiebung der Kurven sorgt, wohingegen bei der relativen Permeabilität für Öl die Steigung der Kurven verändert wird.

Wie anhand der Beispiele gezeigt wurde, sind die relativen Permeabilitäten nicht nur eine Parameterfunktion der Sättigung sondern hängen direkt vom Prozess ab. Auch das Verhältnis der Viskositäten der beiden Fluide hat einen Einfluss auf die gemessenen relativen

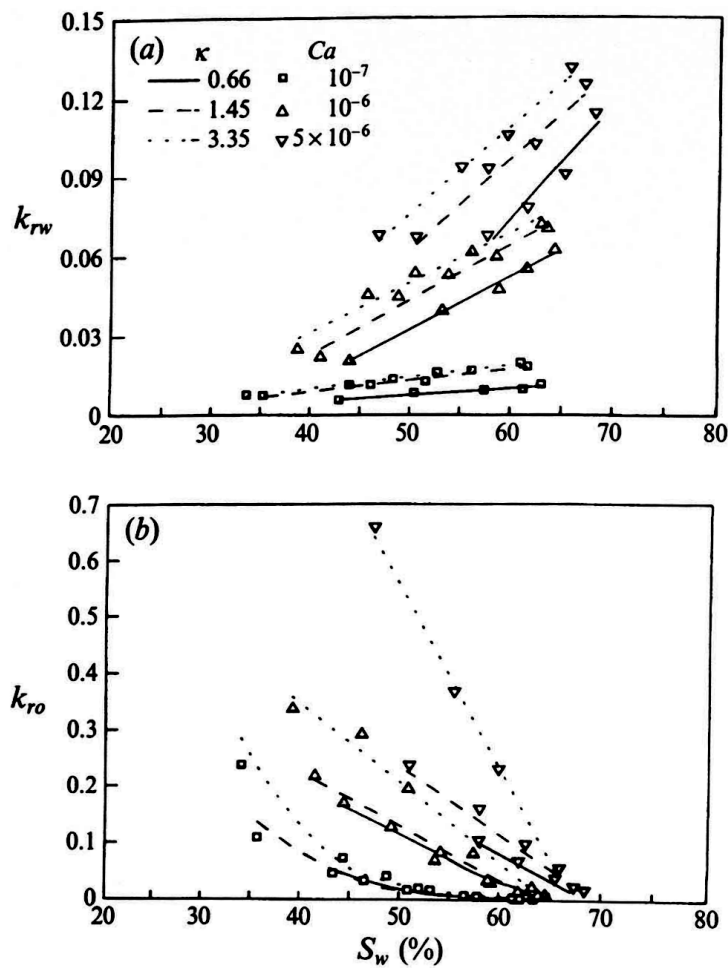


FIGURE 10. (a) Dependence of the 'steady-state' relative permeability to water,  $k_{rw}$ , on the viscosity ratio,  $\kappa$ , for three different Ca values. (b) Dependence of the 'steady-state' relative permeability to oil,  $k_{ro}$ , on the viscosity ratio for three different Ca values.

**Abbildung 2.6:** Dynamische Effekte und Einfluss des Viskositätsverhältnis auf relative Permeabilitäten aus [Avra 95] für ein Mikroporennetzmodell aus Glas. Gezeigt werden relative Permeabilitäten für Wasser in Abbildung (a) und Öl in Abbildung (b) für drei unterschiedliche Viskositätsverhältnisse  $\kappa = \mu_o/\mu_w$  und drei unterschiedliche Volumenströme  $Ca \propto q_w$ .

Permeabilitäten, so dass daran gezweifelt werden muss, ob die Erweiterung des Darcy'schen Gesetzes auf mehrere Phasen zulässig ist.

#### 2.1.4.4 Residuale und effektive Sättigungen

Bisher wurde in den Differentialgleichungen und den Parameterfunktionen die Sättigungen  $S_w, S_o \in [0, 1]$  als Unbekannte verwendet. Allerdings zeigen Experimente, dass ein wassergesättigtes poröses Medium durch hydrodynamische Prozesse zumindest auf einer kurzen Zeitskala nicht vollständig entwässert werden kann; vielmehr bleibt immobiles residuales Wasser zurück. Typische Werte sind dabei von einigen wenigen Prozent bis hin zu Sät-



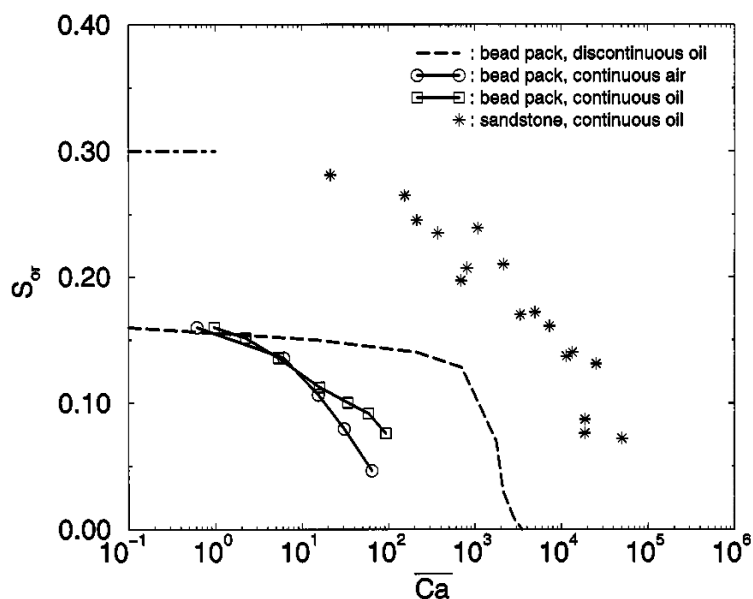


FIG. 2. Same as Fig. 1 but plotted against the macroscopic capillary number  $\overline{Ca} = \mu_w Q / (P_b k l)$  from Eq. (19). Note that the breakpoint for continuous mode displacement occurs around  $\overline{Ca} \approx 1$ .

**Abbildung 2.7:** Strömungsabhängige residuale Sättigungen nach [Anto 99]. Aufgetragen ist die residuale Ölsättigung  $S_{Or}$  über die makroskopische Kapillarzahl  $\overline{Ca} = \mu_{Wq} / P_e^b KL$ , wobei  $L$  eine charakteristische Länge des Systems ist.

tigungen von 20-30%. Ebenso kann ein ölgesättigtes Medium nicht vollständig bewässert werden. In den traditionellen Ansätzen wird dies durch Ersetzen der Wassersättigung durch eine effektive Wassersättigung in den Gleichungen (2.5)-(2.13) berücksichtigt. Die effektive Wassersättigung ist definiert durch

$$S_e = \frac{S_W - S_{Wr}}{1 - S_{Wr} - S_{Or}}, \quad (2.14)$$

wobei  $S_{Wr}$ ,  $S_{Or}$  residuale Sättigungen für Wasser und Öl bezeichnen.

**Schwierigkeiten:** Wie bei den relativen Permeabilitäten und der Kapillardrucksättigungsbeziehung zeigen jedoch auch hier wieder Experimente [Geel 97], dass die residualen Sättigungen keine festen Parameter sind [Morr 88]. Sie hängen vielmehr vom Prozess ab. Dabei spielt der vorherrschende Volumenstrom eine dominante Rolle, wie anhand einiger Beispiele gezeigt wird.

Abbildung 2.7 zeigt den Einfluss der makroskopischen Kapillarzahl auf die residuale Ölsättigung  $S_{Or}$  nach [Anto 99]. Die unterschiedlichen Kapillarzahlen werden bei gleichem porösen Medium und gleichen Fluiden durch eine Veränderung des Flusses erreicht. Es ist deutlich

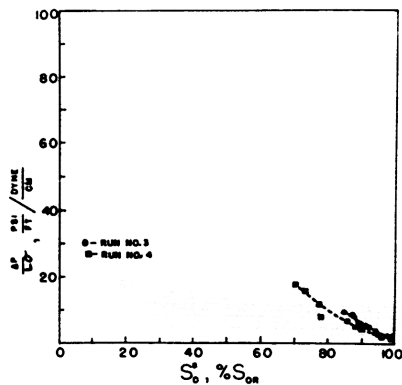


FIG. 2—THE AMOUNT OF RESIDUAL OIL REMAINING IN BEREA SANDSTONE AFTER WATERFLOODS AT VARIOUS PRESSURE GRADIENTS (INITIAL  $S_{or}$  AT ORDINARY, SLOW RATES = 40 TO 44 PERCENT).

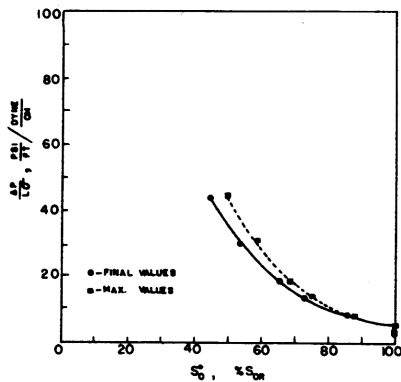


FIG. 3 — THE RELATIONSHIP BETWEEN PRESSURE GRADIENT AND OIL SATURATION IN BEREA SANDSTONE SATURATED WITH OIL AND BRINE CONTAINING 20-PERCENT ISOPROPYL ALCOHOL.

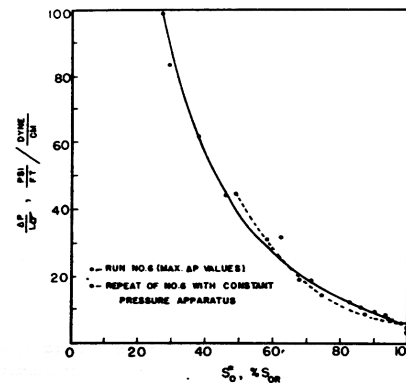


FIG. 4 — THE QUANTITY OF RESIDUAL OIL REMAINING IN BEREA SANDSTONE AT VARIOUS COMBINATIONS OF INTERFACIAL TENSION PRESSURE GRADIENTS: COMPARISON OF DISPLACEMENTS CONDUCTED AT INCREASED RATE AND INCREASED PRESSURE.

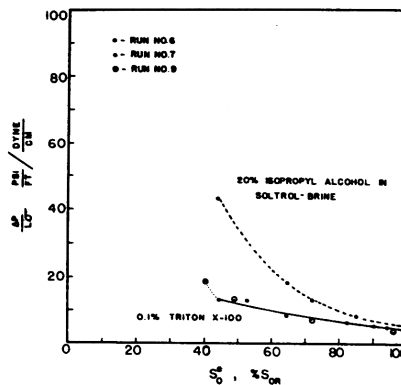


FIG. 5 — THE QUANTITY OF RESIDUAL OIL REMAINING IN BEREA SANDSTONE AT VARIOUS COMBINATIONS OF INTERFACIAL TENSION AND APPLIED PRESSURE.

Abbildung 2.8: Strömungsabhängige residuale Sättigungen nach [Tab. 69]. Aufgetragen ist der Druckabfall über das Absinken der residualen Ölsättigung  $S_{Or}$  im Vergleich zur residualen Ölsättigung bei geringen Volumenströmen.

zu sehen, wie die residuale Ölsättigung bei zunehmendem Fluss abnimmt. In der Abbildung werden Experimente an einem Sandstein für unterschiedliche Größenordnungen von Flüssen durchgeführt.

Abbildung 2.8 zeigt das identische Phänomen in einem anderen Experiment [Tab. 69]. Die Darstellung zeigt den Druckabfall über das Absinken der residualen Ölsättigung  $S_{Or}$  im Vergleich zur residualen Ölsättigung bei geringen Volumenströmen. Auch hier sieht man, wie die residuale Ölsättigung bei zunehmendem Druckgradienten und damit zunehmendem Volumenstrom abnimmt.

#### 2.1.4.5 Skalenwechsel

Ein weiteres Problem, welches hier nur allgemein angesprochen werden soll, stellen Skalenwechsel dar. Es ist bisher nicht gelungen, die Parameterfunktionen für relative Permeabilitäten und die Kapillardrucksättigungsbeziehung durch geeignete Mittelungsverfahren aus Beschreibungen auf Porenskala für "echte" poröse Medien zu bestimmen. Doch auch auf der makroskopischen Skala sind Übergänge von z.B. Labor auf Feldskala ungelöst. Ein geeignetes allgemeines Mittelungsverfahren für relative Permeabilitäten und die Kapillardrucksättigungsbeziehung gibt es nicht. Dies ist neben der Verwendung von Bohrproben zur Charakterisierung von Feldverteilungen auch für die Numerik von wichtiger Bedeutung [Efen 02]. Der Übergang zwischen unterschiedlichen Gitterauflösungen ist nicht allgemein verstanden, da kein physikalisch motiviertes Mittelungsverfahren existiert.

## 2.2 Mathematik partieller Differentialgleichungen

Die Gleichungen der Kontinuumsmechanik sind partielle Differentialgleichungen, die häufig stark gekoppelt und nichtlinear sind. Im Gegensatz zu gewöhnlichen Differentialgleichungen, für die ein mächtiger mathematischer Apparat mit Sätzen über Existenz von Lösungen bzw. Wohlgestellttheit von Problemen vorliegt - man denke an die Faustregel pro Ordnung eine Anfangs- bzw. Randbedingung - liegt keine allgemeine Theorie für Systeme nichtlinearer partieller Differentialgleichungen vor. So ist zum Beispiel eine vollständige Theorie zur Lösung der Navier-Stokes-Gleichungen eines der sieben Millennium-Probleme<sup>7</sup>. Schon die Klassifizierung partieller Differentialgleichung fällt schwer und ist nicht eindeutig. Häufig befruchten sich numerische und analytische Ansätze gegenseitig. Dies spiegelt sich auch in dieser Dissertation wieder, so dass in Teil II analytische und quasianalytische Lösungen diskutiert werden und in Teil III Algorithmen zur numerischen Lösung von Anfangs- und Randwertproblemen vorgestellt werden. Natürlich kann hier keine umfassende Einführung dazu gegeben werden. Es sollen jedoch einige wichtige Begriffe, die später Verwendung finden, geklärt und Verweise auf entsprechende Literatur gegeben werden.

### 2.2.1 Schwache Ableitung und schwache Lösungen

In nichtlinearen partiellen Differentialgleichungen können sich auch für stetig differenzierbare Anfangs- und Randbedingungen unstetige Lösungen entwickeln [LeVe 07, LeFl 02]. Unstetige Lösungen sind aber nicht differenzierbar und damit keine klassische Lösung der Differentialgleichung. Der Übergang zur schwachen Formulierung der Differentialgleichung ist eine Möglichkeit, dieses Problem zu beheben [LeVe 07]. Allerdings verliert man dann unter Umständen die Eindeutigkeit der Lösung und Zusatzbedingungen werden nötig. Der mathematische Apparat ist Teil der Funktionalanalysis und wurde von Sobolew<sup>8</sup> entscheidend vorangebracht. An dieser Stelle soll nur kurz das Konzept vorgestellt werden.

Es sei eine partielle Differentialgleichung

$$\frac{\partial u}{\partial t} + \frac{\partial f(u)}{\partial x} = 0 \quad (2.15)$$

mit  $u(x, t) : \mathbb{R} \times \mathbb{R}_+ \rightarrow \mathbb{R}^n$  und  $f(u) : \mathbb{R}^n \rightarrow \mathbb{R}^n$  gegeben. Die dazugehörige schwache

<sup>7</sup><http://www.claymath.org/millennium/>

<sup>8</sup>Sergei Lwowitsch Sobolew (1908-1989), russischer Mathematiker

Formulierung lautet

$$\int_0^{\infty} \int_{-\infty}^{\infty} \left[ u \frac{\partial \psi}{\partial t} + f(u) \frac{\partial \psi}{\partial x} \right] dx dt = 0, \quad (2.16)$$

wobei  $\psi$  eine stetig differenzierbare Funktion  $\psi(x, t) : \mathbb{R} \times \mathbb{R}_+ \rightarrow \mathbb{R}^n$  mit kompaktem Träger sei. Eine Funktion  $u(x, t)$  heißt schwache Lösung zu Gleichung (2.15), wenn Gleichung (2.16) für jede beliebige stetig differenzierbare Funktion  $\psi(x, t) : \mathbb{R} \times \mathbb{R}_+ \rightarrow \mathbb{R}^n$  mit kompaktem Träger gilt.

Für stetig differenzierbare  $u(x, t)$  sind beide Formulierungen identisch. Durch partielle Integration kann man dann aufgrund des kompakten Trägers von  $\psi$  die Differentialoperatoren auf  $u$  und  $f$  wirken lassen und erhält die Identität.

### 2.2.2 Rand- und Anfangswertprobleme

In dieser Dissertation werden Funktionale für Sättigungsfelder, Geschwindigkeitsfelder und Druckfelder aufgestellt, die von Raum  $x$  und Zeit  $t$  abhängen. Es werden Lösungen für Gebiete in einer Raumdimension gesucht. Sei also  $\mathcal{F}(\cdot)$  ein Funktional der Felder  $u$  sowie deren partiellen Ableitungen  $\partial u / \partial t$ ,  $\partial u / \partial x$ ,  $\partial^2 u / \partial t^2$ ,  $\partial^2 u / \partial x^2$ ,  $\dots$ , dann sind Lösungen für ein Zeitintervall  $[t_0, t_e] \in \mathbb{R}_+$  und ein räumliches Intervall  $[x_\ell, x_r] \in \mathbb{R}$  gesucht. Es werden also Lösungen für  $\mathcal{F}(\cdot)$  auf dem Gebiet  $\mathcal{D} = [t_0, t_e] \times [x_\ell, x_r] \in \mathbb{R}_+ \times \mathbb{R}$  gesucht. Das Problem ist jedoch so noch nicht vollständig gestellt. Es sind zusätzliche Bedingungen auf dem Rand  $\partial \mathcal{D}$  nötig. Angaben auf  $\partial \mathcal{D} \cap \{(t, x) | t = t_0\}$  werden dabei als Anfangswerte und  $\partial \mathcal{D} \cap \{(t, x) | x = x_\ell \vee x = x_r\}$  als Randwerte bezeichnet. Für Anfangswertprobleme von gewöhnlichen Differentialgleichungen liefert der Existenzsatz von Peano<sup>9</sup> [Rann 06, Rann 09, Rann 08a, Rann 08b] Aussagen über die Wohlgestelltheit eines Problems. Doch schon für Randwertprobleme nichtlinearer gewöhnlicher Differentialgleichungen kann kein allgemeiner Existenzsatz mehr angegeben werden. Für partielle Differentialgleichungen ist die Situation nicht besser. Für einige Klassen (siehe nächstes Kapitel) können Bedingungen für die Wohlgestelltheit eines Problems formuliert werden. Häufig sind Differentialgleichungssysteme jedoch nicht einer speziellen Klasse zuzuordnen. Eine physikalische Intuition der Gleichungen und der Phänomene in der Natur, die sie beschreiben sollen, kann helfen, zu entscheiden, welche Anfangs- und Randbedingungen gestellt werden müssen.

Als Anfangswerte werden gewöhnlich die Werte der Felder im gesamten räumlichen Gebiet

$$u(t_0, x) = u_0(x) \quad (2.17)$$

<sup>9</sup>Giuseppe Peano (1858-1932), italienischer Mathematiker

angegeben.

Randwerte werden in unterschiedliche Klassen unterteilt. Als Dirichlet<sup>10</sup>-Randbedingungen bezeichnet man Randbedingungen, bei denen der Funktionswert auf dem Rand durch

$$u(t, x_\ell) = u_\ell(t), \quad (2.18a)$$

$$u(t, x_r) = u_r(t) \quad (2.18b)$$

angegeben wird. Als Neumann<sup>11</sup>-Randbedingungen bezeichnet man Randbedingungen, bei denen die räumliche Ableitung am Rand durch

$$\left. \frac{\partial u(x, t)}{\partial x} \right|_{x=x_\ell} = n_\ell(t), \quad (2.19a)$$

$$\left. \frac{\partial u(x, t)}{\partial x} \right|_{x=x_r} = n_r(t) \quad (2.19b)$$

angegeben wird. Für partielle Differentialgleichungen von Erhaltungssätzen wie z.B. (2.15) spielen Flussrandbedingungen noch eine wichtige Rolle. Sie lauten

$$f(u(t, x_\ell)) = f_\ell(t), \quad (2.20a)$$

$$f(u(t, x_r)) = f_r(t). \quad (2.20b)$$

### 2.2.3 Klassifizierung

Die Klassifizierung von Systemen nichtlinearer partieller Differentialgleichungen ist nicht in voller Allgemeinheit möglich. Drei Eigenschaften werden hier zunächst klassifiziert, wobei weitere Unterklassen möglich sind. Als Ordnung einer Differentialgleichung, auch einer partiellen Differentialgleichung, wird der Grad der höchsten Ableitung bezeichnet, welcher in der Gleichung auftritt. In Systemen werden hier die Ordnungen aller Gleichungen angegeben. Des Weiteren werden lineare partielle Differentialgleichungen zweiter Ordnung in elliptische, parabolische und hyperbolische Gleichungen eingeteilt. Diese Klassifizierung wird auch auf nichtlineare Differentialgleichungen und nichtlineare Differentialgleichungssysteme übertragen. Für nichtlineare Differentialgleichungssysteme kann allerdings die Klassifizierung von der Lösung abhängen. Außerdem wird noch der Grad der Linearität unterschieden.

<sup>10</sup>Johann Peter Gustav Lejeune Dirichlet (1805-1859), deutscher Mathematiker

<sup>11</sup>Carl Gottfried Neumann (1832-1925), deutscher Mathematiker

### 2.2.3.1 Quasi lineare partielle Differentialgleichungen zweiter Ordnung

Man betrachte nach [Munz 05] eine partielle Differentialgleichung zweiter Ordnung der Form

$$a \frac{\partial^2 u}{\partial x^2} + b \frac{\partial^2 u}{\partial x \partial t} + c \frac{\partial^2 u}{\partial t^2} = Q. \quad (2.21)$$

Dabei treten in  $Q = Q(x, t, u, \partial_x u, \partial_t u)$  keine Ableitungen zweiter Ordnung auf. Sind die Koeffizienten  $a, b, c \in \mathbb{R}$  unabhängig von Raum und Zeit, spricht man von linearen partiellen Differentialgleichungen mit konstanten Koeffizienten. Sind Parameter von Raum und Zeit abhängig, also  $a(x, t), b(x, t), c(x, t) \in \mathbb{R}$ , spricht man von linearen partiellen Differentialgleichungen. Sind die Parameter von Raum, Zeit und der Unbekannten selbst abhängig, also  $a(x, t, u), b(x, t, u), c(x, t, u) \in \mathbb{R}$ , spricht man von quasi linearen partiellen Differentialgleichungen.

Eine partielle Differentialgleichung heißt am Ort  $x_0$  zur Zeit  $t_0$  mit der Lösung  $u_0$

**elliptisch**, wenn  $b^2 - 4ac < 0$  gilt,

**parabolisch**, wenn  $b^2 - 4ac = 0$  gilt und

**hyperbolisch**, wenn  $b^2 - 4ac > 0$  gilt.

Der Typ einer Differentialgleichung kann sich demnach mit Raum und Zeit, sowie mit der Lösung verändern. Eine elliptische Differentialgleichung ist z.B. die Poisson-Gleichung aus der Elektrostatik, eine parabolische Differentialgleichung ist die Fick'sche Diffusionsgleichung und eine hyperbolische Differentialgleichung die lineare Wellengleichung. Die Bezeichnung geschieht nach den entsprechenden Kurven der Kegelschnitte mit der Gleichung

$$ax^2 + bxy + cy^2 = Q(x, y). \quad (2.22)$$

Die Gleichungen einer Klasse haben ähnliche Eigenschaften, vor allem auch bzgl. der Anforderungen an ein wohlgestelltes Problem.

### 2.2.3.2 Quasi lineare Systeme partieller Differentialgleichungen erster Ordnung

Nach [Hack 86] wird ein System partieller Differentialgleichungen wie folgt klassifiziert. Das System partieller Differentialgleichungen sei als

$$\frac{\partial u}{\partial t} + A(x, t, u) \frac{\partial u}{\partial x} = Q(x, t, u) \quad (2.23)$$

gegeben. Dabei sei  $A$  eine Matrixfunktion. Bei Erhaltungssätzen ist  $A$  die Jacobi<sup>12</sup>-Matrix. Das partielle Differentialgleichungssystem heißt am Ort  $x_0$  zur Zeit  $t_0$  mit dem Lösung  $u_0$

**streng hyperbolisch**, wenn  $A$  reell diagonalisierbar ist und

**elliptisch**, wenn  $A$  diagonalisierbar ist und alle Eigenwerte von  $A$  nicht reell sind.

Damit sind einzelne reelle partielle Differentialgleichungen erster Ordnung stets hyperbolisch.

### 2.2.4 Riemann Problem

Als Riemann<sup>13</sup>-Problem wird ein spezielles Anfangs- und Randwertproblem bezeichnet. Es lautet

$$u(x, t_0) = \begin{cases} u_\ell & \text{für } x < 0 \\ u_r & \text{für } x > 0 \end{cases}, \quad (2.24a)$$

$$u(-\infty, t) = u_\ell, \quad u(\infty, t) = u_r. \quad (2.24b)$$

Das Gebiet ist also unendlich groß und die Anfangsdaten sind konstant bis auf eine Sprungstelle bei  $x = 0$ . Riemann-Probleme sind von großer Bedeutung für hyperbolische Differentialgleichungen und Differentialgleichungssysteme, da sie analytisch bzw. quasianalytisch gelöst werden können. Sie können als Baustein für so genannte Godunov-Löser (siehe Kapitel 13) verwendet werden, ermöglichen aber auch Aussagen über die Wohlgestellttheit eines Problems.

### 2.2.5 Methode der Charakteristiken

Mit Hilfe der Methode der Charakteristiken können quasi lineare, partielle Differentialgleichungen erster Ordnung, also Gleichungen vom Typ

$$a(x, t, u) \frac{\partial u}{\partial t} + b(x, t, u) \frac{\partial u}{\partial x} = c(x, t, u) \quad (2.25)$$

auf eine Schar von gewöhnlichen Differentialgleichungen zurückgeführt werden. Dazu parametrisiert man Raum  $x = x(\tau, \xi)$  und Zeit  $t = t(\tau, \xi)$  durch zwei neue Koordinaten  $\tau$  und  $\xi$ .

<sup>12</sup>Carl Gustav Jacob Jacobi (1804-1851), deutscher Mathematiker

<sup>13</sup>Bernhard Riemann (1826-1866), deutscher Mathematiker



Das gesuchte Feld  $u(t, x) = u(t(\tau, \xi), x(\tau, \xi))$  wird nach  $\tau$  abgeleitet, so dass man mit Hilfe der Kettenregel

$$\frac{du}{d\tau} = \frac{\partial u}{\partial t} \frac{dt}{d\tau} + \frac{\partial u}{\partial x} \frac{dx}{d\tau} \quad (2.26)$$

erhält. Durch einen Vergleich der Koeffizienten der Gleichungen (2.25) und (2.26) erhält man drei gekoppelte gewöhnliche Differentialgleichungen

$$\frac{dt}{d\tau} = a(x, t, u), \quad (2.27a)$$

$$\frac{dx}{d\tau} = b(x, t, u), \quad (2.27b)$$

$$\frac{du}{d\tau} = c(x, t, u). \quad (2.27c)$$

Ein Anfangswertproblem mit  $u(x, t_0) = u_0(x)$  in einem unendlichen Gebiet kann durch  $t(\xi, \tau_0) = t_0$ ,  $x(\xi, \tau_0) = \xi$  und  $u(\xi, \tau_0) = u_0(x(\xi, \tau_0))$  parametrisiert werden. Mit den Gleichungen (2.27) ist damit eine Schar von Anfangswertproblemen mit dem Scharparameter  $\xi$  gegeben, die Lösungen für das Anfangswertproblem  $u(x, t_0) = u_0(x)$  mit Gleichung (2.25) liefert.

### 2.2.6 Diskretisierungen

Da nur in seltenen Fällen Differentialgleichungen oder partielle Differentialgleichungen exakt analytisch zu lösen sind, sind geeignete numerische Verfahren notwendig. Diese erfordern eine Diskretisierung, um das Problem mit unendlichen Freiheitsgraden auf ein Problem mit endlichen Freiheitsgraden zu reduzieren. In dieser Dissertation werden gitterbasierte Diskretisierungen verwendet. Neben Raum und Zeit müssen auch die Differentialoperatoren diskretisiert werden, so dass die diskretisierten Differentialgleichungen keine Ableitungen mehr enthalten, sondern nur noch rein algebraische Ausdrücke. Damit ergibt sich entweder eine direkte Lösungsvorschrift oder ein lineares oder nichtlineares Gleichungssystem. In den Algorithmen in Teil III werden zwei Diskretisierungen verwendet, die hier kurz erläutert werden. Die beiden adaptiven Löser AMG9 und AMG3+1 basieren auf einer Finite-Differenz-Diskretisierung, die Löser SimBL und FlmPSSS auf einer Finite-Volumen-Diskretisierung.

### 2.2.6.1 Finite-Differenz-Diskretisierung

Eine Finite-Differenz-Diskretisierung ist konzeptionell die einfachste Methode. Raum und Zeit werden durch ein Gitter diskretisiert. In der einfachsten äquidistanten Form ist

$$u_i^k = u(x_0 + i\Delta x, t_0 + k\Delta t), \quad (2.28)$$

wobei  $(x_0, t_0)$  den Referenzpunkt der Diskretisierung und  $\Delta x, \Delta t$  die Schrittgröße in Raum bzw. Zeit bezeichnet. Die Ableitungen werden basierend auf der Taylor-Entwicklung des Feldes  $u(x, t)$  beschrieben. In erster Ordnung lautet damit die Ableitung nach dem Raum

$$\left. \frac{\partial u}{\partial x} \right|_{(x=x_i, t)} = \frac{u(x + \Delta x, t) - u(x, t)}{\Delta x} \quad (2.29a)$$

mit  $x_i = x$  oder  $x_i = x + \Delta x$  (dazu mehr unten) und die Ableitung nach der Zeit

$$\left. \frac{\partial u}{\partial t} \right|_{(x, t=t^k)} = \frac{u(x, t + \Delta t) - u(x, t)}{\Delta t} \quad (2.29b)$$

mit  $t^k = t$  oder  $t^k = t + \Delta t$ . Je nachdem ob  $x_i = x$  oder  $x_i = x + \Delta x$  bzw.  $t^k = t$  oder  $t^k = t + \Delta t$  gewählt wird, spricht man von einer vorwärts oder rückwärts gerichteten Approximation an die Ableitung. Die partiellen Differentialgleichungen lassen sich damit in ein System von Differenzgleichungen umformulieren, welches numerisch gelöst werden kann.

### 2.2.6.2 Finite-Volumen-Diskretisierung

Bei einer Finiten-Volumen-Diskretisierung wird der Raum in  $N_{\text{cls}}$  endlich große Volumina zerlegt, die durch Indizes  $i = 1, \dots, N_{\text{cls}}$  identifiziert werden. Die zeitliche Entwicklung der Mittelwerte der Feldgrößen wird über eine Bilanzierung der Flüsse über die Volumengrenzen berechnet. Das Verfahren ist deshalb besonders geeignet für partielle Differentialgleichungen von Erhaltungssätzen, die aus Volumina, die auf Punkte geschrumpft wurden, hergeleitet werden. Es sei eine Erhaltungsgleichung

$$\frac{\partial u}{\partial t} + \frac{\partial f(u)}{\partial x} = 0 \quad (2.30)$$

mit  $u(x, t) : \mathbb{R} \times \mathbb{R}_+ \rightarrow \mathbb{R}^n$  und der Flussdichte  $f(u) : \mathbb{R}^n \rightarrow \mathbb{R}^n$  gegeben. Dann lautet die entsprechende Formulierung über ein endliches Volumen  $i$  zum Zeitpunkt  $t$

$$\frac{d}{dt} \int_{x_i - \frac{\Delta x}{2}}^{x_i + \frac{\Delta x}{2}} u(x, t) dx = f\left(u\left(x_i - \frac{\Delta x}{2}, t\right)\right) - f\left(u\left(x_i + \frac{\Delta x}{2}, t\right)\right) \quad (2.31)$$

wobei  $x_i$  der Mittelpunkt der Zelle  $i$  und  $f(u(x_i \pm \frac{\Delta x}{2}, t))$  der Fluss<sup>14</sup> über die Grenzfläche der Zelle bei  $x_i \pm \frac{1}{2}\Delta x$  ist. Es seien die Mittelwerte in der  $i$ -ten Zelle zum Zeitpunkt  $k$  durch

$$u_i^k = \frac{1}{\Delta x} \int_{x_i - \frac{\Delta x}{2}}^{x_i + \frac{\Delta x}{2}} u(x, t^k) dx \quad (2.32)$$

und die Flüsse durch die Zellgrenzflächen durch

$$f_{i\pm\frac{1}{2}}(t) = f\left(u\left(x_i \pm \frac{\Delta x}{2}, t\right)\right) \quad (2.33)$$

bezeichnet. Integriert man Gleichung (2.31) über ein endliches Zeitintervall  $\Delta t$  so erhält man für die Veränderung des Mittelwerts in dem Volumen  $i$

$$u_i^{k+1} - u_i^k = \frac{1}{\Delta x} \int_{t^k}^{t^{k+1}} \left(f_{i-\frac{1}{2}}(t) - f_{i+\frac{1}{2}}(t)\right) dt. \quad (2.34)$$

Die Formulierung in dieser Form ist zunächst noch exakt für die Mittelwerte gültig. Allerdings sind die Werte der Feldgrößen  $u(x_i \pm \frac{\Delta x}{2}, t)$  nicht bekannt und müssen geeignet aus den Mittelwerten rekonstruiert werden. Interpretiert man die Mittelwerte zu beiden Seiten einer Zellgrenze als Riemann-Problem und löst dieses, um die Flüsse zu berechnen, erhält man einen Godunov-Löser (siehe Kapitel 13). Allgemein approximiert man den Fluss  $f_{i-\frac{1}{2}}(t)$  in dem Intervall  $[t^k, t^{k+1}]$  bei Verfahren erster Ordnung aus den Mittelwerten  $u_{i-1}^k, u_i^k, u_{i-1}^{k+1}, u_i^{k+1}$  und analog dazu den Fluss  $f_{i+\frac{1}{2}}(t)$ . Verwendet man nur Werte zum Zeitpunkt  $t^k$ , erhält man ein explizites Verfahren. Werden nur Werte zum Zeitpunkt  $t^{k+1}$  verwendet, erhält man ein implizites Verfahren. Für beide Verfahren ist eine arithmetische Mittelung entweder der Flüsse  $f_{i-\frac{1}{2}}(t) \approx \frac{1}{2}(f(u_i^k) + f(u_{i-1}^k))$  oder der Felder  $f_{i-\frac{1}{2}}(t) \approx f(\frac{1}{2}(u_i^k + u_{i-1}^k))$ , hier gezeigt für den expliziten Fall, naheliegend. Beide Mittelungen sind bei expliziter Zeitdiskretisierung für hyperbolische Gleichungen bedingungslos instabil. Verwendet man stattdessen nur die Werte

<sup>14</sup>Man beachte, dass in einer Dimension Fluss  $f$  und Flussdichte  $f$  identische Einheiten haben und daher hier auch mit dem selben Symbol versehen werden.

stromaufwärts, also  $f_{i-\frac{1}{2}}(t) \approx f(u_{i-1}^k)$  für  $f_{i-\frac{1}{2}}(t) > 0$  und  $f_{i-\frac{1}{2}}(t) \approx f(u_i^k)$  für  $f_{i-\frac{1}{2}}(t) < 0$  erhält man ein bedingt stabiles explizites Verfahren. Im Englischen wird dieses Verfahren “Upwinding” genannt.

## 2.2.7 Stabilität, Konsistenz, Konvergenz

Die Diskretisierungen der Felder und Differentialoperatoren stellen eine Approximation an die analytischen Anfangs- und Randwertprobleme der partiellen Differentialgleichungen dar. Es stellt sich daher die Frage, ob die Güte der Näherungen angegeben werden kann. Zentrale Begriffe hierfür sind Stabilität, Konvergenz und Konsistenz eines Verfahrens.

### 2.2.7.1 Stabilität

Ein Verfahren bezeichnet man als stabil, wenn kleine Störungen einer Lösung durch das Verfahren nicht verstärkt werden. Wachsen bei der numerischen Simulation Störungen an, dann handelt es sich um ein instabiles numerisches Verfahren. Zeitlich explizite Verfahren sind zum Beispiel für hyperbolische Differentialgleichungen nur bedingt stabil. Das heißt die Schrittgröße muss kleiner als ein kritischer Wert sein (siehe hierzu Kapitel 13). Bei der Beurteilung der Stabilität eines Verfahrens muss allerdings das Verhalten der approximierten (partiellen) Differentialgleichung berücksichtigt werden. Ist das Anfangs- und Randwertproblem schlecht gestellt, so kann auch eine an sich stabile Diskretisierung instabiles Verhalten zeigen. Dies ist kein rein “akademisches” Problem, da keine allgemeinen Existenz- und Eindeutigkeitsätze für nichtlineare partielle Differentialgleichungen existieren. Zeigt also ein Algorithmus instabiles Verhalten kann das zwei Ursachen haben:

1. Das Anfangs- und Randwertproblem ist schlecht gestellt.
2. Das numerische Verfahren ist instabil.

Um diese Ambivalenz zu vermeiden, testet man die Stabilität am besten gegen analytische Lösungen, sofern diese vorhanden sind. Analytische Lösungen sind daher schon aus diesem Grund außerordentlich wertvoll.

### 2.2.7.2 Konsistenz

Ein Verfahren heißt konsistent, wenn die Lösung des analytischen Problems auch Lösung des approximierten Problems ist. Als lokaler Diskretisierungsfehler wird

$$\epsilon_{\text{disc}_i}^k = u(x_i, t^k) - u_i^k \quad (2.35)$$

bezeichnet. Ein Verfahren heißt konsistent von Ordnung  $p$ , wenn es ein von  $\Delta x$  und  $\Delta t$  unabhängiges  $C \in \mathbb{R}_+$  gibt, für das

$$\|\epsilon_{\text{disc}_i}^k\| \leq C \Delta x^p \Delta t^p \quad (2.36)$$

für alle  $i = 1, 2, \dots, N_{\text{pts}}$  und  $k = 1, 2, \dots, N_{\text{ts}}$  mit einer geeigneten Norm  $\|\cdot\|$  gilt. Wie die Stabilität, kann man die Konsistenz am einfachsten anhand analytischer Lösungen untersuchen.

### 2.2.7.3 Konvergenz

Im Allgemeinen wird ein Verfahren als konvergent bezeichnet, wenn für  $\epsilon_{\text{disc}_i}^k$  aus Gleichung (2.35)

$$\max(\|\epsilon_{\text{disc}_i}^k\|) \rightarrow 0 \quad \text{für } \Delta x \rightarrow 0, \Delta t \rightarrow 0 \quad (2.37)$$

gilt. Wie bei der Konsistenz lässt sich auch eine Konvergenzordnung  $p$  definieren, wenn es ein von  $\Delta x$  und  $\Delta t$  unabhängiges  $C \in \mathbb{R}_+$  gibt, für das

$$\max(\|\epsilon_{\text{disc}_i}^k\|) \leq C \Delta x^p \Delta t^p \quad (2.38)$$

für alle  $i = 1, 2, \dots, N_{\text{pts}}$  und  $k = 1, 2, \dots, N_{\text{ts}}$  mit einer geeigneten Norm  $\|\cdot\|$  gilt. Auch die Konvergenz wird am einfachsten anhand analytischer Lösungen untersucht.

# **Teil I**

## **Das Modell**

---

Das Untersuchungsobjekt dieser Dissertation ist ein Modell für Zweiphasenströmung in porösen Medien, welches perkolierende und nichtperkolierenden Fluidanteile als separate Phasen beschreibt. Das mathematische Modell wurde in den Arbeiten [Hilf 06b, Hilf 06a, Hilf 06c] vorgestellt und basiert auf Ideen aus früheren Arbeiten [Hilf 98, Hilf 00]. Die Notation in dieser Dissertation folgt weitgehend der Notation von [Hilf 06c]. Gegebenenfalls wird sie um Terme ergänzt, die dem Geiste der bestehenden Notation folgen.

In den Arbeiten [Hilf 06a, Hilf 06b, Hilf 06c] wurde das Modell in drei Raumdimensionen eingeführt. In dieser Dissertation werden nur eindimensionale Probleme betrachtet, da Ähnlichkeiten und Unterschiede des Modells zu bestehenden Ansätzen bereits daran verdeutlicht werden können. Bezüglich der Modellierung treten durch die weiteren Raumdimensionen keine erheblichen Schwierigkeiten auf. Die zusätzlich benötigten Variablen, die jeweiligen Geschwindigkeitskomponenten in den beiden weiteren Raumdimensionen, sind durch die weiteren Erhaltungsgleichungen für die Impulskomponenten in den zusätzlichen Raumdimensionen bestimmt. Das Finden von Lösungen, sei es analytisch oder numerisch, wird durch weitere Raumdimensionen jedoch deutlich erschwert. Da in dieser Dissertation die Grundlagen des Modells untersucht werden sollen, wird auf Untersuchungen in mehreren Raumdimensionen verzichtet und auch das Modell wird nur in einer Raumdimension eingeführt. Poröse Säulen, deren Länge sehr viel größer als deren Durchmesser ist und die impermeable Seitenwände haben, sodass ein transversaler Fluss unterbunden wird, können durch ein eindimensionales poröses Medium angenähert werden.

Es sollen nicht mischende Verdrängungsprozesse in einer porösen Säule betrachtet werden. Das poröse Material, z.B. ein Sandstein oder eine Sandschüttung, aber auch Ton oder Erde, sei auf der betrachteten Skala homogen, isotrop und inkompressibel. Der verbundene Porenraum sei vollständig mit zwei inkompressiblen nicht mischenden Fluiden gefüllt, die im folgenden Wasser und Öl genannt werden. Dabei wird als Wasser das benetzende Fluid und als Öl das nicht benetzende Fluid bezeichnet. In Kapitel 17 werden auch Simulationen mit Wasser und Luft durchgeführt. Luft kann in hydrologischen Fragestellungen häufig durch ein inkompressibles, mit Wasser nicht mischendes Fluid angenähert werden, welches gegenüber Wasser das nicht benetzende Fluid ist. Daher wird Luft an der entsprechenden Stelle ebenfalls als Öl bezeichnet.

Die Fluide und das poröse Medium werden auf Längenskalen betrachtet, die viel größer sind als der Porenraum des Mediums. Auf diesen Längenskalen ist eine kontinuumsmechanische Beschreibung möglich. Dabei werden Feldgleichungen für Sättigungen, Drücke und Geschwindigkeiten aufgestellt. Das Modell wird in Kapitel 3 vorgestellt. In Kapitel 4 werden Näherungen vorgestellt, die es ermöglichen, das Modell derart umzuformen, dass analytische

und numerische Lösungen für Anfangs- und Randwertprobleme bestimmt werden können. Die Näherungen lassen sich physikalisch motivieren, sodass die entsprechenden Lösungen auch eine physikalische Interpretation zulassen. Umformulierungen des Modells, bei denen die gemachten Näherungen berücksichtigt werden, werden in Kapitel 5, dem letzten Kapitel dieses Teils der Dissertation, vorgestellt. Ausschnitte dieses Teils der Dissertation werden auch in [Hilf 09, Dost 10d, Dost 10a, Dost 10b, Dost 10c] veröffentlicht.



## 3 Grundlegende Gleichungen

In diesem Kapitel werden die grundlegenden Gleichungen des Modells vorgestellt. Sie basieren auf Erhaltungssätzen für Masse und Impuls der einzelnen Phasen und konstitutiven Annahmen für Körperkräfte, Spannungstensoren, Massen- und Impulsquellen.

### 3.1 Definition der Feldvariablen

Die Sättigung  $S_{\text{W}} = S_{\text{W}}(x, t)$  von Wasser und  $S_{\text{O}} = S_{\text{O}}(x, t)$  von Öl seien Funktionen von Raum  $x \in [x_{\ell}, x_r] \subset \mathbb{R}$  und Zeit  $t \geq 0$ . Die zentrale Idee des Modells ist, dass perkolierende und nicht perkolierende Fluidanteile als separate Phasen betrachtet werden. Wie in [Hilf 06c] wird hier die perkolierende Phase des Wassers mit  $i = 1$  indiziert und die nichtperkolierende Wasserphase mit  $i = 2$ . Die Wassersättigung  $S_{\text{W}}$  ist damit die Summe der beiden Sättigungen  $S_{\text{W}} = S_1 + S_2$ . Die perkolierende Ölphase wird mit dem Index  $i = 3$  versehen und das nichtperkolierende Öl mit dem Index  $i = 4$ . Dementsprechend ist die Ölsättigung  $S_{\text{O}} = S_3 + S_4$ . Die Volumina der einzelnen Phasen seien mit  $\phi_i$  bezeichnet. Der Volumenanteil des porösen Mediums zusammen mit den isolierten Porenräumen wird als  $\phi_5 = 1 - \phi$  bezeichnet.

### 3.2 Erhaltungssätze

Das Modell wird basierend auf Massen- und Impulserhaltung entwickelt. Da inkompressible Medien betrachtet werden, muss neben Masse und Impuls auch das Gesamtvolumen erhalten bleiben. Die Erhaltungssätze werden hier kurz vorgestellt.

Die Erhaltung des Gesamtvolumens lautet in mathematischer Form

$$S_1 + S_2 + S_3 + S_4 = 1, \quad (3.1a)$$

$$1 - \phi = \phi_5, \quad (3.1b)$$

sodass die Bestimmung von drei Sättigungen ausreicht, um die vierte zu berechnen. Diese Gleichungen sind algebraisch und können gegebenenfalls verwendet werden, um die Anzahl der primären Variablen zu reduzieren.

Die Massenerhaltung in differentieller Form der Fluidphase  $i = 1, 2, 3, 4$  lautet

$$\frac{\partial(\phi_i \varrho_i)}{\partial t} + \frac{\partial(\phi_i \varrho_i v_i)}{\partial x} = M_i, \quad (3.2)$$

wobei  $\varrho_i(x, t)$  die Massendichte und  $v_i(x, t)$  die Fließgeschwindigkeit der Phase  $i$  als Funktion von Raum  $x \in [x_\ell, x_r]$  und Zeit  $t \in \mathbb{R}_+$  bezeichnet werden. Die Größen  $M_i$  bezeichnen die Massenaustauschraten zwischen der Phase  $i$  und allen anderen Phasen. Die Massenaustauschraten müssen konstitutiv bestimmt werden.

Die Erhaltung des Impulses lautet in differentieller Form für Fluidphase  $i = 1, 2, 3, 4$

$$\phi_i \varrho_i \frac{D^i}{Dt} v_i - \phi_i \frac{\partial \Sigma_i}{\partial x} - \phi_i F_i = m_i - v_i M_i, \quad (3.3)$$

wobei  $\Sigma_i$  die Flächenkraftdichte, also den Spannungstensor der  $i$ -ten Phase,  $F_i$  die Körperkraftdichte auf die  $i$ -te Phase,  $m_i$  die Impulsübertragungsdichte aller anderen Phasen auf Phase  $i$  und  $D^i/Dt = \partial/\partial t + v_i \partial/\partial x$  die materielle Ableitung der Phase  $i$  bezeichnen. Hier müssen die Spannungstensoren, die Körperkräfte und die Impulsüberträge konstitutiv bestimmt werden. Es sei darauf hingewiesen, dass in der vorliegenden Form der Impulserhaltung die Massenerhaltung bereits in die ursprüngliche Impulserhaltung eingesetzt wurde.

### 3.3 Konstitutivannahmen

In dieser Dissertation werden nur makroskopisch homogene poröse Medien betrachtet. Die Porosität ist damit weder raum- noch zeitabhängig und lautet

$$\phi(x) = \phi = \text{konst.} \quad (3.4)$$

Ebenso werden nur inkompressible Fluide betrachtet, sodass auch ihre Dichten

$$\varrho_1(x, t) = \varrho_{\text{w}}, \quad (3.5a)$$

$$\varrho_2(x, t) = \varrho_{\text{w}}, \quad (3.5b)$$

$$\varrho_3(x, t) = \varrho_{\text{O}}, \quad (3.5c)$$

$$\varrho_4(x, t) = \varrho_{\text{O}} \quad (3.5d)$$

unabhängig von  $x$  und  $t$  sind. Es sei an dieser Stelle darauf hingewiesen, dass das Modell keinesfalls auf diese Fälle beschränkt ist. Diese Annahmen werden lediglich getroffen, um die Untersuchung der grundlegenden Eigenschaften des neuen Modells zu vereinfachen. Eine Lockerung dieser Einschränkung kann dann später analog zum DBRMMWBL-Modell erfolgen.

Perkolierende und nichtperkolierende Phasen eines Fluids können Masse durch Aufbrechen und Vereinigung von Tropfen, Ganglien oder Blasen austauschen. Die Massenaustauschrate muss dabei von der Sättigungsänderungsrate abhängen. In den Arbeiten [Hilf 06a, Hilf 06b, Hilf 06c] wurden sie als

$$M_1 = -M_2 = \eta_2 \phi_{\mathcal{Q}\mathbb{W}} \left( \frac{S_2 - S_2^*}{S_{\mathbb{W}}^* - S_{\mathbb{W}}} \right) \frac{\partial S_{\mathbb{W}}}{\partial t}, \quad (3.6a)$$

$$M_3 = -M_4 = \eta_4 \phi_{\mathcal{Q}\mathbb{O}} \left( \frac{S_4 - S_4^*}{S_{\mathbb{O}}^* - S_{\mathbb{O}}} \right) \frac{\partial S_{\mathbb{O}}}{\partial t} \quad (3.6b)$$

angenommen, wobei  $\eta_2, \eta_4$  Parameter sind. Diese Form wird auch in dieser Dissertation verwendet. Die Parameterfunktionen  $S_{\mathbb{W}}^*, S_{\mathbb{O}}^*, S_2^*, S_4^*$  wurden im Laufe dieser Dissertation leicht modifiziert. Die ursprünglichen Parameterfunktionen lauten

$$S_{\mathbb{W}}^* = (1 - S_{\mathbb{O}\text{im}}) \Theta(\partial_t S_{\mathbb{W}}) + S_{\mathbb{W}\text{dr}} [1 - \Theta(\partial_t S_{\mathbb{W}})], \quad (3.7a)$$

$$S_2^* = S_{\mathbb{W}\text{dr}} [1 - \Theta(\partial_t S_{\mathbb{W}})], \quad (3.7b)$$

$$S_{\mathbb{O}}^* = 1 - S_{\mathbb{W}}^* = (1 - S_{\mathbb{W}\text{dr}}) \Theta(\partial_t S_{\mathbb{O}}) + S_{\mathbb{O}\text{im}} [1 - \Theta(\partial_t S_{\mathbb{O}})], \quad (3.7c)$$

$$S_4^* = S_{\mathbb{O}\text{im}} [1 - \Theta(\partial_t S_{\mathbb{O}})], \quad (3.7d)$$

wobei  $S_{\mathbb{W}\text{dr}}, S_{\mathbb{O}\text{im}}$  begrenzende Sättigungen für die Sättigungen  $S_2, S_4$  der nichtperkolierenden Phasen sind. Hier wurde die in der Physik übliche Kurzschreibweise  $\partial_t = \partial/\partial t$  und die Heaviside<sup>1</sup>-Sprungfunktion

$$\Theta(x) = \begin{cases} 1 & \text{für } x > 0, \\ \text{beliebig, aber endlich} & \text{für } x = 0, \\ 0 & \text{für } x < 0 \end{cases} \quad (3.8)$$

verwendet. Die Parameterfunktionen in Gleichung (3.7) folgen aus den in [Hilf 06b, Hilf 06c] verwendeten Parameterfunktionen unter der Annahme, dass die Änderungsraten der Sättigungen klein sind. Der Wert der Parameterfunktionen (3.7) bei  $\partial_t S_{\mathbb{W}} = 0$  spielt in den Massenaustauschraten (3.6) keine Rolle, wenn der Faktor  $\partial_t S_{\mathbb{W}} = 0$  eine mögliche Singuläri-

<sup>1</sup>Oliver Heaviside (1850-1925), britischer Mathematiker und Physiker

tät des Bruches der Rate dominiert.

Die in Gleichung (3.7) definierten Parameterfunktionen haben den Nachteil, dass sie für Bewässerungsprozesse bei Wassersättigungen  $S_{\text{W}} > 1 - S_{\text{Oim}}$  und für Entwässerungsprozesse  $S_{\text{W}} < S_{\text{Wdr}}$  unphysikalische nichtperkolierende Sättigungen erzeugen. Es wird daher eine leichte Modifikation dieser Terme verwendet. Die begrenzenden Sättigungen lauten in modifizierter Form

$$S_{\text{W}}^* = \{1 - \min [S_{\text{Oim}}, (1 - \epsilon_{\text{M}})S_{\text{O}}]\} \Theta (\partial_t S_{\text{W}}) + \min [S_{\text{Wdr}}, (1 - \epsilon_{\text{M}})S_{\text{W}}] [1 - \Theta (\partial_t S_{\text{W}})], \quad (3.9a)$$

$$S_2^* = \min [S_{\text{Wdr}}, (1 - \epsilon_{\text{M}})S_{\text{W}}] [1 - \Theta (\partial_t S_{\text{W}})], \quad (3.9b)$$

$$S_{\text{O}}^* = \{1 - \min [S_{\text{Wdr}}, (1 - \epsilon_{\text{M}})S_{\text{W}}]\} \Theta (\partial_t S_{\text{O}}) + \min [S_{\text{Oim}}, (1 - \epsilon_{\text{M}})S_{\text{O}}] [1 - \Theta (\partial_t S_{\text{O}})], \quad (3.9c)$$

$$S_4^* = \min [S_{\text{Oim}}, (1 - \epsilon_{\text{M}})S_{\text{O}}] [1 - \Theta (\partial_t S_{\text{O}})]. \quad (3.9d)$$

Mit diesen Parameterfunktionen sind auch Bewässerungen bei Wassersättigungen  $S_{\text{W}} > 1 - S_{\text{Oim}}$  und Entwässerungen  $S_{\text{W}} < S_{\text{Wdr}}$  möglich. Wie stark sich dabei die Wassersättigung ändert, wird durch den Parameter  $\epsilon_{\text{M}} \in [0, 1]$  bestimmt. Für  $\epsilon_{\text{M}} \rightarrow 0$  ändert sich die Wassersättigung nicht mehr und die Modifizierung dient lediglich als Regularisierung, die eine Bewässerung bei  $S_{\text{W}} > 1 - S_{\text{Oim}}$  oder eine Entwässerung bei  $S_{\text{W}} < S_{\text{Wdr}}$  verhindert. Für Wassersättigungen  $S_{\text{Wdr}}/(1 - \epsilon_{\text{M}}) < S_{\text{W}} < 1 - S_{\text{Oim}}/(1 - \epsilon_{\text{M}})$ , sowie für Entwässerungen mit  $S_{\text{W}} > 1 - S_{\text{Oim}}/(1 - \epsilon_{\text{M}})$  und Bewässerungen  $S_{\text{W}} < S_{\text{Wdr}}/(1 - \epsilon_{\text{M}})$  verhalten sich die veränderten Terme aus den Definitionen (3.9) identisch wie die ursprünglichen aus den Definitionen (3.7). Für  $\epsilon_{\text{M}} \neq 0$  ist der Parameter ein Modellparameter, der die Zeitskala mitbestimmt, auf der ein Medium vollständig be- oder entwässert werden kann; siehe hierzu Kapitel 16.5.

Die Spannungstensoren werden durch

$$\Sigma_1 = -P_1, \quad (3.10a)$$

$$\Sigma_2 = (-P_3 + \gamma P_2^* S_2^{\gamma-1}), \quad (3.10b)$$

$$\Sigma_3 = -P_3, \quad (3.10c)$$

$$\Sigma_4 = (-P_1 + \delta P_4^* S_4^{\delta-1}) \quad (3.10d)$$

beschrieben, wobei  $P_1$  und  $P_3$  die Drücke der perkolierenden Phasen sind. Die Spannungstensoren der nichtperkolierenden Phasen sind durch die Drücke der perkolierenden Phase des jeweils anderen Fluids bestimmt. Die zusätzlichen Terme berücksichtigen dabei die Grenzflächenkräfte zwischen den beiden Fluiden, die z.B. auch in Blasen in freien Fluiden außerhalb

eines porösen Mediums für einen Unterschied des Drucks innerhalb und außerhalb der Blase sorgen. Die Konstanten  $P_2^*, P_4^*$  und die Exponenten  $\gamma, \delta$  in den Spannungstensoren der nichtperkolierenden Phasen sind Konstitutivparameter, die genau diese Effekte berücksichtigen. Sie können experimentell aus Kapillardrucksättigungsbeziehungen bestimmt werden und sehr unterschiedlich ausfallen. Insbesondere sind auch unterschiedliche Vorzeichen in  $P_2^*, P_4^*$  möglich.

Die makroskopischen Körperkräfte seien durch Schwerkraft und Kapillarkräfte gegeben. Sie lauten

$$F_1 = \varrho_1 g \sin \vartheta, \quad (3.11a)$$

$$F_2 = \varrho_2 g \sin \vartheta + P_a \frac{\partial S_1^{-\alpha}}{\partial x}, \quad (3.11b)$$

$$F_3 = \varrho_3 g \sin \vartheta, \quad (3.11c)$$

$$F_4 = \varrho_4 g \sin \vartheta + P_b \frac{\partial S_3^{-\beta}}{\partial x}, \quad (3.11d)$$

wobei angenommen wird, dass Kapillarkräfte nur auf die nichtperkolierenden Phasen einen signifikanten Einfluss haben. Die Konstitutivparameter  $P_a, P_b$  und die Exponenten  $\alpha, \beta > 0$  beschreiben die Kapillarkräfte auf makroskopischen Skalen. Man beachte, dass Kapillarkräfte auf Porenskala nicht als Körperkräfte existieren, sondern nur durch Mittelung beim Skalenübergang von Porenskala zur Labor- oder Feldskala entstehen. Die Parameter können ebenfalls experimentell aus Kapillardrucksättigungsbeziehungen bestimmt werden und sehr unterschiedlich ausfallen, da sich in diesen Parametern die Benetzungseigenschaften der Fluide bezüglich des porösen Mediums widerspiegeln.

Der Winkel  $0 \leq \vartheta \leq \pi/2$  beschreibt den Winkel zwischen der Raumrichtung des eindimensionalen porösen Mediums und der Richtung der Schwerkraft. Ein Winkel  $\vartheta = \pi/2$  entspricht dabei einer Ausrichtung entlang der Richtung der Schwerkraft.

Es wird angenommen, dass die Impulsaustauschdichte  $m_i$  zwischen den Phasen durch lineare viskose Kopplung bestimmt wird. Die Stärke der Kopplung wird durch die konstitutiven Widerstandskoeffizienten beschrieben. Die Impulsaustauschterme lauten damit für die vier Phasen

$$m_1 = R_{13}(v_3 - v_1) + R_{14}(v_4 - v_1) - R_{15}v_1, \quad (3.12a)$$

$$m_2 = R_{23}(v_3 - v_2) + R_{24}(v_4 - v_2) - R_{25}v_2, \quad (3.12b)$$

$$m_3 = R_{31}(v_1 - v_3) + R_{32}(v_2 - v_3) - R_{35}v_3, \quad (3.12c)$$

$$m_4 = R_{41}(v_1 - v_4) + R_{42}(v_2 - v_4) - R_{45}v_4, \quad (3.12d)$$

wobei  $R_{12} = 0$  und  $R_{34} = 0$  verwendet wird, da perkolierende und nichtperkolierende Phase desselben Fluids keine gemeinsame Grenzfläche besitzen können. Wie zuvor steht der Index  $i = 5$  für das poröse Medium, dessen Geschwindigkeit durch Wahl eines geeigneten Koordinatensystems identisch Null gesetzt werden kann.

Eine ausführlichere Beschreibung dieser Konstitutivannahmen ist in den Arbeiten [Hilf 06a, Hilf 06b, Hilf 06c] zu finden, wobei das Modell in [Hilf 06b] am ausführlichsten diskutiert wird. Die Erhaltungssätze (3.1a), (3.2) und (3.3) mit den Konstitutivannahmen dieses Unterkapitels liefern in einer Dimension 9 Gleichungen für die 10 Variablen  $S_i, v_i, P_1, P_3$  mit  $i = 1, 2, 3, 4$ . Mögliche Schließbedingungen werden im nächsten Kapitel vorgestellt.

### 3.4 Schließbedingung

Die Erhaltungssätze aus Kapitel 3.2 zusammen mit den Konstitutivannahmen aus Kapitel 3.3 bilden noch kein geschlossenes Gleichungssystem. Es werden in diesem Kapitel zwei unterschiedliche Schließbedingungen für das Gleichungssystem vorgestellt.

#### 3.4.1 Selbstkonsistente Schließbedingung

Die residuale Entkopplungsnäherung (RDA) aus [Hilf 06b] liefert eine Beziehung zwischen den Gradienten der Drücke der perkolierenden Phasen. Diese Bedingung gilt, wenn die nichtperkolierenden Phasen immobil sind. Die Beziehung zwischen den beiden Drücken folgt jedoch auch aus allgemeineren, weniger restriktiven Annahmen. Sie folgt zum Beispiel aus der Forderung, dass die Geschwindigkeiten klein sind, also für den Fall  $v_i \rightarrow 0$  mit  $i = 1, 2, 3, 4$ .

In ihrer allgemeinsten Form lautet die selbstkonsistente Schließbedingung

$$\begin{aligned}
0 = & \left( \frac{R_{13}}{\phi_1} + \frac{R_{14}}{\phi_1} + \frac{R_{15}}{\phi_1} + \frac{R_{31}}{\phi_3} - \frac{R_{41}}{\phi_4} + \frac{M_1}{\phi_1} \right) v_1 + \varrho_1 \frac{D^1}{Dt} v_1 \\
& + \left( -\frac{R_{23}}{\phi_2} - \frac{R_{24}}{\phi_2} - \frac{R_{25}}{\phi_2} + \frac{R_{32}}{\phi_3} - \frac{R_{42}}{\phi_4} + \frac{M_1}{\phi_2} \right) v_2 - \varrho_2 \frac{D^2}{Dt} v_2 \\
& + \left( -\frac{R_{13}}{\phi_1} + \frac{R_{23}}{\phi_2} - \frac{R_{31}}{\phi_3} - \frac{R_{32}}{\phi_3} - \frac{R_{35}}{\phi_3} - \frac{M_3}{\phi_3} \right) v_3 - \varrho_3 \frac{D^3}{Dt} v_3 \\
& + \left( -\frac{R_{14}}{\phi_1} + \frac{R_{24}}{\phi_2} + \frac{R_{41}}{\phi_4} + \frac{R_{42}}{\phi_4} + \frac{R_{45}}{\phi_4} - \frac{M_3}{\phi_4} \right) v_4 + \varrho_4 \frac{D^4}{Dt} v_4. \tag{3.13}
\end{aligned}$$

Werden zu dieser Bedingung die Gleichungen (3.3) für  $i = 2$  und  $i = 3$  addiert und die Gleichungen (3.3) mit  $i = 1$  und  $i = 4$  subtrahiert, so erhält man

$$\frac{\partial P_3}{\partial x} = \frac{\partial P_1}{\partial x} + \frac{1}{2} \frac{\partial}{\partial x} \left( P_a S_1^{-\alpha} - P_b S_3^{-\beta} + \gamma P_2^* S_2^{\gamma-1} - \delta P_4^* S_4^{\delta-1} \right). \quad (3.14)$$

Üblicherweise wird der Druckunterschied zwischen den Drücken der perkolierenden Phasen als makroskopischer Kapillardruck  $P_c := P_3 - P_1$  bezeichnet. Auch wenn dieser Begriff verschleiert, dass diese Druckdifferenz nicht nur von Kapillareffekten herrührt, wird diese Bezeichnung in dieser Dissertation verwendet, da der Begriff etabliert ist. Setzt man diese Kapillardrucksättigungsbeziehung in die Spannungstensoren (3.10) der perkolierenden Phasen  $i = 1, 3$  ein, so zeigt sich, dass auch diese über den Kapillardruck durch

$$\Sigma_3 = \Sigma_1 - P_c. \quad (3.15)$$

voneinander abhängen. Man beachte dabei das andere Vorzeichen im Vergleich zu Gleichung (3.14). Durch Integration von Gleichung (3.14) kann nun eine Beziehung zwischen den Sättigungen  $S_1, S_2, S_3, S_4$  und dem makroskopischen Kapillardruck hergestellt werden. Sie lautet

$$P_c(S_1, S_2, S_3, S_4) = \frac{1}{2} \left( P_a S_1^{-\alpha} - P_b S_3^{-\beta} + \gamma P_2^* S_2^{\gamma-1} - \delta P_4^* S_4^{\delta-1} \right) + P_0^*, \quad (3.16)$$

wobei auch die Konstante  $P_0^*$  experimentell bestimmt werden muss. Es können dazu dieselben experimentellen Daten wie zur Bestimmung der Parameter  $P_a, P_b, P_2^*, P_4^*$  und der Exponenten  $\alpha, \beta, \gamma, \delta$  verwendet werden [Hilf 06a, Hilf 06b, Hilf 06c]. Man beachte, dass auch diese Konstante ein echter Parameter für die betrachteten drei Materialien Wasser, Öl und poröses Medium darstellt und nicht für Be- und Entwässerung oder andere Strömungsverhältnisse angepasst werden muss.

### 3.4.2 Vernachlässigbarer Druckunterschied

Bei vielen Anwendungen, wie zum Beispiel bei der Ölförderung, werden sehr große Drücke angelegt, so dass die Druckunterschiede in den Phasen, die durch Kapillar- und Grenzflächenkräfte hervorgerufen werden, vernachlässigt werden können. Diese Beobachtung wird hier verwendet, um eine weitere Schließbedingung

$$P = P_1 = P_3. \quad (3.17)$$

zu formulieren, die gleichbedeutend mit der Bedingung

$$\Sigma_1 = \Sigma_3 \tag{3.18}$$

für die Spannungstensoren der perkolierenden Phasen ist. Diese Schließbedingung ist essentieller Bestandteil der analytischen Lösungen für das Buckley-Leverett-Problem (siehe Kapitel 7) und die schwerkraftgetriebene Umverteilung (siehe Kapitel 8).



## 4 Näherungen

Die Erhaltungssätze aus Kapitel 3.2 zusammen mit den Konstitutivannahmen aus Kapitel 3.3 und einer der Schließbedingungen aus Kapitel 3.4 ergeben ein stark gekoppeltes System von zehn partiellen differentialalgebraischen Gleichungen. Auch wenn im Rahmen dieser Dissertation numerisch das volle Gleichungssystem für ein Anfangs- und Randwertproblem gelöst wurde (siehe Kapitel 11 und 15, sowie [Hilf 10, Dost 10d]), ist die volle Komplexität nicht immer zwingend erforderlich. Vereinfachungen der Gleichungen beschleunigen nicht nur numerische Löser, sie ermöglichen auch analytische Lösungen, sowie die Entwicklung stabilerer und flexiblerer numerischer Algorithmen. Die verwendeten Näherungen werden in diesem Kapitel vorgestellt.

### 4.1 Vernachlässigbare Trägheit

Die Näherung, dass Trägheitsterme in der Impulserhaltung aller Phasen vernachlässigt werden können, wird bis auf wenige Ausnahmen (siehe Kapitel 11 und 15) in dieser Dissertation verwendet. Mathematisch formuliert lautet die Vernachlässigung der Trägheit

$$\phi_i \varrho_i \frac{D^i}{Dt} v_i = 0 \quad (4.1)$$

mit  $i = 1, 2, 3, 4$ . Diese Näherung ist unstrittig, da eine Abschätzung der Fließgeschwindigkeiten in Experimenten zeigt, dass diese Beiträge um Größenordnungen kleiner sind, als die Beiträge anderer Terme. Sie wurde bereits in [Hilf 06a, Hilf 06b, Hilf 06c] verwendet und wird auch implizit im DBRMMWBL-Modell angenommen. Nur in AMG9 aus Kapitel 11 und 15, sowie [Hilf 10, Dost 10d] wurde auf diese Näherung verzichtet, da die Struktur der Gleichungen damit besser für den zugrunde liegenden Löser [Blom 94] geeignet ist.

## 4.2 Viskose Dominanz im Impulsaustausch

Wird viskose Dominanz im Impulsaustausch angenommen, so bedeutet dies, dass die Impulsveränderung aufgrund der viskosen Kopplung der Fluide untereinander und mit der Wand deutlich größer ist, als die Impulsveränderung, die von der Reaktion der Phase mit der jeweils anderen Phase desselben Fluids herrührt. Dazu muss

$$R_{15} \gg M_1 \quad \text{oder} \quad R_{13} \gg M_1 \quad \text{oder} \quad R_{14} \gg M_1, \quad (4.2a)$$

$$R_{25} \gg M_1 \quad \text{oder} \quad R_{23} \gg M_1 \quad \text{oder} \quad R_{24} \gg M_1, \quad (4.2b)$$

$$R_{35} \gg M_3 \quad \text{oder} \quad R_{31} \gg M_3 \quad \text{oder} \quad R_{32} \gg M_3, \quad (4.2c)$$

$$R_{45} \gg M_3 \quad \text{oder} \quad R_{41} \gg M_3 \quad \text{oder} \quad R_{42} \gg M_3 \quad (4.2d)$$

gelten. Diese Abschätzungen können meistens angenommen werden, da die viskosen Koeffizienten typischer Weise von der Größenordnung  $R_{ij} \approx 10^8 \text{ kg m}^{-3} \text{ s}^{-1}$  sind, während für den Impulsaustausch durch Massenaustausch in typischen Strömungen unter der Erde Werte von  $M_i \approx 10^3 \text{ kg m}^{-3}$  erwartet werden. Dabei wird angenommen, dass  $|S_{\text{W}}^* - S_{\text{W}}| > 10^{-4}$  und  $\partial_t S_{\text{W}} < 1 \text{ s}^{-1}$  gilt. In zwei Fällen ist diese Abschätzung problematisch. Bei nicht differenzierbaren Stoßwellen (siehe Kapitel 6, 7 und 8) kann streng genommen die Abschätzung  $\partial_t S_{\text{W}} < 1 \text{ s}^{-1}$  nicht angenommen werden. Die Näherung wird dennoch auch für auftretende Stoßwellen verwendet, da die Divergenz der Stoßwellen als Modellierungsartefakt betrachtet werden kann. Im Experiment sind im Allgemeinen diese Stoßwellen so ausgeschmiert, dass weiterhin  $\partial_t S_{\text{W}} < 1 \text{ s}^{-1}$  gilt. Des weiteren kann die Wassersättigung sehr wohl Werte mit  $|S_{\text{W}}^* - S_{\text{W}}| > 10^{-4}$  annehmen. Für die begrenzenden Sättigungen nach Gleichung (3.7) ist dies für  $S_{\text{W}} \rightarrow S_{\text{W,dr}}$  bzw.  $S_{\text{W}} \rightarrow 1 - S_{\text{O,im}}$  der Fall. Für die begrenzenden Sättigungen nach Gleichung (3.9) ist dies nur bei  $S_{\text{W}} \rightarrow 0$  bzw.  $S_{\text{W}} \rightarrow 1$  oder entsprechend kleinen  $\epsilon_{\text{M}}$  der Fall. Da die Sättigungen  $S_{\text{W}}$  und  $S_{\text{O,im}}, S_{\text{W,dr}}$  jedoch experimentell äußerst selten mit einer Genauigkeit von größer  $\Delta S \approx 10^{-4}$  gemessen werden, kann auch dieser Limes als Modellierungsartefakt betrachtet werden. Die Näherung der viskosen Dominanz hat damit nahezu allgemeine Gültigkeit.

## 4.3 Immobile nichtperkolierende Phasen

In der residualen Entkopplungsnäherung (RDA) aus [Hilf 06b] wird gefordert, dass die nichtperkolierenden Phasen immobil sind. Dies liefert Bedingungen für die Körper- und Grenzflächenkräfte. Die Immobilität kann jedoch auch durch starke Kopplung der nichtperkolierenden

Phasen an das poröse Medium verursacht sein, da die Verschiebung von Kontaktlinien eine deutlich höhere Kraft als das Bewegen eines Fluids entlang einer Kontaktfläche erfordert. Es wird angenommen, dass die Anzahl der Kontaktlinien pro Volumen für nichtperkolierende Phasen deutlich größer ist als für perkolierende Phasen. Ebenso ist ein nicht-Newtonsches<sup>1</sup>-Verhalten der nichtperkolierenden Phasen denkbar, wenn eine Schwelle (“Haftreibung”) überwunden werden muss, um die Kontaktlinien zu bewegen. Beide Phänomene können in erster Näherung durch

$$R_{25} \gg R_{ij}, \quad (4.3a)$$

$$R_{45} \gg R_{ij}, \quad (4.3b)$$

für alle Paare  $(i, j)$  mit  $i, j = 1, 2, 3, 4, 5$  modelliert werden, wobei  $(i, j) \neq (2, 5)$  und  $(i, j) \neq (4, 5)$  ausgeschlossen werden. Es wird außerdem angenommen, dass die Kopplungsterme nicht durch Massenaustausch kompensiert werden können und

$$R_{25} \gg M_1, \quad (4.4a)$$

$$R_{45} \gg M_3 \quad (4.4b)$$

gilt. Bei viskoser Dominanz im Impulsaustausch (Kapitel 4.2) ist dies durch die Gleichungen (4.3) automatisch gegeben. Durch Einsetzen dieser Annahmen in die Impulsbilanzen (3.3) findet man, dass dadurch für die Geschwindigkeiten

$$v_2 \ll v_1 \quad \text{und} \quad v_2 \ll v_3, \quad (4.5a)$$

$$v_4 \ll v_1 \quad \text{und} \quad v_4 \ll v_3 \quad (4.5b)$$

gilt. Es gilt außerdem

$$\lim_{R_{25} \rightarrow \infty} v_2 = 0, \quad (4.6a)$$

$$\lim_{R_{45} \rightarrow \infty} v_4 = 0. \quad (4.6b)$$

Damit sind die nichtperkolierenden Phasen unabhängig von Spannungstensoren und Körperkräften immobil. Der Zusammenhang zwischen  $R_{ij}$  und  $v_i$  wird nach einigen analytischen Umformungen in Kapitel 5 deutlich. Es sei darauf hingewiesen, dass auch bei vollständiger Benetzung  $R_{45} \neq 0$  angenommen werden kann. Zwar haben bei vollständiger Benetzung das nichtperkolierende Fluid und das poröse Medium keine Grenzfläche. Durch die Geometrie können aber Blasen an engen Kanälen zurückgehalten werden. Auf Porenskala ist diese

<sup>1</sup>Sir Isaac Newton (1643-1727), englischer Naturforscher

Wechselwirkung zwar nur indirekt. Auf der Laborskala können diese Effekte dann jedoch wie eine direkte Wechselwirkung erscheinen.

## 4.4 Kleine Grenzflächenspannungen

Die Spannungstensoren aus Definition (3.10) enthalten Parameter, die die Grenzflächenspannungen in den nichtperkolierenden Phasen beschreiben. In [Hilf 06b] wurden Werte von der Größenordnung  $P_2^*, P_4^* \sim 10^3$  Pa und  $\gamma, \delta > 1$  bestimmt. Das bedeutet, dass für viele Anwendungen wie in Kapitel 3.4.2 der Spannungstensor für die nichtperkolierenden Phasen von den Drücken der umgebenden perkolierenden Phasen des anderen Fluids dominiert wird. Damit können die Spannungstensoren der nichtperkolierenden Phasen durch

$$\Sigma_2 \approx -P_3 = \Sigma_3 \quad (4.7a)$$

$$\Sigma_4 \approx -P_1 = \Sigma_1 \quad (4.7b)$$

approximiert werden.

## 4.5 Keine Körperkräfte

Die Körperkräfte aus Definition (3.11) enthalten Parameter, die Schwerkraft und Kapillarkräfte beschreiben. In [Hilf 06b] wurden Werte von der Größenordnung  $P_a, P_b \sim 10^3$  Pa und  $\alpha, \beta \sim 1$  für die Kapillarkräfte bestimmt. Bei großen Drücken ist daher zu erwarten, dass auch diese Terme vernachlässigt werden können. Betrachtet man außerdem ein horizontales Medium mit  $\vartheta = 0$ , so verschwinden die Körperkräfte vollständig und lauten

$$F_1 \approx 0, \quad (4.8a)$$

$$F_2 \approx 0, \quad (4.8b)$$

$$F_3 \approx 0, \quad (4.8c)$$

$$F_4 \approx 0. \quad (4.8d)$$

Dabei muss jedoch beachtet werden, dass

$$\lim_{S_1 \rightarrow 0} F_2 = \infty, \quad (4.9a)$$

$$\lim_{S_3 \rightarrow 0} F_4 = \infty \quad (4.9b)$$

gilt, wenn die jeweilige perkolierende Phase  $S_1 \rightarrow 0$  und  $S_3 \rightarrow 0$  verschwindet. Ebenso gilt

$$\lim_{\partial_x S_1 \rightarrow \infty} F_2 = \infty, \quad (4.10a)$$

$$\lim_{\partial_x S_3 \rightarrow \infty} F_4 = \infty. \quad (4.10b)$$

Belastbare Ergebnisse werden in dieser Näherung daher nur für endliche Sättigungen und endliche Sättigungsgradienten erwartet. Da bei Vernachlässigung der Körperkräfte unstetige Stoßwellen entstehen können, sind Gleichungen (4.10) genauso problematisch wie es in Kapitel 4.2 die Forderung  $\partial_t S_{\text{W}} < 1 \text{ s}^{-1}$  war. Wie dort lässt sich ein unendlicher Sättigungsgradient auch hier als Modellierungsartefakt verstehen und die Gleichungen (4.8) bleiben gültig.

## 5 Analytische Umformungen

Die Näherungen aus Kapitel 4 werden nun verwendet, um die Gleichungen des Modells umzuformen. Die Ergebnisse der Umformungen erlauben analytische Lösungen und die Entwicklung von stabilen und effizienten Algorithmen, die in den Teilen II und III vorgestellt werden.

### 5.1 Eingesetzte Impulsbilanzen

Durch Vernachlässigung der Trägheit mit Gleichung (18.12) tauchen zeitlichen Ableitungen der Geschwindigkeiten in den Impulsbilanzen (3.3) nicht mehr auf. Aus den Impulsbilanzen (3.3) können Gleichungen formuliert werden, die als Verallgemeinerung des erweiterten Darcy-Gesetz (2.7) für Volumenströme interpretiert werden können. Sie können wie die Gleichungen (2.7) in die Massenbilanzen (3.2) eingesetzt werden, da die Geschwindigkeiten ohne Berücksichtigung der Trägheit nur linear auftauchen. Durch das Einsetzen erhöht sich zwar die Ordnung dieser Differentialgleichungen, dafür wird jedoch die Anzahl der Differentialgleichungen reduziert. Diese Umformungen werden in diesem Unterkapitel durchgeführt.

Auf der rechten Seite der Impulsbilanzen (3.3) kommen die Fließgeschwindigkeiten der Phasen nur linear vor. Die rechte Seite kann daher als Matrix-Vektor-Produkt

$$\begin{pmatrix} m_1 - M_1 v_1 \\ m_2 + M_1 v_2 \\ m_3 - M_3 v_3 \\ m_4 + M_3 v_4 \end{pmatrix} = -\tilde{R} \begin{pmatrix} v_1 \\ v_2 \\ v_3 \\ v_4 \end{pmatrix} \quad (5.1)$$

geschrieben werden, wobei die Komponenten der verallgemeinerten Widerstandsmatrix  $\tilde{R}$

durch

$$\tilde{R}(S_{\mathbb{W}}, S_2, S_4, \partial_t S_{\mathbb{W}}) := \begin{pmatrix} R_{11} & 0 & -R_{13} & -R_{14} \\ 0 & R_{22} & -R_{23} & -R_{24} \\ -R_{31} & -R_{32} & R_{33} & 0 \\ -R_{41} & -R_{42} & 0 & R_{44} \end{pmatrix} \quad (5.2)$$

definiert sind und die Kurzschreibweise

$$R_{11}(S_{\mathbb{W}}, S_2, \partial_t S_{\mathbb{W}}) := R_{15} + R_{13} + R_{14} + M_1, \quad (5.3a)$$

$$R_{22}(S_{\mathbb{W}}, S_2, \partial_t S_{\mathbb{W}}) := R_{25} + R_{23} + R_{24} - M_1, \quad (5.3b)$$

$$R_{33}(S_{\mathbb{W}}, S_4, \partial_t S_{\mathbb{W}}) := R_{35} + R_{31} + R_{32} + M_3, \quad (5.3c)$$

$$R_{44}(S_{\mathbb{W}}, S_4, \partial_t S_{\mathbb{W}}) := R_{45} + R_{41} + R_{42} - M_3 \quad (5.3d)$$

verwendet wurde.

Volumenflüsse  $q_i$  mit  $i = 1, 2, 3, 4$  können durch Einsetzen von Gleichung (5.1) in Gleichung (3.3), Auflösen des daraus entstehenden Gleichungssystems nach den linear auftretenden Geschwindigkeiten und Multiplikation der resultierenden Gleichungen mit der jeweiligen Phasenvolumendichte  $\phi S_i$ ,  $i \in \{1, 2, 3, 4\}$  als

$$\begin{pmatrix} q_1 \\ q_2 \\ q_3 \\ q_4 \end{pmatrix} := \begin{pmatrix} \phi S_1 v_1 \\ \phi S_2 v_2 \\ \phi S_3 v_3 \\ \phi S_4 v_4 \end{pmatrix} = \Lambda \begin{pmatrix} \partial_x \Sigma_1 + F_1 \\ \partial_x \Sigma_2 + F_2 \\ \partial_x \Sigma_3 + F_3 \\ \partial_x \Sigma_4 + F_4 \end{pmatrix} \quad (5.4)$$

bestimmt werden. Dabei wurde die Mobilitätsmatrix  $\Lambda$  eingeführt, deren Komponenten durch

$$\lambda_{ij}(S_{\mathbb{W}}, S_2, S_4, \partial_t S_{\mathbb{W}}) := \phi^2 S_i S_j [\tilde{R}^{-1}]_{ij} \quad (5.5)$$

mit Sättigungen  $S_i, S_j$  und der inversen verallgemeinerten Widerstandsmatrix  $\tilde{R}$  gegeben sind. Wird der Impulsaustausch vom viskosen Impulsaustausch dominiert (siehe Kapitel 4.2), so ist die verallgemeinerte Widerstandsmatrix  $\tilde{R}$  eine Parametermatrix und die Komponenten  $\lambda_{ij} = \lambda_{ij}(S_{\mathbb{W}}, S_2, S_4)$  der Mobilitätsmatrix hängen nur von den Sättigungen und nicht von der Sättigungsänderungsrate ab.

Durch Linearkombination der Massenbilanzen (3.2) und Verwendung der Volumenerhaltung

für inkompressible Fluide (3.1) erhält man mit Gleichung (5.4)

$$\phi \frac{\partial S_{\text{W}}}{\partial t} + \frac{\partial q_{\text{W}}}{\partial x} = 0, \quad (5.6a)$$

$$\varrho_{\text{W}} \phi \frac{\partial S_2}{\partial t} + \varrho_{\text{W}} \frac{\partial q_2}{\partial x} = -M_1, \quad (5.6b)$$

$$\varrho_{\text{O}} \phi \frac{\partial S_4}{\partial t} + \varrho_{\text{O}} \frac{\partial q_4}{\partial x} = -M_3, \quad (5.6c)$$

$$\frac{\partial}{\partial x} (q_{\text{W}} + q_{\text{O}}) = 0, \quad (5.6d)$$

wobei  $q_{\text{W}} = q_1 + q_2$  und  $q_{\text{O}} = q_3 + q_4$  gilt. Diese Form wird in vielen Lehrbüchern, z.B. [Aziz 79, Dull 92, Helm 97, Chen 06], für das DBRMMWBL-Modell angegeben. Dabei entspricht die Gleichung (5.6a) der Transportgleichung und Gleichung (5.6d) der elliptischen Druckgleichung.

## 5.2 Flussgradienten in den Massenaustauschtermen

Die Massenaustauschtermen (3.6) sind proportional zur Änderung der Wasser- bzw. Ölsättigung pro Zeit. Für Algorithmen und analytische Lösungen kann es von Vorteil sein, wenn statt der Sättigungsänderungsrate ein Flussgradient verwendet wird. Mit Gleichung (5.6a) kann die Änderung der Wassersättigung pro Zeit durch den Flussgradienten von Wasser ausgedrückt werden. Analog ist das auch mit der Ölsättigungsänderungsrate möglich. Damit lauten die Massenaustauschtermen

$$M_1 = -\varrho_{\text{W}} \eta_2 \frac{S_2 - S_2^*}{S_{\text{W}}^* - S_{\text{W}}} \frac{\partial q_{\text{W}}}{\partial x}, \quad (5.7a)$$

$$M_3 = -\varrho_{\text{O}} \eta_4 \frac{S_4 - S_4^*}{S_{\text{W}}^* - S_{\text{W}}} \frac{\partial q_{\text{W}}}{\partial x} \quad (5.7b)$$

wobei in Gleichung (5.7b) die Volumenbilanz (3.1) verwendet wurde, um Ölsättigungen durch Wassersättigungen auszudrücken und Gleichung (5.6d), um den Ölfloss durch den Wasserfluss zu ersetzen.

Der Flussgradient im Massenaustauschterm spielt eine wichtige Rolle in späteren analyti-



schen Umformungen. Es werden daher die Terme

$$\eta_{\mathbb{W}}^* = \frac{S_2 - S_2^*}{S_{\mathbb{W}}^* - S_{\mathbb{W}}}, \quad (5.8a)$$

$$\eta_{\mathbb{O}}^* = \frac{S_4 - S_4^*}{S_{\mathbb{W}}^* - S_{\mathbb{W}}} \quad (5.8b)$$

definiert, mit deren Hilfe die Massenaustauschraten  $M_1 = \varrho_{\mathbb{W}} \eta_2 \eta_{\mathbb{W}}^* \frac{\partial q_{\mathbb{W}}}{\partial x}$  und  $M_3 = \varrho_{\mathbb{O}} \eta_4 \eta_{\mathbb{O}}^* \frac{\partial q_{\mathbb{W}}}{\partial x}$  lauten.

## 5.3 Fraktionale Flussformulierungen für immobile nichtperkolierende Phasen

Die vier gekoppelten nichtlinearen partiellen Differentialgleichungen (5.6) können auf zwei partielle Differentialgleichungen und zwei algebraische Gleichungen reduziert werden, wenn angenommen wird, dass die nichtperkolierenden Phasen immobil sind. Die Gleichungen werden im ersten Unterkapitel aufgestellt. In einer Raumdimension mit Flussrandbedingungen kann der Druck als Variable eliminiert werden, so dass nur noch eine partielle Differentialgleichung und zwei algebraische Gleichungen übrig bleiben. Die Vereinfachung wird in zwei weiteren Unterkapiteln jeweils für die Schließbedingung ‘‘Vernachlässigbarer Druckunterschied’’ (siehe Kapitel 3.4.2) und die selbstkonsistente Schließbedingung (siehe Kapitel 3.4.1) durchgeführt.

### 5.3.1 Fraktionale Flussformulierung

Im Limes  $R_{25} \rightarrow \infty$ ,  $R_{45} \rightarrow \infty$  (Kapitel 4.3) und bei viskos dominierten Impulsaustauschen (Kapitel 4.2) sind nur die Komponenten  $\lambda_{11}$ ,  $\lambda_{13}$ ,  $\lambda_{31}$ ,  $\lambda_{33}$  der Mobilitätsmatrix von Null verschieden. Damit lauten die Volumenflüsse

$$q_{\mathbb{W}} = \lambda_{11}(\partial_x \Sigma_1 + F_1) + \lambda_{13}(\partial_x \Sigma_3 + F_3), \quad (5.9a)$$

$$q_{\mathbb{O}} = \lambda_{31}(\partial_x \Sigma_1 + F_1) + \lambda_{33}(\partial_x \Sigma_3 + F_3), \quad (5.9b)$$

$$q_2 = 0, \quad (5.9c)$$

$$q_4 = 0, \quad (5.9d)$$

	$S_{W0}$	$S_{20}$	$S_{40}$	$S_{W}^*$	$S_2^*$	$S_4^*$
Primäre Bewässerung	0	0	0	$1 - S_{O\text{im}}$	0	$S_{O\text{im}}$
Sekundäre Bewässerung	$S_{W\text{dr}}$	$S_{W\text{dr}}$	0	$1 - S_{O\text{im}}$	0	$S_{O\text{im}}$
Primäre Entwässerung	1	0	0	$S_{W\text{dr}}$	$S_{W\text{dr}}$	0
Sekundäre Entwässerung	$1 - S_{O\text{im}}$	0	$S_{O\text{im}}$	$S_{W\text{dr}}$	$S_{W\text{dr}}$	0

**Tabelle 5.1:** Die Anfangs- und Grenzsättigungen der vier Haupthysteresekurven.

wobei die von Null verschiedenen Komponenten der Mobilitätsmatrix durch

$$\lambda_{11}(S_W, S_2, S_4, \partial_t S_W) = \phi^2 \frac{R_{33}}{R_{13}^2 + R_{11}R_{33}} S_1^2, \quad (5.10a)$$

$$\lambda_{13}(S_W, S_2, S_4, \partial_t S_W) = \phi^2 \frac{R_{13}}{R_{13}^2 + R_{11}R_{33}} S_1 S_3, \quad (5.10b)$$

$$\lambda_{31}(S_W, S_2, S_4, \partial_t S_W) = \lambda_{13} = \phi^2 \frac{R_{13}}{R_{13}^2 + R_{11}R_{33}} S_1 S_3, \quad (5.10c)$$

$$\lambda_{33}(S_W, S_2, S_4, \partial_t S_W) = \phi^2 \frac{R_{11}}{R_{13}^2 + R_{11}R_{33}} S_3^2 \quad (5.10d)$$

geben sind. Dabei wurde die Onsager-Reziprozitätsbedingung  $R_{31} = R_{13}$  für die viskose Kopplung angenommen. Die Massenbilanzen (5.6) lauten damit

$$\phi \frac{\partial S_W}{\partial t} + \frac{\partial q_W}{\partial x} = 0 \quad (5.11a)$$

$$q_W \phi \frac{\partial S_2}{\partial t} = -M_1, \quad (5.11b)$$

$$q_O \phi \frac{\partial S_4}{\partial t} = -M_3, \quad (5.11c)$$

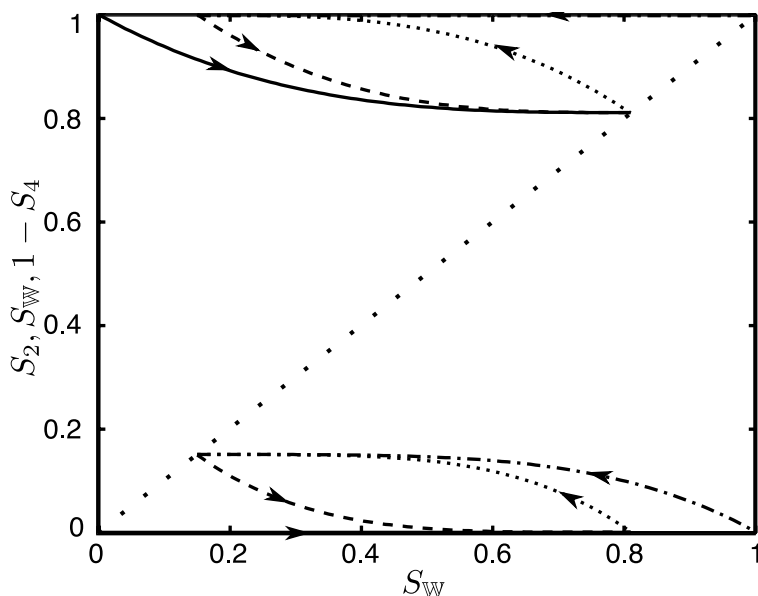
$$\frac{\partial}{\partial x} (q_W + q_O) = 0. \quad (5.11d)$$

Die Gleichungen (5.11b) und (5.11c) können integriert werden [Hilf 06c] und man erhält statt den beiden partiellen Differentialgleichungen die algebraischen Gleichungen

$$S_2(S_W, \partial_t S_W, x, t) = S_2^*(\partial_t S_W) + [S_{20}(x, t) - S_2^*(\partial_t S_W)] \left( \frac{S_W^*(\partial_t S_W) - S_W}{S_W^*(\partial_t S_W) - S_{W0}(x, t)} \right)^{\eta_2}, \quad (5.12a)$$

$$S_4(S_W, \partial_t S_W, x, t) = S_4^*(\partial_t S_W) + [S_{40}(x, t) - S_4^*(\partial_t S_W)] \left( \frac{S_W - S_W^*(\partial_t S_W)}{S_{W0}(x, t) - S_W^*(\partial_t S_W)} \right)^{\eta_4}, \quad (5.12b)$$

wobei  $S_{W0}(x, t), S_{20}(x, t), S_{40}(x, t)$  die Anfangsbedingungen zu Beginn eines Prozesses darstellen. Wird an einem Ort  $x$  während des gesamten betrachteten Zeitraums nur bewässert



**Abbildung 5.1:** Funktionale Abhängigkeit der nichtperkolierenden Sättigungen von der Wassersättigung  $S_2(S_W), S_4(S_W)$  aus Gleichung (5.12) für die Haupthysteresekurven. Durchgezogene Kurven zeigen die Zusammenhänge für primäre, gestrichelte Kurven für sekundäre Bewässerung. Die primären Entwässerungskurven werden durch gestrichelpunktete Kurven dargestellt und die sekundären durch gepunktete Kurven. Pfeile zeigen den Prozessverlauf an. Die primäre Bewässerungskurve für  $S_2(S_W)$  und die primäre Entwässerungskurve für  $S_4(S_W)$  fallen mit den Achsen zusammen. Außerdem wird die winkelhalbierende Kurve  $S_W(S_W)$  gepunktet gezeigt, da ihr Schnitt mit  $S_2(S_W), S_4(S_W)$  die irreduziblen Sättigungen  $S_{W,dr}, S_{O,im}$  zeigt.

oder entwässert, so ist  $S_{i0}(x, t) = S_{i0}(x, 0)$  nicht zeitabhängig. Die beschränkenden Sättigungen  $S_W^*, S_2^*, S_4^*$  sind durch Gleichungen (3.7) oder (3.9) gegeben. Abbildung 5.1 illustriert die funktionale Abhängigkeit der nichtperkolierenden Sättigungen von der Wassersättigung  $S_2(S_W), S_4(S_W)$  aus Gleichung (5.12) für die Haupthysteresekurven. Die vier Haupthysteresekurven sind primäre und sekundäre Bewässerung und Entwässerung. Sie werden mit den Parametern aus Tabelle 5.1 beschrieben. Bei einer primären Bewässerung ist im Medium zu Beginn des Prozesses Wasser weder in perkolierender noch in nichtperkolierender Form vorhanden. Bei einer sekundären Bewässerung ist Wasser in der maximal möglichen Menge in nichtperkolierender Form vorhanden. Für Öl und Entwässerung sind die Begriffe analog definiert.

Die Abbildung zeigt wie zu Beginn einer Entwässerung nichtperkolierendes Öl vernichtet wird und nichtperkolierendes Wasser produziert wird. Dabei nimmt die Produktionsrate ab, je weniger Wasser im System vorhanden ist. Die Produktion kommt zum Erliegen, wenn die residuale Wassersättigung  $S_{W,dr}$  erreicht wird. Zu Beginn einer Bewässerung wird nichtperkolierendes Öl produziert und nichtperkolierendes Wasser vernichtet. Hier nimmt die Produktionsrate ab, wenn die Wassersättigung zunimmt. Die Produktion kommt zum Erliegen,

wenn die residuale Ölsättigung  $S_{\text{Oim}}$  erreicht wurde.

Die Mobilitäten aus den Gleichungen (5.10) erlauben einen Vergleich der Mobilitätsparameter des neuen Modells und des DBRMMWBL-Modells aus Kapitel 2.1.4. Unter Vernachlässigung der viskosen Kopplung zwischen den Fluiden  $R_{13} = 0$  führt ein Koeffizientenvergleich zu

$$R_1 = \frac{\mu_{\text{W}}\phi^2}{K}, \quad (5.13a)$$

$$R_3 = \frac{\mu_{\text{O}}\phi^2}{K} \quad (5.13b)$$

mit den Abkürzungen  $R_1 = R_{13} + R_{14} + R_{15}$  und  $R_3 = R_{31} + R_{32} + R_{35}$ .

### 5.3.2 Fraktionale Flussformulierung mit vernachlässigbarem Druckunterschied

Mit Flussrandbedingungen und der Schließbedingung (3.17) des vernachlässigbaren Druckunterschiedes wird das Differentialgleichungssystem (5.11) weiter vereinfacht. Durch Flussrandbedingungen in einer Raumdimension kann der Druck als unabhängige Variable aufgrund der Inkompressibilität der Phasen eliminiert werden. Man erhält dann eine reine fraktionale Flussformulierung.

Gleichung (5.6d) impliziert, dass der Gesamtfluss

$$q_{\text{W}}(x, t) + q_{\text{O}}(x, t) = q_{\text{tot}}(t) \quad (5.14)$$

im gesamten porösen Medium konstant ist und nur von der Zeit abhängt. Durch Einsetzen der Gleichungen (5.9) und (3.17) in Gleichung (5.14) und Auflösen nach dem Druckgradienten erhält man

$$\frac{\partial P}{\partial x} = - \frac{q_{\text{tot}}(t) - (\lambda_{11} + \lambda_{31})F_1 - (\lambda_{13} + \lambda_{33})F_3}{\lambda_{11} + \lambda_{13} + \lambda_{31} + \lambda_{33}}. \quad (5.15)$$

Durch Einführung der Mobilitäten

$$\lambda_{\text{W}}(S_{\text{W}}, S_2, S_4) = \lambda_{11} + \lambda_{13}, \quad (5.16a)$$

$$\lambda_{\text{O}}(S_{\text{W}}, S_2, S_4) = \lambda_{33} + \lambda_{31} \quad (5.16b)$$

für Wasser  $\lambda_{\text{W}}$  und Öl  $\lambda_{\text{O}}$  kann die Analogie zum DBRMMWBL-Modell betont werden. Die fraktionale Flussfunktion  $f_{\text{W}}$  und die fraktionale Mobilität  $\lambda$  können dann ebenso in Analogie

zum DBRMMWBL-Modell [Aziz 79, Dull 92] als

$$f_{\text{W}}(S_{\text{W}}, S_2, S_4) = \frac{\lambda_{\text{W}}}{\lambda_{\text{W}} + \lambda_{\text{O}}}, \quad (5.17a)$$

$$\lambda(S_{\text{W}}, S_2, S_4) = \frac{\lambda_{11}\lambda_{33} - \lambda_{13}\lambda_{31}}{\lambda_{\text{W}} + \lambda_{\text{O}}} \quad (5.17b)$$

eingeführt werden. Die fraktionale Mobilität  $\lambda$  ist dabei die harmonisch gemittelte Mobilität  $\bar{\lambda} = \lambda_{\text{W}}\lambda_{\text{O}}/(\lambda_{\text{W}} + \lambda_{\text{O}})$ , wenn die viskose Kopplung zwischen den perkolierenden Phasen vernachlässigbar ist, i.e.  $\lambda_{13} = 0, \lambda_{31} = 0$ .<sup>1</sup>

Durch Einsetzen der Gleichungen (5.15) und (5.17) in Gleichung (5.11a) erhält man die partielle Differentialgleichung

$$\phi \frac{\partial S_{\text{W}}}{\partial t} + q_{\text{tot}}(t) \frac{\partial}{\partial x} f_{\text{W}} + \frac{\partial}{\partial x} [\lambda (F_1 - F_3)] = 0 \quad (5.18)$$

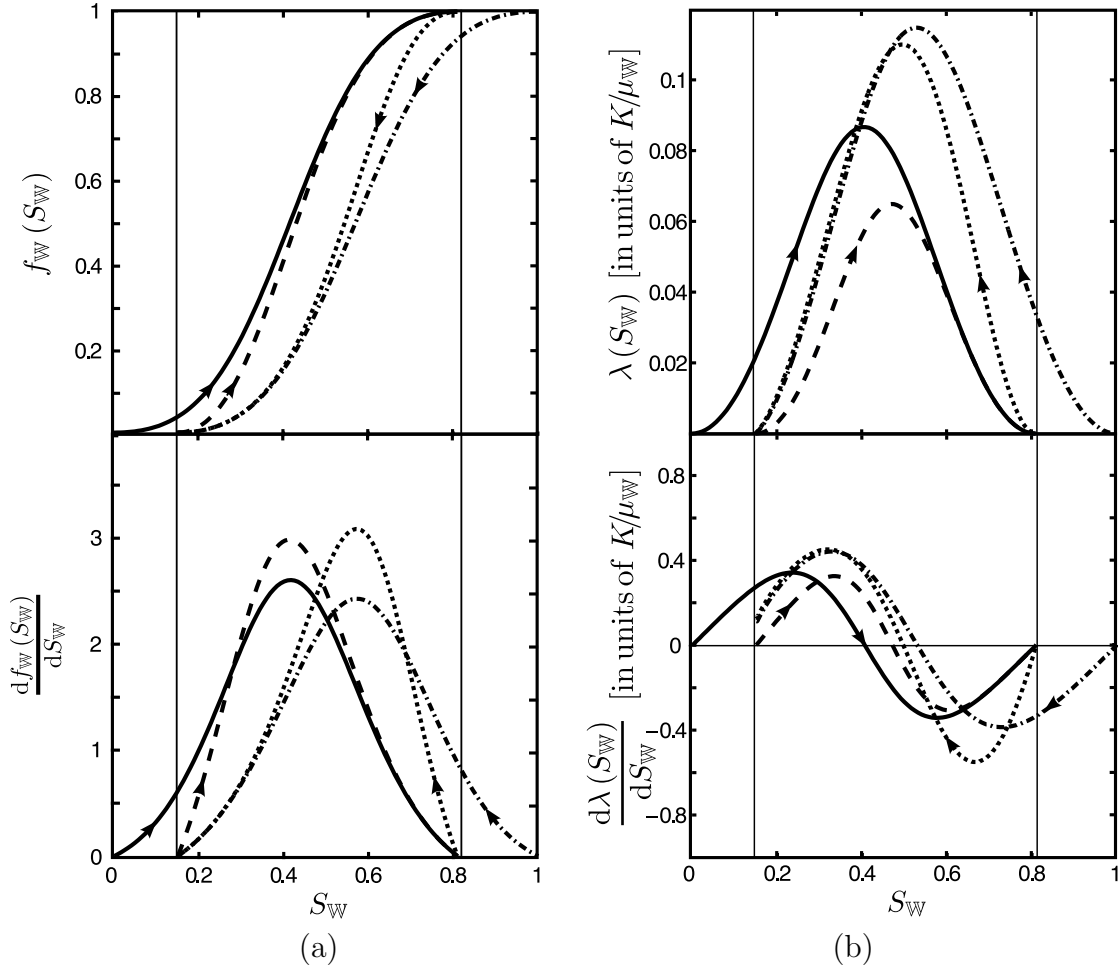
für die Wassersättigung  $S_{\text{W}}$ . Die Sättigungen der nichtperkolierenden Phasen  $S_2, S_4$  sind über die algebraischen Gleichungen (5.12) bestimmt.

Abbildung 5.2 zeigt die Funktionen  $f_{\text{W}}, \lambda$  und ihre Ableitungen für die vier Haupthysteresekurven für beispielhafte Parameterwerte aus [Hilf 06a]. Die fraktionalen Flussfunktionen sind monoton steigend mit einem Wendepunkt. Ihre Ableitungen haben daher ein Maximum. Die fraktionalen Mobilitäten haben ein Maximum und zwei Wendepunkte. Daher haben ihre Ableitungen, ein Maximum, einen Nulldurchgang und ein Minimum. Diese Eigenschaften werden von zentraler Bedeutung für die analytischen Lösungen sein, die in Kapitel 7 und 8 vorgestellt werden.

### 5.3.3 Fraktionale Flussformulierung mit selbstkonsistenter Schließbedingung

Die fraktionale Flussformulierung mit der selbstkonsistenten Schließbedingung (3.14) ist nur geringfügig aufwendiger als die fraktionale Flussformulierung für die Schließbedingung vernachlässigbarer Druckunterschiede. Der Gesamtfluss ist auch hier eine Erhaltungsgröße und es gilt Gleichung (5.14). Durch Einsetzen der Gleichungen (5.9) und (3.14) in Gleichung

<sup>1</sup>Man beachte, dass der Zähler in Gleichung (5.17b) die Determinante einer reduzierten Mobilitätsmatrix  $\Lambda^{\text{red}} = (\lambda_{ij})$  der perkolierenden Phasen  $i, j \in \{1, 3\}$  ist.



**Abbildung 5.2:** Die vier Haupthysteresekurven der fraktionalen Flussfunktion  $f_{\text{W}}$  und ihrer Ableitung  $df_{\text{W}}/dS_{\text{W}}$  in Abbildung (a) und der fraktionalen Mobilität  $\lambda$  und ihrer Ableitung  $d\lambda/dS_{\text{W}}$  in Abbildung (b). Durchgezogene Kurven zeigen die Zusammenhänge für primäre, gestrichelte Kurven für sekundäre Bewässerung. Die primären Entwässerungskurven werden durch gestrichelpunktete Kurven dargestellt und die sekundären durch gepunktete Kurven. Pfeile zeigen den Prozessverlauf an.

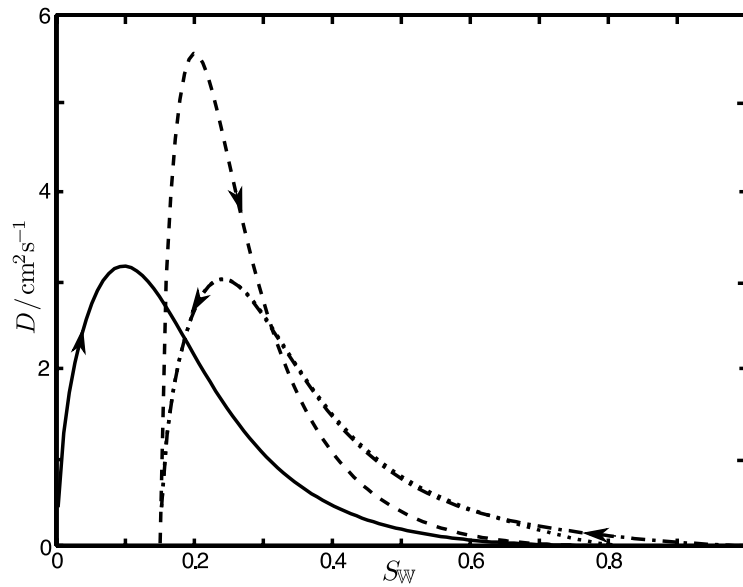
(5.14) und Auflösen nach dem Druckgradienten erhält man

$$\frac{\partial P_1}{\partial x} = -\frac{1}{\lambda_{\text{W}} + \lambda_{\text{O}}} \left( q_{\text{tot}}(t) - \lambda_{\text{W}} F_1 - \lambda_{\text{O}} F_3 - \lambda_{\text{O}} \frac{\partial P_c}{\partial x} \right) \quad (5.19)$$

wobei die Mobilitäten wie in den Gleichungen (5.16) definiert sind. Die fraktionale Flussfunktion  $f_{\text{W}}$  und die fraktionale Mobilität  $\lambda$  werden wie in Gleichung (5.17) definiert.

Durch Einsetzen der Gleichungen (3.10), (3.11), (3.15), (5.19) und (5.17) in Gleichung (5.9a) erhält man für den Wasserfluss

$$q_{\text{W}} = f_{\text{W}} q_{\text{tot}}(t) + \lambda (F_1 - F_3) + \lambda \frac{\partial P_c}{\partial x}. \quad (5.20)$$



**Abbildung 5.3:** Die vier Haupthysteresekurven der verallgemeinerten Diffusionskoeffizientenfunktion  $D(S_w)$ . Durchgezogene Kurven zeigen die Zusammenhänge für primäre, gestrichelte Kurven für sekundäre Bewässerung. Die primären Entwässerungskurven werden durch gestrichpunktete Kurven dargestellt und die sekundären durch gepunktete Kurven. Pfeile zeigen den Prozessverlauf an.

Setzt man diesen Fluss in die Massenbilanz für Wasser (5.11a) ein, erhält man eine nichtlineare partielle Differentialgleichung

$$\phi \frac{\partial S_w}{\partial t} + q_{\text{tot}}(t) \frac{\partial}{\partial x} f_w + \frac{\partial}{\partial x} [\lambda (F_1 - F_3)] + \frac{\partial}{\partial x} \left( \lambda \frac{\partial P_c}{\partial x} \right) = 0 \quad (5.21)$$

für die Wassersättigung  $S_w$ . Die Sättigungen der nichtperkolierenden Phasen  $S_2, S_4$  sind über die algebraischen Gleichungen (5.12) bestimmt. Da der letzte Term wie eine nichtlineare Diffusion wirkt, wird ein nichtlinearer Diffusionskoeffizient

$$D(S_w) = -\lambda(S_w, S_2(S_w), S_4(S_w)) \frac{d}{dS_w} P_c(S_w, S_2(S_w), S_4(S_w)) \quad (5.22)$$

eingeführt. Dieser ist in Abbildung 5.3 für die vier Haupthysteresekurven dargestellt. Der Koeffizient verschwindet an den Endpunkten der Kurven und ist für alle Sättigungen  $S_w \in [0, 1]$  positiv.

## 5.4 Fraktionale Flussformulierung für einen hyperbolischen Limes

Auch für mobile nichtperkolierende Phasen ist eine fraktionale Flussformulierung möglich. Sie wird hier für einen (weitgehend) hyperbolischen Limes vorgestellt.<sup>2</sup> Den Limes erhält man mit der Schließbedingung (3.17) und den Näherungen (4.2), (4.7) und (4.8) aus den Gleichungen (5.6). Der Gesamtfluss ist wiederum erhalten und durch Einsetzen von (3.17) in (5.14) erhält man für den Druckgradienten

$$\frac{\partial P}{\partial x} = -\frac{q_{\text{tot}}(t)}{\lambda_{\text{tot}}}, \quad (5.23)$$

wobei die Gesamtmobilität  $\lambda_{\text{tot}}$  über

$$\lambda_{\text{tot}}(S_{\text{w}}, S_2, S_4) = \lambda_1 + \lambda_2 + \lambda_3 + \lambda_4 \quad (5.24)$$

mit

$$\begin{aligned} \lambda_1(S_{\text{w}}, S_2, S_4) = & \phi^2 [\Lambda_{11}(S_{\text{w}} - S_2)^2 + \Lambda_{12}(S_{\text{w}} - S_2)S_2 \\ & + \Lambda_{13}(S_{\text{w}} - S_2)(1 - S_{\text{w}} - S_4) + \Lambda_{14}(S_{\text{w}} - S_2)S_4], \end{aligned} \quad (5.25a)$$

$$\lambda_2(S_{\text{w}}, S_2, S_4) = \phi^2 [\Lambda_{21}S_2(S_{\text{w}} - S_2) + \Lambda_{22}S_2^2 + \Lambda_{23}S_2(1 - S_{\text{w}} - S_4) + \Lambda_{24}S_2S_4], \quad (5.25b)$$

$$\begin{aligned} \lambda_3(S_{\text{w}}, S_2, S_4) = & \phi^2 [\Lambda_{31}(1 - S_{\text{w}} - S_4)(S_{\text{w}} - S_2) + \Lambda_{32}(1 - S_{\text{w}} - S_4)S_2 \\ & + \Lambda_{33}(1 - S_{\text{w}} - S_4)^2 + \Lambda_{34}(1 - S_{\text{w}} - S_4)S_4], \end{aligned} \quad (5.25c)$$

$$\lambda_4(S_{\text{w}}, S_2, S_4) = \phi^2 [\Lambda_{41}S_4(S_{\text{w}} - S_2) + \Lambda_{42}S_4S_2 + \Lambda_{43}S_4(1 - S_{\text{w}} - S_4) + \Lambda_{44}S_4^2], \quad (5.25d)$$

wobei  $\Lambda_{ij} = [\tilde{R}^{-1}]_{ij}$  gilt, definiert ist. Außerdem werden fraktionale Flussfunktionen

$$f_{\text{w}}(S_{\text{w}}, S_2, S_4) = \frac{\lambda_1 + \lambda_2}{\lambda_{\text{tot}}}, \quad (5.26a)$$

$$f_2(S_{\text{w}}, S_2, S_4) = \frac{\lambda_2}{\lambda_{\text{tot}}}, \quad (5.26b)$$

$$f_4(S_{\text{w}}, S_2, S_4) = \frac{\lambda_4}{\lambda_{\text{tot}}} \quad (5.26c)$$

<sup>2</sup>Das Wort "weitgehend" deutet hier an, dass man im Allgemeinen einen hyperbolischen Limes erwartet. Es gibt jedoch Bereiche im Phasenraum, in welchen das System partieller Differentialgleichungen seinen Charakter verändert (siehe Kapitel 2.2.3.1 und 2.2.3.2) und elliptisch werden kann.



für den Wasserfluss und den Fluss der nichtperkolierenden Phasen eingeführt. Die fraktionalen Flussfunktionen der perkolierenden Phasen sind analog definiert. Durch Einsetzen der Gleichungen (5.23) und (5.26) in Gleichung (5.6) mit den Termen (5.7) erhält man für Flussrandbedingungen in einer Raumdimension die Massenbilanzen

$$\frac{\partial S_{\text{W}}}{\partial t} + \frac{q(t)}{\phi} \frac{\partial f_{\text{W}}}{\partial x} = 0, \quad (5.27a)$$

$$\frac{\partial S_2}{\partial t} + \frac{q(t)}{\phi} \left( \frac{\partial f_2}{\partial x} - \eta_2 \eta_{\text{W}}^* \frac{\partial f_{\text{W}}}{\partial x} \right) = 0, \quad (5.27b)$$

$$\frac{\partial S_4}{\partial t} + \frac{q(t)}{\phi} \left( \frac{\partial f_4}{\partial x} - \eta_4 \eta_{\text{O}}^* \frac{\partial f_{\text{W}}}{\partial x} \right) = 0. \quad (5.27c)$$

Für die mathematische Analyse dieses Systems von drei nichtlinearen gekoppelten partiellen Differentialgleichungen ist es praktisch, einen Vektor  $u$  der primären Variablen

$$u = (S_{\text{W}}, S_2, S_4)^T \quad (5.28)$$

einzuführen. Mit dieser Notation kann Gleichung (5.27) in Form einer allgemeinen quasi linearen Advektionsgleichung

$$\frac{\partial u}{\partial t} + A(u) \frac{\partial u}{\partial x} = 0 \quad (5.29)$$

mit der Matrixfunktion

$$A(u) = \frac{q_{\text{tot}}(t)}{\phi} \begin{pmatrix} \partial_{S_{\text{W}}} f_{\text{W}} & \partial_{S_2} f_{\text{W}} & \partial_{S_4} f_{\text{W}} \\ \partial_{S_{\text{W}}} f_2 - \eta_2 \eta_{\text{W}}^* \partial_{S_{\text{W}}} f_{\text{W}} & \partial_{S_2} f_2 - \eta_2 \eta_{\text{W}}^* \partial_{S_2} f_{\text{W}} & \partial_{S_4} f_2 - \eta_2 \eta_{\text{W}}^* \partial_{S_4} f_{\text{W}} \\ \partial_{S_{\text{W}}} f_4 - \eta_4 \eta_{\text{O}}^* \partial_{S_{\text{W}}} f_{\text{W}} & \partial_{S_2} f_4 - \eta_4 \eta_{\text{O}}^* \partial_{S_2} f_{\text{W}} & \partial_{S_4} f_4 - \eta_4 \eta_{\text{O}}^* \partial_{S_4} f_{\text{W}} \end{pmatrix} \quad (5.30)$$

geschrieben werden. Der Charakter des Gleichungssystems wird durch die Eigenwerte und die Diagonalisierbarkeit von  $A$  bestimmt. Es treten sowohl hyperbolische als auch elliptische Bereiche im Phasenraum auf.

## **Teil II**

# **Analytische und quasianalytische Lösungen**

In diesem Teil der Dissertation werden analytische und quasianalytische Lösungen für vier Gruppen von Anfangs- und Randwertproblemen vorgestellt. Bei allen vier Problemen wird die Näherung “immobiler nichtperkolierende Phasen” verwendet. Sie unterscheiden sich jedoch in der jeweils verwendeten Schließbedingung. Anhand der analytischen und quasianalytischen Lösungen können Fragen bezüglich der Wohlgestelltheit deutlich besser als bei numerischen Lösungsmethoden untersucht werden. Außerdem benötigen Parameterstudien einen deutlich geringeren Zeitaufwand. Die Lösungen dienen ferner als Referenzprobleme für die im Teil III vorgestellten numerischen Algorithmen. Den Kapiteln der vier Anfangs- und Randwertprobleme ist ein Kapitel vorangestellt, in welchem die Methode der Charakteristiken auf einen hyperbolischen Limes des Modells angewendet wird. Diese Methode wird in den beiden folgenden Kapiteln zum verallgemeinerten Buckley-Leverett-Problem (Kapitel 7) und zur schwerkraftgetriebenen Umverteilung (Kapitel 8) verwendet. Teile dieser beiden Kapitel werden auch in [Dost 10a, Dost 10b] veröffentlicht. Im hyperbolischen Limes wird das Gleichungssystem durch Vernachlässigung des Druckunterschiedes (Kapitel 3.4.2) geschlossen. Die verbleibenden zwei Kapitel dieses Teils der Dissertation verwenden die selbstkonsistente Schließbedingung aus Kapitel 3.4.1. Im Kapitel 9 wird eine Verallgemeinerung des McWhorter-Sunada-Problems vorgestellt. Das Kapitel 10 ist eine Verallgemeinerung der kapillarkraftgetriebenen Umverteilung nach Philip. Kapitel 9 und 10 werden auch in [Dost 10c] veröffentlicht.

## 6 Allgemeine Lösung für eine hyperbolische Differentialgleichung

Eine allgemeine Lösung für die quasi lineare hyperbolische partielle Differentialgleichung (5.18) kann durch die Methode der Charakteristiken gewonnen werden. Allerdings erfordern Stoßwellen und räumliche Unstetigkeiten in den Flussfunktionen eine besondere Diskussion. Daher wird der allgemeinen Lösung ein eigenes Kapitel gewidmet. Es sei an dieser Stelle darauf hingewiesen, dass für Differentialgleichungen mit unstetigen Lösungen üblicherweise die schwache Formulierung der Gleichungen [LeVe 07] verwendet wird. Durch die Umformung der partiellen Differentialgleichung in eine Schar von gewöhnlichen Differentialgleichungen für Charakteristiken und durch eine Konstruktionsvorschrift bei Mehrwertigkeiten in den Feldvariablen ist eine schwache Formulierung nicht nötig. In der Diskussion werden einige charakteristische Sättigungen eingeführt, die durch Indizes markiert werden. Um dabei eine Überindizierung der Wassersättigung zu vermeiden, wird in den Kapiteln dieses Teils II der Dissertation der Index  $\mathbb{W}$  bei der Wassersättigung  $S_{\mathbb{W}}$  weggelassen. Damit steht in diesem Kapitel  $S$  anstatt  $S_{\mathbb{W}}$  für die Wassersättigung und  $S_0$  anstatt  $S_{\mathbb{W}0}$  für ihren Anfangswert.

### 6.1 Methode der Charakteristiken

Im hyperbolischen Limes mit immobilen nichtperkolierenden Phasen ist die nichtlineare partielle Differentialgleichung (5.18) zu lösen, wobei die algebraischen Gleichungen (5.12) für die nichtperkolierenden Phasen zu berücksichtigen sind.

Die Flussterme werden zu einem advektiven Gesamtfluss

$$G(S, S_2, S_4, t) = \frac{1}{\phi} [q_{\text{tot}}(t) f_{\mathbb{W}}(S, S_2, S_4) + F_G(t) \lambda(S, S_2, S_4)] \quad (6.1)$$

zusammengefasst, wobei  $F_G = \sin \vartheta(t)(\varrho_{\mathbb{W}} - \varrho_{\mathbb{O}})g$  gilt. Durch Einsetzen der Gleichungen

(5.12) für die immobilen nichtperkolierenden Phasen gilt

$$S_2 = S_2(S, \partial_t S, x, t) = S_2(S, S_0(x, t), S_{20}(x, t)), \quad (6.2a)$$

$$S_4 = S_4(S, \partial_t S, x, t) = S_4(S, S_0(x, t), S_{40}(x, t)), \quad (6.2b)$$

wobei beim jeweils zweiten Gleichheitszeichen berücksichtigt wurde, dass die explizite räumliche Abhängigkeit nur von den Anfangsbedingungen  $S_0, S_{20}, S_{40}$  herrührt und die Abhängigkeit von  $\partial_t S$ , durch eine explizite Zeitabhängigkeit der Anfangsbedingungen und einem Vergleich von  $S$  mit  $S_0$  ausgedrückt werden kann. Die partielle Differentialgleichung (5.18) lautet damit

$$\frac{\partial S(x, t)}{\partial t} + \frac{\partial}{\partial x} G(S(x, t), S_0(x, t), S_{20}(x, t), S_{40}(x, t), t) = 0, \quad (6.3)$$

mit diesem Gesamtfluss. Durch Ausdifferenzieren von Gleichung (6.3) erhält man die quasi lineare partielle Differentialgleichung

$$\frac{\partial S}{\partial t} + \frac{\partial G}{\partial S} \frac{\partial S}{\partial x} = - \frac{\partial G}{\partial S_0} \frac{\partial S_0}{\partial x} - \frac{\partial G}{\partial S_{20}} \frac{\partial S_{20}}{\partial x} - \frac{\partial G}{\partial S_{40}} \frac{\partial S_{40}}{\partial x}. \quad (6.4)$$

Die Untermannigfaltigkeit  $S = S(x, t)$  im  $(x, t, S)$ -Raum, die diese quasi lineare partielle Differentialgleichung löst, erhält man aus der Lösung des autonomen Systems von gewöhnlichen Differentialgleichungen

$$\frac{dt}{d\tau} = 1, \quad (6.5a)$$

$$\frac{dx}{d\tau} = g(S(\tau), x(\tau), t(\tau)), \quad (6.5b)$$

$$\frac{dS}{d\tau} = h(S(\tau), x(\tau), t(\tau)) \quad (6.5c)$$

für die Charakteristiken (siehe Kapitel 2.2.5). Dabei ist  $\tau$  ein Kurvenparameter. Die partiellen Ableitungen von  $G$  werden als Funktionen

$$g(S, x, t) = \frac{\partial G}{\partial S}, \quad (6.6a)$$

$$h(S, x, t) = - \frac{\partial G}{\partial S_0} \frac{\partial S_0}{\partial x} - \frac{\partial G}{\partial S_{20}} \frac{\partial S_{20}}{\partial x} - \frac{\partial G}{\partial S_{40}} \frac{\partial S_{40}}{\partial x} \quad (6.6b)$$

von  $S, x$  und  $t$  Zeit geschrieben. Dabei ist  $g$  die Geschwindigkeit der Charakteristik und  $h$  die Änderungsrate der Sättigung entlang einer Charakteristik. Die Anfangsdaten werden

parametrisch als

$$t = t_0(\xi), \quad (6.7a)$$

$$x = x_0(\xi), \quad (6.7b)$$

$$S = S_0(\xi), \quad (6.7c)$$

geschrieben, wobei  $t_0, x_0, S_0$  gegebene Funktionen sind. Die Abbildung  $[\xi_\ell, \xi_r] \rightarrow \mathbb{R}^3$  mit  $\xi \mapsto (t_0(\xi), x_0(\xi), S_0(\xi))$  stellt eine Parametrierung der Anfangsdaten dar. Durch Integration der Gleichungen (6.5) von  $\tau_0$  bis  $\tau$  erhält man

$$t(\tau, \xi) = t_0(\xi) + \tau - \tau_0, \quad (6.8a)$$

$$x(\tau, \xi) = x_0(\xi) + \int_{\tau_0}^{\tau} g(S(\tau'), x(\tau'), t(\tau')) d\tau', \quad (6.8b)$$

$$S(\tau, \xi) = S_0(\xi) + \int_{\tau_0}^{\tau} h(S(\tau'), x(\tau'), t(\tau')) d\tau' \quad (6.8c)$$

mit den Integrationskonstanten  $x_0(\xi), S_0(\xi)$ . Der Anfangszeitpunkt  $t_0(\xi)$  ist dabei durch das Cauchy<sup>1</sup>-Problem gegeben. Für gewöhnlich ist man an Lösungen für Anfangsdaten interessiert, welche in der  $(x, S)$ -Ebene zu einem Zeitpunkt  $t_0$  gegeben sind. In diesem Fall gilt  $t_0(\xi) = t_0$  für alle  $\xi \in [\xi_\ell, \xi_r]$ . Durch die Wahl  $\tau_0 = t_0$  erhält man  $\tau = t$ , so dass  $\tau$  eliminiert werden kann. Die Lösung für  $t > t_0$  lautet

$$x(t, \xi) = x_0(\xi) + \int_{t_0}^t g(S(t'), x(t'), t') dt', \quad (6.9a)$$

$$S(t, \xi) = S_0(\xi) + \int_{t_0}^t h(S(t'), x(t'), t') dt', \quad (6.9b)$$

wobei  $\xi$  ein Kurvenparameter in der  $(x, S)$ -Ebene darstellt.

Wenn man  $\xi$  aus dieser Darstellung eliminiert, um Profile  $S(x, t)$  zum Zeitpunkt  $t$  zu erhalten, können mehrwertige Lösungen entstehen. Mehrwertige Sättigungen an einem Punkt  $x$  sind zu keinem Zeitpunkt physikalisch möglich. Sie deuten auf eine Sprungunstetigkeit im Sättigungsprofil hin.

---

<sup>1</sup>Augustin Louis Cauchy (1789-1857), französischer Mathematiker

## 6.2 Sprungunstetigkeiten in den Sättigungen

Ort und Höhe von Sprungunstetigkeiten in den Sättigungsprofilen  $S(x, t)$  werden mit Hilfe der inversen Funktion  $x(S, t)$  bestimmt. Eine Mehrwertigkeit in  $S(x, t)$  entspricht nichtmonotonen Kurven  $x(S, t)$ . Nichtmonotone  $x(S, t)$  haben lokale Maxima  $x_{\max}$  und Minima  $x_{\min}$ . Das Ersetzen von Mehrwertigkeiten durch Sprungunstetigkeiten in  $S(x, t)$  geschieht durch Ersetzen der nichtmonotonen Abschnitte in  $x(S, t)$  durch konstante Plateaus. In der Literatur aus der Gasdynamik werden solche Sprungunstetigkeiten Stoßwellen genannt [Land 66].

Die Aufgabenstellung lautet damit: Bestimme für jedes Paar  $(x_{\max}^{(i)}(t), x_{\min}^{(i)}(t))$  den Ort  $x^{(i)}(t)$ , die Sättigung stromaufwärts  $S_-^{(i)}(t)$  und die Sättigung stromabwärts  $S_+^{(i)}(t)$  der Sprungunstetigkeit, so dass die Bedingungen

$$x_{\min}^{(i)}(t) < x^{(i)}(t) < x_{\max}^{(i)}(t), \quad (6.10a)$$

$$x(S_-^{(i)}, t) = x^{(i)}(t), \quad (6.10b)$$

$$x(S_+^{(i)}, t) = x^{(i)}(t), \quad (6.10c)$$

$$\int_{S_-^{(i)}(t)}^{S_+^{(i)}(t)} x(S, t) dS = x^{(i)}(t) (S_+^{(i)}(t) - S_-^{(i)}(t)) \quad (6.10d)$$

erfüllt sind. Die Sättigungen stromauf- und abwärts sind dabei als

$$S_-^{(i)}(t) := \lim_{\epsilon \rightarrow 0} S(x^{(i)}(t) - \epsilon, t), \quad (6.11a)$$

$$S_+^{(i)}(t) := \lim_{\epsilon \rightarrow 0} S(x^{(i)}(t) + \epsilon, t) \quad (6.11b)$$

definiert.

Für kontinuierliche  $x(S, t)$  wird die Existenz der Lösung durch den Mittelwertsatz garantiert. Die Gleichungen (6.10b-d) sind drei nichtlineare Gleichungen für die drei Unbekannten  $x^{(i)}(t)$ ,  $S_+^{(i)}(t)$ ,  $S_-^{(i)}(t)$  und müssen im Allgemeinen numerisch gelöst werden. Zudem ist die Lösung im Allgemeinen nicht eindeutig. Nach der Bestimmung aller möglichen Tripel  $(x^{(i)}(t), S_+^{(i)}(t), S_-^{(i)}(t))$  für alle Paare  $(x_{\min}^{(i)}(t), x_{\max}^{(i)}(t))$  wird  $x(S, t)$  durch  $x^{(i)}(t)$  im Intervall  $S \in [S_-^{(i)}(t), S_+^{(i)}(t)]$  ersetzt. Damit erhält man eine einwertige Lösung  $S(x, t)$ . Es ist möglich, dass zu einem Paar  $(x_{\min}^{(i)}(t), x_{\max}^{(i)}(t))$  mehrere Tripel  $(x^{(i)}(t), S_+^{(i)}(t), S_-^{(i)}(t))$

die Gleichungen (6.10b-d) lösen. Dann wird  $x(S, t)$  durch  $x^{(i)}(t)$  in  $S \in [S_-^{(i)}(t), S_+^{(i)}(t)]$  iterativ für alle Tripel ersetzt, bis  $S(x, t)$  im ganzen Gebiet eindeutig ist.

Der Ort  $x^{(i)}(t)$  der Unstetigkeit ist im Allgemeinen zeitabhängig. Die Geschwindigkeit  $v^{(i)}$ , mit der sich die Unstetigkeit bewegt, ist durch die Massenerhaltungsgleichung bestimmt<sup>2</sup>

$$v^{(i)}(t) = \frac{G_+^{(i)}(S_+^{(i)}(t), t) - G_-^{(i)}(S_-^{(i)}(t), t)}{S_+^{(i)}(t) - S_-^{(i)}(t)}, \quad (6.12)$$

wobei die advektiven Flussfunktionen stromaufwärts (+) und stromabwärts (-) durch

$$G_-^{(i)}(S, t) := \lim_{\epsilon \rightarrow 0} G(S, S_0(x^{(i)}(t) - \epsilon), S_{20}(x^{(i)}(t) - \epsilon), S_{40}(x^{(i)}(t) - \epsilon), t) \quad (6.13a)$$

$$G_+^{(i)}(S, t) := \lim_{\epsilon \rightarrow 0} G(S, S_0(x^{(i)}(t) + \epsilon), S_{20}(x^{(i)}(t) + \epsilon), S_{40}(x^{(i)}(t) + \epsilon), t) \quad (6.13b)$$

mit  $\epsilon > 0$  gegeben sind. Man beachte, dass die Rankine<sup>3</sup>-Hugoniot<sup>4</sup>-Bedingung (6.12) direkt aus der Massenerhaltung folgt und daher über Unstetigkeiten hinaus allgemeine Gültigkeit besitzt.

### 6.3 Räumliche Unstetigkeiten in der Flussfunktion

In der Differentialgleichung (6.4) kann eine zweite Unstetigkeit auftreten, wenn die Anfangsbedingungen  $S_0(x, S_{20}(x), S_{40}(x))$  unstetig sind. Angenommen am Ort  $x = x^d$  sei mindestens eine der Anfangssättigungen  $S_{i0}$  mit  $i \in \{\mathbb{W}, 2, 4\}$  unstetig. Dann ist Gleichung (6.4) bei  $x = x^d$  nicht anwendbar, da dort die rechte Seite singulär ist. Gleichung (6.4) ist die differentiale Form der Massenerhaltungs- bzw. Volumenerhaltungsgleichung<sup>5</sup> für die Wasserphase. Es bietet sich an, das Gebiet an der Stelle  $x = x^d$  zu teilen und Kopplungsvorschriften zu formulieren. Der Fluss über die Unstetigkeit  $x^d$  muss erhalten bleiben. Damit gilt die Bedingung

$$G_-(S_-^d(t), t) = G_+(S_+^d(t), t) \quad (6.14)$$

<sup>2</sup>Dieser Zusammenhang wurde für die Eulergleichungen für kompressible Gase von Rankine und Hugoniot erkannt und Gleichung (6.12) wird daher auch Rankine-Hugoniot-Sprungbedingung genannt.

<sup>3</sup>William John Macquorn Rankine (1820-1872), schottischer Physiker und Ingenieur

<sup>4</sup>Pierre-Henri Hugoniot (1851-1887), französischer Ballistiker

<sup>5</sup>Das physikalische Gesetz der Massenerhaltung lässt sich für inkompressible Fluide in eine Volumenerhaltung übersetzen. Bei inkompressiblen Fluiden ist nämlich die Dichte ein konstanter Faktor der aus der Massenerhaltung heraus dividiert werden kann. Das Ergebnis ist eine Volumenerhaltungsgleichung.



für alle Zeiten  $t > 0$ . Die Limites der Flussfunktionen sind durch

$$G_-(S, t) := \lim_{\epsilon \rightarrow 0} G(S, S_0(x^d - \epsilon), S_{20}(x^d - \epsilon), S_{40}(x^d - \epsilon), t), \quad (6.15a)$$

$$G_+(S, t) := \lim_{\epsilon \rightarrow 0} G(S, S_0(x^d + \epsilon), S_{20}(x^d + \epsilon), S_{40}(x^d + \epsilon), t) \quad (6.15b)$$

und die Grenzsättigungen durch

$$S_-^d(t) := \lim_{\epsilon \rightarrow 0} S(x^d - \epsilon, t), \quad (6.16a)$$

$$S_+^d(t) := \lim_{\epsilon \rightarrow 0} S(x^d + \epsilon, t) \quad (6.16b)$$

mit  $\epsilon > 0$  definiert. Gleichung (6.14) kann als Spezialfall der Rankine-Hugoniot-Bedingung (6.12) gesehen werden, da die Anfangsbedingungen räumlich fest sind und somit für diese Unstetigkeit  $v = 0$  gelten muss. Die Gleichung (6.14) stellt außerdem eine implizite Bedingung an die links- und rechtsseitigen Grenzsättigungen der Unstetigkeit dar. Trifft eine Charakteristik auf die Unstetigkeit in den Flussfunktionen, so kann über die Flusserhaltung die Singularität auf der rechten Seite von Gleichung (6.5c) gelöst werden. Für monotone Flussfunktionen  $G$  ist die Lösung eindeutig. Für nichtmonotone Flussfunktionen kann die Singularität nicht eindeutig mit Gleichung (6.14) gelöst werden und es werden weitere Überlegungen erforderlich. In beiden Fällen muss diskutiert werden, wie die Anfangsbedingungen an der Unstetigkeit parametrisiert werden. In Kapitel 7 treten räumliche Unstetigkeiten in monotonen Flussfunktionen, in Kapitel 8 in nichtmonotonen Flussfunktionen mit einem Extremum auf.

## 7 Verallgemeinertes Buckley-Leverett-Problem

In diesem Kapitel wird die Methode der Charakteristiken angewendet, um das verallgemeinerte Buckley-Leverett-Problem zu lösen. Nach der Diskussion der Anfangs- und Randbedingungen, sowie der Überbrückung einer räumlichen Unstetigkeit in der fraktionalen Flussfunktion für eine monotone fraktionale Flussfunktion, werden zwei Beispiele gegeben. Die physikalische Bedeutung der Lösungen wird am Ende des jeweiligen Beispiels diskutiert.

### 7.1 Anfangs- und Randbedingungen und Parameter

Das Buckley-Leverett-Problem bezieht sich auf eine hyperbolische Näherung des DBRM-MWBL-Modells, deren Popularität in ihrer Einfachheit und Relevanz für petrophysikalische Anwendungen [Lake 89] begründet liegt. Dabei wird ein eindimensionales homogenes poröses Medium betrachtet, welches senkrecht zur Schwerkraft orientiert ist ( $\vartheta = 0$  in Gleichung (3.11)). Damit verschwinden die Körperkräfte für die perkolierenden Phasen

$$F_G = 0 \tag{7.1}$$

in Gleichung (6.1). Dem Medium wird ein Volumenstrom

$$q_{\text{tot}}(t) = (1 - 2\Theta(t - t_r)) q_0, \tag{7.2}$$

aufgeprägt, wobei  $q_0 > 0$  gilt und  $t_r$  den Zeitpunkt bezeichnet, an welchem die Strömungsrichtung umgedreht wird. Die Anfangsbedingungen des Buckley-Leverett-Problems lauten

$$S(x, t_0) = S_0(x) = S_\ell + (S_r - S_\ell) \Theta(x), \quad (7.3a)$$

$$S_2(x, t_0) = S_{20}(x) = S_{2\ell} + (S_{2r} - S_{2\ell}) \Theta(x), \quad (7.3b)$$

$$S_4(x, t_0) = S_{40}(x) = S_{4\ell} + (S_{4r} - S_{4\ell}) \Theta(x) \quad (7.3c)$$

im unendlichen Gebiet  $-\infty < x < \infty$ . Man beachte dabei, dass nach Gleichung (3.8) die Heaviside-Sprungfunktion bei  $x = 0$  unbestimmt ist. Die Randbedingungen an der rechten und linken Grenze sind

$$\lim_{x \rightarrow \infty} S_i(x, t) = \lim_{x \rightarrow \infty} S_{i0}(x) = S_{ir}, \quad (7.4a)$$

$$\lim_{x \rightarrow -\infty} S_i(x, t) = \lim_{x \rightarrow -\infty} S_{i0}(x) = S_{i\ell}, \quad (7.4b)$$

mit  $i = \mathbb{W}, 2, 4$ . Lösungen werden für  $t \in [t_0, t_e]$  berechnet.

Um Vergleiche mit Experimenten zu ermöglichen, werden numerische Werte für die Modellparameter verwendet. Sie wurden durch Anpassung von  $P_c$  an experimentelle Daten in [Hilf 06b] bestimmt. Im hyperbolischen Limes werden von den Parametern nur  $\eta_2, \eta_4, S_{\mathbb{W}dr}$  und  $S_{\mathbb{O}im}$  benötigt. Die viskosen Widerstände wurden aus realistischen Werten für die Viskositäten von Wasser und Öl  $\mu_{\mathbb{W}} = \mu_{\mathbb{O}} = 0.001 \text{ kg m}^{-1} \text{ s}^{-1}$  und einer Permeabilität  $K = 2.05 \times 10^{-12} \text{ m}^2$  einer Sandschüttung [Helm 97] mit Hilfe der Gleichungen (5.13) bestimmt. Dabei wird angenommen, dass die viskose Kopplung nur zwischen den Fluiden und dem porösen Medium stattfindet und nicht zwischen den Fluiden selbst. Die Parameter sind in Tabelle 7.1 zusammengefasst.

## 7.2 Räumliche Unstetigkeiten für monotone fraktionale Flussfunktionen

Die Abwesenheit von Schwerkraft führt zu monotonen fraktionalen Flussfunktionen, wie sie in Abbildung 5.2a gezeigt werden. In diesem Unterkapitel werden die Bedingungen aus Kapitel 6.3 angewendet, um ein eindeutiges Lösungspaar  $(S_-^d(t), S_+^d(t))$  an einer Unstetigkeitsstelle  $x = x^d$  zu bestimmen.

In der Diskussion werden der Einfachheit halber konstante Anfangsbedingungen  $S_\ell, S_{2\ell}, S_{4\ell}$  für  $x < x^d$  und  $S_r, S_{2r}, S_{4r}$  für  $x > x^d$  an beiden Seiten der Unstetigkeitsstelle angenommen. Unkonstante anfängliche Sättigungsprofile führen zu einer Zeitabhängigkeit  $S_-^d = S_-^d(t)$ ,

Parameter	Wert	Einheiten
$\eta_2$	4	-
$\eta_4$	3	-
$S_{\text{Oim}}$	0.19	-
$S_{\text{Wdr}}$	0.15	-
$R_{11}$	$5.886 \times 10^7$	$\text{kg m}^{-3} \text{s}^{-1}$
$R_{33}$	$5.886 \times 10^7$	$\text{kg m}^{-3} \text{s}^{-1}$
$R_{13}$	0.0	$\text{kg m}^{-3} \text{s}^{-1}$
$\phi$	0.347	-
$q_0$	4.0	$\mu\text{m s}^{-1}$
$g$	9.81	$\text{m s}^{-2}$
$\varrho_{\text{W}}$	1000	$\text{kg m}^{-3}$
$\varrho_{\text{O}}$	800	$\text{kg m}^{-3}$

**Tabelle 7.1:** Zusammenfassung der verwendeten Parameter für die hyperbolischen Anfangs- und Randwertprobleme

$S_+^{\text{d}} = S_+^{\text{d}}(t)$ . Diese würde zwar zusätzliche Berechnungen erfordern, aber keine konzeptionellen Schwierigkeiten bereiten. Ferner wird angenommen, dass der Fluss  $q_{\text{tot}}(t) = q_{\text{tot}}$  nicht explizit von der Zeit abhängt. Auch diese Einschränkung vereinfacht die Berechnung, vermeidet jedoch keine konzeptionellen Schwierigkeiten.

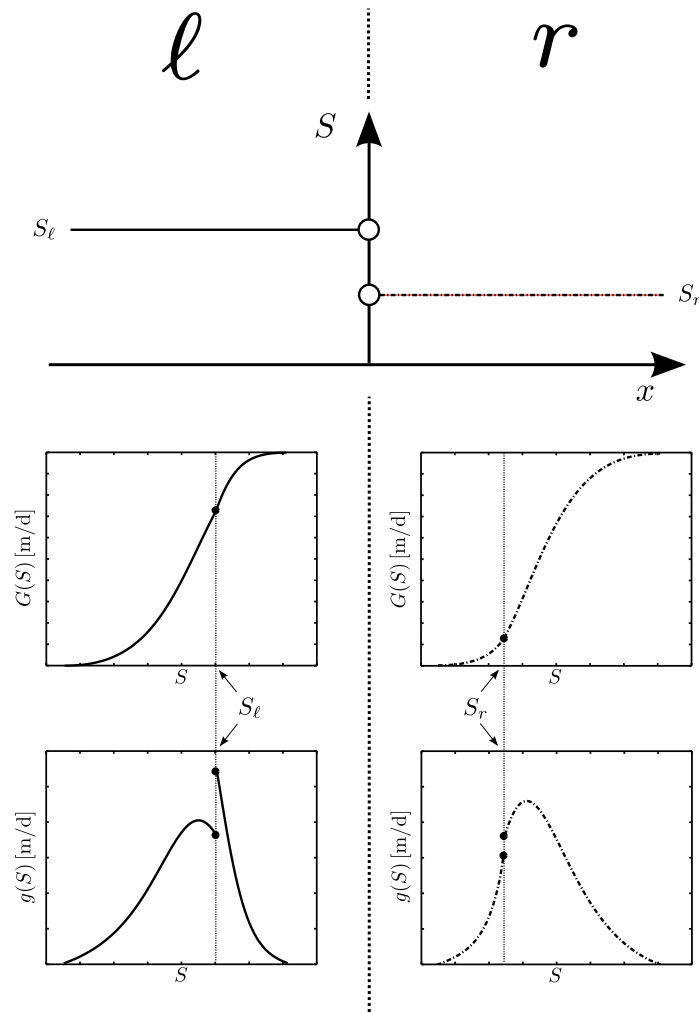
Durch die Anfangsbedingungen sind auch die Limites der advektiven Flussfunktionen  $G_-(S) = G_\ell(S)$  und  $G_+(S) = G_r(S)$  festgelegt. Ihre partiellen Ableitungen  $g_-(S) = g_\ell(S)$ ,  $g_+(S) = g_r(S)$  werden analog zu den Gleichungen (6.6a) und (6.15) definiert. Die Grenzwerte der Anfangsbedingungen  $S_{0-}^{\text{d}}$ ,  $S_{0+}^{\text{d}}$  werden ebenso analog zu Gleichung (6.16) definiert und sind als  $S_{0-}^{\text{d}} = S_\ell$  und  $S_{0+}^{\text{d}} = S_r$  gegeben. Das Modell berücksichtigt Unterschiede in Be- und Entwässerung. Daher müssen auch bei den Ableitungen der fraktionalen Flussfunktionen  $G_i(S)$  mit  $i \in \{+, -\}$  bei  $S_{0i}^{\text{d}}$  zwei Äste

$$g_i^{\text{im}} = \lim_{\nu \rightarrow 0} \frac{\partial G_i}{\partial S}(S_{0i} + \nu), \quad (7.5a)$$

$$g_i^{\text{dr}} = \lim_{\nu \rightarrow 0} \frac{\partial G_i}{\partial S}(S_{0i} - \nu) \quad (7.5b)$$

mit  $\nu > 0$  auf beiden Seiten der Unstetigkeitsstelle unterschieden werden. Der Limes  $g_i^{\text{im}}$  wird für Bewässerungsprozesse und der Limes  $g_i^{\text{dr}}$  für Entwässerungsprozesse angewendet. Im Allgemeinen unterscheiden sich die beiden Limites  $g_i^{\text{im}} \neq g_i^{\text{dr}}$ .

Abbildung 7.1 illustriert die gegebenen Größen. Die obere Abbildung zeigt konstante Sättigungen  $S(x < x^{\text{d}}, t = t_0) = S_\ell$  und  $S(x > x^{\text{d}}, t = t_0) = S_r$  in den beiden Hälften des Gebiets. Die zentrale Abbildung zeigt die Flussfunktionen  $G_\ell(S)$  und  $G_r(S)$  und die untere



**Abbildung 7.1:** Illustration der bekannten Größen an einer Unstetigkeitsstelle bei monotonen Flussfunktionen. Die obere Abbildung zeigt konstante Sättigungen  $S(x < x^d, t = t_0) = S_\ell$  und  $S(x > x^d, t = t_0) = S_r$ . Die zentrale Abbildung zeigt die Flussfunktionen  $G_\ell(S)$  und  $G_r(S)$ , die untere die partiellen Ableitungen  $g_\ell(S)$  und  $g_r(S)$ . Die Werte an den Anfangssättigungen  $S_\ell, S_r$  werden durch gefüllte Kreise angezeigt.

Abbildung zeigt die partiellen Ableitungen  $g_\ell(S)$  und  $g_r(S)$ . Die Werte an den Anfangssättigungen  $S_\ell, S_r$  werden durch gefüllte Kreise angezeigt. Man beachte die unterschiedlichen Limites an den Anfangssättigungen  $S_\ell, S_r$  in den partiellen Ableitungen  $g_\ell, g_r$ .

Mit diesen Vorüberlegungen kann die Lösung mit der Methode der Charakteristiken und der Volumenerhaltung konstruiert werden. Für positive Ableitungen  $g_-(S_\ell) > 0, g_+(S_r) > 0$  treffen alle Charakteristiken mit der Anfangssättigung  $S(x, t = 0) = S_\ell$  von links auf die Unstetigkeit. Dies wird später in Abbildung 8.3a illustriert. Die linke Grenzsättigung lautet daher  $S_-^d = S_\ell$ . Die Charakteristiken mit der Anfangssättigung  $S(x, t = 0) = S_r$  rechts der Unstetigkeit schneiden die Unstetigkeit nicht. Die Sättigung  $S_+^d$  wird durch Gleichung (6.14)

und  $S_-^d = S_\ell$  bestimmt. Die daraus folgende nichtlineare implizite Gleichung für  $S$  lautet

$$G_+(S) = G_-(S_\ell). \quad (7.6)$$

Sie hat eine eindeutige Lösung, da die Flussfunktionen  $G_-(S), G_+(S)$  monoton in  $S$  sind und Werte aus  $[0, q_{\text{tot}}(t)/\phi]$  annehmen. Die Lösung liefert die rechte Grenzsättigung  $S_+^d$  an der Unstetigkeitsstelle als  $S_+^d = G_+^{-1}(G_-(S_\ell))$ .

Für negative Ableitungen  $g_-(S_\ell) < 0, g_+(S_r) < 0$  treffen alle Charakteristiken mit den Anfangssättigungen  $S(x, t=0) = S_r$  von rechts auf die Unstetigkeit. Dies wird später in Abbildung 8.3b illustriert. Für die Grenzsättigung auf der rechten Seite gilt daher  $S_+^d = S_r$ . Die Charakteristiken mit der Anfangssättigung  $S(x, t=0) = S_\ell$  links der Unstetigkeit schneiden die Unstetigkeitsstelle nicht. Die Sättigung  $S_-^d$  wird durch Gleichung (6.14) und  $S_+^d = S_r$  bestimmt. Die implizite nichtlineare Gleichung, die daraus folgt, lautet

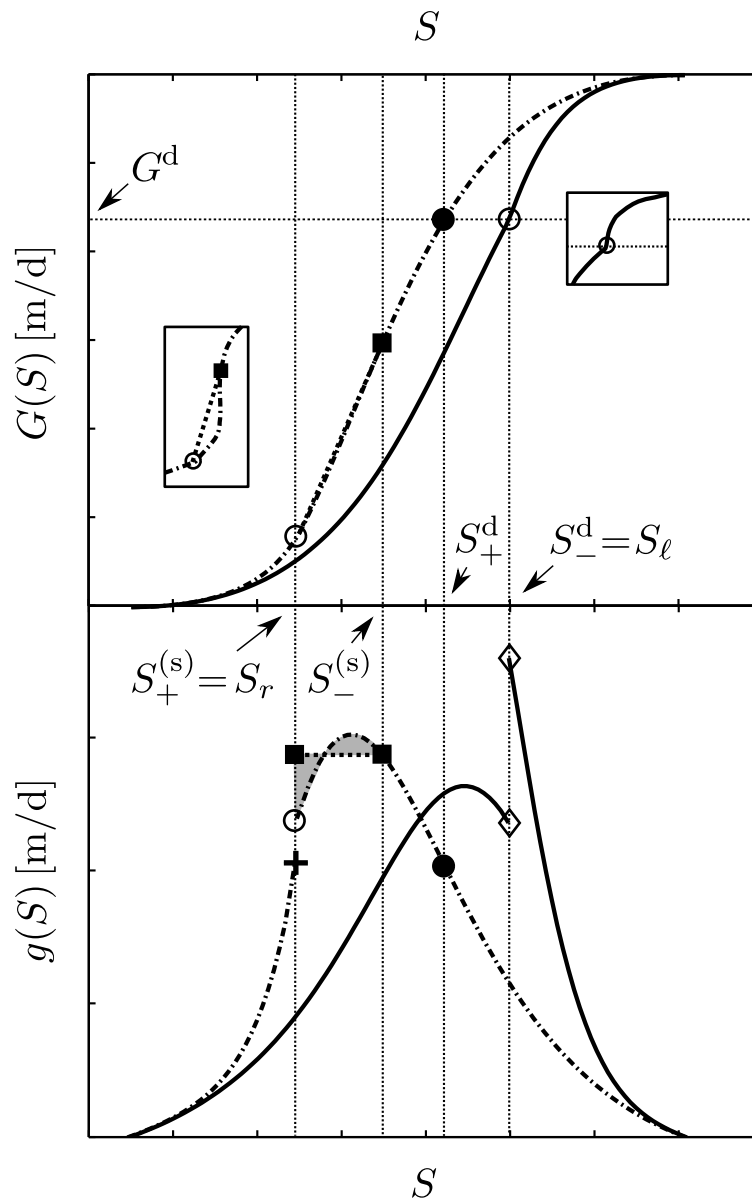
$$G_-(S) = G_+(S_r) \quad (7.7)$$

für  $S$ . Auch diese Gleichung hat eine eindeutige Lösung, weil die Flussfunktionen  $G_-(S), G_+(S)$  monoton in  $S$  sind und Werte aus  $[q_{\text{tot}}(t)/\phi, 0]$  annehmen. Die Lösung liefert die linke Grenzsättigung  $S_-^d$  an der Unstetigkeitsstelle als  $S_-^d = G_-^{-1}(G_+(S_r))$ .

Abbildung 7.2 illustriert die Konstruktion der Lösung an einer räumlichen Unstetigkeit für monotonen Flussfunktionen. Die Lösung des dargestellten Anfangs- und Randwertproblems enthält auch eine Sprungunstetigkeit. Die Konstruktion dieser wird ebenfalls illustriert.

Die Flussfunktionen  $G$  werden im oberen Teil von Abbildung 7.2 gezeigt. Der Hohlkreis auf der durchgezogenen Kurve markiert den Punkt  $(S_\ell, G_-(S_\ell))$ . An der räumlichen Unstetigkeit ist der Fluss  $G^d = G_-(S_\ell)$  aufgrund Gleichung (6.14) erhalten. Entsprechend markiert der gefüllte Kreis den Punkt  $(S_+^d, G_+(S_+^d))$ . Der anfängliche Fluss in der rechten Gebietshälfte wird durch einen Hohlkreis auf der gestrichpunkteten Kurve dargestellt. Die Sprungunstetigkeit wird in Form einer geraden Strecke gezeigt, die die Werte stromaufwärts  $S_-^{(s)} = S_-^d$  und stromabwärts  $S_+^{(s)} = S_\ell$  verbindet. Die Strecke der Sprungunstetigkeit fällt nahezu mit der Kurve der Flussfunktion zusammen. Es wird daher eine schematische Darstellung in einem Nebenbild gegeben. Ein zweites Nebenbild zeigt eine schematische Darstellung des Be- und Entwässerungsastes der Flussfunktion  $G_-$  bei  $S_\ell$ .

Die Lösung in der Nähe der räumlichen Unstetigkeit  $x^d$  kann graphisch mit dem unteren Teil der Abbildung 7.2 konstruiert werden. Dieser zeigt die partiellen Ableitungen  $g_-(S), g_+(S)$  der Flussfunktionen. Im Beispiel kann der Ableitung  $g_-(S_\ell)$  kein eindeutiger Wert zugeordnet werden (Hohldiamanten), da die Sättigung in der linken Gebietshälfte konstant bleibt und



**Abbildung 7.2:** Illustration der Konstruktion der Lösung an einer räumlichen Unstetigkeitsstelle bei monotonen Flussfunktionen. Durchgezogene Kurven zeigen  $G_-(S)$  und  $g_-(S)$ , gestrichelte Kurven  $G_+(S)$  und  $g_+(S)$ . Hohlkreise repräsentieren Werte bei  $S_\ell$  und  $S_r$ . Hohldiamanten zeigen die beiden Werte bei  $g_-(S_\ell)$  und das Pluszeichen zeigt den Entwässerungsgrenzwert  $g_+^{\text{dr}}(S_r)$ . Die Werte bei  $S_+^{\text{d}}$  werden durch gefüllte Kreise dargestellt. Gefüllte Quadrate zeigen die Werte an der Sprungunstetigkeit. Die linke Vergrößerung in Abbildung (a) zeigt eine schematische Darstellung der Sprungunstetigkeit und die rechte Vergrößerung eine schematische Darstellung der unterschiedlichen Limites für Be- und Entwässerung in  $G_-$  bei  $S_\ell$ . Die graue Fläche in Abbildung (b) illustriert die Bedingung (6.10d) an der Sprungunstetigkeit. Dünne gepunktete Linien zeigen wichtige Gitterlinien. Die horizontale Linie zeigt den Fluss an der räumlichen Unstetigkeit  $G^{\text{d}}$  und vertikale Linien zeigen wichtige Sättigungen.

somit die linke Seite weder be- noch entwässert wird. Der gefüllte Kreis zeigt  $(S_+^d, g_+(S_+^d))$ . Der Wert der Ableitung stromaufwärts  $g_+(S_-^{(s)})$  und stromabwärts  $g_+(S_+^{(s)})$  der Sprungetigkeitsfunktion werden jeweils durch gefüllte Quadrate dargestellt und mit einer gepunkteten Linie verbunden. Die Bedingung (6.10d) wird durch eine graue Fläche dargestellt. Der Flächenanteil unter der gepunkteten Linie ist dabei von selbem Maß wie der Flächenanteil über ihr. Der Hohlkreis auf der gestrichpunkteten Kurve zeigt  $g_+^{\text{im}}(S_r)$ . Der irrelevante Entwässerungswert  $g_+^{\text{dr}}(S_r)$  wird als Pluszeichen dargestellt. Aus dieser Abbildung können durch Rotation um  $90^\circ$  und Spiegelung an der  $S$ -Achse Sättigungsprofile konstruiert werden. Diese werden in Abbildung 7.3 gezeigt.

### 7.3 Vorwärts gerichteter Fluss

Nach der Diskussion der räumlichen Unstetigkeiten in der Flussfunktion kann nun das Anfangs- und Randwertproblem nach Buckley und Leverett gelöst werden. Die Anfangsbedingungen (7.3) werden dazu in Gleichungen (6.1) und (6.6) eingesetzt. Dabei soll hier zunächst der Fall  $t < t_r$  betrachtet werden. Der Fall für  $t > t_r$  wird im nächsten Unterkapitel diskutiert. Für  $t < t_r$  ist der Volumenstrom konstant und positiv  $q_{\text{tot}}(t) = q_{\text{tot}} > 0$  und  $G$  unabhängig von  $t$ . Es gilt

$$G(S, x, t) = \begin{cases} G_\ell(S) & \text{für } x < 0, \\ G_r(S) & \text{für } x > 0, \end{cases} \quad (7.8)$$

wobei die Kurzschreibweisen  $G_\ell(S) = G(S, S_\ell, S_{2\ell}, S_{4\ell})$  und  $G_r(S) = G(S, S_r, S_{2r}, S_{4r})$  eingeführt wurden. Die Ableitung  $g$  der advektiven Flussfunktion  $G$  nach der Sättigung  $S$  lautet analog

$$g(S, x, t) = \begin{cases} g_\ell(S) & \text{für } x < 0, \\ g_r(S) & \text{für } x > 0. \end{cases} \quad (7.9)$$

Durch Einsetzen der stückweise konstanten Anfangsbedingungen (7.3) in Gleichung (6.6b) erhält man

$$h(S, x, t) = 0 \quad \text{für } x \neq 0. \quad (7.10)$$

An der Unstetigkeitsstelle  $x^d = 0$  gilt Gleichung (6.14). Die Ableitung  $g(S, x, t) > 0$  ist positiv für alle  $S \in [0, 1]$ , für alle  $x \in \mathbb{R}$  und für alle  $t \in [t_0, t_r]$ . Nach Kapitel 7.2 gilt daher



für den linksseitigen Limes der Sättigung an der Unstetigkeitsstelle  $S_-^d = S_\ell$ . Die Sättigung  $S_+^d$  wird über Gleichung (7.6) bestimmt.

Die Cauchy-Daten (7.3) zum Zeitpunkt  $t_0 = 0$  werden nun mit dem Parameter  $\xi \in \mathbb{R}$  parametrisiert, um die Lösung zu berechnen. Die Parametrierung lautet explizit

$$x_0(\xi) = \begin{cases} \xi & \text{für } \xi \leq 0, \\ 0 & \text{für } 0 \leq \xi \leq 1, \\ \xi - 1 & \text{für } \xi \geq 1, \end{cases} \quad (7.11a)$$

$$S_0(\xi) = \begin{cases} S_\ell & \text{für } \xi \leq 0, \\ S_+^d + (S_r - S_+^d) \xi & \text{für } 0 \leq \xi \leq 1, \\ S_r & \text{für } \xi \geq 1. \end{cases} \quad (7.11b)$$

Bei der Parametrierung wurden die Lösungen an der räumlichen Unstetigkeit aus Gleichung (7.6) berücksichtigt.

Setzt man diese Parametrierung in Gleichung (6.9) ein, erhält man für  $\xi < 0$

$$x(t, \xi) = \begin{cases} \xi + t g_-(S_\ell) & \text{für } t \leq t^*(\xi), \\ t g_r(S_+^d) & \text{für } t > t^*(\xi), \end{cases} \quad (7.12a)$$

$$S(t, \xi) = \begin{cases} S_\ell & \text{für } t \leq t^*(\xi), \\ S_+^d & \text{für } t > t^*(\xi), \end{cases} \quad (7.12b)$$

wobei  $t^*(\xi) := -\xi/g_-(S_\ell)$  den Zeitpunkt bezeichnet, zu dem die jeweilige Charakteristik die Unstetigkeitsstelle  $x(t^*(\xi), \xi) = 0$  erreicht.

Das Ergebnis für  $0 \leq \xi \leq 1$  lautet

$$x(t, \xi) = t g_r(S_+^d + (S_r - S_+^d) \xi), \quad (7.13a)$$

$$S(t, \xi) = S_+^d + (S_r - S_+^d) \xi \quad (7.13b)$$

und für  $\xi \geq 1$

$$x(t, \xi) = \xi - 1 + t g_r(S_r), \quad (7.14a)$$

$$S(t, \xi) = S_r. \quad (7.14b)$$

Physikalisch ist man jedoch nicht an Flächen  $x(t, \xi)$ ,  $S(t, \xi)$  sondern vielmehr an Sättigungs-

profilen  $S(x, t)$  interessiert. Sollten diese mehrdeutig sein, werden Sprungunstetigkeiten über Gleichung (6.10) bestimmt. In der betrachteten Schar von Anfangs- und Randwertproblemen tritt entweder keine oder eine Sprungunstetigkeit auf, die durch  $(i) = (s)$  bezeichnet wird. Die Sprungunstetigkeit kann dabei nur im Gebiet  $x > 0$  auftreten, da die Sättigung für  $x < 0$  für alle Zeit konstant bleibt. Die Sättigung der Sprungunstetigkeit stromabwärts  $S_+^{(s)} = S_r$  und die entsprechende Sättigung stromaufwärts  $S_-^{(s)}$  sind aufgrund der Anfangsbedingungen (7.3) jeweils zeitunabhängig. Setzt man diese Größen in Gleichung (7.13a) ein, erhält man für den Ort der Sprungunstetigkeit  $x^{(s)}(t) = tv^{(s)}$ , wobei  $v^{(s)} = g_r(S_-^{(s)})$  gilt. Setzt man weiter dies und Gleichungen (7.12) - (7.14) in Gleichung (6.10) ein, erhält man eine implizite Gleichung für die Sättigung  $S_-^{(s)}$  stromaufwärts der Sprungunstetigkeit. Sie lautet

$$\int_{S_-^{(s)}}^{S_r} tg_r(S) dS = t \left( G_r(S_r) - G_r(S_-^{(s)}) \right) = tg_r(S_-^{(s)}) \left( S_r - S_-^{(s)} \right). \quad (7.15)$$

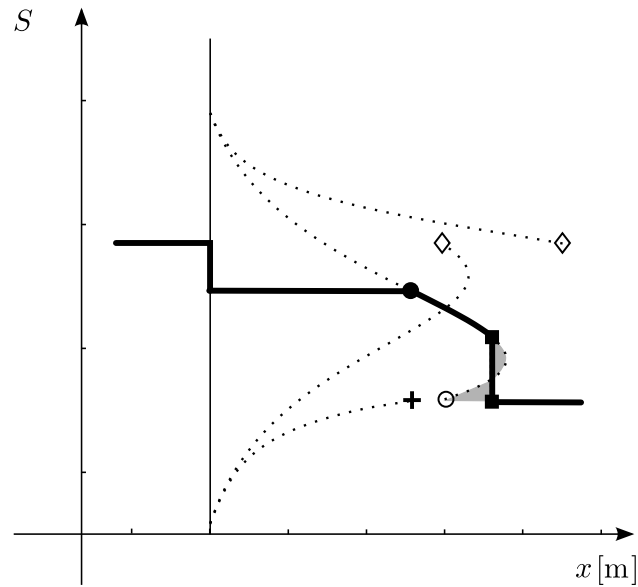
Teilt man schließlich die Gleichungen (7.12a), (7.13a) und (7.14a) durch die Zeit  $t$  erhält man eine Lösung für die Sättigung  $S(x, t)$ , die selbstähnlich in  $x/t$  ist. Zusammengefasst lautet die Lösung damit

$$S(x, t) = S\left(\frac{x}{t}\right) = \begin{cases} S_\ell & \text{für } \frac{x}{t} < 0, \\ S_+^d & \text{für } 0 \leq \frac{x}{t} < g_r(S_+^d), \\ g_r^{-1}\left(\frac{x}{t}\right) & \text{für } g_r(S_+^d) \leq \frac{x}{t} < g_r(S_-^{(s)}), \\ S_r & \text{für } g_r(S_-^{(s)}) \leq \frac{x}{t}. \end{cases} \quad (7.16)$$

Abbildung 7.3 zeigt die unterschiedlichen Segmente der Sättigungsprofile für die monotone Flussfunktion aus Abbildung 7.2 zu einem Zeitpunkt  $t$ . Die Abbildung illustriert, wie die konstante Wassersättigung in der linken Hälfte über einen Sprung an der Unstetigkeit und über eine Verdünnungsstoßwelle mit der konstanten Wassersättigung auf der rechten Seite verbunden wird.

Im Folgenden werden unterschiedliche Verdrängungsprozesse im Rahmen der Buckley-Leverett-Näherung vorgestellt und diskutiert. In Tabelle 7.2 sind die unterschiedlichen Anfangsbedingungen, für die in Abbildungen 7.4-7.6 gezeigten Profile zusammengefasst. Charakteristische Werte der Lösungen stellt Tabelle 7.3 dar. Die Modellparameter, welche bei allen Lösungen verwendet wurden, stehen in Tabelle 7.1.

Abbildung 7.4a zeigt eine primäre Bewässerung. Eine primäre Bewässerung ist ein Verdrängungsprozess des nichtbenetzenden Fluids durch das benetzende Fluid, wobei das poröse Me-



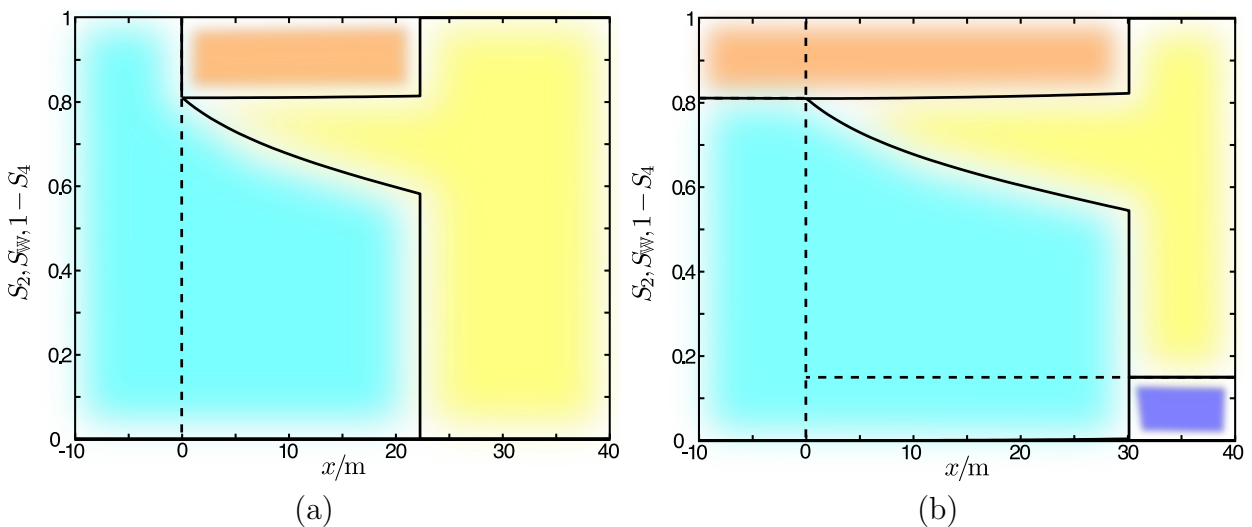
**Abbildung 7.3:** Illustration der unterschiedlichen Segmente der Sättigungsprofile für die monotone Flussfunktion aus Abbildung 7.2. Das Wassersättigungsprofil wird als dicke durchgezogene Kurve dargestellt. Die vertikale Gerade zeigt die Unstetigkeit in den Anfangsbedingungen. Dünne gepunktete Kurven zeigen die Form der Ableitungen  $g_\ell^{-1}$  und  $g_r^{-1}$ . Wichtige Punkte sind durch dieselben Symbole wie in Abbildung 7.2 markiert.

	Abb. 7.4a	Abb. 7.4b	Abb. 7.5a	Abb. 7.5b	Abb. 7.6
$S_\ell$	1.00	0.81	0.60	0.60	0.70
$S_{2\ell}$	0	0	0.138	0.00	0.03
$S_{4\ell}$	0	0.19	0.00	0.189	0.15
$S_r$	0	0.15	0.60	0.60	0.20
$S_{2r}$	0	0.15	0.00	0.138	0.13
$S_{4r}$	0	0	0.189	0.00	0.02

**Tabelle 7.2:** Die Anfangsbedingungen für die in Abbildung 7.4-7.6 gezeigten Verdrängungsprozesse.

	Abb. 7.4a	Abb. 7.4b	Abb. 7.5a	Abb. 7.5b	Abb. 7.6		
$S_+^d$	0.810	0.810	0.519	0.659	0.664	0.693	0.662
$S_-^{(s)}$	0.582	0.544	0.519	--	0.525	0.610	0.456
$S_{2-}^{(s)}$	0.000	0.004	0.068	--	0.006	0.043	0.001
$S_{4-}^{(s)}$	0.186	0.178	0.085	--	0.173	0.134	0.189
$v^{(s)}/(m/d)$	1.482	2.005	4.001	--	2.272	2.007	2.400

**Tabelle 7.3:** Charakteristische Werte der Lösungen der Anfangs- und Randwertprobleme, welche in den Abbildungen 7.4-7.6 gezeigt werden. Für Abbildung 7.5b werden keine Werte für eine Sprungetetigkeit angegeben, da es sich bei der Lösung um eine reine Verdünnungswelle handelt. Die Werte für  $S_+^d$  werden mit Gleichung (6.14), für  $S_-^{(s)}$  mit (7.15), für  $S_{2-}^{(s)}$  mit (5.12a), für  $S_{4-}^{(s)}$  mit (5.12b) und  $v^{(s)} = g_r(S_-^{(s)})$  berechnet. Einige der Werte werden in Abbildung 7.5a durch Pfeile hervorgehoben.



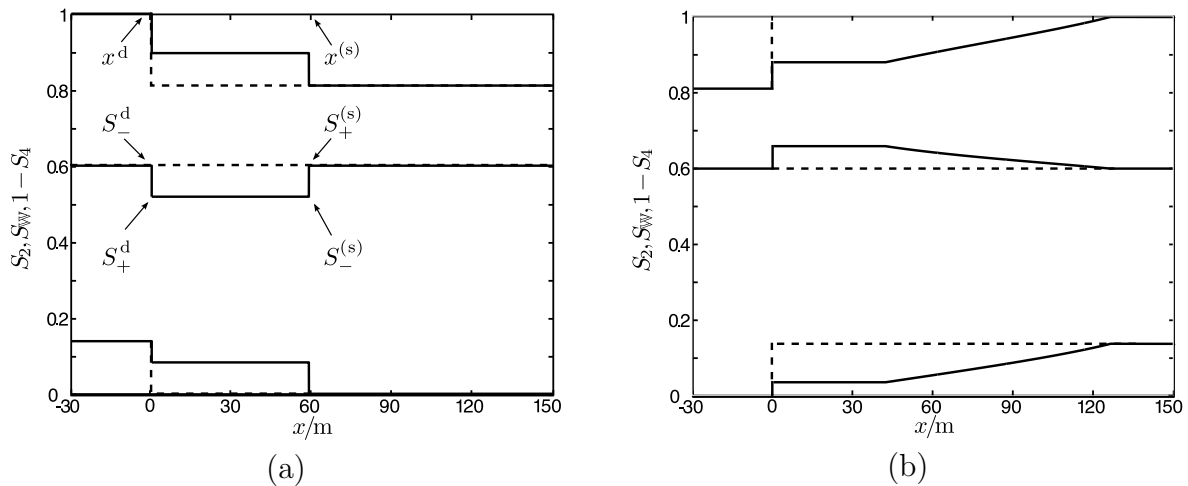
**Abbildung 7.4:** Darstellung von Sättigungsprofilen für primäre Bewässerung in Abbildung (a) und sekundäre Bewässerung in Abbildung (b). Die durchgezogenen Profile zeigen die Sättigungen  $S_2, S, 1 - S_4$  zum Zeitpunkt  $t = 15$  d. Die Anfangsbedingungen werden durch gestrichelte Kurven dargestellt und sind Tabelle 7.2 entnommen. Man beachte, dass einige Kurven mit den Achsen zusammenfallen. Um die Interpretation der Abbildung zu erleichtern, wurden die Sättigungen zum Zeitpunkt  $t = 15$  d farblich hinterlegt. Hellblau steht für perkolierendes Wasser  $S_1$ , dunkelblau für nichtperkolierendes Wasser  $S_2$ , gelb für perkolierendes Öl  $S_3$  und orange für nichtperkolierendes Öl  $S_4$ .

dium zu Beginn kein benetzendes Fluid enthält. Die Anfangsbedingungen für eine primäre Bewässerung sind daher  $S_\ell = 1$  und  $S_r = 0$ . Die Sättigungen der nichtperkolierenden Phasen zu Beginn sind  $S_{2\ell} = 0$ ,  $S_{2r} = 0$ ,  $S_{4\ell} = 0$ , und  $S_{4r} = 0$ . Die Abbildung zeigt den Sprung der Anfangssättigungen als gestrichelte Linie bei  $x = 0$ . Nach  $t = 15$  d ist die Wasserfront in das poröse Medium eingedrungen und hat  $x^{(s)}(15 \text{ d}) = 22.23$  m erreicht. Die Stoßwelle wird von einem Verdünnungsfächer verfolgt, der sich über das gesamte Intervall zwischen  $x = 0$  und der Stoßwelle erstreckt. Durch die Verdrängung der Ölphase reißt die Ölphase teilweise auf und Blasen bleiben immobil im Medium zurück. Die Wasserphase hingegen ist perkolierend, da sie in das Medium eindringt und damit die Wassersättigung überall für alle Zeit zunimmt oder konstant bleibt.

Abbildung 7.4b zeigt eine sekundäre Bewässerung. Eine sekundäre Bewässerung ist ein Verdrängungsprozess des nichtbenetzenden Fluids durch das benetzende Fluid, wobei das poröse Medium zu Beginn nur residuales nichtperkolierendes Wasser enthält. Die Anfangsbedingungen sind damit  $S_\ell = 1 - S_{\text{Oim}}$ ,  $S_r = S_{\text{Wdr}}$ ,  $S_{2\ell} = 0$ ,  $S_{2r} = S_{\text{Wdr}}$ ,  $S_{4\ell} = S_{\text{Oim}}$ , und  $S_{4r} = 0$ . Die Abbildung zeigt die Anfangsbedingungen als gestrichelte Linien. Nach  $t = 15$  d ist die Wasserfront in das poröse Medium eingedrungen und hat  $x^{(s)}(15 \text{ d}) = 30.07$  m erreicht. Auch hier wird die Stoßwelle von einem Verdünnungsfächer verfolgt. Durch die Verdrängung der Ölphase reißt die Ölphase teilweise auf und Blasen bleiben immobil im Medium zurück. Im Gegensatz zur primären Bewässerung trifft die eindringende perkolierende Wasserfront auf das vorhandene nichtperkolierende Wasser und vereinigt sich zum Teil mit ihm. Es sei angemerkt, dass der Anteil an nichtperkolierendem Wasser, welcher sich nicht mit dem eindringenden Wasser vereinigt, für die gewählten Parameter verschwindend klein und in der Abbildung (fast) nicht zu erkennen ist.

Ein Vergleich der Lösungen für primäre und sekundäre Bewässerung zeigt, dass die Stoßwelle der sekundären Bewässerung deutlich schneller als die Stoßwelle der primären Bewässerung ist. Dafür ist die Höhe der Stoßwelle, also der Unterschied zwischen den Sättigungen stromaufwärts und stromabwärts für die sekundäre Bewässerung kleiner. Die injizierte Wassermenge ist nämlich in beiden Fällen gleich. Zahlen für die charakteristischen Größen werden in Tabelle 7.3 gegeben. Die größere Stoßwellengeschwindigkeit hat ihre Ursache darin, dass die Mobilität durch die Vereinigung des eindringenden perkolierenden Wassers mit dem vorhandenen nichtperkolierenden Wasser die Mobilität des Wassers und damit den Wasserfluss vergrößert.

Abbildung 7.5a und b zeigen zwei unterschiedliche Verdrängungsprozesse in einem homogenen porösen Medium mit konstanten Anfangswassersättigungen. Die Hälften des porösen Mediums  $x < 0$  und  $x > 0$  unterscheiden sich nur im Verhältnis zwischen perkolierenden und

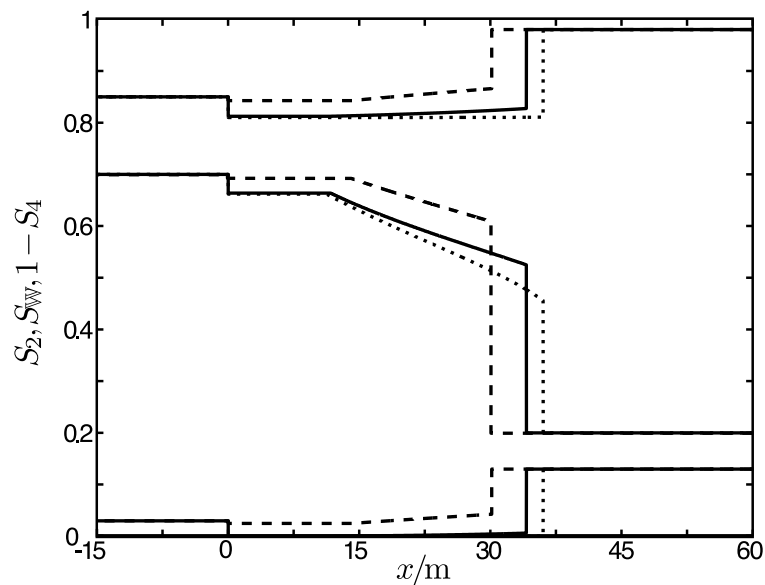


**Abbildung 7.5:** Darstellung von Sättigungsprofilen für konstante Anfangswassersättigung  $S$  im kompletten porösen Medium. Die beide Hälften des porösen Mediums  $x < 0$  und  $x > 0$  unterscheiden sich nur im Verhältnis zwischen perkolierenden und nichtperkolierenden Phasen. Abbildung (a) zeigt Sättigungsprofile für Anfangsbedingungen, bei denen die linke Hälfte durch eine primäre Entwässerung und die rechte Hälfte durch eine primäre Bewässerung präpariert wurden. Abbildung (b) zeigt Anfangsbedingungen die im Vergleich zu (a) an  $x = 0$  gespiegelt wurden. Es wurde also die linke Hälfte durch eine primäre Bewässerung und die rechte Seite durch eine primäre Entwässerung präpariert. Zahlenwerte für charakteristische Größen, welche in Abbildung (a) durch Pfeile hervorgehoben werden, werden Tabelle 7.2 gegeben. Anfangsbedingungen werden gestrichelt, die Lösungen zum Zeitpunkt  $t = 15$  d durchgezogen dargestellt.

nichtperkolierenden Phasen. Die Anfangswassersättigung ist auf beiden Seiten  $S = 0.6$ .

Abbildung 7.5a zeigt Sättigungsprofile für Anfangsbedingungen, bei denen die linke Hälfte durch eine primäre Entwässerung und die rechte Hälfte durch eine primäre Bewässerung präpariert wurden. Abbildung 7.5b zeigt Anfangsbedingungen die im Vergleich zu Abbildung 7.5a bei  $x = 0$  gespiegelt wurden. Es wurde also die linke Hälfte durch eine primäre Bewässerung und die rechte Seite durch eine primäre Entwässerung präpariert. Zur Berechnung der Anfangssättigungen wurde die residuale Entkopplungsnäherung (RDA) aus [Hilf 06c] verwendet. Anfangsbedingungen werden gestrichelt, die Lösungen zum Zeitpunkt  $t = 15$  d durchgezogen dargestellt.

In Abbildung 7.5a nimmt die Sättigung  $S_+^d < S_r$  rechts von der Unstetigkeit in den Anfangsbedingungen ab und eine Entwässerungsstoßwelle wandert in die rechte Hälfte hinein. Die Stoßwelle ist nach  $t = 15$  d bis  $x^{(s)}(15 \text{ d}) = 60.02$  m in das Medium eingedrungen. Die rechte Hälfte wird etwas entwässert, da in der linken Säulenhälfte die Menge an mobilen, perkolierendem Wasser geringer ist als in der rechten Hälfte und daher auch der Wasserfluss  $q_W$  in der linken Hälfte geringer ist als in der rechten Hälfte. Damit kann das Wasser, das nach rechts abfließt, nicht kompensiert werden. In der rechten Hälfte wird nichtperkolierendes Wasser produziert und nichtperkolierendes Öl reduziert, da dort die Wassersättigung



**Abbildung 7.6:** Vergleich von Sättigungsprofilen für unterschiedliche Massenaustauschparameter  $\eta_2, \eta_4$ . Durchgezogene Kurven zeigen Sättigungsprofile für  $\eta_2 = 4, \eta_4 = 3$ , gestrichelte Kurven für  $\eta_2 = 1, \eta_4 = 1$  und gepunktete Kurven für  $\eta_2 = 10, \eta_4 = 10$ . Die Anfangsbedingungen sind in Tabelle 7.2 angegeben.

abnimmt. Die Änderung der Wassersättigung ist gering und die Produktion bzw. Reduktion ist nicht so stark ausgeprägt wie in Abbildung 7.4. In Abbildung 7.5b nimmt die Sättigung  $S_+^d > S_r$  rechts von der Unstetigkeit in den Anfangsbedingungen zu und eine Bewässerungsverdünnungswelle wandert in die rechte Hälfte hinein. Die eindringende Welle ist eine reine Verdünnungswelle und es können weder Stoßhöhen noch Stoßgeschwindigkeiten angegeben werden. Beide Beispiele gehen weit über das DBRMMWBL-Modell hinaus.

Abbildung 7.6 zeigt den Einfluss der Massenaustauschparameter  $\eta_2, \eta_4$  auf die Sättigungsprofile anhand eines Vergleichs für unterschiedliche Werte. Durchgezogene Kurven zeigen Sättigungsprofile für  $\eta_2 = 4, \eta_4 = 3$ , gestrichelte Kurven für  $\eta_2 = 1, \eta_4 = 1$  und gepunktete Kurven für  $\eta_2 = 10, \eta_4 = 10$ . Die anderen Parameter sind identisch mit denen der bisher gezeigten Beispielen. Die Anfangsbedingungen sind in Tabelle 7.2 angegeben. Es zeigt sich, dass die Parameter  $\eta_2, \eta_4$  einen starken Einfluss auf die Stoßwellengeschwindigkeit  $v^{(s)}$  und die Höhe der Sprungunstetigkeit  $S_-^{(s)}$  haben. Für größere  $\eta_2, \eta_4$  wird die Stoßwelle schneller und ihre Höhe entsprechend kleiner, da die injizierte Wassermenge nicht verändert wurde. Die Parameter  $\eta_2, \eta_4$  sind im DBRMMWBL-Modell nicht vorhanden.

## 7.4 Umkehr der Strömungsrichtung

Es sollen nun Profile für Zeiten  $t > t_r$  betrachtet werden. Nach Gleichung (7.2) wird zum Zeitpunkt  $t = t_r$  die Richtung der Strömung umgekehrt, so dass

$$q_{\text{tot}}(t > t_r) = -q_{\text{tot}}(t < t_r) = -q_0 \quad (7.17)$$

gilt. Die Wasserfront ändert damit ihre Bewegungsrichtung. Es ändert sich daher auch die Art des Prozesses. Wenn für  $t < t_r$  die Säule bewässert wurde, wird sie nun entwässert und wenn sie entwässert wurde, wird sie bewässert. Im Folgenden wird die Terminologie entsprechend des ersten Falls, erst Be- dann Entwässerung, verwendet. Den zweiten Fall erhält man durch Vertauschung der Begriffe. Es sei an dieser Stelle explizit erwähnt, dass das in dieser Dissertation untersuchte Modell hysteretisches Verhalten zeigt, wenn anstatt der Sättigungen  $S, S_2, S_4$  nur die Sättigung  $S$  betrachtet wird. Im Gegensatz zum DBRMMWBL-Modell, werden hier jedoch alle Zwischenkurven mit demselben Satz von Parametern berücksichtigt und müssen nicht für unterschiedliche Wege in der Hystereseschleife angepasst werden. Das Modell ist nicht hysteretisch, wenn  $S, S_2, S_4$  als Zustandsgrößen betrachtet werden.

Die Lösungsprofile  $S(x, t_r), S_2(x, t_r), S_4(x, t_r)$ , welche in Gleichung (7.16) gegeben wurden, stellen die Anfangsbedingungen für die Flussumkehr dar. Damit lässt sich das poröse Medium zu Zeiten  $t \geq t_r$  in vier Bereiche unterteilen. Der linke Bereich  $x < 0$  wird durch den Index  $\ell$  bezeichnet. Der zweite Bereich  $0 < x < t_r g_r(S_+^d)$  wird durch den Index  $c$  bezeichnet, da die Sättigung in diesem Bereich zum Zeitpunkt  $t = t_r$  konstant ist. Der dritte Bereich  $t_r g_r(S_+^d) < x < x^{(s)}(t_r)$  entspricht dem Verdünnungsfächer der Lösung (7.16) zum Zeitpunkt  $t = t_r$ . Er wird durch den Index  $m$  identifiziert. Der rechte Bereich  $x > x^{(s)}(t_r)$  wird durch den Index  $r$  bezeichnet. Wählt man  $t_r = 15$  d und dieselben Anfangsbedingungen wie für Abbildung 7.6 aus Tabelle 7.2, so stellen die durchgezogenen Kurven aus Abbildung 7.6 die Anfangsbedingungen für den Prozess nach der Strömungsrichtungsumkehr dar. Der Index  $\ell$  steht damit für den Bereich  $x \in [-\infty, 0]$  m, der Index  $c$  für  $x \in [0, 11.68]$  m, der Index  $m$  für  $x \in [11.68, 34.08]$  m und der Index  $r$  für  $x \in [34.08, \infty]$  m.

Die Sättigungen in  $\ell, c$  und  $r$  sind zum Zeitpunkt  $t = t_r$  konstant. Daher hängen in diesen Bereichen die Flussfunktionen  $G_\ell, G_c, G_r$  nicht explizit von der Raumkoordinate  $x$  ab. In der quasi linearen partiellen Differentialgleichung (6.4) tauchen damit keine Quellen auf und es



gilt

$$h(S, x, t) = \begin{cases} h_\ell = 0 & \text{für } x < 0, \\ h_c = 0 & \text{für } 0 < x < t_r g_r(S_+^d), \\ h_r = 0 & \text{für } x > x^{(s)}(t_r). \end{cases} \quad (7.18)$$

Die Strömung ist nun von rechts nach links gerichtet. Damit ist die Sättigung

$$S(x, t) = S_r \quad (7.19)$$

konstant für  $t > t_r$  und  $x > x^{(s)}(t_r)$ . Bei  $x = x^{(s)}(t_r)$  ist aufgrund der Stoßwelle eine Unstetigkeit in den neuen Anfangsbedingungen. In der Flussfunktion gibt es daher eine zweite räumliche Unstetigkeit, die durch den hochgestellten Index  $d_s$  bezeichnet wird. Auch an dieser Unstetigkeit gilt Bedingung (6.14). Des Weiteren ist  $g(S, x) < 0$  für alle  $S \in [0, 1]$ , für alle  $x \in \mathbb{R}$  und für alle  $t \in [t_r, t_e]$ . Nach Kapitel 7.2 sind damit die Sättigungen an dieser Unstetigkeit  $S_+^d = S_r$ , und  $S_-^d$  ist die Lösung von Gleichung (7.6) mit  $S_+^d = S_r$ . Die Grenze zwischen  $m$  und  $c$  bei  $x = t_r g_r(S_+^d)$  erfordert keine separate Behandlung und die Unstetigkeit bei  $x = 0$  ist dieselbe wie beim vorwärts gerichteten Fluss im Zeitraum  $t < t_r$  und wird ebenso behandelt. Im Bereich  $m$  verschwindet der Quellterm in der quasi linearen partiellen Differentialgleichung (6.4) nicht. Es gilt

$$h(S, x, t) = h_m(S, x) \neq 0 \quad (7.20)$$

für  $t_r g_r(S_+^d) < x < x^{(s)}(t_r)$  und  $t > t_r$ .

Wie zuvor wird die Anfangsbedingung, i.e. die Lösung für den vorwärts gerichteten Fluss zum Zeitpunkt  $t = t_r$  aus Gleichung (7.16) mit dem Parameter  $\xi \in \mathbb{R}$  parametrisiert. Die Parametrierung lautet

$$x_0(\xi) = \begin{cases} \xi + 1 & \text{für } \xi \leq -1, \\ t_r g_r(S_+^d) (1 - \xi) & \text{für } -1 \leq \xi \leq 0, \\ t_r g_r(S_+^d + (S_-^{(s)} - S_+^d) \xi) & \text{für } 0 \leq \xi \leq 1, \\ x^{(s)}(t_r) & \text{für } 1 \leq \xi \leq 2, \\ \xi - (2 - x^{(s)}(t_r)) & \text{für } \xi \geq 2, \end{cases} \quad (7.21a)$$

für die Raumkoordinate  $x$  und

$$S_0(\xi) = \begin{cases} S_\ell & \text{für } \xi \leq -1, \\ S_+^d & \text{für } -1 \leq \xi \leq 0, \\ S_+^d + (S_-^{(s)} - S_+^d)\xi & \text{für } 0 \leq \xi \leq 1, \\ S_-^{(s)} + (S_r - S_-^{(s)})(\xi - 1) & \text{für } 1 \leq \xi \leq 2, \\ S_r & \text{für } \xi \geq 2 \end{cases} \quad (7.21b)$$

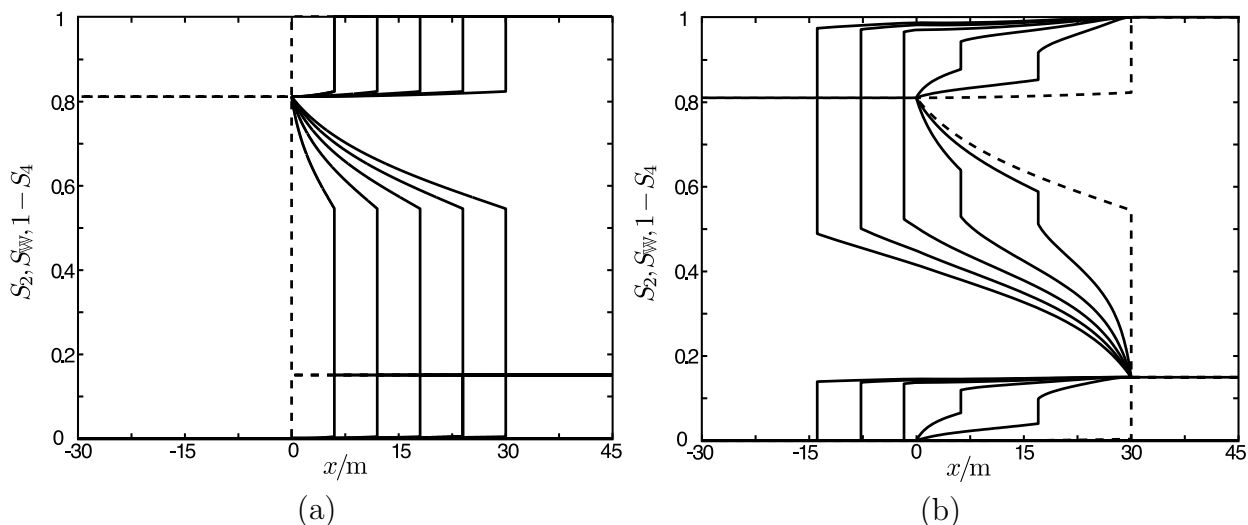
für die Wassersättigung  $S$ . Hier wurden die Lösungen an den räumlichen Unstetigkeiten aus Gleichung (7.7) berücksichtigt. Durch Einsetzen dieser Parametrierung in Gleichung (6.9) erhält man wiederum Lösungen für unterschiedliche Parameterbereiche.

Im Gegensatz zum zuvor diskutierten Riemann-Problem, sind hier die Anfangsbedingungen nicht homogen im gesamten Bereich und eine analytische Lösung ist nicht bekannt. Allerdings kann das Gleichungssystem von gewöhnlichen Differentialgleichungen (6.5) für die Charakteristiken numerisch durch Standardmethoden (siehe Kapitel B.1.1) gelöst werden.

Die Lösung im  $(x, t, S)$ -Raum kann wieder mehrdeutige Lösungen  $S(x, t)$  erzeugen. Die Mehrdeutigkeit wird durch eine Sprungunstetigkeit nach Gleichung (6.10) gelöst. Die nichtlinearen Gleichungen werden mit einer Bisektionsmethode (siehe Kapitel B.3.2) gelöst. Es sei darauf hingewiesen, dass wenn Flussfunktionen nicht explizit von der Zeit abhängen, die Konstruktion der Sprungunstetigkeiten und die Zeitentwicklung der Charakteristiken mit dem Gleichungssystem von gewöhnlichen Differentialgleichungen (6.5) vertauscht werden können. Es genügt daher, die Sprungunstetigkeiten nachträglich an benötigten Zeitpunkten zu konstruieren.

Ein einfaches Beispiel, eine Entwässerung nach einer sekundären Bewässerung, wird in Abbildung 7.7 gezeigt. Man beachte, dass in diesem Fall  $S_+^d = S_\ell$  und  $g_r(S_+^d) = 0$  gilt und der Bereich  $c$  auf den Punkt  $x = x^{(s)}(t_r)$  geschrumpft ist. Abbildung 7.7a zeigt Sättigungsprofile  $S_2, S, 1 - S_4$  zu sechs äquidistanten Zeitpunkten für den Zeitraum  $t \leq t_r$ . Die gestrichelten Kurven markieren dabei die Anfangsbedingungen. Abbildung 7.7b zeigt Sättigungsprofile ebenfalls zu sechs äquidistanten Zeitpunkten für den Zeitraum  $t \geq t_r$ . Hier markieren die gestrichelten Kurven die Profile zum Zeitpunkt  $t = t_r$ . Der zeitliche Abstand zwischen zwei benachbarten Profilen beträgt in beiden Abbildungen  $\Delta t = t_r/5 = 3$  d.

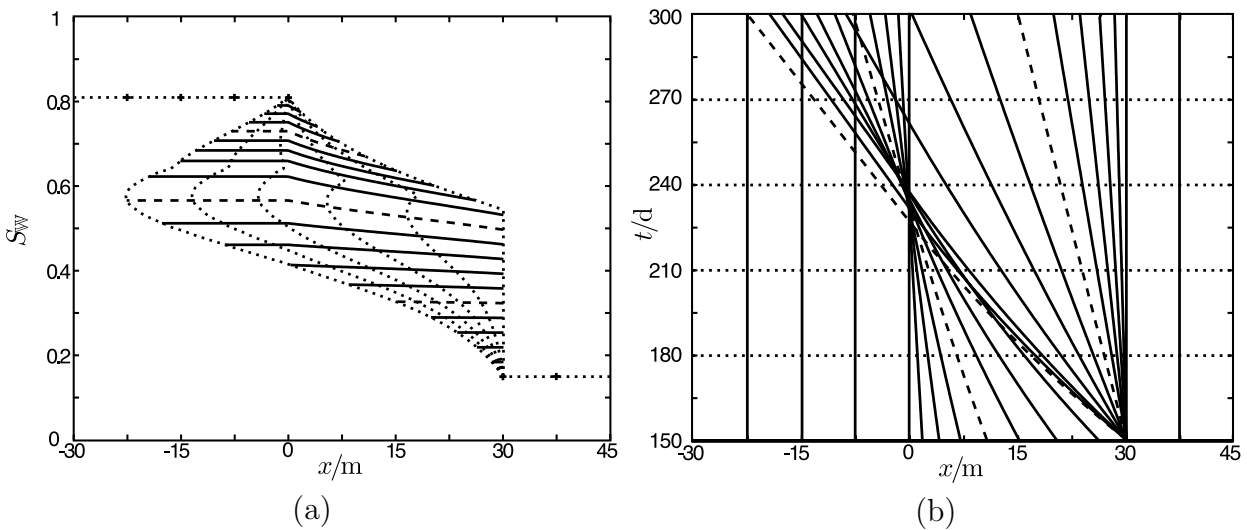
Im Zeitraum  $0 \leq t \leq t_r$  ist der Volumenstrom von links nach rechts gerichtet. Der Fall wurde bereits in Abbildung 7.4b gezeigt und diskutiert. Für  $x < 0$  m bleibt die Sättigung konstant und der Bereich  $x > 0$  m wird sekundär bewässert. Für Zeiten  $t \geq t_r$  ist der Volumenstrom



**Abbildung 7.7:** Sättigungsprofile für das Buckley-Leverett-Problem mit umgekehrter Strömungsrichtung. Abbildung (a) zeigt die Periode der Wasserinjektion von der linken Seite bis zum Zeitpunkt  $t = t_r = 15$  d. Abbildung (b) zeigt die Periode der Ölinjektion von der rechten Seite vom Zeitpunkt  $t = 15$  d bis zum Zeitpunkt  $t = 30$  d. In jeder Abbildung werden die jeweiligen Anfangsbedingungen als gestrichelte Kurven dargestellt. Profile werden in äquidistanten Zeitschritten  $\Delta t = 3$  d gezeigt.

von rechts nach links gerichtet und eine Verdünnungs-Stoßwelle wandert von rechts nach links. Im Gegensatz zur sekundären Bewässerung in Abbildung 7.7b ist hier die Sättigung  $S_+^{(s)}(t)$  stromabwärts der Stoßwelle nicht konstant und auch die Sättigung  $S_-^{(s)}(t)$  stromaufwärts und die Geschwindigkeit der Stoßwelle  $v^{(s)}(t)$  verändern sich im Laufe der Zeit. Ab dem Moment, an dem die Stoßwelle  $x = 0.0$  m erreicht, bleiben sowohl die Geschwindigkeit  $v^{(s)}(t)$  als auch die Sättigungen stromauf- und stromabwärts der Sprungunstetigkeit  $S_-^{(s)}(t)$ ,  $S_+^{(s)}(t)$  konstant. Sie nehmen die Werte einer sekundären Entwässerung an. Würde man dieses Problem mit dem DBRMMWBL-Modell beschreiben wollen, würde man unendlich viele Zwischenkurven benötigen, um die Dynamik der Entwässerungswelle, während sie über die Bewässerungsverdünnungswelle wandert, korrekt beschreiben zu können. Im untersuchten Modell wird dies nicht benötigt. Die richtigen Zwischenkurven sind durch die Sättigungen  $S_0(x)$ ,  $S_{20}(x)$ ,  $S_{40}(x)$  bereits bestimmt.

Abbildung 7.8 illustriert die Lösung anhand von Projektionen ausgewählter Charakteristiken aus dem  $(x, t, S)$ -Raum auf die  $(x, S)$ -Ebene in Abbildung 7.8a und auf die  $(x, t)$ -Ebene in Abbildung 7.8b für Zeiten  $t > t_r$ . Die Charakteristiken werden in beiden Abbildungen als durchgezogene und gestrichelte Kurven dargestellt. Die Charakteristiken mit den Anfangsättigungen  $S(\xi, t_r) = 1 - S_{\text{Oim}}$  und  $S(\xi, t_r) = S_{\text{Wdr}}$  verlaufen parallel zur Zeitachse und entsprechen daher Punkten in der  $(x, S)$ -Ebene und Geraden in der  $(x, t)$ -Ebene. Im Bereich  $m$  ( $x \in [0.0 \text{ m}, 30.01 \text{ m}]$ ) verändern sich die Sättigungen entlang von Charakteristiken. Dies wird in Abbildung 7.8a explizit gezeigt. Implizit zeigt dies auch Abbildung 7.8b, da



**Abbildung 7.8:** Illustration von ausgewählten Charakteristiken für die rückwärtsgerichtete Strömungsrichtung. Die Sättigungsprofile dazu werden in Abbildung 7.7b gezeigt. Abbildung (a) zeigt Projektionen der Charakteristiken auf die  $(x, S)$ -Ebene. Die Kreuze entsprechen Charakteristiken, die in dieser Darstellung stationär sind. Abbildung (b) zeigt Projektionen der Charakteristiken auf die  $(x, t)$ -Ebene. Die Charakteristiken werden in beiden Abbildungen als durchgezogene und gestrichelte Kurven dargestellt. Die gepunkteten Kurven zeigen Schnitte senkrecht zur Zeitachse zu äquidistanten Zeitpunkten mit  $\Delta t = 3$  d.

die Charakteristiken in diesem Bereich eine Krümmung aufweisen. Die gepunkteten Kurven zeigen Schnitte senkrecht zur Zeitachse zu äquidistanten Zeitpunkten mit  $\Delta t = 3$  d. In der  $(x, S)$ -Ebene entsprechen diese Schnitte den Profilen welche in Abbildung 7.7 gezeigt werden wobei die Mehrdeutigkeit nicht mit einer Sprungunstetigkeit aufgelöst wurde. Schnitte von Charakteristiken in der  $(x, t)$ -Ebenen deuten mehrere Sättigungswerte an einem Ort  $x$  an. In beiden Abbildungen werden Projektionen derselben Charakteristiken gezeigt. Um die Identifizierung zu erleichtern, werden drei Charakteristiken als gestrichelte Kurven dargestellt.

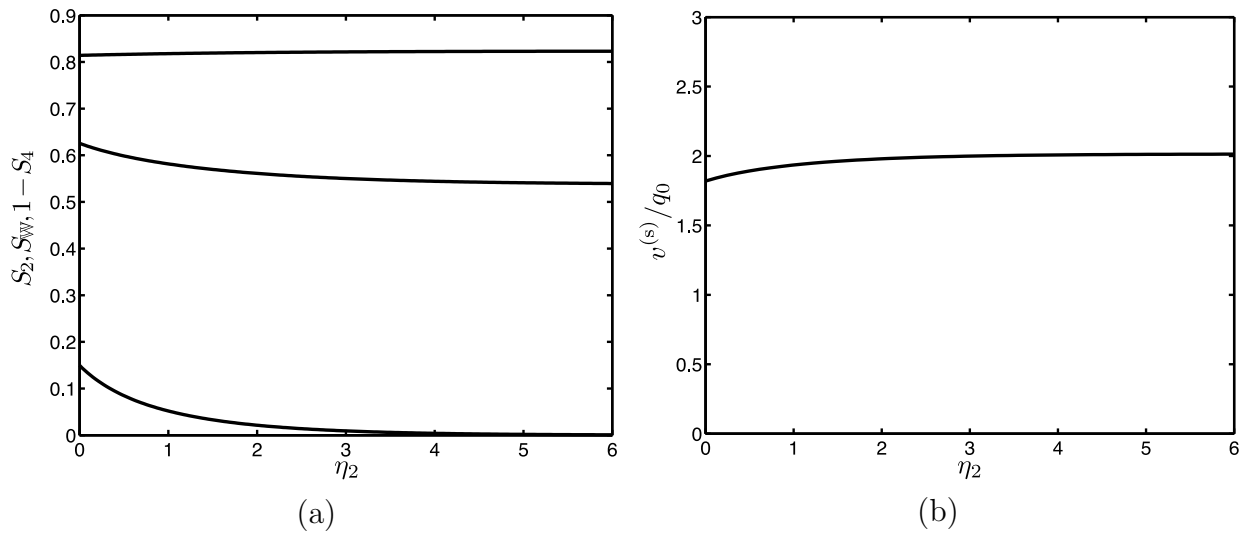
## 7.5 Einfluss der Parameter auf Stoßwellenhöhe und Stoßwellengeschwindigkeit für eine sekundäre Bewässerung

In diesem Unterkapitel wird eine Parameterstudie für die sekundäre Bewässerung durchgeführt. Die Parameter sind in Tabelle 7.1 aufgelistet. In der Studie werden die Sättigungen  $S_{2-}^{(s)}$ ,  $S_{-}^{(s)}$ ,  $1 - S_{4-}^{(s)}$  stromaufwärts der Sprungunstetigkeit und die Geschwindigkeit  $v^{(s)}$  der Stoßwelle in Abhängigkeit eines Parameters gezeigt. Die übrigen Parameter werden dabei konstant gehalten. Da in der Parameterstudie eine sekundäre Bewässerung betrachtet wird, hat  $S_{\text{W dr}}$  keinen Einfluss auf die Lösung. Auf eine Darstellung wird daher verzichtet.

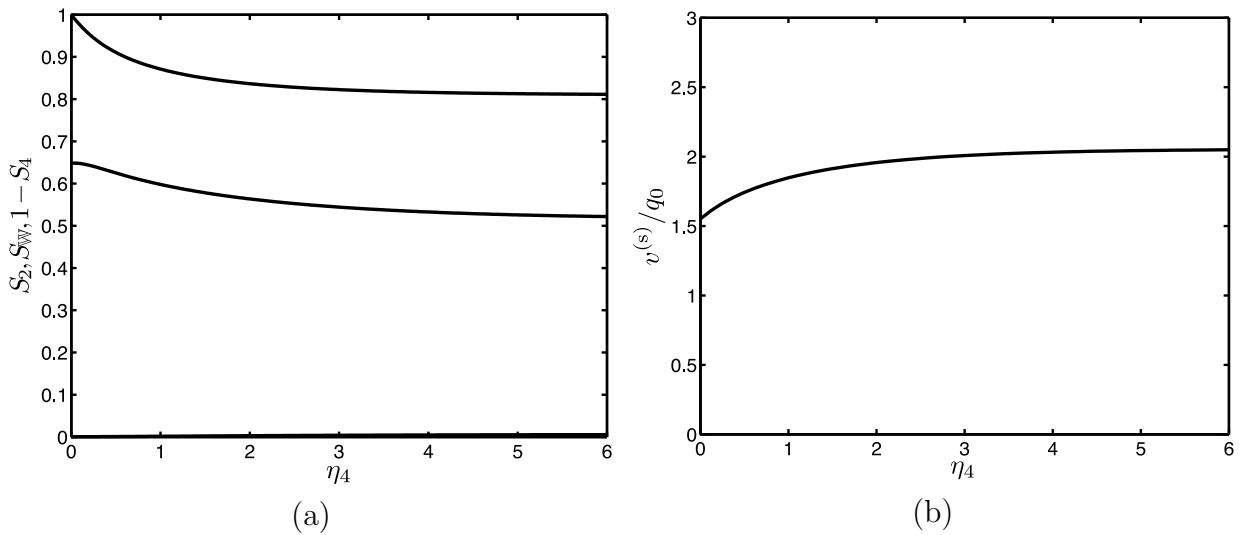
Der Einfluss des Massenaustauschparameters für Wasser  $\eta_2$  auf die Sättigungen  $S_{2-}^{(s)}$ ,  $S_{-}^{(s)}$ ,  $1 - S_{4-}^{(s)}$  stromaufwärts der Stoßwelle wird in Abbildung 7.9a und auf die Geschwindigkeit der Stoßwelle  $v^{(s)}$  in Abbildung 7.9b gezeigt. Die Darstellung im Parameterraum  $\eta_2 \in [0, 5]$  zeigt, dass die Wassersättigung  $S_{-}^{(s)}$  für Werte  $\eta_2 \in [0, \approx 3]$  deutlich, für  $\eta_2 \in [\approx 3, 5]$  nur geringfügig abnimmt. Der Einfluss auf  $S_{2-}^{(s)}$  ist deutlicher. Für  $\eta_2 \approx 3$  vereinigt sich bereits nahezu das komplette nichtperkolierende Wasser mit der eindringenden Wasserfront. Eine größeres  $\eta_2$  hat daher keinen Effekt. Der Einfluss auf die nichtperkolierende Ölsättigung  $S_{4-}^{(s)}$  geschieht nur indirekt und fällt damit deutlich geringer aus. Die Geschwindigkeit der Stoßwelle verhält sich entgegengesetzt zu den Sättigungen stromaufwärts, da die injizierte Wassermenge konstant gehalten wird.

Der Einfluss des Massenaustauschparameters für Öl  $\eta_4$  auf die Sättigungen  $S_{2-}^{(s)}$ ,  $S_{-}^{(s)}$ ,  $1 - S_{4-}^{(s)}$  stromaufwärts der Stoßwelle wird in Abbildung 7.10a und auf die Geschwindigkeit der Stoßwelle  $v^{(s)}$  in Abbildung 7.10b gezeigt. Das Verhalten der Sättigungen  $S_{2-}^{(s)}$ ,  $S_{-}^{(s)}$ ,  $1 - S_{4-}^{(s)}$  stromaufwärts der Stoßwelle sowie der Geschwindigkeit der Stoßwelle  $v^{(s)}$  verhält sich bei einer Variation von  $\eta_4$  weitestgehend analog zur Variation von  $\eta_2$ . Für geringere  $\eta_4$  zerreißt das Öl weniger stark in Blasen und der Anteil an mobilen perkolierenden Fluiden ist entsprechend größer. Dies wirkt sich indirekt auch auf die Menge an nichtperkolierendem Wasser aus. Da bei mehr mobilen Fluidanteilen, die Sprunghöhe größer ist, muss aufgrund der Volumenerhaltung die Stoßwellengeschwindigkeit für kleine  $\eta_4$  geringer sein.

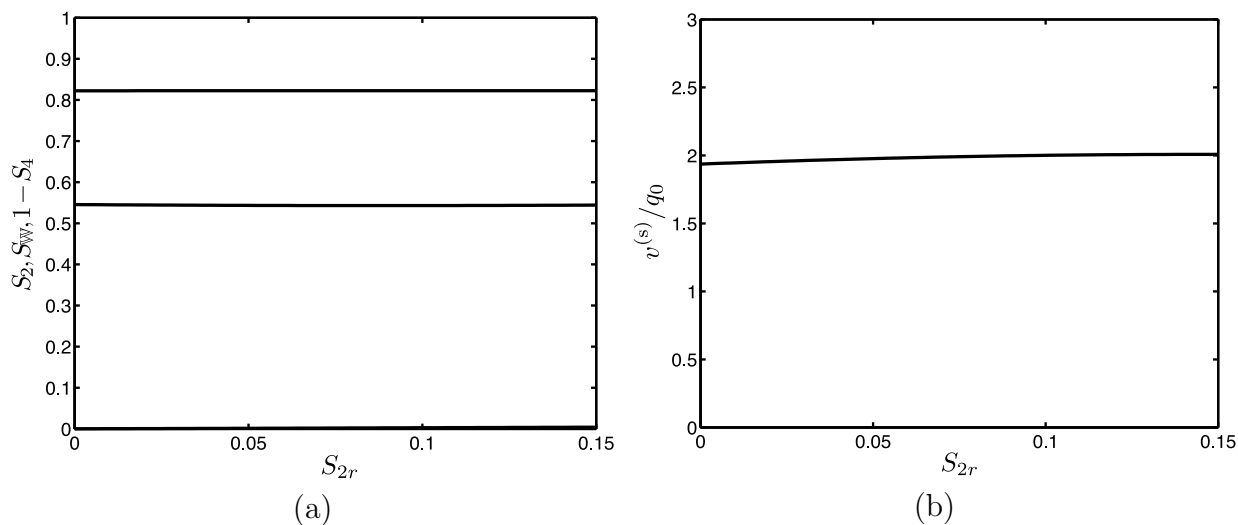
Der Einfluss der anfänglichen nichtperkolierenden Wassersättigung in der rechten Hälfte  $S_{2r}$  auf die Sättigungen  $S_{2-}^{(s)}$ ,  $S_{-}^{(s)}$ ,  $1 - S_{4-}^{(s)}$  stromaufwärts der Stoßwelle wird in Abbildung 7.11a und auf die Geschwindigkeit der Stoßwelle  $v^{(s)}$  in Abbildung 7.11b gezeigt. Die anfängliche nichtperkolierende Wassersättigung in der rechten Hälfte  $S_{2r}$  beeinflusst die Wassersättigung stromaufwärts der Sprungunstetigkeit  $S_{-}^{(s)}$  nur geringfügig, da dabei die Wassersättigung  $S_r$



**Abbildung 7.9:** Einfluss des Massenaustauschparameters für Wasser  $\eta_2$  auf die Sättigungen  $S_{2-}^{(s)}$ ,  $S_{w-}^{(s)}$ ,  $1 - S_{4-}^{(s)}$  stromaufwärts der Stoßwelle in Abbildung (a) und auf die Geschwindigkeit der Stoßwelle  $v^{(s)}$  in Abbildung (b).



**Abbildung 7.10:** Einfluss des Massenaustauschparameters für Öl  $\eta_4$  auf die Sättigungen  $S_{2-}^{(s)}$ ,  $S_{w-}^{(s)}$ ,  $1 - S_{4-}^{(s)}$  stromaufwärts der Stoßwelle in Abbildung (a) und auf die Geschwindigkeit der Stoßwelle  $v^{(s)}$  in Abbildung (b).



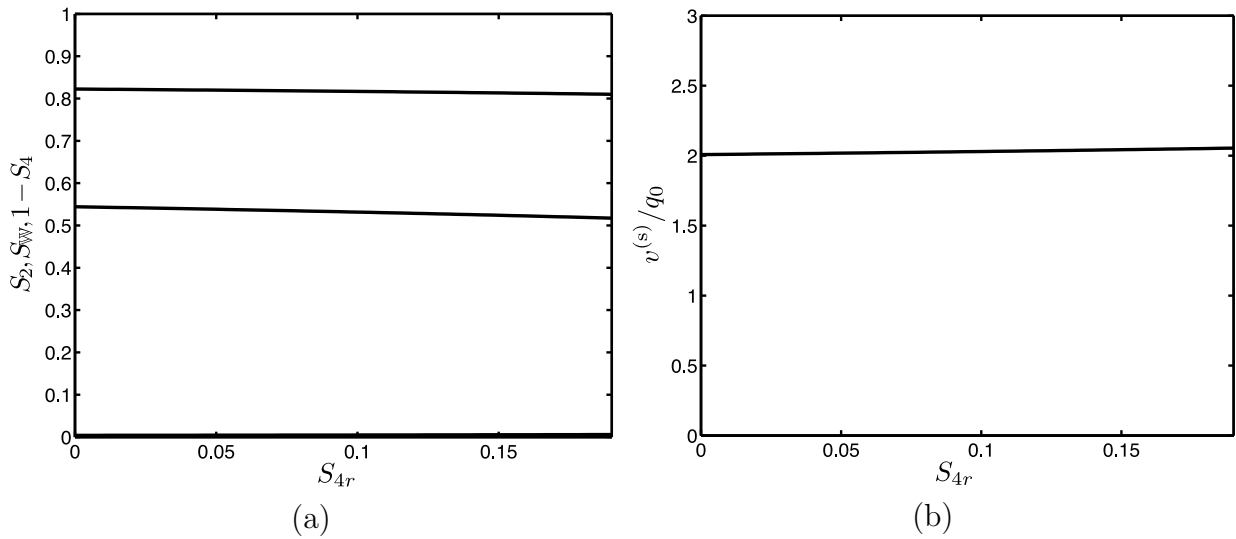
**Abbildung 7.11:** Einfluss der anfänglichen nichtperkolierenden Wassersättigung in der rechten Hälfte  $S_{2r}$  auf die Sättigungen  $S_{2-}^{(s)}$ ,  $S_{-}^{(s)}$ ,  $1 - S_{4-}^{(s)}$  stromaufwärts der Stoßwelle in Abbildung (a) und auf die Geschwindigkeit der Stoßwelle  $v^{(s)}$  in Abbildung (b).

konstant gehalten wird und somit weniger nichtperkolierendes Wasser durch mehr perkolierendes Wasser kompensiert wird. Der Einfluss von  $S_{2r}$  ist gering, da auch perkolierende Fluide für kleine Sättigungen nahezu immobil sind und es somit keine große Rolle spielt, in welcher Form die Wassersättigung  $S_r$  vorliegt. Die eindringende Wasserfront vereinigt sich mit dem vorliegenden Wasser, egal ob es perkolierend oder nichtperkolierend ist.

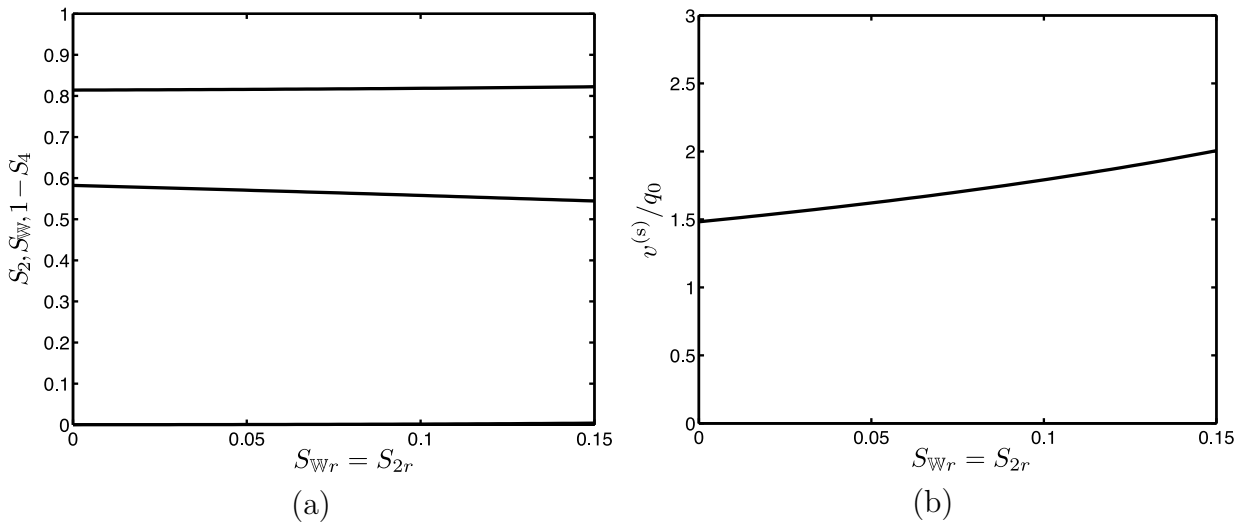
Der Einfluss der anfänglichen nichtperkolierenden Ölsättigung in der rechten Hälfte  $S_{4r}$  auf die Sättigungen  $S_{2-}^{(s)}$ ,  $S_{-}^{(s)}$ ,  $1 - S_{4-}^{(s)}$  stromaufwärts der Stoßwelle wird in Abbildung 7.12a und auf die Geschwindigkeit der Stoßwelle  $v^{(s)}$  in Abbildung 7.12b gezeigt. Der Einfluss von  $S_{4r}$  auf  $S_{-}^{(s)}$  ist stärker als der von  $S_{2r}$ . Der Einfluss auf  $S_{4-}^{(s)}$  ist zwar ähnlich gering wie der Einfluss von  $S_{2r}$  auf  $S_{2-}^{(s)}$ . Der Anteil des nichtperkolierenden Öls an der gesamten Ölsättigung ist jedoch deutlich größer, so dass der relative Anteil größer ist. Da das Öl damit weniger mobil ist, wird die Wassersättigung  $S_{-}^{(s)}$  mit zunehmenden  $S_{4r}$  kleiner und die Geschwindigkeit nimmt entsprechend zu.

Abbildung 7.13 zeigt den Einfluss der anfänglichen Wassersättigung in der rechten Hälfte  $S_r = S_{2r}$  für  $S_r < S_{\text{Wdr}}$  auf die Lösung. Die Abbildung zeigt den kontinuierlichen Übergang in Stoßwellenhöhe und Stoßwellengeschwindigkeit von einer primären Bewässerung (siehe Abbildung 7.4a) zu einer sekundären Bewässerung (siehe Abbildung 7.4b). Dabei nimmt die Geschwindigkeit der Stoßwelle zu und die Stoßwellenhöhe ab.

Der Einfluss des anfänglichen perkolierenden Wassers in der rechten Hälfte  $S_r - S_{2r}$  auf die Sättigungen  $S_{2-}^{(s)}$ ,  $S_{-}^{(s)}$ ,  $1 - S_{4-}^{(s)}$  stromaufwärts der Stoßwelle wird in Abbildung 7.14a und

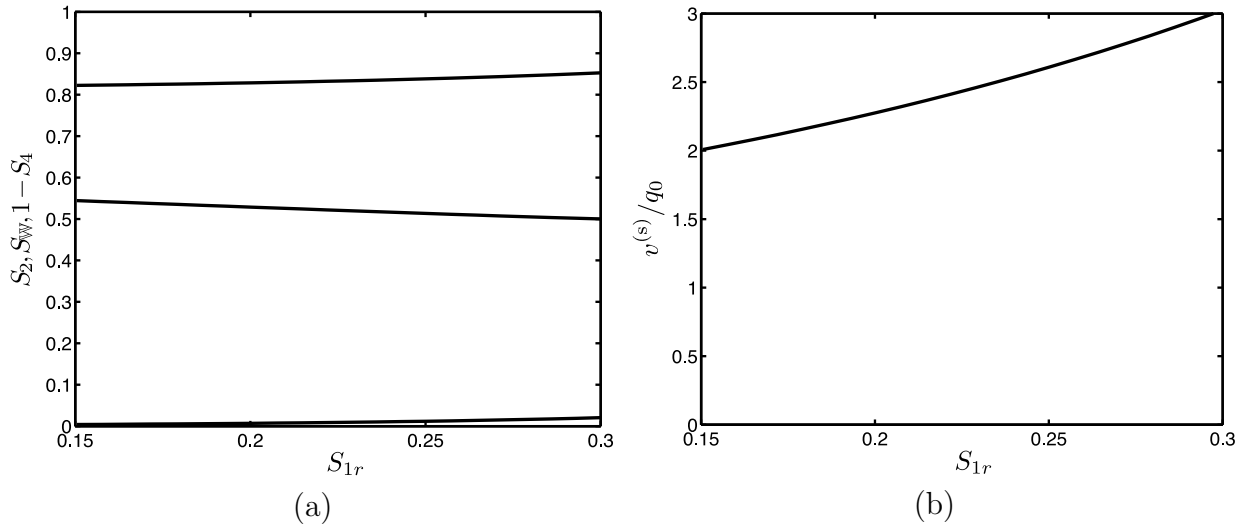


**Abbildung 7.12:** Einfluss der anfänglichen nichtperkolierenden Ölsättigung in der rechten Hälfte  $S_{4r}$  auf die Sättigungen  $S_{2-}^{(s)}, S_{-}^{(s)}, 1 - S_{4-}^{(s)}$  stromaufwärts der Stoßwelle in Abbildung (a) und auf die Geschwindigkeit der Stoßwelle  $v^{(s)}$  in Abbildung (b).



**Abbildung 7.13:** Einfluss der anfänglichen Wassersättigung in der rechten Hälfte  $S_r = S_{2r}$  für  $S_r < S_{Wdr}$  auf die Sättigungen  $S_{2-}^{(s)}, S_{-}^{(s)}, 1 - S_{4-}^{(s)}$  stromaufwärts der Stoßwelle in Abbildung (a) und auf die Geschwindigkeit der Stoßwelle  $v^{(s)}$  in Abbildung (b).



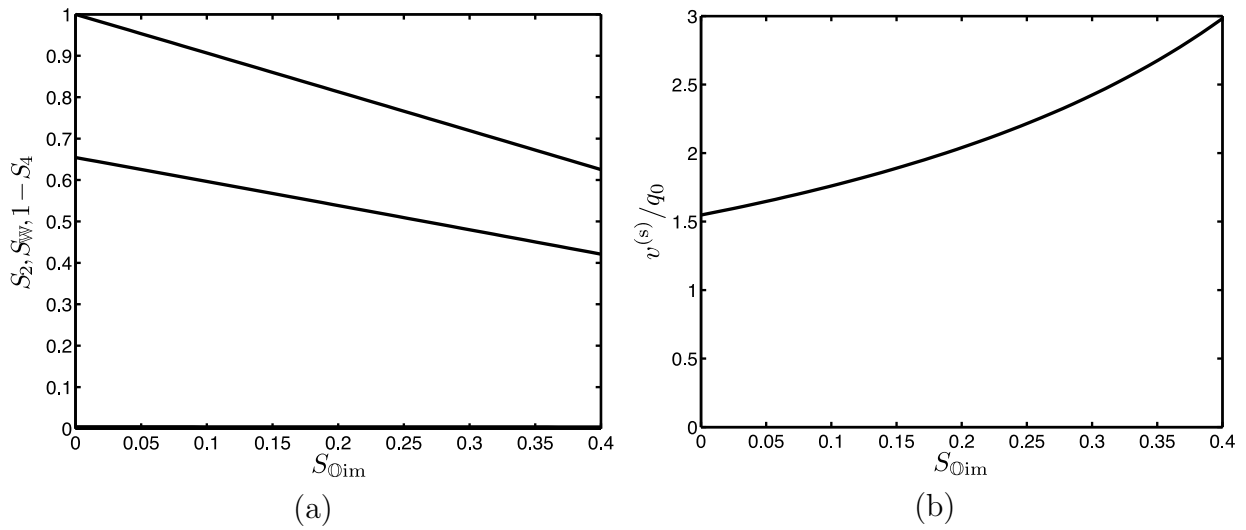


**Abbildung 7.14:** Einfluss der anfänglichen perkolierenden Wassersättigung in der rechten Hälfte  $S_1 = S_r - S_{2r}$  für Wassersättigungen  $S_r > S_{\text{Wdr}}$  auf die Sättigungen  $S_{2-}^{(s)}$ ,  $S_{-}^{(s)}$ ,  $1 - S_{4-}^{(s)}$  stromaufwärts der Stoßwelle in Abbildung (a) und auf die Geschwindigkeit der Stoßwelle  $v^{(s)}$  in Abbildung (b).

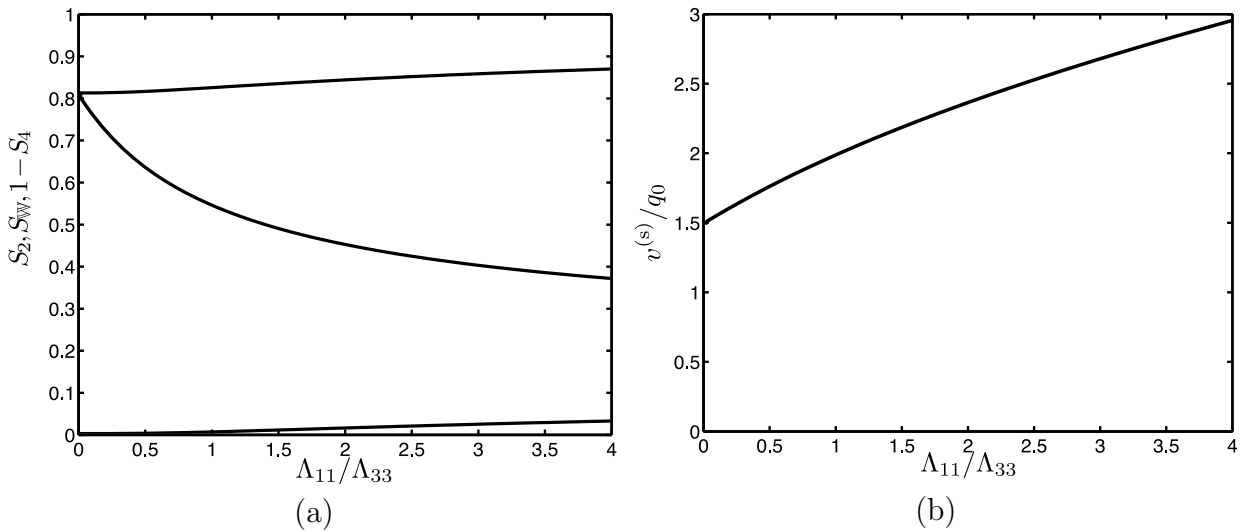
auf die Geschwindigkeit der Stoßwelle  $v^{(s)}$  in Abbildung 7.14b gezeigt. Ist der Wasseranteil zu Beginn des Verdrängungsprozesses größer, so ändern sich die Sättigungen  $S_{2-}^{(s)}$ ,  $S_{-}^{(s)}$ ,  $S_{4-}^{(s)}$  nur geringfügig. Dagegen wird die Stoßwelle deutlich schneller. Dies folgt mathematisch direkt aus der konvex-konkaven Form der fraktionalen Flussfunktion  $f_{\text{W}}$ . Es lässt sich jedoch auch physikalisch motivieren. Der Verdünnungsfächer entsteht, weil das Öl für kleine Ölsättigungen deutlich an Mobilität verliert und somit schlechter verdrängt wird. Dies ist völlig unabhängig davon, wie hoch der Wasseranteil zu Beginn des Experiments ist, so lange er noch klein genug ist, um nicht bereits zu Beginn von kleine Ölsättigungen sprechen zu müssen. Die Stoßwelle hingegen ist deutlich schneller.

Der Einfluss der Grenzsättigung für Öl  $S_{\text{Oim}}$  auf die Sättigungen  $S_{2-}^{(s)}$ ,  $S_{-}^{(s)}$ ,  $1 - S_{4-}^{(s)}$  stromaufwärts der Stoßwelle wird in Abbildung 7.15a und auf die Geschwindigkeit der Stoßwelle  $v^{(s)}$  in Abbildung 7.15b gezeigt. Mit zunehmender Grenzsättigung für Öl  $S_{\text{Oim}}$  nimmt die Sättigung  $S_{4-}^{(s)}$  zu, da sie größere Werte annehmen kann und der Abstand zur maximal möglichen Sättigung einen Einfluss darauf hat, wie leicht das Öl zerreißt. Da damit der Raum für mobile Phasen abnimmt, sinkt auch die Sättigung  $S_{-}^{(s)}$ . Die Geschwindigkeit  $v^{(s)}$  muss dann allerdings zunehmen, da die gleiche Menge an Wasser injiziert wird.

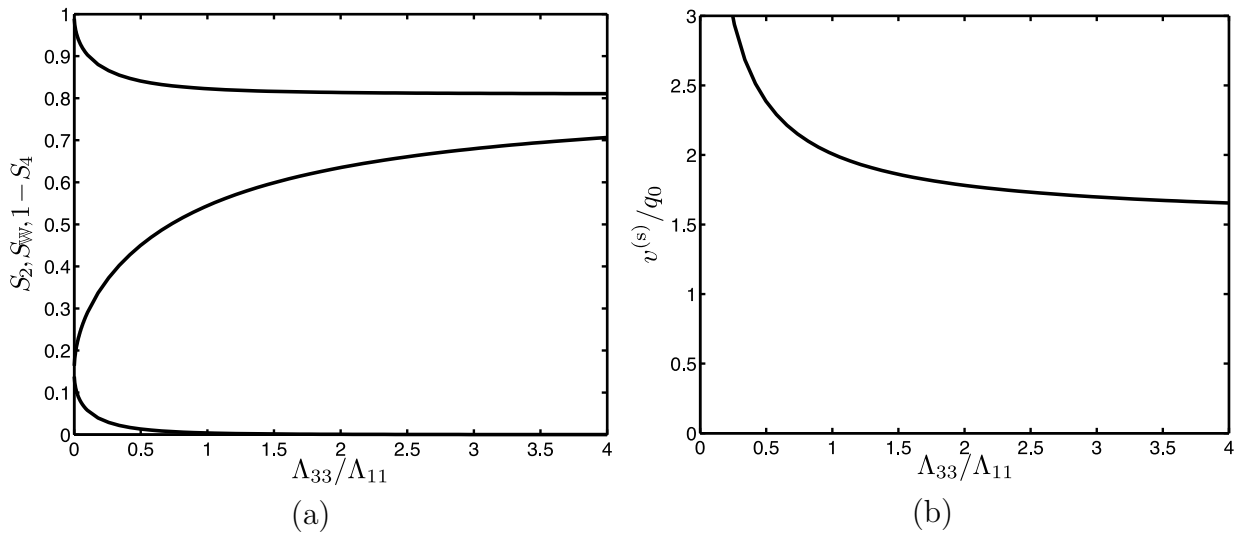
Der Einfluss der Mobilitätskonstante  $\Lambda_{11}$  des perkolierenden Wassers auf die Sättigungen  $S_{2-}^{(s)}$ ,  $S_{-}^{(s)}$ ,  $1 - S_{4-}^{(s)}$  stromaufwärts der Stoßwelle wird in Abbildung 7.16a und auf die Geschwindigkeit der Stoßwelle  $v^{(s)}$  in Abbildung 7.16b gezeigt. Der Einfluss der Mobilitätskonstante  $\Lambda_{11}$  ist analog zum Einfluss der Viskosität von Wasser im traditionellen Buckley-Leverett-Modell, wenn man berücksichtigt, dass in der RDA für die Mobilität  $\Lambda_{11} \propto \mu_{\text{W}}^{-1}$  gilt. Eine



**Abbildung 7.15:** Einfluss der Grenzsättigung für Öl  $S_{Oim}$  auf die Sättigungen  $S_{2-}^{(s)}, S_{-}^{(s)}, 1 - S_{4-}^{(s)}$  stromaufwärts der Stoßwelle in Abbildung (a) und auf die Geschwindigkeit der Stoßwelle  $v^{(s)}$  in Abbildung (b).



**Abbildung 7.16:** Einfluss der Mobilitätskonstante  $\Lambda_{11}$  des perkolierenden Wassers auf die Sättigungen  $S_{2-}^{(s)}, S_{-}^{(s)}, 1 - S_{4-}^{(s)}$  stromaufwärts der Stoßwelle in Abbildung (a) und auf die Geschwindigkeit der Stoßwelle  $v^{(s)}$  in Abbildung (b).



**Abbildung 7.17:** Einfluss der Mobilitätskonstante  $\Lambda_{33}$  des perkolierenden Öls auf die Sättigungen  $S_{2-}^{(s)}, S_{-}^{(s)}, 1 - S_{4-}^{(s)}$  stromaufwärts der Stoßwelle in Abbildung (a) und auf die Geschwindigkeit der Stoßwelle  $v^{(s)}$  in Abbildung (b).

vergrößerte Mobilität entspricht also auch hier einer verringerten Viskosität von Wasser und führt damit zu einer kleineren Stoßwellenhöhe  $S_{-}^{(s)}$  und einer größeren Geschwindigkeit  $v^{(s)}$ .

Der Einfluss der Mobilitätskonstante  $\Lambda_{33}$  des perkolierenden Öls auf die Sättigungen  $S_{2-}^{(s)}, S_{-}^{(s)}, 1 - S_{4-}^{(s)}$  stromaufwärts der Stoßwelle wird in Abbildung 7.17a und auf die Geschwindigkeit der Stoßwelle  $v^{(s)}$  in Abbildung 7.17b gezeigt. Auch der Einfluss der Mobilitätskonstante  $\Lambda_{33}$  ist analog zum Einfluss der Viskosität von Öl im traditionellen Buckley-Leverett-Modell, wenn man berücksichtigt, dass in der RDA für die Mobilität  $\Lambda_{33} \propto \mu_0^{-1}$  gilt. Eine vergrößerte Mobilität entspricht also auch hier einer verringerten Viskosität und führt damit zu einer größeren Stoßwellenhöhe  $S_{-}^{(s)}$  und einer kleineren Geschwindigkeit  $v^{(s)}$ .

## 8 Schwerkraftgetriebene Umverteilung

In diesem Kapitel wird die Methode der Charakteristiken angewendet, um das schwerkraftgetriebene Umverteilungsproblem in einer geschlossenen Säule zu lösen. Nach der Diskussion der Anfangs- und Randbedingungen widmet sich ein Unterkapitel der Überbrückung einer räumlichen Unstetigkeit in der nichtmonotonen advektiven Flussfunktion. Die allgemeine Lösung wird im dritten Unterkapitel hergeleitet und im letzten Unterkapitel werden einige Beispiele diskutiert.

### 8.1 Anfangs- und Randbedingungen und Parameter

Man betrachte eine homogene poröse Säule, deren Wände an allen Seiten geschlossen sind und die parallel zur Schwerkraft ausgerichtet ist ( $\vartheta = 90^\circ$  in Gleichung (3.11)). Die Tiefe sei dabei durch  $x$  bezeichnet. In diesem Fall sind die Körperkräfte für die perkolierenden Phasen

$$F_G = (\varrho_{\text{W}} - \varrho_{\text{O}}) g. \quad (8.1)$$

Da die Säule auf allen Seiten geschlossen ist, muss der Gesamtfluss

$$q_{\text{tot}}(t) = 0 \quad (8.2)$$

verschwinden. Die Anfangsbedingungen für die schwerkraftgetriebene Umverteilung lauten

$$S(x, 0) = S_0(x) = S_\ell + (S_r - S_\ell) \Theta(x), \quad (8.3a)$$

$$S_2(x, 0) = S_{20}(x) = S_{2\ell} + (S_{2r} - S_{2\ell}) \Theta(x), \quad (8.3b)$$

$$S_4(x, 0) = S_{40}(x) = S_{4\ell} + (S_{4r} - S_{4\ell}) \Theta(x) \quad (8.3c)$$

im unendlichen Gebiet  $-\infty < x < \infty$ . Man beachte dabei, dass nach Gleichung (3.8) die Heaviside-Sprungfunktion bei  $x = 0$  unbestimmt ist. Die Randbedingungen an der oberen

und unteren Grenze sind

$$\lim_{x \rightarrow -\infty} S_i(x, t) = \lim_{x \rightarrow -\infty} S_{i0}(x) = S_{i\ell}, \quad (8.4a)$$

$$\lim_{x \rightarrow \infty} S_i(x, t) = \lim_{x \rightarrow \infty} S_{i0}(x) = S_{ir}, \quad (8.4b)$$

mit  $i = \mathbb{W}, 2, 4$ . Auch hier werden Lösungen für  $t \in [t_0, t_e]$  berechnet.

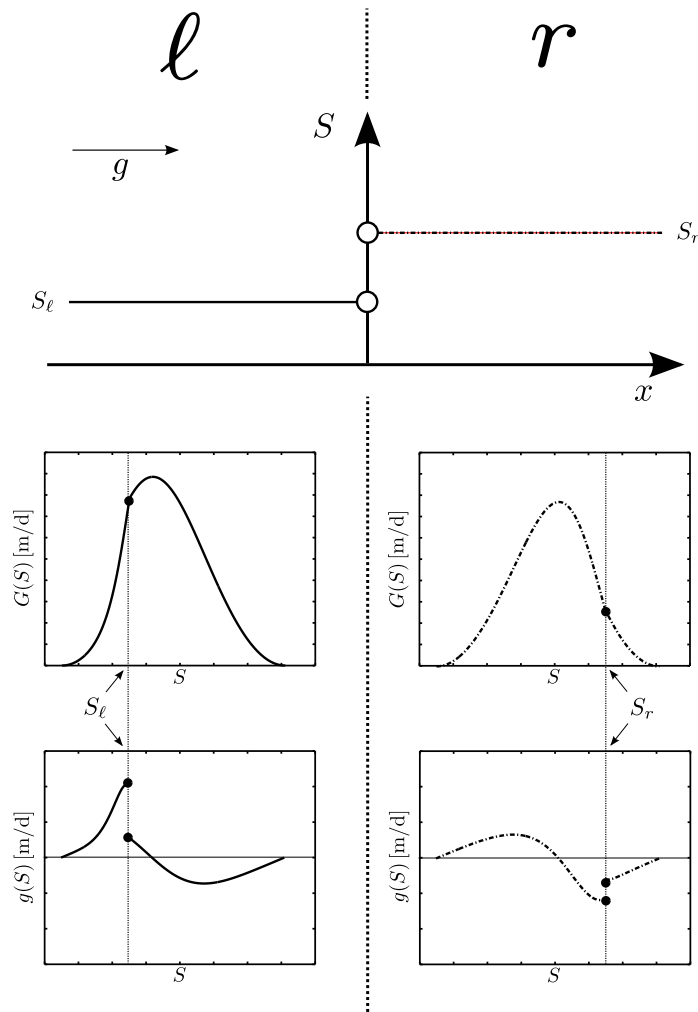
Es sei an dieser Stelle betont, dass diese Anfangs- und Randbedingungen nur für eine endliche Zeit eine gültige Näherung an Experimente mit einer geschlossenen Säule sind. Sie gelten außerdem nur in der Nähe der Unstetigkeit  $x = 0$  in den Anfangsbedingungen. Im Allgemeinen werden auch Wellen am oberen und unteren Rand  $x = \pm\infty$  der Säule entstehen. Diese Wellen werden hier nicht betrachtet. Damit ist der Gültigkeitsbereich der Lösungen auf einen Zeitraum beschränkt, in welchem Wellen von der Unstetigkeit und den Rändern noch nicht interferieren.

Die verwendeten Parameter sind dieselben wie für das Buckley-Leverett-Problem. Sie sind dort in Tabelle 7.1 aufgelistet.

## 8.2 Räumliche Unstetigkeiten für nichtmonotone Flussfunktionen

Die Berücksichtigung des Schwerkraftsterms  $F_G$  führt zu nichtmonotonen Flussfunktionen mit meist einem Extremum, wie es z.B. in Abbildung 5.2b zu sehen ist. In der folgenden Diskussion wird ein Maximum angenommen. Ein mögliches Minimum kann immer in ein Maximum verwandelt werden, wenn die Richtung der  $x$ -Achse gespiegelt wird. In diesem Unterkapitel werden die Bedingungen angewendet, die in Kapitel 6.3 zur Überbrückung einer räumlichen Unstetigkeit formuliert wurden. Es wird ein eindeutiges Lösungspaar  $(S_-^d(t), S_+^d(t))$  an der räumlichen Unstetigkeitsstelle  $x = x^d$  ermittelt. In [Kaas 99] wurde das Lösungspaar mit Hilfe einer Stabilitätsbedingung für die schwache Formulierung des DBRMMWBL-Modells hergeleitet.

Wie beim Buckley-Leverett-Problem in Kapitel 7.2 werden auch hier der Einfachheit wegen konstante Anfangsbedingungen  $S_\ell, S_{2\ell}, S_{4\ell}$  für  $x < x^d$  und  $S_r, S_{2r}, S_{4r}$  für  $x > x^d$  auf beiden Seiten der räumlichen Unstetigkeitsstelle angenommen. Unkonstante Anfangssättigungen führen zu einer Zeitabhängigkeit  $S_-^d = S_-^d(t)$  und  $S_+^d = S_+^d(t)$ . Dies würde zwar zusätzliche Berechnungen erfordern, aber keine konzeptionellen Schwierigkeiten bereiten. Außerdem wird angenommen, dass die Flussfunktion nicht explizit von der Zeit abhängt. Auch

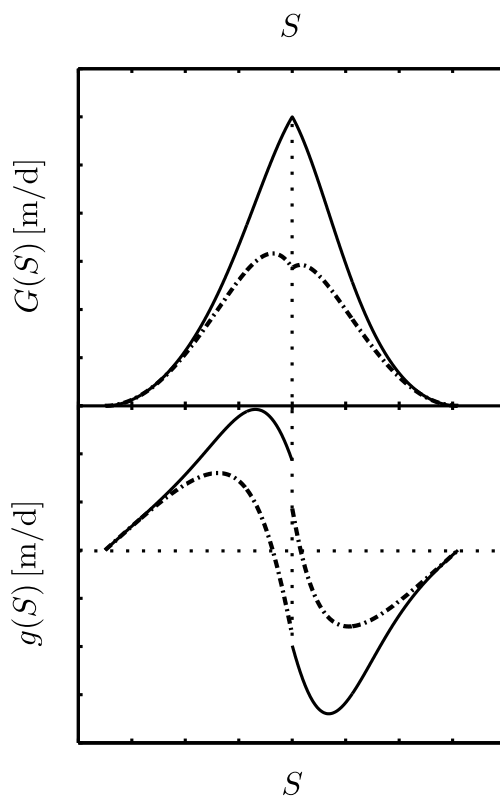


**Abbildung 8.1:** Illustration der bekannten Größen an einer Unstetigkeitsstelle bei nichtmonotonen Flussfunktionen. Die obere Abbildung zeigt konstante Sättigungen  $S(x < x^d, t = t_0) = S_\ell$  und  $S(x > x^d, t = t_0) = S_r$ . Die zentrale Abbildung zeigt die Flussfunktionen  $G_\ell(S)$  und  $G_r(S)$  und die untere Abbildung zeigt die partiellen Ableitungen  $g_\ell(S)$  und  $g_r(S)$ . Die Werte an den Anfangssättigungen  $S_\ell, S_r$  werden durch gefüllte Kreise angezeigt.

diese Einschränkung vereinfacht wieder die Berechnung, vermeidet aber keine konzeptionellen Schwierigkeiten.

Durch die Anfangsbedingungen sind auch die Flussfunktionen  $G_-(S) = G_\ell(S)$  und  $G_+(S) = G_r(S)$  an den beiden Seiten der Unstetigkeit gegeben. Ihre partiellen Ableitungen  $g_-(S) = g_\ell(S)$ ,  $g_+(S) = g_r(S)$  werden dabei in Analogie zu den Gleichungen (6.15) definiert. Die Grenzwerte der Anfangsbedingungen  $S_{0-}^d, S_{0+}^d$  werden ebenso analog zu Gleichung (6.16) definiert und sind durch  $S_{0-}^d = S_\ell$  und  $S_{0+}^d = S_r$  gegeben.

Wie in Definition (7.5) werden auch hier die beiden Limite  $g_{\mp}^{\text{im}}, g_{\mp}^{\text{dr}}$  der Ableitungen  $g_{\mp}$  für Be- und Entwässerung bei  $S_{0\mp}^d$  unterschieden. Im Allgemeinen unterscheiden sich diese



**Abbildung 8.2:** Beispiele für Flussfunktionen, die Bedingung (8.5) verletzen und ein singuläres Maximum (durchgezogene Kurven) oder zwei Maxima (gestrichpunktete Kurven) haben. Die obere Abbildung zeigt die Flussfunktionen  $G(S)$  und der untere Graph ihre Ableitungen  $g(S)$ .

beiden Limites  $g_{\mp}^{\text{im}} \neq g_{\mp}^{\text{dr}}$ .

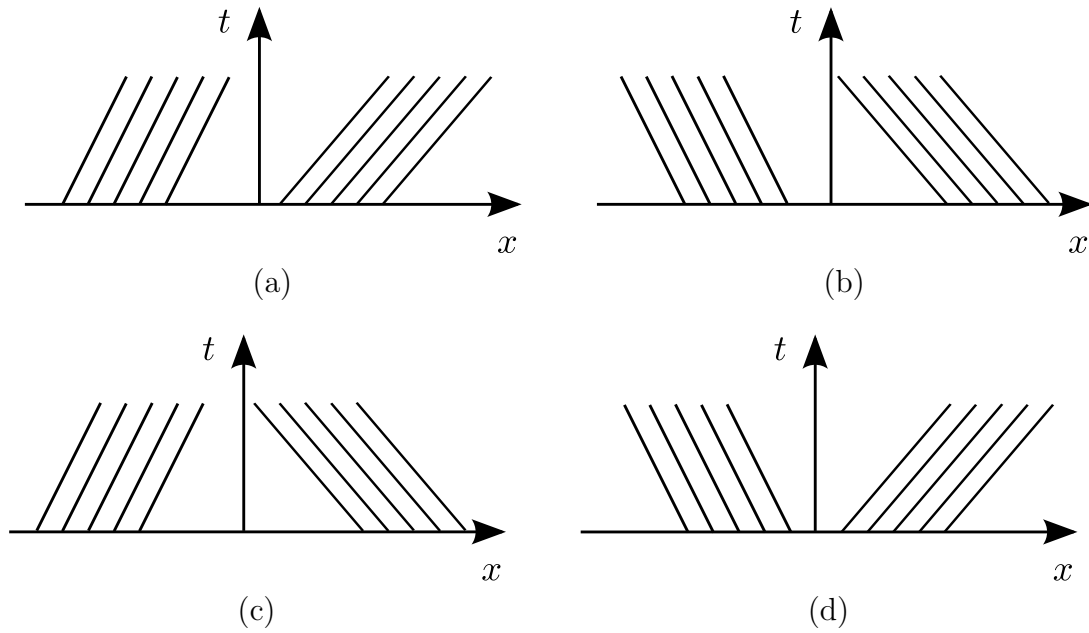
Abbildung 8.1 illustriert wichtige Größen des Anfangs- und Randwertproblems an der Unstetigkeitsstelle. Die obere Abbildung zeigt konstante Sättigungen  $S(x < x^{\text{d}}, t = t_0) = S_{\ell}$  und  $S(x > x^{\text{d}}, t = t_0) = S_r$ . Die zentrale Abbildung zeigt die Flussfunktionen  $G_{\ell}(S)$  und  $G_r(S)$  und die untere Abbildung zeigt die partiellen Ableitungen  $g_{\ell}(S)$  und  $g_r(S)$ . Die Werte an den Anfangssättigungen  $S_{\ell}$ ,  $S_r$  werden durch gefüllte Kreise angezeigt. Man beachte die Zweiwertigkeit an den Anfangssättigungen  $S_{\ell}$ ,  $S_r$  in den partiellen Ableitungen  $g_{\ell}$ ,  $g_r$ .

Die Konstruktion der Lösungen unterscheidet sich je nach Vorzeichen der Ableitungen  $g_-(S, t)$ ,  $g_+(S, t)$  beiderseits der Unstetigkeitsstelle. Allerdings kann es bei besonderen Parameterkonstellationen zu Flussfunktionen mit zwei Maxima und einem singulären Minimum oder mit einem singulären Maximum kommen. Der Einfachheit wegen werden diese von der Diskussion durch die Forderung, dass

$$\text{sign}(g_{\mp}^{\text{im}}) = \text{sign}(g_{\mp}^{\text{dr}}) \quad (8.5)$$

gelten muss, ausgeschlossen.

Abbildung 8.2 zeigt Beispiele für Flussfunktionen, die Bedingung (8.5) verletzen und ein



**Abbildung 8.3:** Illustration der vier unterschiedlichen Fälle anhand von Projektionen der Charakteristiken links und rechts der Unstetigkeit auf die  $(x, t)$ -Ebene. Die Abbildung (a) und (b) dargestellten Fälle werden in Kapitel 8.2.1 diskutiert. Der Fall zu Abbildung (c) wird in Kapitel 8.2.2 und der Fall zu Abbildung (d) in Kapitel 8.2.3 diskutiert.

singuläres Maximum (durchgezogene Kurven) oder zwei Maxima (gestrichpunktete Kurven) haben. Die Abbildung zeigt die Flussfunktionen in der oberen Hälfte und ihre partiellen Ableitungen in der unteren Hälfte. Ein singuläres Maximum tritt dann an der Stelle  $S_{0i}$  auf, wenn  $g_i^{\text{dr}} > 0$  und  $g_i^{\text{im}} < 0$  gilt. Zwei Maxima treten in der Flussfunktion dann auf, wenn  $g_i^{\text{dr}} < 0$  und  $g_i^{\text{im}} > 0$  gilt und damit an der Stelle  $S_{0i}$  ein singuläres Minimum auftritt. Es sei erwähnt, dass beide hier gezeigten Flussfunktionen dieselben Parameter und dieselbe Anfangswassersättigung  $S_0$  haben. Nur die Anfangssättigungen der nichtperkolierenden Phasen  $S_{20}, S_{40}$  sind unterschiedlich. Die vertikale Linie in der Abbildung deutet die Anfangssättigung  $S_0$  an, die horizontale Linie in der unteren Abbildung markiert  $g = 0$ . Mit dem Ausschluss singulärer Maxima können die Sättigungen  $S_{\mp}^{\text{max}}$ , an welchen die Flussfunktionen maximal werden, über

$$\frac{\partial}{\partial S} G_{\mp} (S_{\mp}^{\text{max}}) = 0, \quad (8.6a)$$

$$\frac{\partial^2}{\partial S^2} G_{\mp} (S_{\mp}^{\text{max}}) < 0 \quad (8.6b)$$

definiert werden.

Bei nichtmonotonen Flussfunktionen  $G_-(S), G_+(S)$ , ist die Sättigung  $S_+^{\text{d}}$  an einer Unstetigkeitsstelle nicht eindeutig durch Gleichung (6.14) definiert, auch wenn  $S_-^{\text{d}}$  gegeben ist.



Gleiches gilt für  $S_-^d$  wenn  $S_+^d$  gegeben ist. Anhand der Vorzeichen der Ableitungen  $g_-(S_\ell)$  und  $g_+(S_r)$  können vier Fälle unterschieden werden.

Abbildung 8.3 illustriert die vier Fälle anhand von Projektionen der Charakteristiken auf die  $(x, t)$ -Ebene. Die Richtung einer Charakteristik ist über die Zeitrichtung gegeben. Abbildung 8.3a zeigt Charakteristiken mit  $g_-(S_\ell) > 0$  und  $g_+(S_r) > 0$  und Abbildung 8.3b zeigt Charakteristiken mit  $g_-(S_\ell) < 0$  und  $g_+(S_r) < 0$ . In beiden Fällen laufen die Charakteristiken beider Seiten in dieselbe Richtung und treffen auf die Unstetigkeitsstelle von einer Seite und verlassen sie auf der anderen Seite. Die Diskussion für beide Fälle verläuft völlig analog, wenn die Begriffe entsprechend angepasst werden. Sie werden daher gemeinsam in Kapitel 8.2.1 diskutiert. Abbildung 8.3c zeigt Charakteristiken mit  $g_-(S_\ell) > 0$  und  $g_+(S_r) < 0$ . In diesem Fall treffen Charakteristiken von beiden Seiten auf die Unstetigkeit. Die Lösung zu diesem Fall wird in Kapitel 8.2.2 hergeleitet. Abbildung 8.3d zeigt Charakteristiken mit  $g_-(S_\ell) < 0$  und  $g_+(S_r) > 0$ . In diesem Fall zeigen die Charakteristiken an beiden Seiten der Unstetigkeit aus ihr heraus. Die Lösung zu diesem Fall wird in Kapitel 8.2.3 hergeleitet.

### 8.2.1 Charakteristiken mit selbem Vorzeichen (Abbildung 8.3a,b)

Ohne Beschränkung der Allgemeinheit wird der Fall mit positiven Ableitungen  $g_-(S_\ell) \geq 0, g_+(S_r) \geq 0$  betrachtet, der in Abbildung 8.3a illustriert ist. Für positive  $g_-(S_\ell) > 0$  treffen die Charakteristiken der linken Anfangssättigungen  $S_\ell$  auf die räumliche Unstetigkeit. Daher muss die linke Grenzsättigung  $S_-^d = S_\ell$  sein. Die Charakteristiken der rechten Anfangssättigungen  $S_r$  überqueren die Unstetigkeit nicht. Damit erhält man für  $S$  aus der Bedingung (6.14) mit  $S_-^d(t)$  die nichtlineare implizite Gleichung

$$G_+(S) = G_-(S_\ell). \quad (8.7)$$

Sie hat aufgrund der Nichtmonotonität der advektiven Flussfunktion  $G_-(S), G_+(S)$  keine eindeutige Lösung  $S^*$ . Da die Flussfunktionen ein Maximum haben, kann Gleichung (8.7) entweder keine, eine oder zwei Lösungen haben.

Wenn Gleichung (8.7) eine *eindeutige Lösung* besitzt, ist diese Lösung die Sättigung rechts der Unstetigkeit  $S_+^d = S^*$ . Das Lösungspaar ist damit  $(S_-^d, S_+^d) = (S_\ell, S^*)$ .

Wenn Gleichung (8.7) *keine Lösung* besitzt, dann bedeutet dies physikalisch, dass das Medium rechts von der Unstetigkeit nicht in der Lage ist, den Volumenstrom, der von links kommt, durchfließen zu lassen. Es kommt daher zum Rückstau auf der linken Seite. Der maximal mögliche Volumenstrom durch die Unstetigkeit ist für  $S_+^d = S_+^{\max}$  möglich. Mit dieser

Sättigung  $S_+^d = S_+^{\max}$  liefert Bedingung (6.14) eine nichtlineare implizite Gleichung

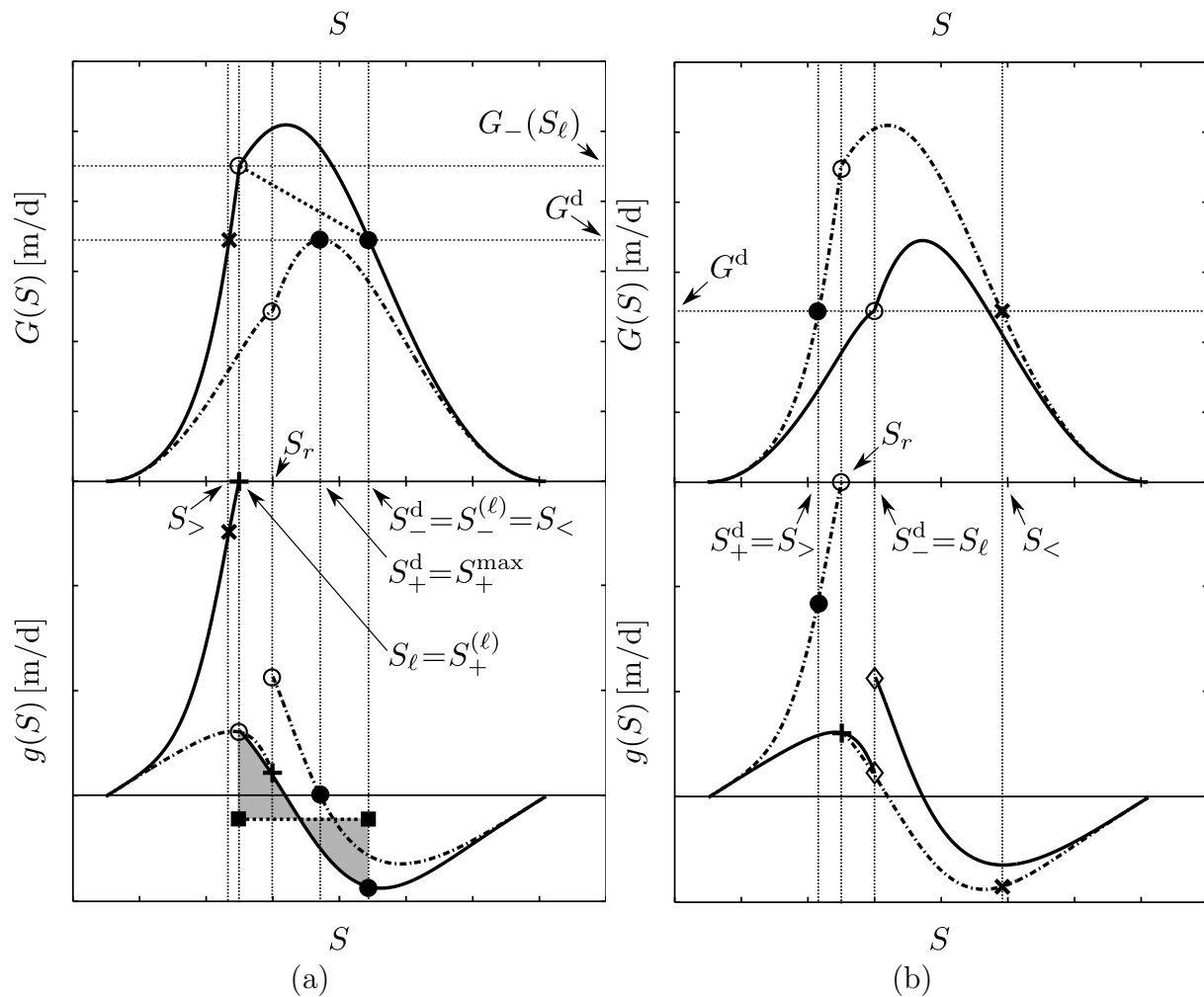
$$G_-(S) = G_+(S_+^{\max}) \quad (8.8)$$

für  $S$  mit zwei Lösungen. Nach dem Vorzeichen der Ableitungen  $g_-$  an den entsprechenden Stellen werden die beiden Lösungen als  $S_>$  mit  $g_-(S_>) > 0$  und als  $S_<$  mit  $g_-(S_<) < 0$  bezeichnet.

Die physikalische relevante Lösung ist  $S_<$ . Zur Begründung beachte man zunächst, dass  $S_> < S_\ell < S_<$  gilt. Die Lösung  $S_>$  sorgt also nicht für eine Wasserzunahme links der Unstetigkeit. Außerdem ist die Geschwindigkeit der Charakteristik positiv, so dass die Charakteristik die linke Hälfte sofort nach rechts wieder verlässt und bei der Konstruktion der Lösung in der linken Hälfte nicht berücksichtigt werden muss. Dagegen läuft die Charakteristik zu  $S_<$  in die linke Hälfte. Laut Voraussetzung laufen die Charakteristiken zu Beginn in der linken Seite nach rechts und die Charakteristiken schneiden sich in der  $(x, t)$ -Ebene. Dies deutet auf eine Sprungunstetigkeit hin. Die Rankine-Hugoniot-Bedingung (6.12) liefert darum eine Stoßwelle, die den Rückstau des Wassers beschreibt.

Abbildung 8.4a illustriert die Konstruktion der Lösung an der räumlichen Unstetigkeit für den eben diskutierten Fall. Sie zeigt außerdem die Konstruktion einer Sprungunstetigkeit, die durch die Gleichungen (6.10) bestimmt ist, da die Sättigungsprofile der Lösung für die beispielhaft gewählten Parameter eine Sprungunstetigkeit erforderlich machen. Durchgezogene Kurven zeigen  $G_-(S)$  und  $g_-(S)$ , gestrichpunktete  $G_+(S)$  und  $g_+(S)$ . Hohlkreise zeigen Funktionswerte an  $S_\ell$  und  $S_r$ .

Die Flussfunktionen werden im oberen Teil der Abbildung 8.4a gezeigt. Der Hohlkreis auf der durchgezogenen Kurve markiert den Punkt  $(S_\ell, G_-(S_\ell))$ . An der räumlichen Unstetigkeit muss der Fluss aufgrund von Gleichung (6.14) erhalten bleiben. Die horizontale Linie  $G_-(S_\ell)$  schneidet jedoch die gestrichpunktete dargestellte Flussfunktion  $G_+(S)$  nicht, so dass keine Sättigung gefunden werden kann, für welche Gleichung (6.14) gilt. Daher wird der Fluss über die räumliche Unstetigkeit durch den maximal möglichen Fluss auf der rechten Seite, also dem Maximum der gestrichpunkteten Kurve, bestimmt. Der entsprechende Punkt  $(S_+^{\max}, G_+(S_+^{\max}))$  wird durch einen gefüllten Kreis auf der gestrichpunkteten Linie markiert. Der Fluss  $G^d = G_+(S_+^d) = G_+(S_+^{\max})$  wird durch eine weitere horizontale Linie dargestellt. Diese schneidet die durchgezogene dargestellte Flussfunktion für die linke Seite in zwei Punkten  $(S_>, G_-(S_>))$  und  $(S_<, G_-(S_<))$ . Der relevante Punkt hat die Sättigung  $S = S_<$  und wird durch einen gefüllten Kreis dargestellt. Ein Kreuz zeigt den verworfenen Punkt  $(S_>, G_-(S_>))$ . Die Sprungunstetigkeit wird durch eine gerade gepunktete Linie



**Abbildung 8.4:** Illustration der Konstruktion der Lösung an einer räumlichen Unstetigkeit für Charakteristiken mit gleichem Vorzeichen auf beiden Seiten für nichtmonotone Flussfunktionen. Außerdem wird die Konstruktion einer Sprungunstetigkeit illustriert. Abbildung (a) zeigt den Fall, wenn Wasser aufgestaut wird und Abbildung (b) wenn der Wasserfluss nicht aufrecht erhalten werden kann. Durchgezogene Kurven zeigen  $G_-(S)$  und  $g_-(S)$ , gestrichpunktete  $G_+(S)$  und  $g_+(S)$ . Hohlkreise zeigen Funktionswerte an  $S_\ell$  und  $S_r$ . Hohlquadrate zeigen die beiden Werte  $g_-(S_\ell)$ , wenn weder Be- noch Entwässerung stattfindet. Die Pluszeichen zeigen den irrelevanten Limes von  $g_\mp(S_i)$  mit  $i \in \{\ell, r\}$ , wenn an der Stelle der entsprechend andere Prozess (Be- oder Entwässerung) vorherrscht. Kreuze zeigen Zwischenlösungen. Funktionswerte an der räumlichen Unstetigkeit werden durch gefüllte Kreise dargestellt. Gefüllte Quadrate zeigen die Werte an der Sprungunstetigkeit. Die graue Fläche illustriert die Bedingung (6.10d) der Sprungunstetigkeit. Dünne gepunktete Linien zeigen wichtige Gitterlinien. Horizontale Linien zeigen dabei den Fluss  $G^d$  über die räumliche Unstetigkeit und den Fluss  $G_-(S_\ell)$ . Vertikale Linien zeigen wichtige Sättigungswerte.

dargestellt, welche den Funktionswert stromaufwärts bei  $S_-^{(\ell)} = S_-^d$  und den Funktionswert stromabwärts bei  $S_+^{(\ell)} = S_\ell$  verbindet.

Die Lösung in der Umgebung von  $x^d$  kann graphisch mit Hilfe den im unteren Teil der Abbildung 8.4a gezeigten partiellen Ableitungen  $g_-(S)$ ,  $g_+(S)$  konstruiert werden. Auf der linken Seite findet eine Bewässerung statt, da sich das Wasser zurückstaut. Daher ist der Punkt mit dem Bewässerungslimes der Ableitung  $(S_\ell, g_-^{\text{im}}(S_\ell))$  der relevante Punkt. Er wird durch einen Hohlkreis dargestellt. Dagegen wird der Punkt  $(S_\ell, g_-^{\text{dr}}(S_\ell))$ , welcher unbedeutend für die Lösung ist, als Pluszeichen gezeigt. Die rechte Seite der Unstetigkeit wird ebenfalls bewässert und auch hier hat der Entwässerungslimes keine Bedeutung für die Lösung. Wie für die linke Seite wird auch hier der irrelevante Punkt  $(S_r, g_+^{\text{dr}}(S_r))$  als Pluszeichen und der relevante Punkt  $(S_r, g_+^{\text{im}}(S_r))$  als Hohlkreis, nun auf der gestrichpunkteten Kurve, dargestellt. Die Sprungunstetigkeit wird als gepunktete Linie gezeigt, welche die Werte stromauf- und stromabwärts, die jeweils durch gefüllte Quadrate dargestellt werden, miteinander verbindet. Die Bedingung (6.10d) wird durch die graue Fläche illustriert. Der Flächenanteil unter der gepunkteten Linie ist dabei vom selben Maß wie der Flächenanteil über ihr. Der Hohlkreis auf der gestrichpunkteten Kurve zeigt  $g_+^{\text{im}}(S_r)$ . Der irrelevante Entwässerungswert  $g_+^{\text{dr}}(S_r)$  wird als Pluszeichen abgebildet. Aus dieser Abbildung können, durch Rotation um  $90^\circ$  und Spiegelung an der neuen  $S$ -Achse, Sättigungsprofile konstruiert werden. Diese werden später in Abbildung 8.6a gezeigt.

Zuletzt wird nun noch der Fall diskutiert, wenn Gleichung (8.7) *zwei Lösungen* hat. Die beiden Lösungen werden wieder aufgrund des Vorzeichens ihrer Ableitungen als  $S_>$  mit  $g_-(S_>) > 0$  und  $S_<$  mit  $g_-(S_<) < 0$  bezeichnet. Hier ist die relevante Lösung  $S_>$ , da in diesem Fall die Charakteristik mit  $S_<$  die rechte Hälfte wieder verlassen würde.

Abbildung 8.4b illustriert die Konstruktion der Lösung an der räumlichen Unstetigkeit für diesen Fall. Für die beispielhaft gewählten Parameter und Anfangsbedingungen tritt dabei keine Sprungunstetigkeit auf. Durchgezogene Kurven zeigen  $G_-(S)$  und  $g_-(S)$ , gestrichpunktete Kurven  $G_+(S)$  und  $g_+(S)$ . Hohlkreise auf den Kurven zeigen Funktionswerte bei  $S_\ell$  und  $S_r$ .

Flussfunktionen werden im oberen Teil der Abbildung 8.4b gezeigt. Der Kreis auf der durchgezogenen Kurve markiert den Punkt  $(S_\ell, G_-(S_\ell))$ . Die horizontale Linie  $G^d = G_-(S_\ell)$ , welche Bedingung (6.14) illustriert, schneidet die Kurve der rechten Flussfunktion in zwei Punkten  $(S_>, G_+(S_>))$  und  $(S_<, G_+(S_<))$ . Der Punkt  $(S_>, G_+(S_>))$  wird durch einen gefüllten Kreis auf der gestrichpunkteten Kurve dargestellt. Das Kreuz zeigt den Punkt  $(S_<, G_+(S_<))$ .

Die Lösung in der Umgebung von  $x^d$  kann graphisch mit Hilfe der im unteren Teil der

Abbildung 8.4b dargestellten partiellen Ableitungen  $g_-(S)$ ,  $g_+(S)$  konstruiert werden. Da die Sättigungen in der linken Mediumshälfte konstant bleiben, kann weder von Be- noch Entwässerung gesprochen werden. Beide Punkte  $(S_\ell, g_-^{\text{im}}(S_\ell))$ ,  $(S_\ell, g_-^{\text{dr}}(S_\ell))$  werden daher durch Hohldiamanten dargestellt. Die rechte Seite wird bewässert und der Entwässerungslimes kann ignoriert werden. Bei der Konstruktion der Lösung wird der Punkt  $(S_r, g_+^{\text{dr}}(S_r))$  ignoriert. Er ist als Pluszeichen dargestellt. Der Punkt  $(S_r, g_+^{\text{im}}(S_r))$  dagegen wird als Hohlkreis auf der gestrichpunkteten Kurve dargestellt. Der Punkt  $(S_+^{\text{d}}, g_+(S_+^{\text{d}}))$  wird als gefüllter Kreis gezeigt. Aus dieser Abbildung können durch Rotation um  $90^\circ$  und Spiegelung an der neuen  $S$ -Achse Sättigungsprofile konstruiert werden. Diese werden später in Abbildung 8.6b gezeigt.

### 8.2.2 Charakteristiken treffen auf die Unstetigkeit (Abbildung 8.3c)

Für  $g_-(S_\ell, t) > 0$  und  $g_+(S_r, t) < 0$  treffen Charakteristiken von beiden Seiten auf die räumliche Unstetigkeit. Es müssen zunächst also beide Sättigungen  $S_\ell$ ,  $S_r$  jeweils in Gleichung (6.14) eingesetzt werden. Durch Einsetzen von  $S_\ell$  erhält man die nichtlineare implizite Gleichung (8.7) für  $S$ . Diese kann auch hier wieder keine, eine oder zwei Lösungen besitzen. Setzt man  $S_r$  in Gleichung (6.14) ein, so erhält man die implizite Gleichung

$$G_-(S) = G_+(S_r) \quad (8.9)$$

für  $S$ . Diese Gleichung kann ebenfalls keine, eine oder zwei Lösungen besitzen.

Es sei angemerkt, dass wenn eine der beiden Gleichungen keine Lösung hat, die andere zwei Lösungen hat. Außerdem kann die eindeutige Lösung als Spezialfall von zwei Lösungen betrachtet werden, bei dem beide Lösungen zusammenfallen. Insgesamt gibt es daher entweder zwei oder vier Lösungspaare. Von diesen Lösungspaaren werden nun die physikalisch relevanten identifiziert.

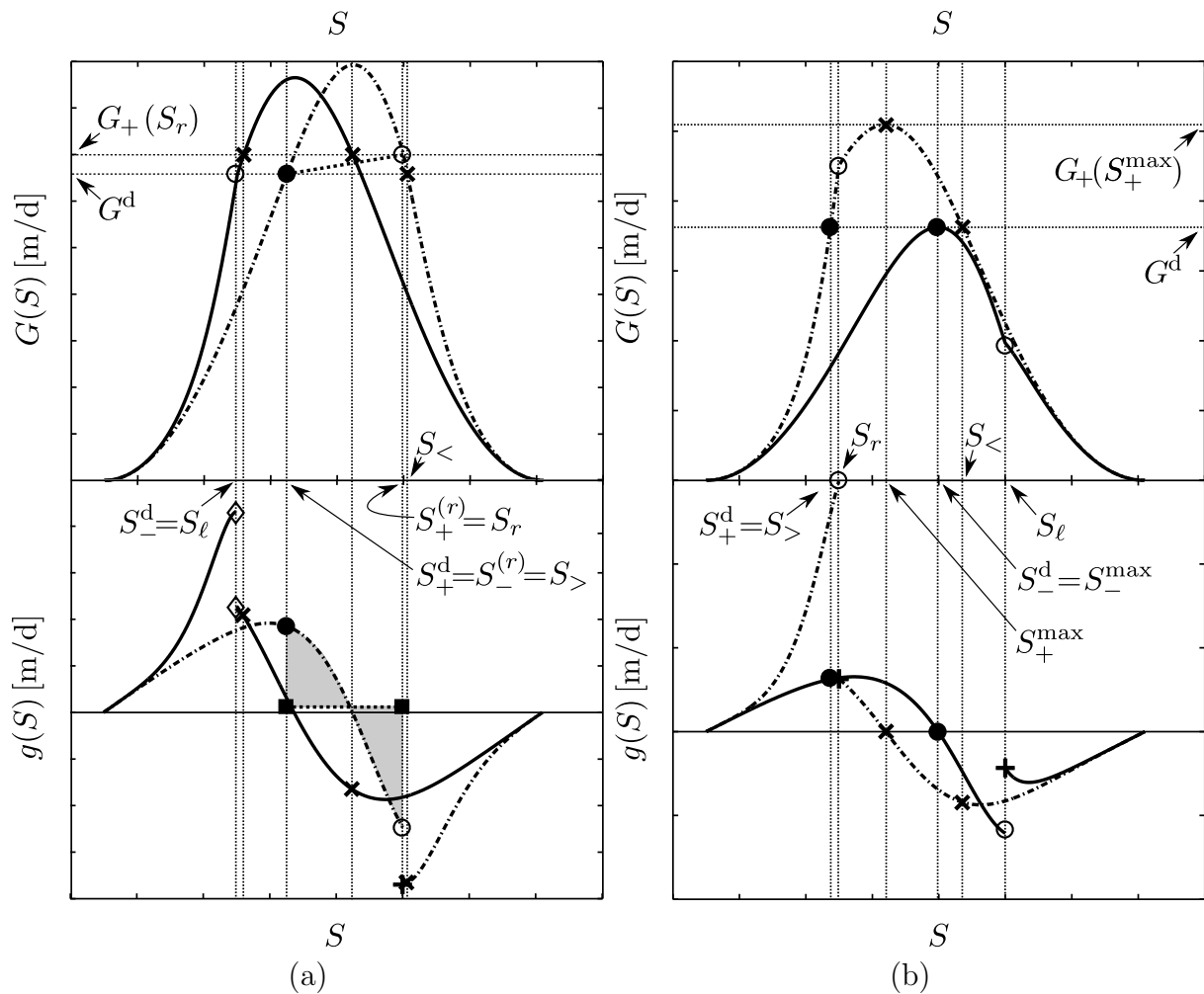
Ohne Beschränkung der Allgemeinheit wird angenommen, dass  $G_+(S_r) > G_-(S_\ell)$  gilt. In diesem Fall hat Gleichung (8.9) keine, eine oder zwei Lösungen. Sollte sie zwei Lösungen haben, werden diese wieder anhand des Vorzeichens der Ableitung der Flussfunktion für die entsprechende Sättigung identifiziert. Die Sättigung  $S_>$  ist damit die Lösung mit  $g_-(S_>) > 0$  und  $S_<$  diejenige mit  $g_-(S_<) < 0$ . Die Charakteristik zu  $S_>$  verlässt die linke Hälfte sofort wieder und muss nicht berücksichtigt werden. Die Charakteristik zu  $S_<$  läuft in die linke Hälfte hinein. Laut Voraussetzung laufen die Charakteristiken in der linken Hälfte zu Beginn nach rechts und Charakteristiken schneiden sich in der  $(x, t)$ -Ebene. Die Rankine-Hugoniot-Bedingung (6.12) der dazugehörigen Stoßwelle liefert eine positive Geschwindigkeit und die

Welle verlässt die linke Hälfte sofort wieder. Daher muss auch  $S_{<}$  nicht berücksichtigt werden. Die nichtlineare implizite Gleichung (8.7) hat zwei Lösungen, wenn  $G_+(S_r) > G_-(S_\ell)$  gilt. Auch diese Lösungen werden wieder nach dem Vorzeichen ihrer Ableitungen als  $S_{>}$  und  $S_{<}$  bezeichnet. Die Charakteristik zu  $S_{<}$  verlässt die rechte Hälfte und muss nicht berücksichtigt werden. Laut Voraussetzung laufen die Charakteristiken in der rechten Hälfte zu Beginn nach links und die Charakteristiken schneiden sich in der  $(x, t)$ -Ebene. Die Rankine-Hugoniot-Bedingung (6.12) liefert nun eine Stoßwelle, die mit positiver Geschwindigkeit in die rechte Hälfte des Mediums wandert.

Abbildung 8.5a illustriert die Konstruktion der Lösung an der räumlichen Unstetigkeit für den eben diskutierten Fall. Sie zeigt außerdem die Konstruktion einer Sprungunstetigkeit, die durch die Gleichungen (6.10) bestimmt ist, da die Sättigungsprofile der Lösung für die beispielhaft gewählten Parameter eine Sprungunstetigkeit erforderlich machen. Durchgezogene Kurven zeigen  $G_-(S)$  und  $g_-(S)$ , gestrichpunktete  $G_+(S)$  und  $g_+(S)$ . Hohlkreise zeigen Funktionswerte bei  $S_\ell$  und  $S_r$ .

Die Flussfunktionen werden im oberen Teil der Abbildung 8.5a gezeigt. Der Hohlkreis auf der durchgezogenen Kurve markiert den Punkt  $(S_\ell, G_-(S_\ell))$  und der Hohlkreis auf der gestrichpunkteten Kurven den Punkt  $(S_r, G_+(S_r))$ . Durch beide Punkte sind horizontale Geraden gezogen, um nach möglichen Punkten auf der anderen Seite der räumlichen Unstetigkeit zu suchen. Von den vier Schnittpunkten der Geraden mit der jeweils anderen Kurve ist nur ein Punkt relevant. Dieser Punkt wird durch einen gefüllten Kreis auf der gestrichpunkteten Kurve markiert. Kreuze zeigen die verworfenen Punkte. Die Sprungunstetigkeit wird durch eine gerade gepunktete Linie dargestellt, welche den Funktionswert stromaufwärts bei  $S_-^{(\ell)} = S_-^d$  und den Funktionswert stromabwärts bei  $S_+^{(\ell)} = S_\ell$  verbindet.

Die Lösung in der Umgebung von  $x^d$  kann graphisch mit Hilfe der im unteren Teil der Abbildung 8.5a dargestellten partiellen Ableitungen  $g_-(S)$ ,  $g_+(S)$  konstruiert werden. Die linke Seite wird weder be- noch entwässert, da die Sättigung konstant bleibt. Daher werden beide Punkte  $(S_\ell, g_-^{im}(S_\ell))$ ,  $(S_\ell, g_-^{dr}(S_\ell))$  durch Hohldiamanten dargestellt. Die rechte Seite wird entwässert. Der Hohlkreis auf der gestrichpunkteten Kurve zeigt daher  $g_+^{dr}(S_r)$ . Der irrelevante Bewässerungswert  $g_+^{im}(S_r)$  wird als Pluszeichen dargestellt. Die Sprungunstetigkeit wird durch die gepunktete Linie dargestellt, die die Werte stromauf- und stromabwärts miteinander verbindet. Die Bedingung (6.10d) wird durch eine graue Fläche dargestellt. Der Flächenanteil unter der gepunkteten Linie ist dabei vom selben Maß wie der Flächenanteil über ihr. Aus dieser Abbildung können, durch Rotation um  $90^\circ$  und Spiegelung an der  $S$ -Achse, Sättigungsprofile konstruiert werden. Diese werden in Abbildung 8.6c gezeigt.



**Abbildung 8.5:** Illustration der Konstruktion der Lösung an einer räumlichen Unstetigkeit für Charakteristiken mit unterschiedlichem Vorzeichen auf beiden Seiten für nichtmonotone Flussfunktionen. Außerdem wird die Konstruktion einer Sprungunstetigkeit illustriert. Abbildung (a) zeigt den Fall, wenn Charakteristiken auf die Unstetigkeit treffen und Abbildung (b) wenn die Charakteristiken aus der Unstetigkeit heraus laufen. Durchgezogene Kurven zeigen  $G_-(S)$  und  $g_-(S)$ , gestrichpunktete  $G_+(S)$  und  $g_+(S)$ . Hohlkreise zeigen Funktionswerte bei  $S_\ell$  und  $S_r$ . Hohldiamanten zeigen die beiden Werte  $g_-(S_\ell)$ , wenn weder Be- noch Entwässerung stattfindet. Die Pluszeichen zeigen den irrelevanten Limes von  $g_\mp(S_i)$  mit  $i \in \{\ell, r\}$ , wenn an der Stelle der entsprechend andere Prozess (Be- oder Entwässerung) vorherrscht. Kreuze zeigen Zwischenlösungen. Funktionswerte an der räumlichen Unstetigkeit werden durch gefüllte Kreise dargestellt. Gefüllte Quadrate zeigen die Werte an der Sprungunstetigkeit. Die graue Fläche illustriert die Bedingung (6.10d) der Sprungunstetigkeit. Dünne gepunktete Linien zeigen wichtige Gitterlinien. Horizontale Linien zeigen dabei den Fluss  $G^d$  über die räumliche Unstetigkeit und den Fluss  $G_-(S_\ell)$ . Vertikale Linien zeigen wichtige Sättigungswerte.

### 8.2.3 Charakteristiken zeigen aus der Unstetigkeit (Abbildung 8.3d)

Für  $g_-(S_\ell) < 0$  und  $g_+(S_r) > 0$  zeigen Charakteristiken aus der Unstetigkeit in die beiden Hälften des Mediums. Damit stellt sich die Situation schwieriger als bei den drei anderen Fällen dar, da in dem Bereich, der durch die Charakteristiken  $x(t) = x^d + g_-(S_\ell)t$  und  $x(t) = x^d + g_+(S_r)t$  begrenzt wird, die Lösung mathematisch nicht durch das Anfangs- und Randwertproblem gegeben ist. Physikalische Überlegungen helfen an dieser Stelle weiter. Durch das Anfangs- und Randwertproblem wird die Umverteilung von zwei Fluiden unterschiedlicher Dichte in einer Säule modelliert. Das schwerere Wasser strömt nach unten und verdrängt das Öl, das dadurch nach oben fließt. Gesucht werden Sättigungen  $S_-^d, S_+^d$  an der Unstetigkeitsstelle  $x^d$ . Die Bedingung (6.14) ermöglicht unterschiedliche Paare  $(S_-^d, S_+^d)$ . Der Fluss  $G^d = G_-(S_-^d) = G_+(S_+^d)$  über die Unstetigkeitsstelle unterscheidet sich zwischen den unterschiedlichen Paaren  $(S_-^d, S_+^d)$ . Es wird angenommen, dass das Paar, bei dem der Fluss maximal wird, die physikalisch relevante Lösung ist. Dies ist eine zusätzliche Annahme. Sie ist dadurch motiviert, dass ein geringerer Fluss dafür sorgen würde, dass das System länger in einem Zustand mit höherer potentieller Energie verweilt. Da aber keine weiteren Einschränkungen an die Dynamik vorhanden sind, legt die physikalische Intuition nahe, dass das System den schnellsten Weg in den Zustand mit der geringsten potentiellen Energie wählt. Die Annahme wird außerdem durch numerische Lösungen für das entsprechende Anfangs- und Randwertproblem der allgemeineren Formulierung aus Kapitel 5.3.3 gestützt. Ein Vergleich beider Lösungen ist Abbildung 12.6 zu sehen.

Die Sättigungen  $S_+^{\max}, S_-^{\max}$  aus den Gleichungen (8.6) maximieren den Fluss auf der jeweiligen Seite der Unstetigkeit. Beide Sättigungen werden in Gleichung (6.14) eingesetzt und man erhält für  $S$  die impliziten nichtlinearen Gleichungen

$$G_-(S) = G_+(S_+^{\max}), \quad (8.10a)$$

$$G_+(S) = G_-(S_-^{\max}). \quad (8.10b)$$

Obwohl jede der beiden Gleichungen für sich keine, eine oder zwei Lösungen  $S^*$  haben kann, sind insgesamt nur drei Kombinationen möglich:

1. Gleichung (8.10a) und (8.10b) haben jeweils eine Lösung.
2. Gleichung (8.10a) hat keine Lösung und Gleichung (8.10b) hat zwei Lösungen.
3. Gleichung (8.10a) hat zwei Lösungen und Gleichung (8.10b) hat keine Lösung.

Im ersten Fall ist das Lösungspaar  $(S_-^d, S_+^d) = (S_-^{\max}, S_+^{\max})$ . Im zweiten Fall werden die beiden Lösungen wieder anhand des Vorzeichens der Ableitungen durch  $S_>, S_<$  bezeichnet.



Von diesen beiden Lösungspaaren wird das Lösungspaar  $(S_-^d, S_+^d) = (S_-^{\max}, S_<)$  verworfen, da die dazugehörige Charakteristik nach rechts aus dem Gebiet links der Unstetigkeit hinaus zeigt. Das korrekte Lösungspaar ist  $(S_-^d, S_+^d) = (S_-^{\max}, S_>)$ . Der dritte Fall kann aus dem zweiten Fall durch entsprechende Vertauschung der Bezeichnungen gewonnen werden.

Abbildung 8.5b illustriert die Konstruktion der Lösung an der räumlichen Unstetigkeit für den eben diskutierten Fall. Durchgezogene Kurven zeigen  $G_-(S)$  und  $g_-(S)$ , gestrichpunktete  $G_+(S)$  und  $g_+(S)$ . Hohlkreise zeigen Funktionswerte bei  $S_\ell$  und  $S_r$ .

Die Flussfunktionen werden im oberen Teil der Abbildung 8.5b gezeigt. Der Hohlkreis auf der durchgezogenen Kurve markiert den Punkt  $(S_\ell, G_-(S_\ell))$  und der Hohlkreis auf der gestrichpunkteten Kurven den Punkt  $(S_r, G_+(S_r))$ . Durch die beiden Maxima sind horizontale Geraden gezogen, um nach möglichen Punkten auf der anderen Seite der räumlichen Unstetigkeit zu suchen. Die Gerade durch  $G_+(S_+^{\max})$  schneidet die Kurve  $G_-(S)$  nicht. Daher wird das Maximum durch ein Kreuz markiert. Die Gerade durch  $G^d = G_-(S_-^{\max})$  schneidet die Kurve  $G_+(S)$  in zwei Punkten  $(S_>, G_+(S_>))$  und  $(S_<, G_+(S_<))$ . Der gültige Punkt  $(S_>, G_+(S_>))$  wird durch einen gefüllten Kreis dargestellt. Der zweite irrelevante Punkt  $(S_<, G_+(S_<))$  wird durch ein Kreuz dargestellt.

Die Lösung in der Umgebung von  $x^d$  kann graphisch mit Hilfe der im unteren Teil der Abbildung 8.5a dargestellten partiellen Ableitungen  $g_-(S)$ ,  $g_+(S)$  konstruiert werden. Beide Seiten des Mediums werden entwässert und daher werden  $(S_\ell, g_-^{\text{dr}}(S_\ell))$  und  $(S_r, g_+^{\text{dr}}(S_r))$  durch Hohlkreise und  $(S_\ell, g_-^{\text{im}}(S_\ell))$  und  $(S_r, g_+^{\text{im}}(S_r))$  durch Pluszeichen dargestellt. Die Punkte  $(S_-^{\max}, g_-(S_-^{\max}))$  und  $(S_>, g_+(S_>))$  an der räumlichen Unstetigkeit werden durch gefüllte Kreise dargestellt. Der zweite Punkt der Lösung  $(S_>, g_+(S_>))$  von Gleichung (8.10b) wird durch ein Kreuz dargestellt. Aus dieser Abbildung können, durch Rotation um  $90^\circ$  und Spiegelung an der  $S$ -Achse, Sättigungsprofile konstruiert werden. Auch diese werden später in Abbildung 8.6d gezeigt.

## 8.3 Allgemeine Lösung

Die Anfangsbedingungen (8.3) werden in die Gleichungen (6.1) und (6.6) vollkommen analog zu Gleichungen (7.8)-(7.10) eingesetzt. Auch hier ist die Flussfunktion  $G$  zeitunabhängig mit einer räumlichen Unstetigkeit bei  $x^d = 0$  und lautet

$$G(S, x, t) = \begin{cases} G_\ell(S) & \text{für } x < 0, \\ G_r(S) & \text{für } x > 0, \end{cases} \quad (8.11)$$

wobei die Kurzschreibweisen  $G_\ell(S) = G(S, S_\ell, S_{2\ell}, S_{4\ell})$  und  $G_r(S) = G(S, S_r, S_{2r}, S_{4r})$  verwendet wurden. Ebenso gilt für die partielle Ableitung nach der Sättigung  $S$

$$g(S, x, t) = \begin{cases} g_\ell(S) & \text{für } x < 0, \\ g_r(S) & \text{für } x > 0. \end{cases} \quad (8.12)$$

Quellterme tauchen in der quasi linearen partiellen Differentialgleichung (6.4) nur an der Unstetigkeitsstelle  $x^d = 0$  auf, so dass

$$h(S, x, t) = 0 \quad \text{für } x \neq 0 \quad (8.13)$$

gilt. An der Unstetigkeitsstelle  $x^d = 0$  hängen die Sättigungen über Gleichung (6.14) voneinander ab. Die Flussfunktionen  $G_\mp$  sind proportional zu den fraktionalen Mobilitäten  $\lambda$ , da die Ränder der Säule, wenn auch bei  $x \rightarrow \pm\infty$ , geschlossen sind und Gleichung (8.2) gilt. Die Sättigungen  $S_-^d(t)$ ,  $S_+^d(t)$  beiderseits der Unstetigkeit sind durch die im vorherigen Kapitel 8.2 beschriebenen Schritte zu bestimmen.

Die Cauchy-Daten (8.3) werden nun mit dem Parameter  $\xi \in \mathbb{R}$  parametrisiert und lauten

$$x_0(\xi) = \begin{cases} \xi + 1 & \text{für } \xi \leq -1, \\ 0 & \text{für } -1 \leq \xi \leq 1, \\ \xi - 1 & \text{für } \xi \geq 1 \end{cases} \quad (8.14a)$$

und

$$S_0(\xi) = \begin{cases} S_\ell & \text{für } \xi \leq -1, \\ S_-^d - (S_\ell - S_-^d) \xi & \text{für } -1 \leq \xi \leq 0, \\ S_+^d + (S_r - S_+^d) \xi & \text{für } 0 \leq \xi \leq 1, \\ S_r & \text{für } \xi \geq 1 \end{cases} \quad (8.14b)$$

Diese Parametrierung wird nun in Gleichung (6.9) eingesetzt. Im Gegensatz zum Buckley-Leverett-Problem müssen hier jedoch vier Bereiche unterschieden werden, da auch für  $\xi < 0$  der Parameterbereich zweigeteilt wird.

Für den Bereich  $\xi \leq -1$  gilt damit

$$x(t, \xi) = \xi + 1 + t g_\ell(S_\ell), \quad (8.15a)$$

$$S(t, \xi) = S_\ell, \quad (8.15b)$$

für  $-1 \leq \xi \leq 0$  gilt

$$x(t, \xi) = t g_\ell (S_-^d - (S_\ell - S_-^d) \xi), \quad (8.16a)$$

$$S(t, \xi) = S_-^d - (S_\ell - S_-^d) \xi, \quad (8.16b)$$

für  $0 \leq \xi \leq 1$  gilt

$$x(t, \xi) = t g_r (S_+^d + (S_r - S_+^d) \xi), \quad (8.17a)$$

$$S(t, \xi) = S_+^d + (S_r - S_+^d) \xi \quad (8.17b)$$

und für  $\xi \geq 1$  gilt

$$x(t, \xi) = \xi - 1 + t g_r (S_r), \quad (8.18a)$$

$$S(t, \xi) = S_r. \quad (8.18b)$$

Es werden Sättigungsprofile  $S(x, t)$  gesucht. Zeigen diese Mehrwertigkeiten, so müssen Sprungunstetigkeiten mit Hilfe der Gleichungen (6.10) bestimmt werden. Im hier betrachteten Fall der schwerkraftgetriebenen Umverteilung tritt in jeder Hälfte des Mediums  $x < 0$ ,  $x > 0$  entweder keine oder eine Sprungunstetigkeit auf. Sie werden mit  $(i) = (\ell)$  in der oberen Hälfte und mit  $(i) = (r)$  in der unteren Hälfte des Mediums bezeichnet. In der oberen Hälfte des Mediums ist der Wert der Sättigung aufgrund der Anfangsbedingungen (8.3) stromabwärts der Sprungunstetigkeit durch  $S_+^{(\ell)} = S_\ell$  gegeben und der Wert stromaufwärts  $S_-^{(\ell)}$  ist zeitunabhängig. In der unteren Hälfte des Mediums ist entsprechend die Sättigung stromabwärts durch  $S_+^{(r)} = S_r$  gegeben und die Sättigung stromaufwärts  $S_-^{(r)}$  ist ebenfalls zeitunabhängig.

Setzt man diese Werte zusammen mit Gleichungen (8.15) - (8.18) in Gleichung (6.10) ein, erhält man implizite Gleichungen für die Sättigungen  $S_-^{(\ell)}, S_-^{(r)}$  stromaufwärts der Sprungunstetigkeiten. Sie lauten

$$\begin{aligned} \int_{S_-^{(\ell)}}^{S_\ell} t g_\ell(S) dS &= t \left( G_\ell(S_\ell) - G_\ell(S_-^{(\ell)}) \right) \\ &= t g_\ell(S_-^{(\ell)}) \left( S_\ell - S_-^{(\ell)} \right), \end{aligned} \quad (8.19a)$$

$$\begin{aligned} \int_{S_-^{(r)}}^{S_r} t g_r(S) dS &= t \left( G_r(S_r) - G_r(S_-^{(r)}) \right) \\ &= t g_r(S_-^{(r)}) \left( S_r - S_-^{(r)} \right). \end{aligned} \quad (8.19b)$$

Teilt man außerdem die Gleichungen (8.15a), (8.16a), (8.17a) und (8.18a) durch die Zeit  $t$ , erhält man eine Lösung für die Sättigung  $S(x, t)$ , die selbstähnlich in  $x/t$  ist. Zusammengefasst lautet die Lösung damit

$$S(x, t) = S\left(\frac{x}{t}\right) = \begin{cases} S_\ell & \text{für } \frac{x}{t} \leq g_\ell(S_-^{(\ell)}), \\ g_\ell^{-1}\left(\frac{x}{t}\right) & \text{für } g_\ell(S_-^{\text{d}}) \geq \frac{x}{t} > g_\ell(S_-^{(\ell)}), \\ S_-^{\text{d}} & \text{für } 0 \geq \frac{x}{t} \geq g_\ell(S_-^{\text{d}}), \\ S_+^{\text{d}} & \text{für } 0 \leq \frac{x}{t} \leq g_r(S_+^{\text{d}}), \\ g_r^{-1}\left(\frac{x}{t}\right) & \text{für } g_r(S_+^{\text{d}}) \leq \frac{x}{t} < g_r(S_-^{(r)}), \\ S_r & \text{für } g_r(S_-^{(r)}) \leq \frac{x}{t}, \end{cases} \quad (8.20)$$

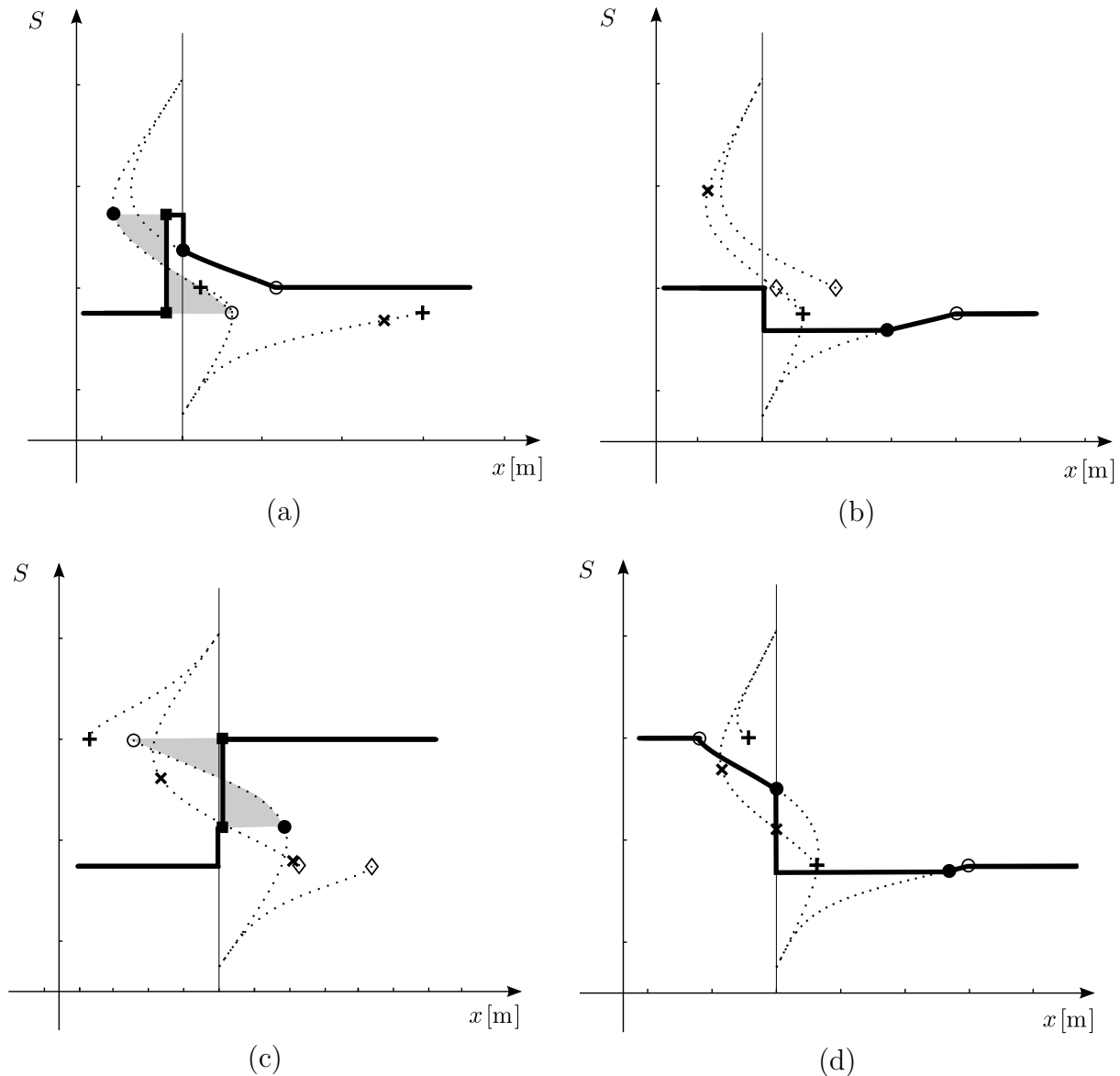
wobei  $g_\ell^{-1}$ ,  $g_r^{-1}$  die Inversen der Funktionen  $g_\ell$ ,  $g_r$  bezeichnen.

Abbildung 8.6 zeigt die unterschiedlichen Segmente der Sättigungsprofile für Flussfunktionen aus Abbildung 8.4 und 8.5 zu einem Zeitpunkt  $t$ . Das Wassersättigungsprofil wird als dicke durchgezogene Kurve dargestellt. Die vertikale Gerade zeigt die Unstetigkeit in den Anfangsbedingungen. Dünn gepunktete Kurven zeigen die Form der Ableitungen  $g_\ell^{-1}$  und  $g_r^{-1}$ . Wichtige Punkte sind durch dieselben Symbole wie in Abbildung 8.4 und 8.5 markiert. Abbildung 8.6a zeigt wie sich das Wasser zurückstaut, Abbildung 8.6b wie die Wassersättigung abnimmt, obwohl sie links davon größer ist. Abbildung 8.6c zeigt wie die zusammentreffenden Charakteristiken sich nahezu kompensieren und nur eine sehr langsame Stoßwelle in die rechte Hälfte wandert. Abbildung 8.6d zeigt einen Verdünnungsfächer, dessen langsamste Charakteristik die Geschwindigkeit  $g_-(S_-^{\text{d}}) = 0$  hat und parallel zur Zeitachse verläuft. Der Fluss ist dabei zu gering, um die Sättigung rechts der Unstetigkeit konstant zu lassen. Daher laufen Entwässerungswellen in beide Richtungen aus der Unstetigkeit.

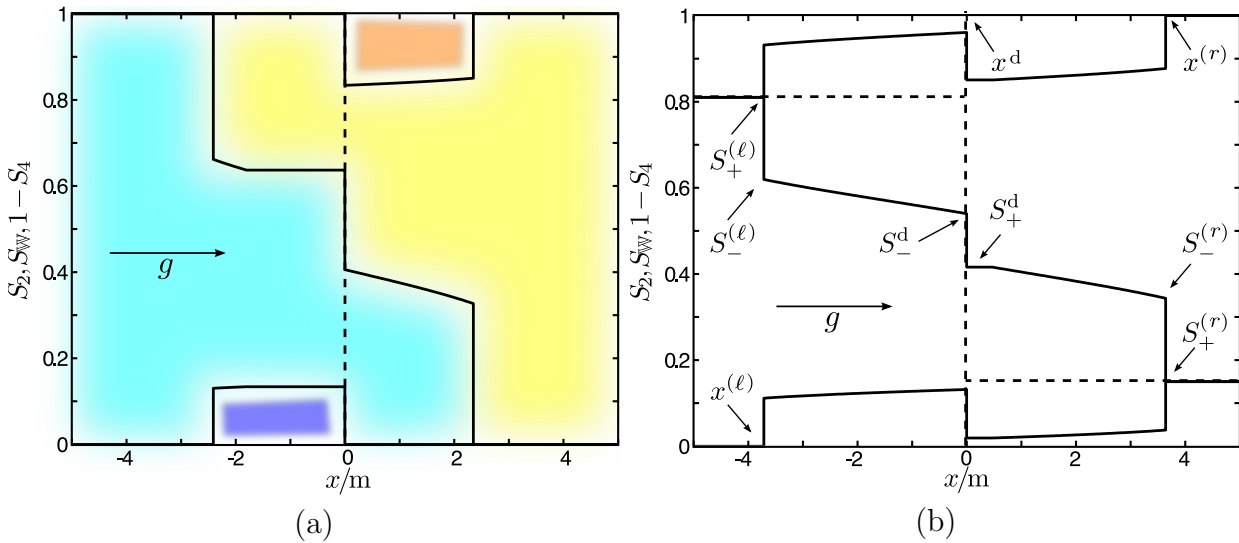
## 8.4 Beispiele

In diesem Unterkapitel werden nun Beispiele für unterschiedliche Anfangs- und Randbedingungen gegeben. Es wird gezeigt, wie allein durch die Anfangsbedingungen die unterschiedlichen Prozessarten von primären Prozessen bis zu beliebigen Zwischenkurven berücksichtigt werden. Eine Parameteranpassung ist dabei nicht notwendig.

Bevor die Beispiele gezeigt werden, sei noch einmal betont, dass die Anfangs- und Randbedingungen als geeignete Näherung in der Umgebung der Unstetigkeitsstelle zwischen zwei Schichten für eine endliche Zeit betrachtet werden. Die Wellen, welche an den Rändern des



**Abbildung 8.6:** Illustration der unterschiedlichen Segmente der Sättigungsprofile für die nichtmonotonen Flussfunktionen aus Abbildung 8.4a in Abbildung (a), aus Abbildung 8.4b in Abbildung (b), aus Abbildung 8.5a in Abbildung (c) und aus Abbildung 8.5b in Abbildung (d). Das Wassersättigungsprofil wird als dicke durchgezogene Kurve dargestellt. Die vertikale Gerade zeigt die Unstetigkeit in den Anfangsbedingungen. Dünn gepunktete Kurven zeigen die Form der Ableitungen  $g_\ell^{-1}$  und  $g_r^{-1}$ . Wichtige Punkte sind durch dieselben Symbole wie in Abbildung 8.4 und 8.5 markiert.



**Abbildung 8.7:** Darstellung von Sättigungsprofilen für primäre schwerkraftgetriebene Umverteilung in Abbildung (a) und sekundäre Umverteilung in Abbildung (b). Die durchgezogenen Profile zeigen die Sättigungen  $S_2, S, 1 - S_4$  zum Zeitpunkt  $t = 10d$ . Die Anfangsbedingungen werden durch gestrichelte Kurven dargestellt und sind Tabelle 8.1 entnommen. Sättigungswerte an Unstetigkeitsstellen werden in Tabelle 8.2 zusammengefasst. Man beachte, dass einige Kurven mit den Achsen zusammenfallen. Um die Interpretation der Abbildung zu erleichtern, wurden die Sättigungen zum Zeitpunkt  $t = 10d$  in Abbildung (a) farblich hinterlegt. Hellblau steht für perkolierendes Wasser  $S_1$ , dunkelblau für nichtperkolierendes Wasser  $S_2$ , gelb für perkolierendes Öl  $S_3$  und orange für nichtperkolierendes Öl  $S_4$ .

Mediums entstehen, werden hier nicht betrachtet. Damit sind die Lösungen nur gültig, solange Wellen aus der Unstetigkeit und Wellen von den Rändern nicht interferieren.

Tabelle 8.1 fasst die Anfangsbedingungen für die Lösungen zusammen, die in Abbildung 8.7 und 8.8 gezeigt werden. Charakteristische Werte der Lösungen werden in Tabelle 8.2 gegeben. Die verwendeten Modellparameter sind bis auf eine Ausnahme dieselben, wie für das Buckley-Leverett-Problem und stehen in Tabelle 7.1. Der Gesamtfluss  $q_0 = 0$  verschwindet hier aufgrund der geschlossenen Säule.

	Abb. 8.7a	Abb. 8.7b	Abb. 8.8a	Abb. 8.8b	Abb. 8.8c	Abb. 8.8d
$S_\ell$	1.00	0.81	0.32	0.60	0.60	0.60
$S_{2\ell}$	0	0	0.00	0.02	0.00	0.12
$S_{4\ell}$	0	0.19	0.00	0.00	0.17	0.18
$S_r$	0	0.15	0.00	0.40	0.40	0.40
$S_{2r}$	0	0.15	0.00	0.10	0.10	0.00
$S_{4r}$	0	0	0.00	0.10	0.10	0.04

**Tabelle 8.1:** Die Anfangsbedingungen für die in Abbildung 8.7 und Abbildung 8.8 gezeigten Verdrängungsprozesse.

Abb.	$i$	$S_i^d$	$S_{2i}^d$	$S_{4i}^d$	$i$	$S_-^{(i)}$	$S_{2-}^{(i)}$	$S_{4-}^{(i)}$	$v^{(i)}/(\text{m/d})$
8.7a	–	0.637	0.134	0.000	$\ell$	0.662	0.130	0.0	–0.241
	+	0.406	0.000	0.166	$r$	0.327	0.000	0.150	0.235
8.7b	–	0.540	0.132	0.039	$\ell$	0.620	0.112	0.068	–0.371
	+	0.416	0.019	0.150	$r$	0.344	0.037	0.123	0.364
8.8a	–	0.320	0.000	0.000	$\ell$	–	–	–	–
	+	0.364	0.000	0.158	$r$	0.327	0.000	0.150	0.235
8.8b	–	0.621	0.013	0.052	$\ell$	0.612	0.016	0.032	–1.21
	+	0.463	0.051	0.136	$r$	–	–	–	–
8.8c	–	0.527	0.076	0.100	$\ell$	–	–	–	–
	+	0.463	0.051	0.136	$r$	–	–	–	–
8.8d	–	0.500	0.139	0.085	$\ell$	–	–	–	–
	+	0.368	0.063	0.027	$r$	0.387	0.029	0.034	1.014

**Tabelle 8.2:** Charakteristische Werte der Lösungen der Anfangs- und Randwertprobleme, welche in den Abbildungen 8.7 und 8.8 gezeigt werden. Es werden keine Werte für eine Sprungunstetigkeit angegeben, wenn es sich um Verdünnungswellen handelt oder keine Wellen auftreten. Die Werte für  $S_i^d$  werden mit Gleichung (6.14), für  $S_-^{(i)}$  mit (8.19), für  $S_{2-}^{(i)}$  mit (5.12a), für  $S_{4-}^{(i)}$  mit (5.12b) und  $v^{(s)} = g_- (S_-^{(s)})$  berechnet. Einige der Werte werden in Abbildung 8.7b durch Pfeile hervorgehoben.

Abbildung 8.7 zeigt Sättigungsprofile für eine primäre schwerkraftgetriebene Umverteilung in Abbildung 8.7a und für eine sekundäre schwerkraftgetriebene Umverteilung in Abbildung 8.7b. Anfangsbedingungen werden gestrichelt und Sättigungsprofile zum Zeitpunkt  $t = 10d$  durchgezogen dargestellt. Sowohl für die primäre als auch für die sekundäre Umverteilung wandern Verdünnungsstoßwellen aus der Unstetigkeit  $x = 0$  in beide Hälften des porösen Mediums. Eine Bewässerungswelle läuft nach unten und eine Entwässerungswelle nach oben. Es wird daher nichtperkolierendes Wasser in der oberen Hälfte und nichtperkolierendes Öl in der unteren Hälfte produziert. Da bei der sekundären Umverteilung bereits nichtperkolierendes Wasser in der unteren Hälfte des Mediums vorhanden ist, vereinigt sich dieses mit der ankommenden Wasserfront. Das nichtperkolierende Öl in der oberen Hälfte vereinigt sich ebenso mit dem ankommenden perkolierenden Öl.

Für die gewählten Parameter ist bei der primären Umverteilung in Abbildung 8.7a der Fluss in der oberen Hälfte durch den Fluss, der in der unteren Hälfte möglich ist, beschränkt. Dadurch wird der Verdünnungsfächer der nach oben laufenden Entwässerungswelle abgeschnitten und es entsteht ein Plateau wie in der Abbildung im Bereich  $x \in [-2.0 \text{ m}, 0 \text{ m}]$  zu sehen ist. Das Gegenteil ist bei der sekundären Umverteilung der Fall. Dabei wird der Wasserfluss in der unteren Hälfte des Mediums durch den Fluss in der oberen Hälfte beschränkt.

Man betrachte hierzu den Bereich  $x \in [0 \text{ m}, 0.5 \text{ m}]$  in Abbildung 8.7b. Die obere Hälfte des Mediums kann nicht soviel Wasser liefern, wie in der unteren Hälfte fließen könnte.

Die Geschwindigkeiten der Stoßwellen sind bei der sekundären Umverteilung deutlich größer. Dies lässt sich, wie schon beim Buckley-Leverett-Problem, damit erklären, dass die Mobilität der eindringenden perkolierenden Phase durch die Vereinigung mit der bereits vorhandenen nichtperkolierenden Phase erhöht wird. Dies wird im DBRMMWBL-Modell nicht berücksichtigt.

Abbildung 8.8 zeigt Sättigungsprofile für unterschiedliche Anfangsbedingungen, um Eigenschaften des betrachteten Modells darzustellen. Dabei werden wie zuvor die Anfangsprofile durch gestrichelte und die Sättigungsprofile zum Zeitpunkt  $t = 10\text{d}$  durch durchgezogene Kurven dargestellt.

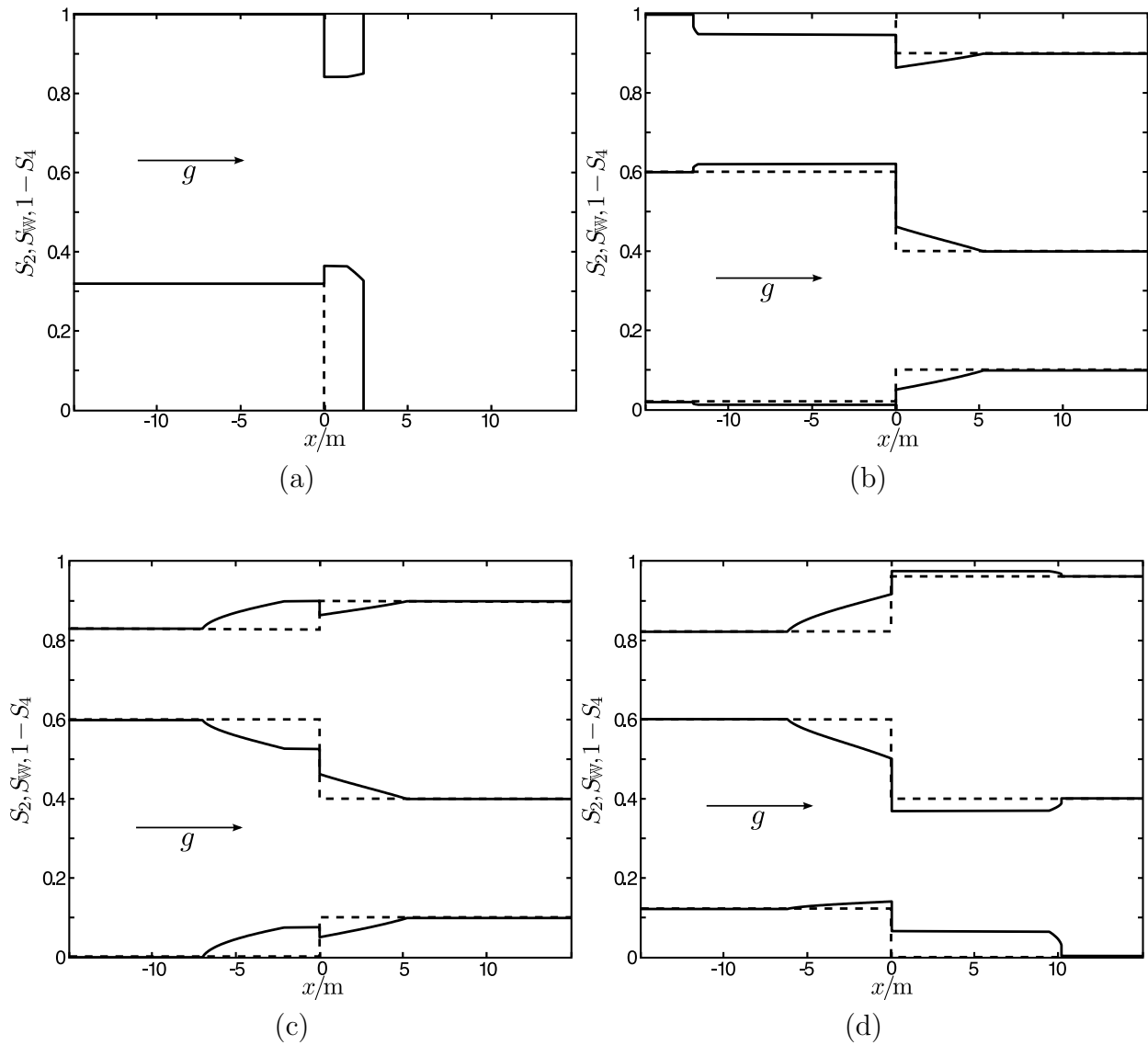
Abbildung 8.8a zeigt Sättigungsprofile für Anfangsbedingungen, bei denen die obere Hälfte zu Beginn mobiles perkolierendes Wasser enthält und die untere Hälfte komplett mit Öl gefüllt ist.

Die Wassersättigung in der oberen Hälfte ist dabei so klein ( $S_\ell < S_\ell^{\max}$ ), dass die Charakteristiken nach unten laufen. In der unteren Hälfte ist das ebenfalls der Fall, so dass der Fall (a) aus Abbildung 8.3 vorherrscht und die Lösung an der Unstetigkeit nach Kapitel 8.2.1 ermittelt wird. Die untere Hälfte des Mediums wird bewässert. Durch das Eindringen des perkolierenden Wassers wird dort jedoch der Anteil an mobilen Fluiden reduziert, da das verdrängte Öl nichtperkolierendes Öl zurücklässt. Daher muss die Wassersättigung in der unteren Hälfte größer sein, als in der oberen Hälfte, um den gleichen Wasserfluss zu ermöglichen. Das führt zu einem Sättigungssprung bei  $x = 0.0 \text{ m}$ .

Abbildungen 8.8b-d illustrieren die Möglichkeit, durch Berücksichtigung der nichtperkolierenden Fluidphasen die Entartung des DBRMMWBL-Modells bzgl. der Tatsache, dass identische poröse Medien mit identischer Sättigung  $S$  unterschiedliches Verhalten zeigen, aufzulösen. Dazu wird für die drei gezeigten Lösungen jeweils die gleiche Anfangswassersättigung von 60% in der oberen Hälfte und 40% in der unteren Hälfte des Mediums angenommen. Die Anfangsbedingungen unterscheiden sich darin, wie die Fluidsättigungen auf perkolierende und nichtperkolierende Fluidphasen verteilt werden. Diese drei Fälle sind im DBRMMWBL-Modell ununterscheidbar. Bei allen drei Fällen laufen bei  $x^d = 0$  die Charakteristiken auseinander, so dass der Fall (d) aus Abbildung 8.3 vorherrscht und die Lösung an der Unstetigkeitsstelle nach Kapitel 8.2.3 ermittelt wird.

In Abbildung 8.8b ist das poröse Medium in der oberen Hälfte nahezu vollständig mit perkolierenden Phasen gefüllt. Hingegen ist der Anteil an nichtperkolierenden Phasen in der





**Abbildung 8.8:** Darstellung von Sättigungsprofilen für schwerkraftgetriebene Umverteilung in einer geschlossenen porösen Säule. Die durchgezogenen Profile zeigen die Sättigungen  $S_2, S, 1 - S_4$  zum Zeitpunkt  $t = 10d$ . Die Anfangsbedingungen werden durch gestrichelte Kurven dargestellt und sind Tabelle 8.1 entnommen. Sättigungswerte an Unstetigkeitsstellen werden in Tabelle 8.2 zusammengefasst. Die verwendeten Parameter sind in Tabelle 7.1 aufgelistet.

unteren Hälfte relativ hoch. In diesem Fall dringt eine Bewässerungsverdünnungswelle in die untere Hälfte ein. Allerdings ist die untere Hälfte des Mediums nicht in der Lage, einen Volumenstrom, der so groß wie der von der oberen Hälfte auf die Unstetigkeitsstelle treffende Strom ist, zu gewährleisten. Wasser staut sich daher zurück und eine Bewässerungsverdünnungsstoßwelle entsteht bei  $x^d = 0$  und läuft in die obere Hälfte des Mediums. Die Unstetigkeit in den Anfangsbedingungen wirkt demnach wie eine teildurchlässige Wand.

In Abbildung 8.8c ist die untere Hälfte identisch mit der in Abbildung 8.8b und der Anteil an nichtperkolierenden Phasen dort ist hoch. Im oberen Teil des Mediums ist dagegen nun auch nichtperkolierendes Öl vorhanden. Genau wie in Abbildung 8.8b dringt eine Bewässerungsverdünnungswelle in die untere Hälfte. In der oberen Hälfte ist jedoch die Mobilität des Öls zu gering, als dass das verdrängte Öl nach oben abfließen kann. Daher wird dort die Wassersättigung gesenkt und eine Entwässerungswelle läuft im Medium nach oben.

In Abbildung 8.8d ist die untere Hälfte fast vollständig mit perkolierendem Wasser gefüllt und in der oberen Hälfte ist der Anteil an nichtperkolierenden Fluidphasen hoch. In diesem Fall reicht der Wasserfluss von der oberen Hälfte in die untere Hälfte des Mediums nicht aus, um die Wassersättigung an der Unstetigkeitsstelle  $x^d = 0$  konstant zu halten. Die untere Hälfte des Mediums wird daher entwässert und eine Entwässerungsverdünnungsstoßwelle läuft in die untere Hälfte des Mediums. Eine Entwässerungsverdünnungswelle läuft auch in die obere Hälfte. Dadurch wird der Wasserfluss über die Unstetigkeitsstelle maximiert. Es widerspricht zunächst der Intuition, dass eine geringere Wassersättigung einen höheren Wasserfluss ermöglicht. Wechselt man jedoch die Blickrichtung und betrachtet stattdessen das Öl, verschwindet dieser scheinbare Widerspruch. Das Wasser von oben drückt das Öl aus der unteren Hälfte des Mediums. Aufgrund der impermeablen Wände an allen Seiten kann das Öl nicht nach unten ausweichen, sondern muss nach oben fließen. Durch die abgesenkte Wassersättigung wird ein höherer Ölfluss in der oberen Hälfte möglich. Dies wiederum ermöglicht einen erhöhten Wasserfluss in der unteren Hälfte.

## 9 Verallgemeinertes McWhorter-Sunada-Problem

McWhorter und Sunada haben ein Anfangs- und Randwertproblem für das DBRMMWBL-Modell vorgeschlagen [McWh 90, McWh 92], für welches die partielle Differentialgleichung der fraktionalen Flussformulierung in eine gewöhnliche Integro-Differentialgleichung umgeformt werden kann. Man erhält dann eine Ähnlichkeitslösung für die Sättigung  $S(\eta)$ , wobei die Ähnlichkeitsvariable durch  $\eta = xt^{-1/2}$  gegeben ist. Im Vergleich mit der numerischen Lösung einer nichtlinearen partiellen Differentialgleichung kann die numerische Lösung einer gewöhnlichen Integro-Differentialgleichung als beliebig genau angenommen werden. Die Methode von McWhorter-Sunada wird in diesem Kapitel für die fraktionale Flussformulierung mit immobilen nichtperkolierenden Phasen angewendet. Die Lösungen dienen als Referenzprobleme für die später vorgestellten Algorithmen. Es werden in diesem Kapitel außerdem Beispiele präsentiert, die Eigenschaften des neuen Modells illustrieren. Darüber hinaus können im McWhorter-Sunada-Problem der Übergang in den hyperbolischen Limes untersucht und die Bedingungen für die Sprungunstetigkeit aus Kapitel 6.2 überprüft und verifiziert werden.

### 9.1 Problemstellung

McWhorter und Sunada betrachten ein eindimensionales homogenes poröses Medium, welches von  $x = 0$  bis  $x \rightarrow \infty$  reicht. Das Medium ist senkrecht zur Schwerkraft ausgerichtet ( $\vartheta = 0$  in Gleichung (3.11)), so dass Körperkräfte in den perkolierenden Phasen

$$F_1 = 0, \tag{9.1a}$$

$$F_3 = 0 \tag{9.1b}$$

verschwinden. Das poröse Medium wird von links nach rechts mit Wasser geflutet. Am rechten Rand bei  $x \rightarrow \infty$  habe das poröse Medium eine Wand, deren Permeabilität variabel zwischen

voll durchlässig und völlig undurchlässig eingestellt werden kann. Der Gesamtvolumenstrom sei positiv,

$$q_{\text{tot}}(t) \geq 0. \quad (9.2)$$

Der injizierte Volumenstrom des Wassers  $q_0(t) = q_{\text{w}}(x_\ell, t)$  ist Teil der Lösung und wird so bestimmt, dass die Sättigung  $S$  am linken Rand  $x_\ell = 0$  konstant bleibt. Die Anfangsbedingungen für das McWhorter-Sunada-Problem sind konstante Sättigungen

$$S(x, 0) = S_r \quad (9.3)$$

auf dem Gebiet  $(0, \infty)$ . Als Randbedingungen werden konstante Sättigungen an beiden Rändern

$$S(x_\ell, t) = S_\ell, \quad (9.4)$$

$$\lim_{x \rightarrow \infty} S(x, t) = S_r \quad (9.5)$$

für den betrachteten Zeitraum  $t \in [0, t_e]$  angenommen. Die partielle Differentialgleichung wird durch eine Transformation zu einer Ähnlichkeitsvariablen  $\eta$  in eine gewöhnliche Differentialgleichung umgeformt. Die Anfangs- und Randbedingungen transformieren dabei in ein Randwertproblem mit

$$S(\eta = 0) = S_\ell, \quad (9.6a)$$

$$\lim_{\eta \rightarrow \infty} S(\eta) = S_r. \quad (9.6b)$$

## 9.2 Allgemeine Lösung

Die Anfangsbedingungen sind homogen und der Volumenstrom des injizierten Fluids wird monoton erhöht. Daher ist der Charakter des Prozesses konstant und identisch im ganzen Gebiet. Für  $S_\ell < S_r$  wird das Medium entwässert und für  $S_\ell > S_r$  bewässert. Damit sind die Grenzsättigungen  $S_{\text{w}}^*$ ,  $S_2^*$ ,  $S_4^*$  aus Gleichung (3.7) unabhängig von Raum  $x$  und Zeit  $t$ . Im Folgenden werden Bewässerungen betrachtet. Die Grenzsättigungen lauten dann

$$S_{\text{w}}^*(x, t) = 1 - S_{\text{Oim}}, \quad (9.7a)$$

$$S_2^*(x, t) = 0, \quad (9.7b)$$

$$S_4^*(x, t) = S_{\text{Oim}}. \quad (9.7c)$$

Die Prozedur für Entwässerungsprozesse verläuft analog. Der Übersichtlichkeit wegen sei Gleichung (5.21) mit Berücksichtigung der Bedingungen (9.1) angegeben. Sie lautet

$$\phi \frac{\partial S}{\partial t} + q_{\text{tot}}(t) \frac{\partial}{\partial x} f_{\text{w}}(S) - \frac{\partial}{\partial x} \left( D(S) \frac{\partial S}{\partial x} \right) = 0 \quad (9.8)$$

und ist eine einzige partielle Differentialgleichung mit der Variablen  $S$ . Man beachte, dass der Wasserfluss  $q_{\text{w}}$  einen hyperbolischen advektiven Anteil  $q_{\text{tot}} f_{\text{w}}$  und einen parabolisch diffusiven Anteil  $-D \partial S / \partial x$  hat. Damit die Sättigung bei  $x_{\ell} = 0$  konstant bleibt, muss das Wasser mit einem bestimmten Volumenstrom injiziert werden. McWhorter und Sunada [McWh 90, McWh 92] haben gezeigt, dass die Sättigung am linken Rand nur dann konstant bleibt, wenn sich der eingeströmte Volumenstrom als

$$q_0(t) = q_{\text{w}}(x_{\ell}, t) = \frac{\mathcal{A}(S_{\ell}, S_r)}{\sqrt{t}} \quad (9.9)$$

schreiben lässt. Dann erhält man eine Ähnlichkeitslösung in  $\eta$ . Der Koeffizient  $\mathcal{A}$  ist dabei Teil der Lösung. Der Gesamtfluss von Wasser und Öl ist durch

$$q_{\text{tot}}(t) = \mathcal{R} q_0(t) \quad (9.10)$$

gegeben, wobei  $\mathcal{R}$  das Verhältnis des Gesamtflusses zum injizierten Wasserfluss bezeichnet und ein Parameter des Lösungsverfahrens ist. Für  $\mathcal{R} = 0$  strömen Öl und Wasser in entgegengesetzter Richtung. Experimentell kann ein solches System durch eine undurchlässige Wand am rechten Ende des Mediums bei  $x \rightarrow \infty$  erzeugt werden. Für  $\mathcal{R} = 1$  entspricht der Gesamtfluss dem injizierten Wasserfluss am linken Rand. Es verlässt also kein Öl das Medium am linken Rand und Öl- und Wasserfluss sind parallel ausgerichtet. Experimentell kann ein solches System durch ein poröses Medium, welches am rechten Ende offen ist, angenähert werden. Das Lösungsverfahren wurde für Werte  $\mathcal{R} \in [0, 1]$  entwickelt.

Um die Gleichung (9.8) zu lösen, definieren McWhorter und Sunada eine alternative fraktionale Flussfunktion

$$F^{\text{w}}(x, t) = \frac{q_{\text{w}}(x, t)/q_0(t) - f_{\text{w}}(S_r)\mathcal{R}}{1 - f_{\text{w}}(S_r)\mathcal{R}}, \quad (9.11)$$

welche den lokalen Wasserfluss  $q_{\text{w}}(x, t)$  in Bezug zum injizierten Fluss  $q_0(t)$  setzt. Die üblicherweise verwendete fraktionale Flussfunktion  $f_{\text{w}}$  setzt den lokalen Wasserfluss dagegen in Bezug zum lokalen gesamten Fluss. Formuliert man die Massenerhaltungsgleichung (9.8)

mit Hilfe dieser fraktionalen Flussfunktion, so lautet sie

$$\phi \frac{\partial S}{\partial t} + q_0(t) (1 - f_{\text{w}}(S_r) \mathcal{R}) \frac{\partial F^{\text{w}}}{\partial x} = 0. \quad (9.12)$$

Löst man diese Gleichung nach  $q_0$  auf, setzt das Ergebnis in Gleichung (9.9) ein und führt die Ähnlichkeitsvariable  $\eta = xt^{-1/2}$  ein, lautet das Ergebnis

$$\eta(S) = \frac{2\mathcal{A}(1 - f_{\text{w}}(S_r) \mathcal{R})}{\phi} \frac{d}{dS} F^{\text{w}}(S) \quad (9.13)$$

wobei Details zu den Umformungen in [McWh 90, Fuci 07] nachgelesen werden können. Ein zweiter Ansatz führt zu einer gewöhnlichen Differentialgleichung für die Ähnlichkeitsvariable  $\eta$ . Setzt man Gleichung (5.20) in Gleichung (9.11) ein, erhält man

$$\frac{d}{dS} \eta(S) = - \frac{1}{\mathcal{A}(1 - f_{\text{w}}(S_r) \mathcal{R})} \frac{D(S)}{F^{\text{w}}(S) - \mathcal{F}^{\text{w}}(S)} \quad (9.14)$$

wobei  $\mathcal{F}^{\text{w}}$  die normalisierte fraktionale Flussfunktion

$$\mathcal{F}^{\text{w}}(S) = \mathcal{R} \frac{f_{\text{w}}(S) - f_{\text{w}}(S_r)}{1 - \mathcal{R}f_{\text{w}}(S_r)} \quad (9.15)$$

bezeichnet. Differenziert man Gleichung (9.13) nach der Wassersättigung  $S$  und setzt das Ergebnis in Gleichung (9.14) ein, so erhält man eine Integrodifferentialgleichung

$$\frac{d^2}{dS^2} F^{\text{w}}(S) = - \frac{\phi}{2\mathcal{A}^2(1 - f_{\text{w}}(S_r) \mathcal{R})^2} \frac{D(S)}{F^{\text{w}}(S) - \mathcal{F}^{\text{w}}(S)} \quad (9.16)$$

für  $F^{\text{w}}$ . Auch wenn Gleichung (9.16) kein Integral enthält, so ist es dennoch eine Integrodifferentialgleichung, da  $\mathcal{A}$  kein freier Parameter, sondern Teil der Lösung ist. Der Koeffizient  $\mathcal{A}$  muss aufgrund der Bedingung  $F^{\text{w}}(S_r) = 0$  [McWh 90] die Gleichung

$$\mathcal{A}^2 = \frac{\phi}{2(1 - \mathcal{R}f_{\text{w}}(S_r))^2} \int_{S_r}^{S_\ell} \frac{(\nu - S_r) D(\nu)}{F^{\text{w}}(\nu) - \mathcal{F}^{\text{w}}(\nu)} d\nu. \quad (9.17)$$

erfüllen. Durch zweifache Integration von Gleichung (9.16) und Einsetzen von Gleichung

(9.17) erhält man eine reine Integralgleichung

$$F^w(S) = 1 - \frac{\int_{S_r}^{S_\ell} \frac{(\nu-S)D(\nu)}{F^w(\nu)-\mathcal{F}^w(\nu)} d\nu}{\int_{S_r}^{S_\ell} \frac{(\nu-S_r)D(\nu)}{F^w(\nu)-\mathcal{F}^w(\nu)} d\nu}. \quad (9.18)$$

Integriert man Gleichung (9.16) nur einmal erhält man eine Integrodifferentialgleichung

$$\frac{d}{dS} F^w(S) = \frac{\int_{S_r}^{S_\ell} \frac{D(\nu)}{F^w(\nu)-\mathcal{F}^w(\nu)} d\nu}{\int_{S_r}^{S_\ell} \frac{(\nu-S_r)D(\nu)}{F^w(\nu)-\mathcal{F}^w(\nu)} d\nu}, \quad (9.19)$$

die verwendet wird, um aus der Lösung  $F^w$  von Gleichung (9.18) mithilfe von Gleichung (9.13) die Inverse der Ähnlichkeitslösung  $\eta(S)$  zu berechnen, ohne dass das numerische Ergebnis  $F^w$  differenziert werden muss.

## 9.3 Numerischer Algorithmus

Gleichung (9.18) muss numerisch gelöst werden, da eine analytische Lösung nicht bekannt ist. Dabei ist ein einfaches Schema naheliegend. Schreibt man Gleichung (9.18) als

$$F^{wk+1}(S) = 1 - \frac{\int_{S_r}^{S_\ell} \frac{(\nu-S)D(\nu)}{F^{wk}(\nu)-\mathcal{F}^w(\nu)} d\nu}{\int_{S_r}^{S_\ell} \frac{(\nu-S_r)D(\nu)}{F^{wk}(\nu)-\mathcal{F}^w(\nu)} d\nu}, \quad (9.20)$$

erhält man einen iterativen Algorithmus, welcher in den meisten Fällen schnell konvergiert, wenn er mit dem Schätzwert  $F^{wk=1}(S) = 1$  initialisiert wird. Der Algorithmus wurde von Fucik [Fuci 07] durch eine kleine Veränderung derart verbessert, dass es auch für Sättigungen  $S_\ell \rightarrow 1$  konvergiert. In diesen Fällen versagt der Algorithmus basierend auf Gleichung (9.20). Wird der Integrand als  $\widetilde{F}^w = D/(F^w - \mathcal{F}^w)$  bezeichnet, kann der alternative Algorithmus als

$$\widetilde{F}^{wk+1}(S) = D(S) + \widetilde{F}^{wk}(S) \left( \mathcal{F}^w(S) - \frac{\int_{S_r}^{S_\ell} (\nu-S) \widetilde{F}^w(\nu) d\nu}{\int_{S_r}^{S_\ell} (\nu-S_r) \widetilde{F}^w(\nu) d\nu} \right). \quad (9.21)$$

geschrieben werden. In der Implementierung kann dann die diskrete Natur von numerischen Algorithmen berücksichtigt werden. Zerlegt man das Intervall  $[S_r, S_\ell]$  in  $N_S$  äquidistant verteilte Punkte  $S_i = S_r + (i - 1) \Delta S$  mit  $\Delta S = (S_\ell - S_r) / (N_S - 1)$ , dann ist ein Element der Diskretisierung von  $\widetilde{F}^w$  als  $\widetilde{F}^w_i = \widetilde{F}^w(S_r + (i - 1) \Delta S)$  definiert. Damit können die Integrale in Gleichung (9.21) numerisch durch

$$\mathcal{I}_j := \int_{S=S_r+(j-1)\Delta S}^{S_\ell} (\nu - S) \widetilde{F}^w(\nu) d\nu = \sum_{i=j}^{N_S-1} (a_i - (S_r + (j - 1) \Delta S) b_i), \quad (9.22a)$$

$$\mathcal{I}_{N_S} := 0 \quad (9.22b)$$

approximiert werden, wobei  $j = 1, \dots, N_S - 1$  gilt. Die Koeffizienten  $a_i, b_i$  sind durch

$$a_i = \int_{S_r+(i-1)\Delta S}^{S_r+i\Delta S} \nu \widetilde{F}^w(\nu) d\nu \simeq \frac{\Delta S}{2} S_r \left( \widetilde{F}^w_i + \widetilde{F}^w_{i+1} \right) + \frac{\Delta S^2}{6} \left( (3i + 1) \widetilde{F}^w_i + (3i + 2) \widetilde{F}^w_{i+1} \right), \quad (9.23a)$$

$$b_i = \int_{S_r+(i-1)\Delta S}^{S_r+i\Delta S} \widetilde{F}^w(\nu) d\nu \simeq \frac{\Delta S}{2} \left( \widetilde{F}^w_i + \widetilde{F}^w_{i+1} \right), \quad (9.23b)$$

mit  $i = 1, \dots, N_S - 1$  definiert. Mit diesen Definitionen lautet der iterative Algorithmus schließlich

$$\widetilde{F}^w_j^{k+1} = D_j + \widetilde{F}^w_j^k \left( \mathcal{F}^w_j + \frac{\mathcal{I}_j}{\mathcal{I}_1} \right). \quad (9.24)$$

Man beachte, dass durch  $\mathcal{I}_1$  das Integral von  $S_r$  bis  $S_\ell$  bezeichnet wird. Setzt man nun die diskreten Ergebnisse in die Gleichungen (9.17) und (9.19) ein und das Ergebnis davon in Gleichung (9.13), so erhält man die Inverse der diskreten Ähnlichkeitslösung

$$\eta(S_r + (j - 1) \Delta S) = \sqrt{\frac{2}{\phi \mathcal{I}_1}} \sum_{i=j}^{N_S-1} b_i \quad (9.25)$$

und den Flusskoeffizienten

$$\mathcal{A} = \sqrt{\frac{\phi \mathcal{I}_1}{2(1 - \mathcal{R}f_w(S_r))^2}}. \quad (9.26)$$



Nach Fucik [Fuci 07] wird der Flusskoeffizient als Konvergenzkriterium verwendet. Die Iterationen werden gestoppt, wenn

$$|\mathcal{A}^{k+1} - \mathcal{A}^k| < \epsilon_{\text{tol}}, \quad (9.27)$$

mit der gewünschten Genauigkeit  $\epsilon_{\text{tol}}$  gilt.

## 9.4 Beispiele

Um numerische Lösungen berechnen zu können, müssen Parameterwerte gewählt werden. Die Parameter sind in Tabelle 9.1 zusammengefasst. Die viskosen Widerstände entsprechen nach Gleichung (5.13) hier Viskositäten  $\mu_{\text{W}} = 0.001 \text{ kg m}^{-1} \text{ s}^{-1}$ ,  $\mu_{\text{O}} = 0.02 \text{ kg m}^{-1} \text{ s}^{-1}$  und einer Permeabilität von  $K = 1.0 \times 10^{-11} \text{ m}^2$ . Die übrigen Parameter sind aus [Hilf 06c].

Parameter	Wasser		Parameter	Öl	
	Wert	Einheiten		Wert	Einheiten
$\varrho_{\text{W}}$	1000	$\text{kg m}^{-3}$	$\varrho_{\text{O}}$	800	$\text{kg m}^{-3}$
$\eta_2$	4	-	$\eta_4$	3	-
$S_{\text{Wdr}}$	0.15	-	$S_{\text{Oim}}$	0.19	-
$P_{\text{a}}$	1620	Pa	$P_{\text{b}}$	25	Pa
$\alpha$	0.52	-	$\beta$	0.90	-
$P_2^*$	2500	Pa	$P_4^*$	400	Pa
$\gamma$	1.5	-	$\delta$	3.5	-
$R_{11}$	1.16	$10^6 \text{ kg m}^{-3} \text{ s}^{-1}$	$R_{33}$	2.31	$10^7 \text{ kg m}^{-3} \text{ s}^{-1}$
$R_{13}$	0	$\text{kg m}^{-3} \text{ s}^{-1}$	$R_{31}$	0	$\text{kg m}^{-3} \text{ s}^{-1}$

**Tabelle 9.1:** Zusammenfassung der verwendeten Parameter für das McWhorter-Sunada-Problem und das Philip-Problem.

Es werden Bewässerungsexperimente für drei unterschiedliche Anfangsbedingungen gezeigt. Tabelle 9.2 stellt diese zusammen dar. Die Anfangsbedingungen A beschreiben eine primäre Bewässerung und die Anfangsbedingungen B eine sekundäre Bewässerung. Bei den Anfangsbedingungen C ist die maximal mögliche Menge an nichtperkolierenden Phasen im Medium vorhanden. Der übrige Porenraum ist mit perkolierendem Öl gefüllt. Um ein Gefühl für realistische Raum- und Zeitskalen zu vermitteln, werden die Lösungen nicht gegen die Ähnlichkeitsvariable  $\eta = xt^{-1/2}$  aufgetragen, sondern gegen die Raumvariable  $x$  zum Zeitpunkt  $t = 1000 \text{ s}$ .

Für  $\mathcal{R} \rightarrow 1$  und  $S_{\ell} \rightarrow 1 - S_{\text{Oim}}$  wird der Volumenstrom, welcher benötigt wird, um die Sättigungen am linken Rand konstant zu halten, immer größer und dementsprechend auch  $\mathcal{A}$ .

	A	B	C
$S_\ell$	0.7	0.7	0.7
$S_{2\ell}$	$S_2(0.7, 0, 0)$	$S_2(0.7, S_{\text{W dr}}, S_{\text{W dr}})$	$S_2(0.7, S_{\text{W dr}}, S_{\text{W dr}})$
$S_{4\ell}$	$S_4(0.7, 0, 0)$	$S_4(0.7, S_{\text{W dr}}, 0)$	$S_4(0.7, S_{\text{W dr}}, S_{\text{O im}})$
$S_r$	0	$S_{\text{W dr}}$	$S_{\text{W dr}}$
$S_{2r}$	0	$S_{\text{W dr}}$	$S_{\text{W dr}}$
$S_{4r}$	0	0	$S_{\text{O im}}$

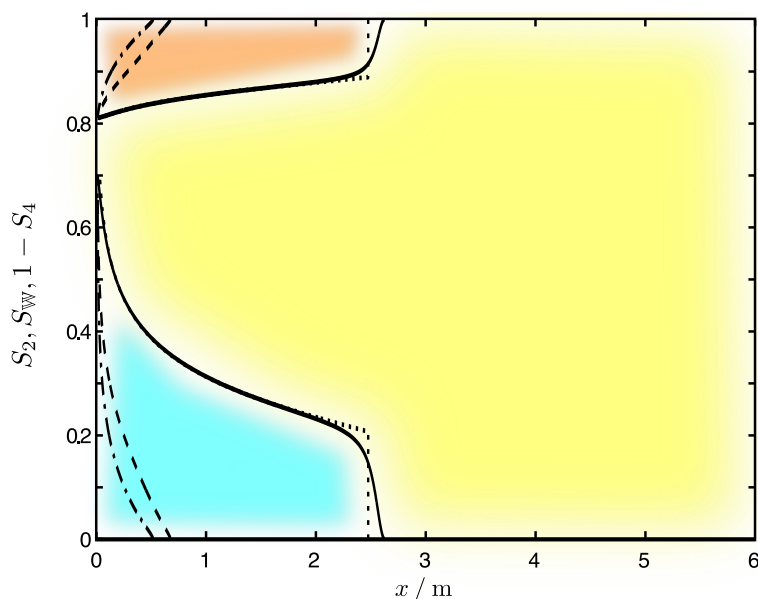
**Tabelle 9.2:** Anfangs- und Randbedingungen für das McWhorter-Sunada-Problem mit  $S_2 = S_2(S, S_0, S_{20})$  und  $S_4 = S_4(S, S_0, S_{40})$ .

Werte für die Konstante  $\mathcal{A}$  für die unterschiedlichen Anfangs- und Randbedingungen sind in Tabelle 9.3 zusammengefasst. Bei größeren aufgeprägten Strömungen nehmen die diffusiven Anteile an der Strömung ab. Das Modell für Zweiphasenströmungen in porösen Medien mit vernachlässigbaren diffusiven Termen wird gemeinhin als Buckley-Leverett-Modell bezeichnet und wurde in Kapitel 7 verallgemeinert, um auch immobile nichtperkolierende Phasen berücksichtigen zu können. Die Lösungen dort sind für konstante Volumenströme  $q$  und konstante Anfangsbedingungen mit einem Sprung selbstähnlich in  $x/t$ . Wird der Fluss jedoch mit  $q \propto \sqrt{t}$  permanent erhöht, so werden die Lösungen selbstähnlich in  $\eta = xt^{-1/2}$  und ein Vergleich mit der McWhorter-Sunada-Lösung ist möglich.

Anfangsbedingung	$R = 0.0$	$R = 0.8$	$R = 1.0$
A	0.312	0.560	3.797
B	0.283	0.571	4.550
C	0.258	0.554	4.774

**Tabelle 9.3:** Die Lösungen für die Konstante  $\mathcal{A}$  in  $10^{-3} \text{ m s}^{-1/2}$ .

Abbildung 9.1 zeigt Sättigungsprofile für eine primäre Bewässerung mit den Anfangsbedingungen A für unterschiedliche Werte  $\mathcal{R}$  zum Zeitpunkt  $t = 1000 \text{ s}$ . Bei allen gezeigten Profilen dringt das Wasser in das Medium ein und verdrängt das dortige Öl. Für  $\mathcal{R} = 1$  ist der Fluss fast vollständig durch die advektiven Terme dominiert. Das Wasser ist etwa fünf mal so weit in das Medium vorgedrungen wie für die beiden anderen Werte für  $\mathcal{R}$ . Die Buckley-Leverett-Lösung und die Lösung des McWhorter-Sunada-Problems unterscheiden sich nur noch geringfügig. Für  $S_\ell \rightarrow 1 - S_{\text{O im}}$  nähert sich die Lösung des McWhorter-Sunada-Problems dem Buckley-Leverett-Problem noch weiter an. Betrachtet man dabei den Koeffizienten  $\mathcal{A}$  so leuchtet diese Annäherung sofort ein. Für  $S_\ell \rightarrow 1 - S_{\text{O im}}$  wird der Koeffizient immer größer, so dass der Fluss auch immer größer wird. Die Kapillar- und Grenzflächenterme bleiben jedoch gleich groß und können daher in immer besserer Näherung vernachlässigt werden. Für  $\mathcal{R} = 0$  sind die Terme dagegen nie zu vernachlässigen, da der Gesamtfluss immer  $q_0 = 0$

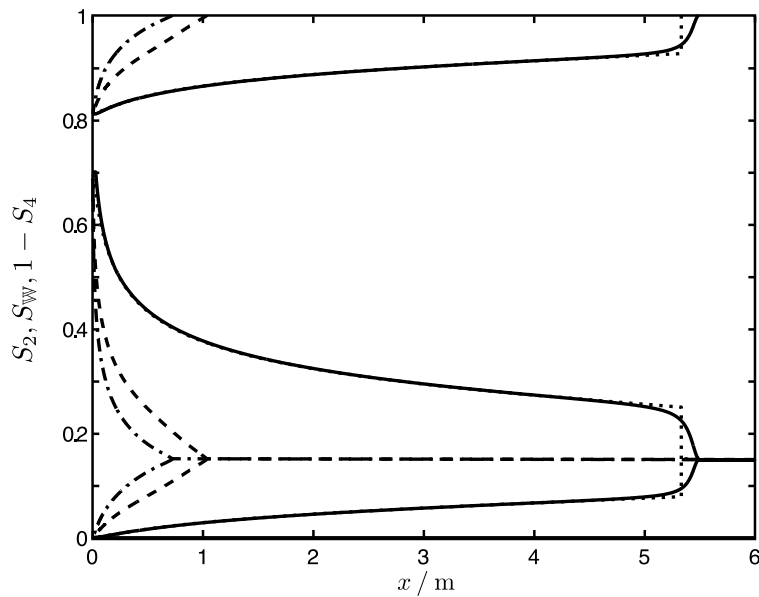


**Abbildung 9.1:** Sättigungsprofile für eine primäre Bewässerung mit unterschiedlichen Werten für  $\mathcal{R}$ . Die durchgezogenen Kurven zeigen  $\mathcal{R} = 1$ , die gestrichelten Kurven  $\mathcal{R} = 0.8$  und die gestrichpunkteten Kurven  $\mathcal{R} = 0$ . Außerdem wird die Lösung des entsprechenden Buckley-Leverett-Problems als gepunktete Kurve gezeigt. Die Kurve für das nichtperkolierende Wasser  $S_2$  fällt mit der  $x$ -Achse zusammen. Die Profile zeigen den Zeitpunkt  $t = 1000$  s. Um die Interpretation der Abbildung zu erleichtern, wurden die Sättigungen für  $\mathcal{R} = 1$  farblich hinterlegt. Hellblau steht für perkolierendes Wasser  $S_1$ , gelb für perkolierendes Öl  $S_3$  und orange für nichtperkolierendes Öl  $S_4$ . Nichtperkolierendes Wasser kommt bei einer primären Bewässerung nicht vor.

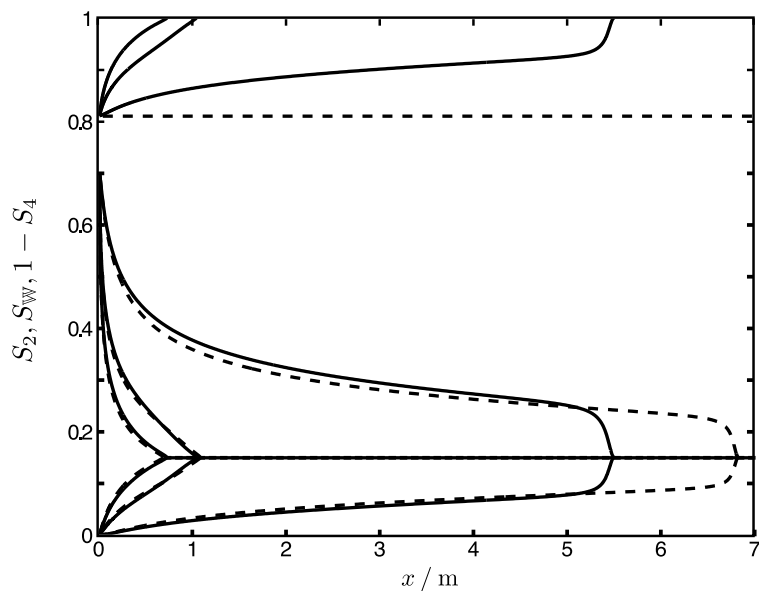
bleibt und der Fluss alleine durch die Kapillar- und Grenzflächenkräfte getrieben wird. Dann ist der Prozess diffusiv dominiert. Im Vergleich mit einer linearen Diffusion ist die Ausbreitung für geringe Sättigungen unterdrückt, da  $D(S) \rightarrow 0$  für  $S \rightarrow 0$ . Für  $0 < \mathcal{R} < 1$  kann der hyperbolische Limes durch Sättigungen  $S_\ell \approx 1 - S_{\text{Oim}}$  angenähert werden.

Abbildung 9.2 zeigt Sättigungsprofile für eine sekundäre Bewässerung mit den Anfangsbedingungen B für unterschiedliche Werte  $\mathcal{R}$  zum Zeitpunkt  $t = 1000$  s. Qualitativ unterscheiden sich die Profile für die sekundäre und primäre Bewässerung nicht. Ein Vergleich der beiden Lösungen zeigt, dass das Wasser für die sekundäre Bewässerung zum gleichen Zeitpunkt weiter in das Medium vorgedrungen ist. Aus einer anderen Perspektive betrachtet: Es muss ein deutlich höherer Wasserfluss in das Medium gepumpt werden, um die Sättigung am Einlass konstant bei  $S = 0.7$  zu halten. Der Unterschied ist für  $\mathcal{R} = 1$  besonders ausgeprägt und wird schwächer für kleinere  $\mathcal{R}$ . Dies macht physikalisch Sinn, da die Mobilität vor allem für advective Prozesse eine zentrale Rolle spielt. Diffusive Kapillarkräfte nehmen dagegen für größere Sättigungen wieder ab, so dass die erhöhte Mobilität wieder kompensiert wird.

Abbildung 9.3 zeigt Sättigungsprofile für die sekundäre Bewässerung B sowie eine Bewässerung eines porösen Mediums, welches maximal mit nichtperkolierenden Phasen gefüllt ist



**Abbildung 9.2:** Sättigungsprofile für eine sekundäre Bewässerung mit unterschiedlichen Werten für  $\mathcal{R}$ . Die durchgezogenen Kurven zeigen  $\mathcal{R} = 1$ , die gestrichelten Kurven  $\mathcal{R} = 0.8$  und die gestrichpunkteten Kurven  $\mathcal{R} = 0$ . Außerdem wird die Lösung des entsprechenden Buckley-Leverett-Problems als gepunktete Kurve gezeigt. Profile zeigen den Zeitpunkt  $t = 1000$  s.



**Abbildung 9.3:** Vergleich von Sättigungsprofilen für eine sekundäre Bewässerung (durchgezogene Kurven) und für die Bewässerung eines Mediums, in welchem nicht alles vorhandene Öl perkoliert (gestrichelte Kurven). Gezeigt werden Kurven für unterschiedliche  $\mathcal{R} = 0$ ,  $\mathcal{R} = 0.8$  und  $\mathcal{R} = 1$ . Die entsprechenden Kurven können durch Vergleich mit Abbildung 9.2 identifiziert werden. Die Profile zeigen den Zeitpunkt  $t = 1000$  s.

---

und durch Anfangsbedingungen C aus Tabelle 9.2 beschrieben wird. Gezeigt werden Profile für unterschiedliche Werte  $\mathcal{R}$  zum Zeitpunkt  $t = 1000$  s. Zunächst sei bemerkt, dass sich an der Sättigung des nichtperkolierenden Öls während des Experiments nichts ändert, da die maximale Sättigung bereits vorliegt und jeder weitere Öltropfen, der entsteht, durch eine Vereinigung von Blasen am makroskopisch selben Ort kompensiert wird. Außerdem ist festzustellen, dass auch hier der Effekt der nichtperkolierenden Phase am größten ist, wenn die Verdrängung advektiv dominiert ist. Sind die Kapillar- und Grenzflächenterme dominant, verändert sich lediglich die Form des Profils geringfügig. Die Eindringgeschwindigkeit ändert sich nicht.

## 10 Verallgemeinertes Philip-Problem

Philip hat ein Anfangs- und Randwertproblem für das DBRMMWBL-Modell vorgeschlagen [Phil 91], welches Hysterese in Be- und Entwässerungsprozessen berücksichtigt. Es wurde kürzlich von Pop et al. [Pop 09] verallgemeinert, um auch Grenzflächen zwischen den einzelnen Phasen berücksichtigen zu können. In diesem Kapitel wird es verallgemeinert, um nichtperkolierende Phasen zu berücksichtigen. Das Verfahren löst ein Randwertproblem einer gewöhnlichen Differentialgleichung iterativ. Auch hier erhält man wie beim McWhorter-Sunada-Problem aus Kapitel 9 eine Ähnlichkeitslösung für die Sättigung  $S(\eta)$  mit der Ähnlichkeitsvariablen  $\eta = xt^{-1/2}$ . Das iterative Lösen des Randwertproblems geschieht numerisch. Wie schon beim McWhorter-Sunada-Problem kann die numerische Lösung eines Randwertproblems einer ODE im Vergleich zur numerischen Lösung einer nichtlinearen partiellen Differentialgleichung als beliebig genau betrachtet werden. Das Philip-Problem dient daher ebenfalls als Referenzproblem. Es ist jedoch auch physikalisch sehr interessant, da es zum einen gleichzeitige Be- und Entwässerung beschreibt und zum anderen prinzipiell auch im Labor umsetzbar ist. Eine Verallgemeinerung des Philip-Problems auf das untersuchte Modell, welches zwischen perkolierenden und nichtperkolierenden Fluidanteilen unterscheidet, ist hilfreich, da Be- und Entwässerungsphänomene im Modell direkt berücksichtigt werden. Sie müssen im Gegensatz zum DBRMMWBL-Modell nicht durch unterschiedliche Parametrierungen der Parameterfunktionen realisiert werden,

### 10.1 Problemstellung

Im Philip-Problem wird ein eindimensionales, unendlich langes, homogenes poröses Medium betrachtet. Es sei senkrecht zur Schwerkraft ausgerichtet ( $\vartheta = 0$ ), sodass die Körperkräfte auf die perkolierenden Phasen

$$F_1 = 0, \tag{10.1a}$$

$$F_3 = 0 \tag{10.1b}$$

verschwinden. Das poröse Medium sei an beiden Enden geschlossen, so dass die Fluide in der Summe in Ruhe sind und

$$q_{\text{tot}}(t) = 0 \quad (10.2)$$

gilt.

Die Anfangsbedingungen für das Philip-Problem sind zwei konstante Sättigungen, die über eine Unstetigkeit in der Mitte bei  $x = 0$  verbunden sind. Sie lauten damit

$$S(x, 0) = S_\ell \quad \text{für } x < x_0, \quad (10.3a)$$

$$S(x, 0) = S_r \quad \text{für } x > x_0. \quad (10.3b)$$

An den Rändern wird angenommen, dass die Sättigungen

$$\lim_{x \rightarrow -\infty} S(x, t) = S_\ell, \quad (10.4)$$

$$\lim_{x \rightarrow \infty} S(x, t) = S_r \quad (10.5)$$

für alle  $t \in [0, t_e]$  konstant sind. Die partielle Differentialgleichung wird durch Transformation zur Ähnlichkeitsvariablen  $\eta$  in eine gewöhnliche Differentialgleichung umgeformt. Die Anfangs- und Randbedingungen werden ebenfalls transformiert und werden zu Randbedingungen. Die Randbedingungen lauten

$$\lim_{\eta \rightarrow -\infty} S(\eta) = S_\ell, \quad (10.6a)$$

$$\lim_{\eta \rightarrow \infty} S(\eta) = S_r. \quad (10.6b)$$

## 10.2 Allgemeine Lösung

An der Unstetigkeitsstelle  $x^d = 0$  induzieren die unterschiedlichen Benetzungseigenschaften der Fluide eine Strömung. Ohne Beschränkung der Allgemeinheit sei im Folgenden angenommen, dass  $S_r < S_\ell$  gilt. In diesem Fall saugen Kapillarkräfte das benetzende Fluid in die rechte Hälfte des Mediums. Der Wasserfluss  $q_w$  von links nach rechts muss jedoch durch ein Ölfluss  $q_o$  von rechts nach links ausgeglichen werden, damit der Gesamtfluss wie in Gleichung (10.2) verschwindet. Da die Kapillardrucksättigungsbeziehung monoton ist, ändert sich der Charakter des Prozesses im Laufe des Experiments nicht. Die linke Hälfte wird entwässert und die rechte Hälfte wird bewässert. Im DBRMMWBL-Model (vgl. [Phil 91]) müssen daher

zwei unterschiedliche Kapillardrucksättigungsbeziehungen und relative Permeabilitäten parametrisiert werden. Im untersuchten Modell ist dies nicht der Fall. Mit dem Vorwissen über Be- und Entwässerung können die Grenzsättigungen aus Gleichung (3.7) vereinfacht werden. Da  $\partial_t S > 0$  für  $x > 0$  und  $\partial_t S < 0$  für  $x < 0$  werden die Grenzsättigungen  $S_{\text{W}}^*$ ,  $S_2^*$ ,  $S_4^*$  zeitunabhängig und lauten

$$S_{\text{W}}^*(x, t) = (1 - S_{\text{Oim}})\Theta(x) + S_{\text{Wdr}}\Theta(-x), \quad (10.7a)$$

$$S_2^*(x, t) = S_{\text{Wdr}}\Theta(-x), \quad (10.7b)$$

$$S_4^*(x, t) = S_{\text{Oim}}\Theta(x). \quad (10.7c)$$

Diese Grenzsättigungen können in Gleichung (5.12) eingesetzt werden. Mit den Voraussetzungen (10.1) und (10.2) lautet die Differentialgleichung (5.21)

$$\phi \frac{\partial S}{\partial t} + -\frac{\partial}{\partial x} \left( D(S, x) \frac{\partial S}{\partial x} \right) = 0. \quad (10.8)$$

Um das Problem zu lösen, wird es zunächst an der Unstetigkeitsstelle  $x^d = 0$  geteilt. Die Hälften werden separat gelöst und die Anfangs- und Randwertprobleme lauten

$$\begin{cases} \phi \frac{\partial S}{\partial t} - \frac{\partial}{\partial x} (D_\ell(S) \frac{\partial S}{\partial x}) = 0, \\ S(x, 0) = S_\ell \end{cases} \quad \text{für } x < 0 \quad (10.9a)$$

und

$$\begin{cases} \phi \frac{\partial S}{\partial t} - \frac{\partial}{\partial x} (D_r(S) \frac{\partial S}{\partial x}) = 0, \\ S(x, 0) = S_r \end{cases} \quad \text{für } x > 0, \quad (10.9b)$$

wobei die Kurzschreibweisen

$$D_\ell(S) = -\lambda(S, S_2, S_4) \frac{d}{dS} P_c(S, S_2, S_4) \quad \text{für } x < 0, \quad (10.10a)$$

$$D_r(S) = -\lambda(S, S_2, S_4) \frac{d}{dS} P_c(S, S_2, S_4) \quad \text{für } x > 0 \quad (10.10b)$$

für die nichtlinearen Diffusionskoeffizienten in den beiden Hälften eingeführt wurden. Man beachte, dass die Diffusionfunktionen  $D$  eingeschränkt auf die Gebietshälften nicht mehr explizit von  $x$  abhängen. Die beiden Gleichungen (10.9a) und (10.9b) sind bei  $x = 0$  gekoppelt.



Dort müssen Fluss und Druck stetig sein, so dass

$$q_-(t) = q_\ell(0_-, t) = q_r(0_+, t) = q_+(t), \quad (10.11a)$$

$$P_{c-}(S_-(t)) = P_{c+}(S_+(t)) \quad (10.11b)$$

gilt, wobei der Fluss in der linken Gebietshälfte als  $q_\ell(x, t) = D_\ell \frac{\partial S}{\partial x}$  und in der rechten Gebietshälfte als  $q_r(x, t) = D_r \frac{\partial S}{\partial x}$  bezeichnet wird. Der gemeinsame Rand der beiden Teilgebiete wird im rechten Teilgebiet  $0_+ = \lim_{x \searrow 0} x$  und im linken Teilgebiet  $0_- = \lim_{x \nearrow 0} x$  bezeichnet. Die Kapillardrucksättigungsbeziehungen  $P_{c-}, P_{c+}$  sind der links- und rechtsseitige Limes der Kapillardrucksättigungsbeziehungen  $P_c(S, S_0(x), S_{20}(x), S_{40}(x))$  an  $x = 0$ . Die Sättigungen  $S_-(t)$  und  $S_+(t)$  sind der linksseitige und der rechtsseitige Limes der Wassersättigung  $S(x, t)$  bei  $x = 0$ .

Das Problem ist nun völlig analog zu [Phil 91] formuliert. Allerdings unterscheiden sich die Kapillardrucksättigungsbeziehung  $P_c$  und damit der diffusive Term  $D$ . Die Lösung wird über eine selbstähnliche Lösung der partiellen Differentialgleichungen (10.9) durch Transformation von  $x$  und  $t$  nach  $\eta = xt^{-1/2}$  gelöst. Man erhält dann zwei Randwertprobleme für gewöhnliche Differentialgleichungen für die beiden Teilgebiete

$$\begin{cases} \frac{\eta}{2} S' + [D_\ell(S) S']' = 0, \\ S(-\infty) = S_\ell \end{cases} \quad \text{für } \eta \in (-\infty, 0) \quad (10.12a)$$

und

$$\begin{cases} \frac{\eta}{2} S' + [D_r(S) S']' = 0, \\ S(+\infty) = S_r \end{cases} \quad \text{für } \eta \in (0, +\infty), \quad (10.12b)$$

wobei hier  $'$  die Ableitung  $d/d\eta$  bezeichnet. Obwohl es sich um Differentialgleichungen zweiter Ordnung handelt und nur eine Randbedingung angegeben wird, ist das Problem wohlgestellt, da die Gleichungen bei  $\eta = 0$  durch die Gleichungen (10.11) gekoppelt sind.

In den meisten Experimenten werden Kapillardrucksättigungsbeziehungen gemessen, die streng monoton fallend in  $S$  sind. Diese Kapillardrucksättigungsbeziehungen sind invertierbar. Um die linksseitigen Grenzwerte und rechtsseitigen Grenzwerte der Sättigung  $S$  miteinander in Bezug zu setzen, werden die beiden Funktionen  $\mathcal{P}_-^+(s), \mathcal{P}_+^-(s) : [0, 1] \rightarrow [0, 1]$  als

$$\mathcal{P}_-^+(s) := P_{c+}^{-1}[P_{c-}(s)], \quad (10.13a)$$

$$\mathcal{P}_+^-(s) := P_{c-}^{-1}[P_{c+}(s)]. \quad (10.13b)$$

definiert, wobei  $P_{c\pm}^{-1}$  die Inverse der Kapillardrucksättigungsbeziehung bezeichnet. Mit (10.11b) und der Tatsache, dass die Kapillardrucksättigungsbeziehung fallend in  $S$  ist, erhält man

$$S_+ = \mathcal{P}_-^+(S_-), \quad (10.14a)$$

$$S_- = \mathcal{P}_+^-(S_+). \quad (10.14b)$$

Man beachte, dass  $S_\ell > \mathcal{P}_+^-(S_r)$  und  $S_r < \mathcal{P}_-^+(S_\ell)$  gelten muss, damit ein konsistentes und lösbares Randwertproblem vorliegt. Damit ist die linksseitige Flussfunktion  $q_\ell(s)$  monoton steigend in  $s \in [\mathcal{P}_+^-(S_r), S_\ell]$ . Sie verschwindet an ihrer maximalen Sättigung  $q_\ell(S_\ell) = 0$ . Damit ist  $q_\ell(\mathcal{P}_+^-(S_r)) > 0$ . Analog dazu ist die rechtsseitige Flussfunktion  $q_r(s)$  fallend in  $s \in [S_r, \mathcal{P}_-^+(S_\ell)]$ . Sie verschwindet an ihrer minimalen Sättigung  $q_r(S_r) = 0$  und es gilt  $q_r(\mathcal{P}_-^+(S_\ell)) > 0$ .

Das bedeutet, dass die Differenz der Flüsse  $\mathcal{Q} : [\mathcal{P}_+^-(S_r), S_\ell] \rightarrow \mathbb{R}$ , die durch

$$\mathcal{Q}(s) := q_\ell(s) - q_r(\mathcal{P}_-^+(s)) \quad (10.15)$$

definiert ist, eine stetig zunehmende Funktion mit  $\mathcal{Q}(\mathcal{P}_+^-(S_r)) < 0$  und  $\mathcal{Q}(S_\ell) > 0$  ist. Es existiert also ein eindeutiges Lösungspaar  $(S_-, S_+)$ , für welches die Differenz der Flüsse verschwindet und Gleichung (10.11a) gilt. Ein direkter Algorithmus zur Lösung des Problems ist naheliegend: Wähle  $S_- = \mathcal{P}_+^-(S_r)$  und  $S_\ell$ , bestimme die entsprechende Sättigung  $S_+$  mit Gleichung (10.14) und verwende  $S_-, S_+$  als zweite Randbedingung für die Gleichungen (10.12). Durch ein Bisektionsverfahren könnte damit die Nullstelle von  $\mathcal{Q}(s)$  bestimmt werden. Dieses Verfahren ist jedoch ziemlich ineffizient, da in jedem Iterationsschritt das Sättigungsprofil im ganzen Gebiet  $S(\eta)$ ,  $\eta \in [-\infty, \infty]$  bestimmt werden muss, obwohl es zur Beurteilung der Konvergenz des Verfahrens genügt, die Grenzflüsse  $q_-, q_+$  zu kennen.

Es wird hier eine effizientere Methode benutzt, die auch in [Pop 09] verwendet wurde. Dabei werden die monotonen Eigenschaften von  $S$  bezüglich  $\eta \in (\eta_\ell, 0)$  ausgenutzt, wobei  $\eta_\ell = \max\{\eta | S(\eta) = S_\ell\}$  gilt. Daher kann die gewöhnliche Differentialgleichung (10.12a) für  $S = S(\eta)$  in eine gewöhnliche Differentialgleichung für  $\eta = \eta(S)$  transformiert werden. Mit  $S'(\eta) = 1/\eta'(S)$  wird die Gleichung (10.12a) in

$$\frac{\partial}{\partial S} q_\ell(S) = \frac{\eta}{2} \quad \text{für } \underline{s} < S < S_\ell. \quad (10.16)$$

transformiert. Man beachte, dass die Ableitung für  $\eta = 0$  verschwindet. Leitet man diese Gleichung nach der Sättigung  $S$  ab und setzt  $\eta' = D_\ell/q_\ell$  in das Ergebnis ein, dann erhält man eine gewöhnliche Differentialgleichung für  $q_\ell(S)$ , die unabhängig von  $\eta$  ist. Die glei-

- $S_< := \mathcal{P}_+^-(S_r)$ ,  $S_> := S_\ell$
- **while**  $S_> - S_< > \epsilon_{\text{tol}}$  **do**
  - $\underline{s} = (S_> + S_<)/2$
  - **Solve eq.** (10.17a)  $\Rightarrow q_\ell(\underline{s})$
  - $\bar{s} = \mathcal{P}_-^+(\underline{s})$
  - **Solve eq.** (10.17b)  $\Rightarrow q_r(\bar{s})$
  - **if**  $Q(\underline{s}) > 0$ :  $S_< = \underline{s}$
  - **if**  $Q(\underline{s}) < 0$ :  $S_> = \underline{s}$
- $S_- = \underline{s}$ ,  $S_+ = \mathcal{P}_-^+(\underline{s})$
- **obtain**  $S(\eta)$  **by inverting eq.** (10.18)

**Abbildung 10.1:** Der iterative Algorithmus in einer Pseudoprogrammiersprache. Dabei bezeichnet  $\epsilon_{\text{tol}}$  die gewünschte Genauigkeit.

chen Argumente können analog für  $\eta > 0$  angebracht werden, so dass schließlich die beiden Randwertprobleme

$$\begin{cases} q_\ell(S) \frac{d^2}{dS^2} q_\ell(S) = \frac{1}{2} D_\ell(S), & \text{für } \underline{s} < S < S_\ell, \\ \frac{d}{dS} q_\ell(\underline{s}) = 0, & q_\ell(S_\ell) = 0 \end{cases} \quad (10.17a)$$

und

$$\begin{cases} q_r(S) \frac{d^2}{dS^2} q_r(S) = \frac{1}{2} D_r(S), & \text{für } S_r < S < \bar{s}, \\ \frac{d}{dS} q_r(\bar{s}) = 0, & q_r(S_r) = 0, \end{cases} \quad (10.17b)$$

die durch Gleichung (10.11) gekoppelt sind, gelöst werden müssen. Durch die Kopplung sind allerdings  $\underline{s}, \bar{s}$  ein Teil der Lösung, so dass die Lösung nur iterativ bestimmt werden kann.

Sind schließlich  $q_r, q_\ell$  bestimmt, so kann die Inverse des Sättigungsprofils mit Gleichung (10.16) und deren rechtsseitigen Entsprechung als

$$\eta(S) = \begin{cases} 2 \frac{d}{dS} q_r(S) & \text{für } S_r < S < S_+, \\ 2 \frac{d}{dS} q_\ell(S) & \text{für } S_- < S < S_\ell \end{cases} \quad (10.18)$$

bestimmt werden. Der Algorithmus ist in Abbildung 10.1 in einer Pseudoprogrammiersprache zusammengefasst.

## 10.3 Implementierung

Der implementierte Algorithmus unterscheidet sich von den Algorithmen aus [Pop 09] und [Phil 91] an zwei Stellen. Die hier verwendete Kapillardrucksättigungsbeziehung liegt in algebraischer Form vor, wohingegen sie in [Pop 09] als gewöhnliche Differentialgleichung vorliegt. Obwohl die hier verwendete Kapillardrucksättigungsbeziehung prinzipiell auch analytisch invertierbar ist, wird ein beliebig genau angepasstes, stückweise interpoliertes Polynom numerisch invertiert. Außerdem wird ein implizites Finite-Differenz-Verfahren zusammen mit einem Newton-Raphson<sup>1</sup>-Schema verwendet, um die Randwertprobleme aus Gleichung (10.17) zu lösen. Die Implementierung dieses Verfahrens wurde von Oliver Hönig durchgeführt und ist etwas aufwendiger als das in [Pop 09] verwendete Schießverfahren (siehe Kapitel B.1.2). Der Mehraufwand zahlt sich jedoch durch eine deutlich schnellere Konvergenz aus. Darüber hinaus werden die Neumann-Randbedingungen bei  $S_-$ ,  $S_+$  direkt berücksichtigt. Damit ist die Lösung der verwendeten Methode an diesen Rändern prinzipiell genauer als eine, die mit dem Schießverfahren berechnet wurde.

## 10.4 Beispiele

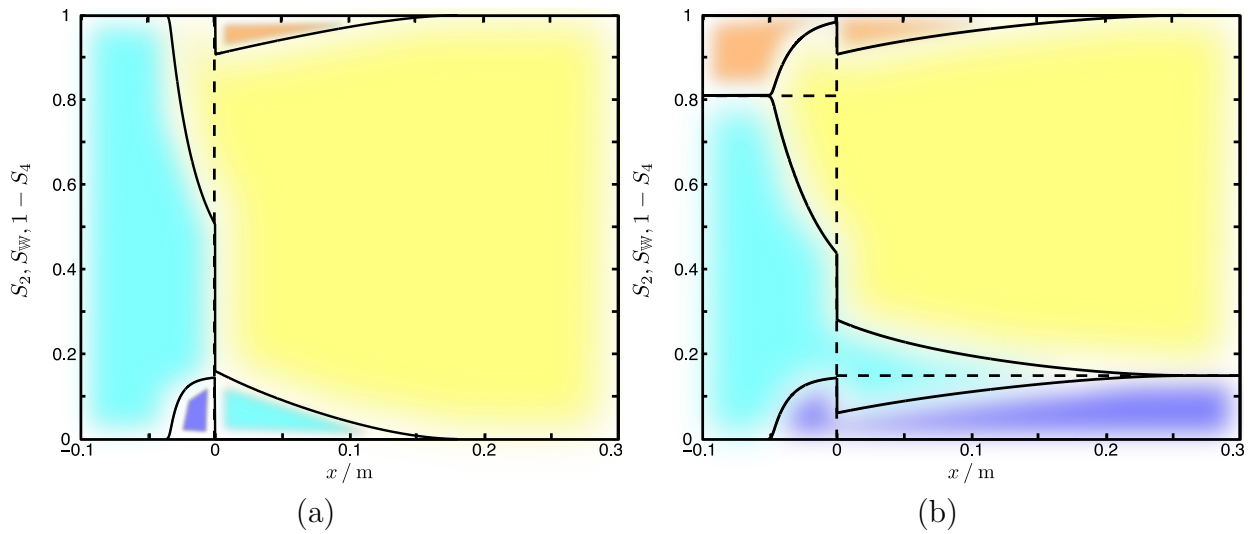
Für die Berechnung von Lösungen werden dieselben Parameter wie für das McWhorter-Sunada-Problem gewählt. Sie sind dort in Tabelle 9.1 zusammengefasst. Umverteilungsprofile werden für zwei unterschiedliche Anfangsbedingungen gezeigt, die in Tabelle 10.1 aufgelistet sind. Eine primäre Umverteilung besteht aus einer primären Entwässerung auf der linken

Umverteilung	$S_\ell$	$S_{2\ell}$	$S_{4\ell}$	$S_r$	$S_{2r}$	$S_{4r}$
primär	1	0	0	0	0	0
sekundär	$1 - S_{\odot\text{im}}$	0	$S_{\odot\text{im}}$	$S_{\text{W dr}}$	$S_{\text{W dr}}$	0

**Tabelle 10.1:** Anfangsbedingungen für das Philip-Problem

Seite und einer primären Bewässerung auf der rechten Seite. Eine sekundäre Umverteilung besteht aus einer sekundären Entwässerung auf der linken Seite und einer sekundären Bewässerung auf der rechten Seite. Die Lösungen werden nicht gegen die Ähnlichkeitsvariable  $\eta = xt^{-1/2}$  aufgetragen, sondern gegen die Raumvariable  $x$  zum Zeitpunkt  $t = 1000$  s, um ein Gefühl für realistische Raum- und Zeitskalen zu vermitteln. Charakteristische Werte der Lösung sind in Tabelle 10.2 zusammengefasst.

<sup>1</sup>Joseph Raphson (1648-1715), englischer Mathematiker



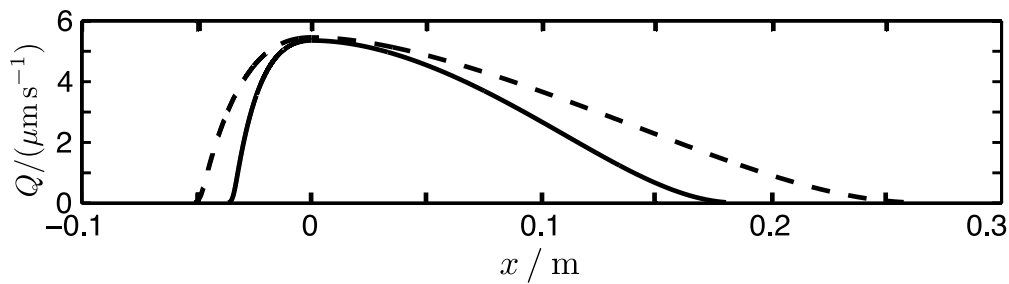
**Abbildung 10.2:** Sättigungsprofile  $S_2(x), S(x), 1 - S_4(x)$  für eine primäre Umverteilung nach Philip in Abbildung (a) und eine sekundäre Umverteilung nach Philip in Abbildung (b). Durchgezogene Kurven zeigen Profile zum Zeitpunkt  $t = 1000$  s und gestrichelte Kurven die Anfangsbedingungen. Um die Interpretation der Abbildung zu erleichtern, wurden die Sättigungen zum Zeitpunkt  $t = 1000$  s farblich hinterlegt. Hellblau steht für perkolierendes Wasser  $S_1$ , dunkelblau für nichtperkolierendes Wasser  $S_2$ , gelb für perkolierendes Öl  $S_3$  und orange für nichtperkolierendes Öl  $S_4$ .

Abbildung 10.2a zeigt Sättigungsprofile  $S_2(x), S(x), 1 - S_4(x)$  einer primären Umverteilung. Das Wasser wird durch Kapillarkräfte in die rechte Hälfte des Mediums gesaugt. Dabei wird dort bei der Verdrängung des Öls nichtperkolierendes Öl produziert. Das verdrängte Öl dringt in die linke Hälfte des Mediums ein, sodass dort nichtperkolierendes Wasser produziert wird. An der Grenze zwischen Be- und Entwässerung bei  $x = 0$  entsteht ein Sättigungssprung, der dort theoretisch für alle Zeit stabil bleibt. In der rechten Hälfte des Mediums wird kein nichtperkolierendes Wasser produziert, da die Wassersättigung dort zunimmt. Ebenso wird in der linken Seite des Mediums kein nichtperkolierendes Öl produziert, da die Ölsättigung dort zunimmt.

Abbildung 10.2b zeigt Sättigungsprofile  $S_2(x), S(x), 1 - S_4(x)$  einer sekundären Umvertei-

Umverteilung	Primär		Sekundär	
	-	+	-	+
$S_i$	0.506	0.161	0.438	0.281
$S_{2i}$	0.145	0	0.145	0.062
$S_{4i}$	0	0.092	0.016	0.092

**Tabelle 10.2:** Werte für den links- und rechtsseitigen Limes der Sättigungen für primäre und sekundäre Umverteilung



**Abbildung 10.3:** Profile des Volumenstroms zum Zeitpunkt  $t = 1000$  s für das Umverteilungsproblem nach Philip. Die durchgezogene Kurve zeigt den Volumenstrom bei einer primären Umverteilung und die gestrichelt Kurve zeigt den Strom bei einer sekundären Umverteilung.

lung. Das Wasser wird durch Kapillarkräfte in die rechte Hälfte des Mediums gesaugt. Dabei wird bei der Verdrängung des Öls dort nichtperkolierendes Öl produziert. Das verdrängte Öl dringt in die linke Hälfte des Mediums ein, sodass dort nichtperkolierendes Wasser produziert wird. An der Grenze zwischen Be- und Entwässerung bei  $x = 0$  entsteht ein Sättigungssprung, der dort theoretisch für alle Zeit stabil bleibt. Da in der rechten Hälfte zu Beginn des Experimentes nichtperkolierendes Wasser vorhanden ist, kann sich das eindringende perkolierende Wasser mit einem Teil des nichtperkolierenden Wassers vereinigen und die Sättigung  $S_2$  nimmt ab. Ebenso vereinigt sich das vorhandene nichtperkolierende Öl teilweise mit dem eindringenden perkolierenden Öl in der linken Hälfte, so dass dort die Sättigung  $S_4$  abnimmt.

Ein Vergleich der Profile der primären und sekundären Umverteilung zeigt, dass die Geschwindigkeit der Umverteilung durch die nichtperkolierenden Phasen nur geringfügig verändert wird. Die Präsenz der nichtperkolierenden Phasen erleichtert die Umverteilung ein wenig. Der Sättigungssprung bei  $x = 0$  unterscheidet sich jedoch deutlich. Die Sprungstelle in  $S$  bei  $x = 0$  wurde auch von Philip [Phil 91] und Pop et al [Pop 09] beschrieben. Ein Vergleich von primären und sekundären Prozessen wurde dort jedoch nicht durchgeführt.

Abbildung 10.3 zeigt Flussprofile für das Wasser für beide Umverteilungsprobleme aus Abbildung 10.2. Der Fluss ist am größten an der Stelle  $x = 0$  und verschwindet bei  $|x| \rightarrow \infty$ . Es wird hier noch deutlicher sichtbar als in Abbildung 10.2, dass die Umverteilung für sekundäre Prozesse geringfügig schneller stattfindet.

## **Teil III**

# **Numerische Algorithmen**

In diesem Teil der Dissertation werden die entwickelten numerischen Algorithmen zur Lösung der nichtlinearen, gekoppelten partiellen Differentialgleichungen des Modells und seinen Näherungen vorgestellt und ihre Implementierungen diskutiert. Es wurden vier unterschiedliche Algorithmen entwickelt. Die Entwicklung unterschiedlicher Algorithmen hat zum einen historische Gründe, da ein besseres Verständnis der Gleichungen bessere Algorithmen ermöglichte. Zum anderen wurden Algorithmen an Näherungen angepasst. Der Algorithmus **AMG9** wird in Kapitel 11 vorgestellt und löst das vollständige Modell. Teile dieses Kapitels sind in [Hilf 10, Dost 10d] veröffentlicht. Die übrigen drei Algorithmen unterscheiden sich in den angenommenen Näherungen, der Geschwindigkeit, der Erweiterbarkeit und der Präzision. Dem in Kapitel 14 vorgestellte Algorithmus **FImPSSS** liegen die Gleichungen mit den wenigsten Näherungen zugrunde. Allerdings ist er im Vergleich zu den anderen beiden Algorithmen **SimBL** und **AMG3+1** langsam. Dies begrenzt die mögliche Präzision und eine mögliche Erweiterung auf mehrere Dimensionen. Dem in Kapitel 12 vorgestellten **AMG3+1** liegt die Näherung von immobilen nichtperkolierenden Phasen zugrunde. Wie **AMG9** verwendet er den Löser [Blom 94] mit adaptivem mobilem Gitter und entsprechender möglicher Genauigkeit. Allerdings ist eine Erweiterbarkeit auf mehrere Dimensionen unter anderem deshalb nicht möglich, da der Löser nur eine Raumdimension ermöglicht. Dem letzten Algorithmus **SimBL** liegt ebenfalls die Näherung mit immobilen nichtperkolierenden Phasen zugrunde. Allerdings werden bei ihm zusätzlich Kapillar- und Grenzflächenterme vernachlässigt. Der Algorithmus wird in Kapitel 13 vorgestellt. Er ist ein Godunov-Löser und basiert auf der in Kapitel 6, 7 und 8 vorgestellten Lösung des Riemann-Problems. Er ist schnell, präzise und erweiterbar und kann als Baustein für Algorithmen für mehrere Dimensionen und komplexere Modellnäherungen dienen. Die wichtigsten Merkmale der Algorithmen sind zum Vergleich in nebenstehender Übersicht zusammengefasst.



	Merkmale	Vorteile	Nachteile
AMG9	<ul style="list-style-type: none"> <li>• 9 partielle Differentialgleichungen</li> <li>• Primärvariablen: <math>S_1, S_2, S_3, S_4, v_1, v_2, v_3, v_4, P_1</math></li> <li>• Vollständiger Gleichungssatz</li> <li>• Geschlossene Säule</li> <li>• Homogene Anfangsbedingungen</li> </ul>	<ul style="list-style-type: none"> <li>• Diskretisierung erfolgt automatisch</li> <li>• Kein Vorwissen über das Gleichungssystem nötig</li> </ul>	<ul style="list-style-type: none"> <li>• Beschränkt auf kleinen Parameter-raumausschnitt</li> <li>• Beschränkt auf homogene Anfangsbedingungen</li> <li>• Beschränkt auf geschlossene Säule</li> <li>• Nicht erweiterbar</li> <li>• Langsam</li> </ul>
AMG3+1	<ul style="list-style-type: none"> <li>• 4 partielle Differentialgleichungen</li> <li>• Primärvariablen: <math>S_{\text{w}}, S_2, S_4, \sigma</math></li> <li>• Immobiler nichtperkolierender Phase</li> <li>• Reduzierte Nichtlinearität durch künstliche Gleichung</li> <li>• Advective und diffusive Flüsse</li> <li>• Fluss-, Dirichlet- und Neumann-Randbedingungen</li> <li>• Beliebige Anfangsbedingungen</li> </ul>	<ul style="list-style-type: none"> <li>• Diskretisierung erfolgt automatisch</li> <li>• Kein Vorwissen über das Gleichungssystem nötig</li> <li>• Hohe Genauigkeit möglich</li> </ul>	<ul style="list-style-type: none"> <li>• Nicht erweiterbar</li> <li>• Künstliche Gleichung nötig</li> <li>• Gelegentliches Versagen (nicht in allen Aspekten verstanden)</li> </ul>
SimBL	<ul style="list-style-type: none"> <li>• 1 partielle Differentialgleichung und 2 algebraische Gleichungen</li> <li>• Primärvariable: <math>S_{\text{w}}</math></li> <li>• Hilfsvariablen: <math>S_2, S_4</math></li> <li>• Immobiler nichtperkolierender Phase</li> <li>• Advective Flüsse</li> <li>• Fluss- und Nullgradientenextrapolationsrandbedingungen</li> <li>• Beliebige Anfangsbedingungen</li> <li>• Godunov-Löser</li> <li>• Implementiert in CLAWPACK</li> </ul>	<ul style="list-style-type: none"> <li>• Einfach</li> <li>• Kontrolle über alle Diskretisierungsaspekte</li> <li>• Grundbaustein für komplexere Algorithmen</li> </ul>	<ul style="list-style-type: none"> <li>• Erweiterungen sind u.U. nicht in CLAWPACK möglich</li> <li>• Keine Berücksichtigung der Kapillar- und Grenzflächenterme</li> </ul>
FlmPSSS	<ul style="list-style-type: none"> <li>• 4 partielle Differentialgleichungen</li> <li>• Primärvariablen: <math>S_1, S_2, S_3, P_1</math></li> <li>• Vollständiger Gleichungssatz ohne Trägheit</li> <li>• Fluss- und Dirichlet-Randbedingungen, insbesondere auch für den Druck</li> <li>• Advective und diffusive Flüsse</li> <li>• Beliebige Anfangsbedingungen</li> </ul>	<ul style="list-style-type: none"> <li>• Stabilität nur durch Konditionierung der Zeitentwicklungsmatrix beschränkt</li> <li>• Einziger Algorithmus mit Druckrandbedingungen</li> </ul>	<ul style="list-style-type: none"> <li>• Relativ langsam</li> <li>• Viele Regularisierungen nötig</li> </ul>

# 11 AMG9

In diesem Kapitel wird der Algorithmus **AMG9** vorgestellt. Er basiert auf einer FORTRAN-Implementierung eines allgemeinen Löser für partielle Differentialgleichungen, welcher ein adaptives mobiles Gitter für die Raumdiskretisierung verwendet [Zege 92, Blom 94, Dam 06]. Dieser Löser wird zunächst kurz vorgestellt. Im nächsten Unterkapitel werden die Anpassungen der Gleichungen beschrieben, die nötig sind, um die Gleichungen des Modells mit dem Algorithmus lösen zu können. Nachfolgend wird die Implementierung diskutiert. Nach Unterkapiteln über die Anfangs- und Randbedingungen folgt ein Unterkapitel, in welchem Konvergenz und Genauigkeit anhand eines Vergleichs von Lösungen des Algorithmus **AMG9** mit Lösungen des Algorithmus **AMG3+1** überprüft werden. Abschließend werden Vor- und Nachteile des Algorithmus erörtert. Teile dieses Kapitels sind in [Hilf 10, Dost 10d] veröffentlicht.

## 11.1 Überblick über den zugrunde liegenden Löser

Der Algorithmus basiert auf einem Löser für allgemeine Systeme gekoppelter, nichtlinearer partieller Differentialgleichungen [Blom 94, Zege 10]. Die verwendete Notation orientiert sich an der FORTRAN-Implementierung, die in [Blom 94] veröffentlicht wurde. Der Algorithmus verwendet ein adaptiv verzerrtes Gitter, um den Raum durch finite Differenzen zu diskretisieren. Die Zeitintegration wird in dem Algorithmus mit dem “public-domain” Löser DASSL für differentialalgebraische Gleichungen durchgeführt [Petz 83]. Dieser basiert wiederum auf einem impliziten Euler-Schema variabler Ordnung und variabler Zeitschrittgröße.

Der Löser kann allgemein Systeme von  $N_{\text{PDE}}$  nichtlinearen Differentialgleichungen lösen, die sich in der Form

$$C \left( x, t, u, \frac{\partial u}{\partial x} \right) \frac{\partial u}{\partial t} + Q \left( x, t, u, \frac{\partial u}{\partial x} \right) = \frac{\partial}{\partial x} \left[ R \left( x, t, u, \frac{\partial u}{\partial x} \right) \right], \quad (11.1)$$

schreiben lassen, wobei  $C$  eine  $N_{\text{PDE}} \times N_{\text{PDE}}$ -Matrix ist,  $x \in [x_\ell, x_r] \subset \mathbb{R}$ ,  $t > t_0$  gilt und  $u = (u_1, \dots, u_{N_{\text{PDE}}})^T$  der Vektor der  $N_{\text{PDE}}$  Unbekannten ist. Die beiden Vektoren  $Q$  und  $R$  haben  $N_{\text{PDE}}$  Elemente und stehen für Quell- und Flussterme.

Auf den Rändern werden im Algorithmus die Gleichungen

$$B_j(x, t) R_j = \tilde{\Gamma}_j \left( x, t, u, \frac{\partial u}{\partial x}, \frac{\partial u}{\partial t} \right) + \Gamma_j \left( x, t, u, \frac{\partial u}{\partial x} \right), \quad (11.2)$$

mit  $j = 1, \dots, N_{\text{PDE}}$  gelöst, wobei  $R_j$  die  $j$ -te Komponente des Vektors  $R$  ist. Die Funktionen  $R_j$ ,  $B_j$ ,  $\tilde{\Gamma}_j$  und  $\Gamma_j$  werden auf dem linken Rand  $x = x_\ell$  und dem rechten Rand  $x = x_r$  ausgewertet. Die Anfangsbedingungen werden durch

$$u(x, t_0) = u_0(x) \quad (11.3)$$

für  $x \in [x_\ell, x_r]$  angegeben.

Durch die Angabe der Matrix  $C$ , der Vektoren  $Q$ ,  $R$  und der Funktionen  $B_j$ ,  $\tilde{\Gamma}_j$ ,  $\Gamma_j$  und  $u_0$  wird ein Anfangs- und Randwertproblem durch den Benutzer bestimmt. Es können also Systeme partieller Differentialgleichungen gelöst werden, die linear und von erster Ordnung bzgl. der Zeitableitung sind. Räumliche Ableitungen können bis zur zweiten Ordnung gelöst werden. Dabei dürfen Terme erster Ordnung in beliebiger nichtlinearer Form vorkommen. Terme zweiter Ordnung werden hingegen aus der räumlichen Ableitung eines Funktionals  $R$  erzeugt und dürfen daher nur linear vorkommen. Gleichungen vom Typ (11.1) folgen insbesondere aus Bilanz- oder Erhaltungsgleichungen. Es sei an dieser Stelle darauf hingewiesen, dass der Algorithmus theoretisch Matrizen  $C$  mit vollem Rang benötigt. In der Praxis kann es jedoch auch gelingen, Gleichungen zu lösen, bei denen nicht für jede Variable eine zeitliche Ableitung vorkommt. Außer der Problemdefinition muss der Benutzer noch einige numerische Parameter angeben. Der Parameter  $\epsilon_{\text{tol}}$  bestimmt die Genauigkeit der Zeitintegration in DASSL [Petz 83].

Ein Merkmal des Algorithmus ist, dass sich das Gitter automatisch während des Zeitverlaufs an die Dynamik der primären Variablen anpasst. Die Methode dafür basiert auf einem Gleichverteilungsprinzip. Dieses fordert  $\Delta x_i \kappa_i = \text{konstant}$ , wobei  $\kappa_i$  der Funktionswert am  $i$ -ten Gitterpunkt einer Funktion  $\kappa$  der räumlichen Ableitungen des Variablenvektors  $u$  ist. Sie wird Monitorfunktion genannt. Das Gleichverteilungsprinzip sorgt dafür, dass für kleine Werte von  $\kappa$  größere Gitterabstände  $\Delta x_i$  möglich werden, wohingegen größere Werte von  $\kappa$  ein engmaschigeres Gitter erfordern. Damit das Gleichverteilungsprinzip gilt, muss außerdem gewährleistet sein, dass das Integral der Monitorfunktion  $\kappa$  über jede Gitterzelle  $[x_{i-1}, x_i]$  dem Durchschnitt der Monitorfunktion über das ganze Intervall  $[x_\ell, x_r]$  entspricht. Einmal bestimmt, kann das Produkt  $\Delta x_i \kappa_i$  für alle Zeiten  $t \geq t_0$  gleich gewählt werden.

Das reine Gleichverteilungsprinzip, wie es beschrieben wurde, kann in der Implementierung durch das Ausschalten zweier Glättungsparameter  $\tau_{\text{sm}}$  und  $\sigma_{\text{sm}}$  verwendet werden. Details

dazu werden ausführlich in [Blom 94, Dam 06] diskutiert. In den Simulationen wurden diese Parameter jedoch nicht ausgeschaltet, da bekannt ist [Zege 04, Zege 07], dass adaptive Gitter, welche auf diesem einfachen Prinzip basieren, oszillationsanfällig sind und die Gitterpunkte “unregelmäßig” über den Raum verteilt werden. Dies kann, neben dem Verlust von Genauigkeit, auch das Konvergieren des Algorithmus verhindern. In der verwendeten Implementierung wurden daher zwei Glättungsverfahren verwendet, die diese Schwierigkeiten vermeiden. Eines davon glättet in Zeitrichtung. Der dazugehörige Parameter ist  $\tau_{\text{sm}}$ . Für  $\tau_{\text{sm}} > 0$  werden Oszillationen unterbunden. Das andere Verfahren glättet im Raum. Wenn der dazugehörige Parameter  $\sigma_{\text{sm}} > 0$  ist, sorgt dieses Verfahren dafür, dass die Gitterpunkte trotz der Verzerrung “gleichmäßig” über den Raum verteilt sind. Die Glättung im Raum kann mathematisch als zusätzliche Bedingung für die Gitterabstände formuliert werden. Für das Verhältnis der Gitterabstände zweier benachbarter Punkte gilt

$$\frac{\sigma_{\text{sm}}}{\sigma_{\text{sm}} + 1} \leq \frac{\Delta x_{i+1}}{\Delta x_i} \leq \frac{\sigma_{\text{sm}} + 1}{\sigma_{\text{sm}}} \quad (11.4)$$

für alle  $i$  und für alle  $t \geq t_0$ . Typische Parameterwerte sind  $\tau_{\text{sm}} = 0.001 \times t_e$  und  $\sigma_{\text{sm}} = 2$ , wobei  $t_e$  den betrachteten Zeitraum vorgibt.

## 11.2 Anpassung der Gleichungen

Die Gleichungen des Modells (vergleiche Teil I) zeigen nicht die vom Algorithmus geforderte Struktur aus Gleichung (11.1). Es sind einige Umformulierungen nötig, die in diesem Unterkapitel vorgestellt werden. Das Gleichungssystem des Modells lautet für eine Raumdimension

$$\frac{\partial S_1}{\partial t} + \frac{\partial(S_1 v_1)}{\partial x} = \eta_2 \left( \frac{S_2 - S_2^*}{S_{\text{W}}^* - S_{\text{W}}} \right) \frac{\partial S_{\text{W}}}{\partial t}, \quad (11.5a)$$

$$\frac{\partial S_2}{\partial t} + \frac{\partial(S_2 v_2)}{\partial x} = -\eta_2 \left( \frac{S_2 - S_2^*}{S_{\text{W}}^* - S_{\text{W}}} \right) \frac{\partial S_{\text{W}}}{\partial t}, \quad (11.5b)$$

$$\frac{\partial S_3}{\partial t} + \frac{\partial(S_3 v_3)}{\partial x} = \eta_4 \left( \frac{S_4 - S_4^*}{S_{\text{O}}^* - S_{\text{O}}} \right) \frac{\partial S_{\text{O}}}{\partial t}, \quad (11.5c)$$

$$\frac{\partial S_4}{\partial t} + \frac{\partial(S_4 v_4)}{\partial x} = -\eta_4 \left( \frac{S_4 - S_4^*}{S_{\text{O}}^* - S_{\text{O}}} \right) \frac{\partial S_{\text{O}}}{\partial t}, \quad (11.5d)$$

$$\varrho_{\mathbb{W}} \frac{D^1}{Dt} v_1 + \frac{\partial P_1}{\partial x} - \varrho_{\mathbb{W}} g \sin \vartheta = \sum_{j=1}^5 \frac{R_{1j}}{\phi S_1} (v_j - v_1) - \frac{\eta_2 v_1 \varrho_{\mathbb{W}}}{S_1} \left( \frac{S_2 - S_2^*}{S_{\mathbb{W}}^* - S_{\mathbb{W}}} \right) \frac{\partial S_{\mathbb{W}}}{\partial t}, \quad (11.5e)$$

$$\begin{aligned} \varrho_{\mathbb{W}} \frac{D^2}{Dt} v_2 + \frac{\partial}{\partial x} (P_3 - \gamma P_2^* S_2^{\gamma-1} - P_a S_1^{-\alpha}) - \varrho_{\mathbb{W}} g \sin \vartheta = \\ \sum_{j=1}^5 \frac{R_{2j}}{\phi S_2} (v_j - v_2) + \frac{\eta_2 v_2 \varrho_{\mathbb{W}}}{S_2} \left( \frac{S_2 - S_2^*}{S_{\mathbb{W}}^* - S_{\mathbb{W}}} \right) \frac{\partial S_{\mathbb{W}}}{\partial t}, \end{aligned} \quad (11.5f)$$

$$\varrho_{\mathbb{O}} \frac{D^3}{Dt} v_3 + \frac{\partial P_3}{\partial x} - \varrho_{\mathbb{O}} g \sin \vartheta = \sum_{j=1}^5 \frac{R_{3j}}{\phi S_3} (v_j - v_3) - \frac{\eta_4 v_3 \varrho_{\mathbb{O}}}{S_3} \left( \frac{S_4 - S_4^*}{S_{\mathbb{W}}^* - S_{\mathbb{W}}} \right) \frac{\partial S_{\mathbb{W}}}{\partial t}, \quad (11.5g)$$

$$\begin{aligned} \varrho_{\mathbb{O}} \frac{D^4}{Dt} v_4 + \frac{\partial}{\partial x} (P_1 - \delta P_4^* S_4^{\delta-1} - P_b S_3^{-\beta}) - \varrho_{\mathbb{W}} g \sin \vartheta = \\ \sum_{j=1}^5 \frac{R_{4j}}{\phi S_4} (v_j - v_4) + \frac{\eta_4 v_4 \varrho_{\mathbb{O}}}{S_4} \left( \frac{S_4 - S_4^*}{S_{\mathbb{W}}^* - S_{\mathbb{W}}} \right) \frac{\partial S_{\mathbb{W}}}{\partial t}, \end{aligned} \quad (11.5h)$$

$$S_1 + S_2 + S_3 + S_4 = 1, \quad (11.5i)$$

$$\frac{\partial P_3}{\partial x} = \frac{\partial P_1}{\partial x} + \frac{1}{2} \frac{\partial}{\partial x} \left( P_a S_1^{-\alpha} - P_b S_3^{-\beta} + \gamma P_2^* S_2^{\gamma-1} - \delta P_4^* S_4^{\delta-1} \right), \quad (11.5j)$$

wobei  $v_5 = 0, R_{12} = 0, R_{21} = 0, R_{34} = 0, R_{43} = 0$  angenommen wird und die Größen  $S_{\mathbb{W}}^*, S_2^*, S_4^*$  entsprechend der Definitionen aus Gleichung (3.7) verwendet werden.

### 11.2.1 Auswahl der primären Variablen

Das System von zehn gekoppelten nichtlinearen partiellen Differentialgleichungen (11.5), kann auf neun Gleichungen reduziert werden, wenn Gleichung (11.5j) in (11.5f) und (11.5g) eingesetzt wird, um  $\partial P_3 / \partial x$  aus den Gleichungen zu eliminieren. Die verbleibenden neun Variablen lauten  $u_1 = S_1, u_2 = S_2, u_3 = S_3, u_4 = S_4, u_5 = v_1, u_6 = v_2, u_7 = v_3, u_8 = v_4, u_9 = P_1$ . Jede Gleichung aus (11.5) wird mit einer Variablen assoziiert. So gilt der Index  $i = 1$  für Gleichung (11.5a) bis zum Index  $i = N_{\text{PDE}} = 9$  für Gleichung (11.5i).

### 11.2.2 Zeitliche Ableitungen

Die zeitlichen Ableitungen  $\partial S_{\mathbb{W}} / \partial t$  und  $\partial S_{\mathbb{O}} / \partial t$  lassen sich auch als räumliche Ableitungen ausdrücken:

$$\frac{\partial S_{\mathbb{W}}}{\partial t} = - \frac{\partial S_{\mathbb{O}}}{\partial t} = - \frac{\partial}{\partial x} (S_1 v_1 + S_2 v_2) \quad (11.6)$$

Die erste Identität folgt direkt aus der Volumenerhaltung  $S_{\mathbb{W}} + S_{\mathbb{O}} = 1$ . Die zweite erhält man durch Addition der Gleichungen (11.5a) und (11.5b). Dadurch können auch die nichtlinear

auftretenden zeitlichen Ableitungen in Gleichung (3.7) behandelt werden. Ebenso wird durch diese analytische Umformung die Implementierung der zeitlichen Ableitungen des Massenaustauschterms aus Gleichung (3.6) erleichtert.

### 11.2.3 Regularisierung der Sättigungen

Es kann insbesondere während der Iterationen zur Lösung von nichtlinearen Gleichungen vorkommen, dass Sättigungen  $S_i < 0$  berechnet werden, da der Löser nicht explizit die physikalische Schranke  $S_i > 0$  berücksichtigt. Um komplexe Zahlen bzw. einen numerischen Überlauf aufgrund zu großer Zahlen, ausgelöst durch negative bzw. kleine Sättigungen, zu vermeiden, müssen die Sättigungen regularisiert werden. Durch Ersetzen aller Sättigungen  $S_i$  mit

$$S_i(x, t) \longrightarrow \max(S_i(x, t), \epsilon_S), \quad (11.7)$$

wobei  $\epsilon_S$  ein Regularisierungsparameter ist, wird genau dies erreicht.

### 11.2.4 Symmetrische Flüsse

Es zeigte sich, dass der Algorithmus deutlich schneller und stabiler ist, wenn die Flüsse möglichst symmetrisch formuliert sind. Daher werden Massenflüsse  $S_i v_i$  einer jeden Phase  $i$  durch

$$S_i v_i = \frac{1}{2} \left( S_i v_i - \sum_{\substack{j=1 \\ j \neq i}}^4 S_j v_j \right) \quad (11.8)$$

an allen auftretenden Stellen ersetzt. Dabei wird verwendet, dass der Gesamtfluss in der geschlossenen Säule verschwindet und daher  $\sum_{i=1}^4 v_i S_i = 0$  gilt.

### 11.2.5 Flüsse als Quellterme

Es zeigte sich, dass der Algorithmus deutlich schneller und stabiler ist, wenn Terme mit räumlichen Ableitungen von erster Ordnung als Quellterme interpretiert und über den Vektor  $Q$  implementiert werden, auch wenn sie physikalische Flüsse darstellen. Für Flüsse ist eigentlich der Vektor  $R$  in (11.1) vorgesehen. Da in Gleichung (11.5) räumliche Ableitungen jedoch nur von maximal erster Ordnung auftreten, können alle Flussterme als Quellterme implementiert werden.

### 11.2.6 Volumenerhaltung und Druckstabilisierung

Die Volumenerhaltung (11.5i) ist eine algebraische Gleichung und wird üblicherweise dazu verwendet, eine Sättigung aus den Gleichungen zu eliminieren und die Anzahl der Gleichungen zu reduzieren [Aziz 79, Helm 97]. Dies wird hier nicht getan, da aufgrund der Annahme, dass die Fluide inkompressibel sind, keine der Gleichungen (11.5) eine Zeitableitung für den Druck  $P_1 = u_9$  liefert und als Druckgleichung identifiziert werden kann. Da Gleichung (11.5i) die einzige Gleichung aus (11.5) ist, die keine Zeitableitung enthält und auch nicht direkt einer Variablen zugeordnet werden kann, ist sie geeignet, mit dem Druck identifiziert zu werden.

Zunächst wird dazu Gleichung (11.5i) in eine partielle Differentialgleichung umgeformt. Die Volumenerhaltung wird nach der Zeit differenziert und lautet

$$\frac{\partial}{\partial t}(S_1 + S_2 + S_3 + S_4) = 0. \quad (11.9)$$

Dieser lokale Term wird über die Summe aller Massenbilanzen (11.5a-11.5d) durch einen Flussgradienten ersetzt, sodass keine zeitlichen Ableitungen mehr auftreten. Man erhält

$$\frac{\partial}{\partial x}(S_1 v_1 + S_2 v_2 + S_3 v_3 + S_4 v_4) = 0. \quad (11.10)$$

Durch Addition eines künstlichen diffusiven Terms für den Druck kann diese Gleichung als Druckgleichung interpretiert werden. Sie lautet damit

$$\frac{\partial}{\partial x}(S_1 v_1 + S_2 v_2 + S_3 v_3 + S_4 v_4) = \epsilon_P \frac{\partial^2 P_1}{\partial x^2}, \quad (11.11)$$

wobei  $\epsilon_P \approx 0$  ein künstlicher numerischer Parameter ist. Ohne eine Zeitableitung für den Druck in dieser Gleichung macht es eigentlich keinen Sinn, von einem diffusiven Term zu sprechen. Zu Beginn der Implementierung wurde zu dieser Gleichung jedoch ein zweiter künstlicher Term  $\propto \partial_t P_1$  addiert. Der dazugehörige Koeffizient kann jedoch ohne Einbußen gleich Null gesetzt werden. Nach der Vermutung des Autors könnten numerische Rundungsfehler dafür sorgen, dass die Matrix  $C$  dennoch vollen Rang hat.

Die Methode, einen Term proportional  $\partial_{xx}^2 P$  zur Divergenz des Geschwindigkeitsfeldes zu addieren, wurde im Zusammenhang mit der inkompressiblen Navier-Stokes-Gleichung entwickelt und untersucht. Sie wird dort “pressure stabilization” oder auch “pressure projection method” genannt. Eine ausführliche Darstellung der Methode findet sich in [Chor 67, Rann 92, Shen 92a]. Hier soll genügen, dass der Einfluss des künstlichen Parameters  $\epsilon_P$  überprüft wurde. Dabei wurde festgestellt, dass er außer der Stabilisierung der Lösung für Werte

$10^{-20} \text{ m}^3 \text{ s kg}^{-1} < \epsilon_p < 10^{-14} \text{ m}^3 \text{ s kg}^{-1}$  keinen Einfluss zeigt.

### 11.3 Implementierung des Modells

Mit der geleisteten Vorarbeit ist es nun möglich, die Gleichungen (11.5) in die Form der Gleichung (11.1) zu bringen und die Größen  $C, Q, R$  anzugeben. Die Zeitentwicklungsmatrix  $C$  ist diagonal und hat die Form

$$C = \text{diag}(1, 1, 1, 1, 1, 1, 1, 1, 0). \quad (11.12)$$

Die Komponenten des Quellvektors  $Q$  für die Massenbilanzen  $i = 1, \dots, 4$  lauten

$$Q_i = \frac{1}{2} \left[ u_i \frac{\partial u_{i+4}}{\partial x} + u_{i+4} \frac{\partial u_i}{\partial x} - \sum_{\substack{j=1 \\ j \neq i}}^4 \left( u_j \frac{\partial u_{j+4}}{\partial x} + u_{j+4} \frac{\partial u_j}{\partial x} \right) \right] - \widetilde{M}_i, \quad (11.13)$$

wobei für  $i = 1$

$$\widetilde{M}_1 = -\eta_2 \frac{u_2 - S_2^* \Theta \left[ -\sum_{i=1}^2 \left( u_i \frac{\partial u_{i+4}}{\partial x} + u_{i+4} \frac{\partial u_i}{\partial x} \right) \right]}{S_{\mathbb{W}}^* \Theta \left[ -\sum_{i=1}^2 \left( u_i \frac{\partial u_{i+4}}{\partial x} + u_{i+4} \frac{\partial u_i}{\partial x} \right) \right] - u_1 - u_2} \sum_{i=1}^2 \left( u_i \frac{\partial u_{i+4}}{\partial x} + u_{i+4} \frac{\partial u_i}{\partial x} \right) \quad (11.14)$$

gilt. Die Terme für  $i = 2, 3, 4$  folgen analog. Die Komponente der Impulsbilanz für perkolierendes Wasser ( $i = 5$ ) lautet

$$Q_5 = \frac{1}{\phi \rho_{\mathbb{W}} u_1} [(R_{15} + R_{12} + R_{13} + R_{14}) u_5 - R_{12} u_6 - R_{13} u_7 - R_{14} u_8] + \frac{u_5}{u_1} \widetilde{M}_1 + \frac{1}{\rho_{\mathbb{W}}} \frac{\partial u_9}{\partial x} + u_5 \frac{\partial u_5}{\partial x} - g \sin \vartheta. \quad (11.15)$$

Die Komponenten des Quellvektors  $Q_i$  der Impulsbilanzen  $i = 6, 7, 8$  ergeben sich analog. Die Komponente des Quellvektors  $Q_9$  der Druckgleichung lautet

$$Q_9 = \sum_{i=1}^4 \left( u_i \frac{\partial u_{i+4}}{\partial x} + u_{i+4} \frac{\partial u_i}{\partial x} \right). \quad (11.16)$$



Der Flussvektor enthält nur den künstlichen numerischen Parameter der Druckgleichung, da dies der einzige Term mit einer räumlichen Ableitung zweiter Ordnung ist. Er lautet daher

$$R = \left( 0, 0, 0, 0, 0, 0, 0, 0, \epsilon_P \frac{\partial u_9}{\partial x} \right)^T. \quad (11.17)$$

## 11.4 Randbedingungen

Mit AMG9 werden gedachte Experimente mit einer homogenen, porösen Säule simuliert, welche impermeable Wände an allen Seiten hat. Damit wird nur ein Satz Randbedingungen benötigt, der direkt im Code implementiert werden kann.

Die Randbedingungen werden durch drei Vektoren  $B$ ,  $\Gamma$  und  $\tilde{\Gamma}$  auf jeder Seite  $x \in \{x_\ell, x_r\}$  spezifiziert. Impermeable Wände erfordern Dirichlet-Randbedingungen mit  $u_i = 0$  für die Geschwindigkeiten ( $i = 5, \dots, 8$ ) auf jeder Seite ( $x \in \{x_\ell, x_r\}$ ), offene Randbedingungen für die Sättigungen  $u_i$  ( $i = 1, \dots, 4$ ) auf beiden Seiten ( $x \in \{x_\ell, x_r\}$ ) und Dirichlet-Randbedingungen für den Druck mit  $u_9 = 0$  auf der linken Seite  $x = x_\ell$  und offene Randbedingungen für den Druck auf der rechten Seite  $x = x_r$ . Eine ausführliche Beschreibung der Modellierung der Ränder wird in Kapitel 15.1.1 gegeben.

Die Randbedingungen werden durch die drei Vektoren wie folgt abgebildet. Die Vektoren  $B$  für die Flussrandbedingungen lauten

$$B(x_\ell, t) = (0, 0, 0, 0, 0, 0, 0, 0, 0)^T, \quad (11.18a)$$

$$B(x_r, t) = (0, 0, 0, 0, 0, 0, 0, 0, 0)^T. \quad (11.18b)$$

Die Vektoren  $\Gamma$  für die Dirichlet- und Neumann-Randbedingungen lauten

$$\Gamma(x_\ell, t, u(x_\ell, t), \partial_x u|_{x=x_\ell}) = (0, 0, 0, 0, u_5(x_\ell, t), u_6(x_\ell, t), u_7(x_\ell, t), u_8(x_\ell, t), u_9(x_\ell, t))^T, \quad (11.19a)$$

$$\Gamma(x_r, t, u(x_r, t), \partial_x u|_{x=x_r}) = (0, 0, 0, 0, u_5(x_r, t), u_6(x_r, t), u_7(x_r, t), u_8(x_r, t), 0)^T. \quad (11.19b)$$

Offene Randbedingungen bedeuten, dass die entsprechenden Gleichungen auf dem Rand gelöst werden. Diese müssen in den Vektoren  $\tilde{\Gamma}$  implementiert werden. Die Komponenten

des Vektors auf der linken Seite lauten

$$\begin{aligned} \tilde{\Gamma}_i(x_\ell, t, u(x_\ell, t), \partial_x u|_{x=x_\ell}, \partial_t u|_{x=x_\ell}) = \\ \frac{\partial u_i}{\partial t} \Big|_{x=x_\ell} + \frac{1}{2} \left[ u_i(x_\ell, t) \frac{\partial u_{i+4}}{\partial x} \Big|_{x=x_\ell} + u_{i+4}(x_\ell, t) \frac{\partial u_i}{\partial x} \Big|_{x=x_\ell} \right. \\ \left. - \sum_{\substack{j=1 \\ j \neq i}}^4 \left( u_j(x_\ell, t) \frac{\partial u_{j+4}}{\partial x} \Big|_{x=x_\ell} + u_{j+4}(x_\ell, t) \frac{\partial u_j}{\partial x} \Big|_{x=x_\ell} \right) \right] - \tilde{M}_i(x_\ell, t) \end{aligned} \quad (11.20a)$$

für die Massenbilanzen der perkolierenden Phasen  $i = 1, 3$ ,

$$\begin{aligned} \tilde{\Gamma}_i(x_\ell, t, u(x_\ell, t), \partial_x u|_{x=x_\ell}, \partial_t u|_{x=x_\ell}) = \\ \frac{\partial u_i}{\partial t} \Big|_{x=x_\ell} + u_i(x_\ell, t) \frac{\partial u_{i+4}}{\partial x} \Big|_{x=x_\ell} + u_{i+4}(x_\ell, t) \frac{\partial u_i}{\partial x} \Big|_{x=x_\ell} + \tilde{M}_{i-1}(x_\ell, t) \end{aligned} \quad (11.20b)$$

für die Massenbilanzen der nichtperkolierenden Phasen  $i = 2, 4$  und

$$\tilde{\Gamma}_i(x_\ell, t, u(x_\ell, t), \partial_x u|_{x=x_\ell}, \partial_t u|_{x=x_\ell}) = 0 \quad (11.20c)$$

für die Impulsbilanzen und die Druckgleichung  $i = 5, \dots, 9$ . Die Komponenten des Vektors auf der rechten Seite lauten

$$\begin{aligned} \tilde{\Gamma}_i(x_r, t, u(x_r, t), \partial_x u|_{x=x_r}, \partial_t u|_{x=x_r}) = \\ \frac{\partial u_i}{\partial t} \Big|_{x=x_r} + \frac{1}{2} \left( u_i(x_r, t) \frac{\partial u_{i+4}}{\partial x} \Big|_{x=x_r} + u_{i+4}(x_r, t) \frac{\partial u_i}{\partial x} \Big|_{x=x_r} \right. \\ \left. - \sum_{\substack{j=1 \\ j \neq i}}^4 \left( u_j(x_r, t) \frac{\partial u_{j+4}}{\partial x} \Big|_{x=x_r} + u_{j+4}(x_r, t) \frac{\partial u_j}{\partial x} \Big|_{x=x_r} \right) \right) - \tilde{M}_i(x_r, t) \end{aligned} \quad (11.21a)$$

für die Massenbilanzen der perkolierenden Phasen  $i = 1, 3$ ,

$$\begin{aligned} \tilde{\Gamma}_i(x_r, t, u(x_r, t), \partial_x u|_{x=x_r}, \partial_t u|_{x=x_r}) = \\ \frac{\partial u_i}{\partial t} \Big|_{x=x_r} + u_i(x_r, t) \frac{\partial u_{i+4}}{\partial x} \Big|_{x=x_r} + u_{i+4}(x_r, t) \frac{\partial u_i}{\partial x} \Big|_{x=x_r} + \tilde{M}_{i-1}(x_r, t) \end{aligned} \quad (11.21b)$$

für die Massenbilanzen der nichtperkolierenden Phasen  $i = 2, 4$ ,

$$\tilde{\Gamma}_i(x_r, t, u(x_r, t), \partial_x u|_{x=x_r}, \partial_t u|_{x=x_r}) = 0 \quad (11.21c)$$

für die Impulsbilanzen  $i = 5, \dots, 8$ , und

$$\begin{aligned} \tilde{\Gamma}_9(x_r, t, u(x_r, t), \partial_x u|_{x=x_r}, \partial_t u|_{x=x_r}) = \\ \sum_{j=1}^4 \left( u_j(x_r, t) \frac{\partial u_{j+4}}{\partial x} \Big|_{x=x_r} + u_{j+4}(x_r, t) \frac{\partial u_j}{\partial x} \Big|_{x=x_r} \right) \end{aligned} \quad (11.21d)$$

für die Druckgleichung  $i = 9$ . Man beachte, dass symmetrische Flüsse (11.8) an den Rändern nur für die perkolierenden Phasen verwendet werden. Dies trägt zu einer weiteren Verringerung von numerischen Oszillationen bei.

## 11.5 Anfangsbedingungen

Der Algorithmus wird verwendet, um gedachte Experimente mit einer homogenen, porösen Säule zu simulieren, welche zu Beginn homogene Sättigungsverteilungen hat und deren Fluide in Ruhe sind. Die Anfangsbedingungen für die Geschwindigkeiten und den Druck sind damit

$$v_i(x, 0) = v_{i0}(x) = u_{i+40}(x) = 0 \quad (11.22a)$$

$$P_1(x, 0) = P_{10}(x) = u_{90}(x) = 0 \quad (11.22b)$$

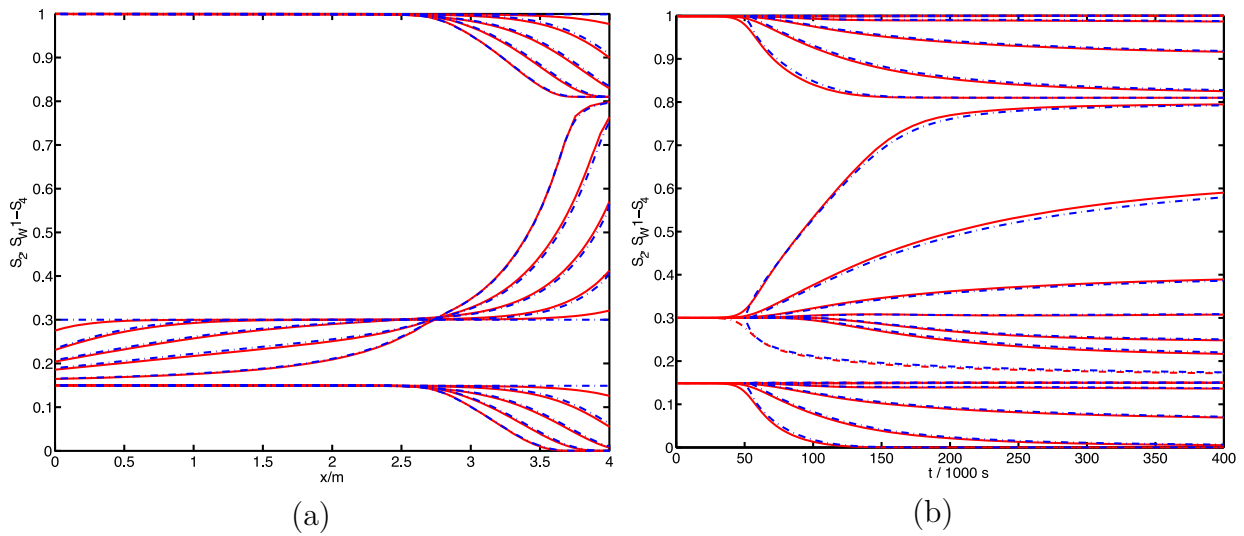
mit  $i = 1, \dots, 4$ . Die Sättigungen unterscheiden sich von Simulation zu Simulation und werden durch jeweils einen Parameter  $S_{i0}$  als

$$S_i(x, 0) = S_{i0}(x) = u_{i0}(x) = S_{i0} \quad (11.22c)$$

mit  $i = 1, \dots, 4$  spezifiziert.

## 11.6 Überprüfung des Algorithmus

Der Algorithmus AMG9 ist der erste Algorithmus, der entwickelt und eingesetzt wurde. Er wurde verwendet, um erste nichtstationäre Lösungen für das Modell zu berechnen. Da zunächst weder analytische Lösungen noch Vergleichslösungen von anderen Lösern vorhanden waren, gestaltete sich eine umfassende Fehleranalyse schwierig. Hinzu kommt, dass durch die Adaptivität des Algorithmus eine Konvergenzanalyse nur beschränkte Aussagekraft hat.



**Abbildung 11.1:** Vergleich von Ergebnissen für das Aufstellen einer Säule aus Kapitel 15, welche mit AMG9 (rot durchgezogene Kurven) und AMG3+1 (blau gestrichpunktete Kurven) berechnet wurden. Abbildung (a) zeigt Sättigungsprofile  $S_2(x)$ ,  $S_W(x)$ ,  $1 - S_4(x)$  im Raum zu unterschiedlichen Zeitpunkten. Abbildung (b) zeigt Sättigungsverläufe  $S_2(t)$ ,  $S_W(t)$ ,  $1 - S_4(t)$  mit der Zeit an unterschiedlichen Stellen.

Gegen später wurden jedoch weitere Algorithmen entwickelt, die mit analytischen Lösungen verglichen wurden und deren Lösungen mit Lösungen von AMG9 verglichen werden können. Ein Vergleich von Lösungen eines Anfangs- und Randwertproblems, welche sowohl mit AMG9 als auch mit AMG3+1 aus Kapitel 12 berechnet wurden, wird im Folgenden präsentiert.

Abbildung 11.1 zeigt einen Vergleich von Ergebnissen für das Aufstellen einer Säule aus Kapitel 15 welche mit AMG9 (rot durchgezogene Kurven) und AMG3+1 (blau gestrichpunktete Kurven) berechnet wurden. Die gewählten numerischen Parameter für die beiden Algorithmen sind in Tabelle 11.1 zusammengefasst.

Die Abbildungen zeigen, wie sich aufgrund der unterschiedlichen Dichten die Fluide in einer geschlossenen Säule umverteilen. Eine ausführliche Diskussion des Experiments wird in Kapitel 15 gegeben. An dieser Stelle ist nur von Bedeutung, dass beide Algorithmen nahezu identische Ergebnisse liefern. Nur zu Beginn des Experiments unterscheiden sich die Sättigungswerte geringfügig. Dies liegt daran, dass sich die Experimente geringfügig unterscheiden. Im Experiment, das mit AMG9 simuliert wurde (rot durchgezogene Kurven), wird die Säule über einen Zeitraum von ca.  $t = 25 \tau_r$  bis ca.  $t = 75 \tau_r$  aufgestellt, wohingegen die Säule für das Experiment, welches mit AMG3+1 simuliert wurde, instantan bei  $t = 50 \tau_r$  aufgestellt wurde.

AMG9		AMG3+1	
Parameter	Wert	Parameter	Wert
$N_{\text{pts}}$	51	$N_{\text{pts}}$	101
$\tau_{\text{sm}}$	5.0	$\tau_{\text{sm}}$	$10^{-5}$
$\sigma_{\text{sm}}$	2.0	$\sigma_{\text{sm}}$	2.0
$\epsilon_{\text{tol}}$	$10^{-5}$	$\epsilon_{\text{tol}}$	$10^{-5}$
$\epsilon_{\text{S}}$	$10^{-5}$	$\epsilon_{\text{S}}$	$10^{-5}$
$\epsilon_{\text{P}}$	$1 \frac{\mu\text{m}^3\text{s}}{\text{kg}}$	$\epsilon_{\sigma}$	$5 \frac{\text{mm}^2}{\text{s}}$
		$\zeta_{\sigma}$	$0.1 \frac{1}{\text{s}}$
		$\epsilon_{\text{np}}$	$0.1 \frac{\text{mm}^2}{\text{s}}$
		$\tau_{\text{st}}$	10 s
		$\epsilon_{\text{di}}$	$10^{-9} \text{s}^{-1}$
		$\epsilon_{\text{eq}}$	$10^{-5}$

**Tabelle 11.1:** Die verwendeten numerischen Parameter für AMG9 und AMG3+1 für die Simulationen aus Abbildung 11.1a.

## 11.7 Vor- und Nachteile von AMG9

Abschließend sollen hier noch einige Vor- und Nachteile des Algorithmus AMG9 diskutiert werden. Des Weiteren wird noch kurz auf mögliche Verbesserungen und Erweiterungen eingegangen.

An Vorzügen ist zunächst zu nennen, dass kein Vorwissen über die Gleichungen bei der Implementierung notwendig war. Die Diskretisierung erfolgt vollkommen automatisch. Es müssen lediglich die Gleichungen auf eine Form, wie sie durch Gleichung (11.1) vorgegeben wird, gebracht werden. Da das Modell nahezu diese Form hat, waren nur einige Regularisierungen und analytische Umformungen nötig, um das *vollständige* Modell numerisch approximativ zu lösen. Dies bedeutet, dass der Algorithmus vier Massenbilanzen, vier Impulsbilanzen und die Volumenerhaltung voll gekoppelt lösen kann. Es sei an dieser Stelle darauf hingewiesen, dass die Verwendung (11.5j) zur Eliminierung von  $\partial_x P_3$  nicht zwingend notwendig war. Es wurde auch eine Variante mit 10 Gleichungen implementiert. Die Leistungsfähigkeit des Algorithmus ist in der Variante mit 9 Gleichungen jedoch deutlich besser. Da der Algorithmus die Gleichungen aus der Modellierung nahezu unverändert lösen kann, ist er insbesondere dazu geeignet, erste Lösungen zu berechnen, wenn Änderungen des Modells erforderlich werden sollten. Da er außerdem alle Phasen komplett symmetrisch behandelt, sollte auch eine Erweiterung oder eine Reduktion der Phasen direkt möglich sein.

Bei den Nachteilen ist vor allem hervorzuheben, dass der Algorithmus sehr beschränkt in mehreren Aspekten ist. Es können nur Anfangs- und Randbedingungen gelöst werden, welche Experimente mit einer auf allen Seiten geschlossenen, homogenen porösen Säule und

homogenen Anfangssättigungsverteilungen modellieren. Der Algorithmus ist auf eine Raumdimension beschränkt. Eine Erweiterung auf mehrere Raumdimensionen ist mit dem zugrunde liegenden Löser nicht möglich. AMG9 ist außerdem auf relativ langsam verlaufende Prozesse beschränkt. Mit anderen Worten: Die Säule kann z.B. nicht schnell aufgestellt bzw. rotiert werden. Im übrigen ist er nicht zuletzt auch wegen der großen Anzahl an gekoppelten Gleichungen relativ langsam.

Die Gründe einiger Schwachstellen sind bisher nicht bekannt. Um diese zu verstehen, wäre jedoch ein tieferes Verständnis des zugrunde liegenden Algorithmus für die adaptiven Gitter und des Zeitintegrators DASSL erforderlich und eine intensive Auseinandersetzung mit der Diskretisierung wäre unvermeidlich. Ist man aber bereit, sich mit der Diskretisierung der Gleichungen direkt auseinander zu setzen, führen einfachere Algorithmen schneller zum gewünschten Ziel. Beispiele dafür sind **SimBL** und **FlmPSSS**, die in Kapitel 13 und 14 vorgestellt werden. Sicherlich könnten die Erkenntnisse über die Gleichungen, welche inzwischen durch analytische Lösungen und Lösungen anderer Algorithmen gewonnen wurden, dabei behilflich sein, diesen Algorithmus zu erweitern und zu verbessern. Allerdings versprechen Antworten zu anderen offenen Fragen, welche im Rahmen dieser Dissertation formuliert werden, einen deutlich größeren wissenschaftlichen Gewinn.

## 12 AMG3+1

In diesem Kapitel wird der Algorithmus **AMG3+1** vorgestellt. Er basiert auf einer FORTRAN-Implementierung eines allgemeinen Löser für partielle Differentialgleichungen, welcher ein adaptives mobiles Gitter für die Raumdiskretisierung verwendet [Zege 92, Blom 94, Dam 06]. Dieser Löser wurde bereits in Kapitel 11.1 vorgestellt. Der Algorithmus **AMG3+1** basiert auf der fraktionalen Flussformulierung des Modells unter der Verwendung der Näherung der immobilen nichtperkolierenden Phasen (vergleiche Kapitel 5.3). Im ersten Unterkapitel wird diskutiert, wie die Gleichungen derart umformuliert werden, dass sie die Form der Gleichung (11.1) haben. Nachfolgend wird die Implementierung diskutiert. Nach weiteren Unterkapiteln über die Anfangs- und Randbedingungen folgt ein Unterkapitel, in welchem Konvergenz und Genauigkeit anhand von Vergleichen von analytischen Lösungen mit Lösungen des Algorithmus **AMG3+1**, sowie eine Parameterstudie der numerischen Parameter durchgeführt wird. Abschließend werden Vor- und Nachteile des Algorithmus erörtert.

### 12.1 Anpassung der Gleichungen

Die Gleichungen des Modells, welches in dieser Dissertation untersucht wird, zeigen in der fraktionalen Flussformulierung mit immobilen, nicht perkolierenden Phasen, und der selbstkonsistenten Schließbedingung nicht die vom Algorithmus geforderte Struktur aus Gleichung (11.1). Es sind einige Umformulierungen nötig, insbesondere die Einführung einer künstlichen Variablen und einer dazugehörigen künstlichen Reaktions- und Diffusionsgleichung, die in diesem Unterkapitel vorgestellt werden.

Das System von Gleichungen in der betrachteten Näherung des Modells lautet für eine Raum-

dimension

$$\phi \frac{\partial S_{\mathbb{W}}}{\partial t} = -q_{\text{tot}}(t) \frac{\partial}{\partial x} f_{\mathbb{W}}(S_{\mathbb{W}}, S_2, S_4) - (\varrho_{\mathbb{W}} - \varrho_{\mathbb{O}}) g \sin \vartheta(t) \frac{\partial}{\partial x} \lambda(S_{\mathbb{W}}, S_2, S_4) - \frac{\partial}{\partial x} \left[ \lambda(S_{\mathbb{W}}, S_2, S_4) \left( \frac{\partial P_c}{\partial S_{\mathbb{W}}} \frac{\partial S_{\mathbb{W}}}{\partial x} + \frac{\partial P_c}{\partial S_2} \frac{\partial S_2}{\partial x} + \frac{\partial P_c}{\partial S_4} \frac{\partial S_4}{\partial x} \right) \right], \quad (12.1a)$$

$$\frac{\partial S_2}{\partial t} = -\eta_2 \left( \frac{S_2 - S_2^*}{S_{\mathbb{W}}^* - S_{\mathbb{W}}} \right) \frac{\partial S_{\mathbb{W}}}{\partial t}, \quad (12.1b)$$

$$\frac{\partial S_4}{\partial t} = -\eta_4 \left( \frac{S_4 - S_4^*}{S_{\mathbb{W}}^* - S_{\mathbb{W}}} \right) \frac{\partial S_{\mathbb{W}}}{\partial t}. \quad (12.1c)$$

Die fraktionale Flussfunktion  $f_{\mathbb{W}}$ , sowie die fraktionale Mobilität  $\lambda$  lauten explizit

$$f_{\mathbb{W}}(S_{\mathbb{W}}, S_2, S_4) = \frac{R_{33} S_1^2 + R_{13} S_1 S_3}{R_{33} S_1^2 + 2R_{13} S_1 S_3 + R_{11} S_3^2}, \quad (12.2a)$$

$$\lambda(S_{\mathbb{W}}, S_2, S_4) = \frac{\phi^2 S_1^2 S_3^2}{R_{33} S_1^2 + 2R_{13} S_1 S_3 + R_{11} S_3^2} \left( \frac{R_{11} R_{33} - R_{13}^2}{R_{11} R_{33} + R_{13}^2} \right), \quad (12.2b)$$

wobei

$$S_1(x, t) = S_{\mathbb{W}}(x, t) - S_2(x, t), \quad (12.3a)$$

$$S_3(x, t) = 1 - S_{\mathbb{W}}(x, t) - S_4(x, t) \quad (12.3b)$$

gilt und die partiellen Ableitungen der Kapillardrucksättigungsbeziehung  $P_c$  bezüglich der Sättigungen  $S_{\mathbb{W}}, S_2, S_4$  durch

$$\frac{\partial P_c}{\partial S_{\mathbb{W}}} = -\frac{1}{2} (\alpha P_a (S_{\mathbb{W}} - S_2)^{-\alpha-1} + \beta P_b (1 - S_{\mathbb{W}} - S_4)^{-\beta-1}), \quad (12.4a)$$

$$\frac{\partial P_c}{\partial S_2} = \frac{1}{2} (\alpha P_a (S_{\mathbb{W}} - S_2)^{-\alpha-1} + \gamma(\gamma - 1) P_2^* S_2^{\gamma-2}), \quad (12.4b)$$

$$\frac{\partial P_c}{\partial S_4} = -\frac{1}{2} (\beta P_b (1 - S_{\mathbb{W}} - S_4)^{-\beta-1} + \delta(\delta - 1) P_4^* S_4^{\delta-2}) \quad (12.4c)$$

gegeben sind. Die Parameterfunktionen  $S_{\mathbb{W}}^*, S_2^*, S_4^*$  sind definiert als

$$S_{\mathbb{W}}^*(\partial_t S_{\mathbb{W}}) = (1 - S_{\mathbb{O} \text{im}}) \Theta(\partial_t S_{\mathbb{W}}) + S_{\mathbb{W} \text{dr}} [1 - \Theta(\partial_t S_{\mathbb{W}})], \quad (12.5a)$$

$$S_2^*(\partial_t S_{\mathbb{W}}) = S_{\mathbb{W} \text{dr}} [1 - \Theta(\partial_t S_{\mathbb{W}})], \quad (12.5b)$$

$$S_4^*(\partial_t S_{\mathbb{W}}) = S_{\mathbb{O} \text{im}} \Theta(\partial_t S_{\mathbb{W}}), \quad (12.5c)$$

wobei  $S_{\mathbb{W} \text{dr}}, S_{\mathbb{O} \text{im}}$  beschränkende Sättigungen für  $S_2, S_4$  sind und  $\Theta(x)$  für die Heaviside-



Sprungfunktion steht. Die Heaviside-Sprungfunktion sorgt für ein nichtlineares Auftreten des zeitlichen Differentialoperators  $\partial/\partial t$ . Damit ist das System von nichtlinearen, gekoppelten, partiellen Differentialgleichungen nicht von der Form (11.1) und kann nur nach Anpassungen und Umformulierungen mit dem adaptiven Löser [Blom 94, Dam 06] gelöst werden.

### 12.1.1 Einführung einer künstlichen Gleichung und einer künstlichen Variablen

Die Parameterfunktionen  $S_{\mathbb{W}}^*$ ,  $S_2^*$ ,  $S_4^*$  sorgen für ein nichtlineares Auftreten des zeitlichen Differentialoperators  $\partial/\partial t$  in den Gleichungen (12.1). Dadurch werden sie zunächst inkompatibel mit dem Löser [Blom 94, Dam 06]. Um dieses Problem zu umgehen, wird eine neue Variable  $\sigma(x, t)$  eingeführt. Die Parameterfunktionen sollen nun nicht mehr von  $\partial_t S_{\mathbb{W}}$  abhängen, sondern von der neuen Variablen  $\sigma(x, t)$ . Die Parameterfunktionen aus den Gleichungen (12.5) lauten damit

$$S_{\mathbb{W}}^*(\sigma) = (1 - S_{\mathbb{O}\text{im}})\Theta(\sigma) + S_{\mathbb{W}\text{dr}}[1 - \Theta(\sigma)], \quad (12.6a)$$

$$S_2^*(\sigma) = S_{\mathbb{W}\text{dr}}[1 - \Theta(\sigma)], \quad (12.6b)$$

$$S_4^*(\sigma) = S_{\mathbb{O}\text{im}}\Theta(\sigma). \quad (12.6c)$$

Mit dieser Vorarbeit benötigt man nun eine (partielle) (Differential-) Gleichung für  $\sigma$ , die  $\sigma(x, t) \approx \partial S_{\mathbb{W}}(x, t)/\partial t$  garantiert. Außerdem soll das neue Gleichungssystem, bestehend aus Gleichungen (12.1) und dieser neuen Gleichung, kompatibel mit dem Algorithmus sein und die Form (11.1) haben. Eine Reaktions-Diffusions-Gleichung der Form

$$\frac{\partial \sigma}{\partial t} = -\zeta_{\sigma} \left( \sigma - \frac{\partial S_{\mathbb{W}}}{\partial t} \right) + \epsilon_{\sigma} \frac{\partial^2 \sigma}{\partial x^2} \quad (12.7)$$

erfüllt diese Aufgabe. Zeitliche Ableitungen treten nun linear und räumliche Ableitung treten mit maximal zweiter Ordnung auf. Damit sind die Gleichungen kompatibel mit Gleichung (11.1). Wie im Folgenden erörtert wird, bewirkt die Gleichung (12.7), dass  $\sigma \approx \partial S_{\mathbb{W}}/\partial t$  für geeignete Parameter  $\zeta_{\sigma} \in \mathbb{R}_+$ ,  $\epsilon_{\sigma} \in \mathbb{R}_+$  gilt.

Der erste Term der rechten Seite sorgt dafür, dass die Variable  $\sigma$  der zeitlichen Ableitung  $\partial S_{\mathbb{W}}/\partial t$  folgt. Der Term sorgt dafür, dass  $\sigma$  in Richtung  $\partial S_{\mathbb{W}}/\partial t$  "zerfällt"<sup>1</sup>, wenn  $\sigma \neq \partial S_{\mathbb{W}}/\partial t$  gilt und verschwindet, wenn  $\sigma = \partial S_{\mathbb{W}}/\partial t$  gilt. Dabei steuert der Parameter  $\zeta_{\sigma}$  die Anpassungsgeschwindigkeit.

<sup>1</sup>Das Verb "zerfallen" wird verwendet, da hier die Anpassungsgeschwindigkeit wie beim radioaktiven Zerfall proportional zum Abstand vom Gleichgewicht ist.  $\zeta_{\sigma}^{-1}$  ist entsprechend eine Halbwertszeit.

Der zweite Term ist ein linearer Diffusionsterm für  $\sigma$ . Er verschmiert steile Sprünge von  $\sigma$  im Raum. Dieser Term ist notwendig, um das Konvergenzverhalten des Algorithmus zu verbessern. Für ein möglichst effizientes Lösen der Gleichungen muss man zwischen Genauigkeit und Konvergenzgeschwindigkeit bei der Wahl der beiden Parameter  $\zeta_\sigma, \epsilon_\sigma$  abwägen. Man erhält die originalen Gleichungen zurück, wenn  $\zeta_\sigma \rightarrow \infty$  und  $\epsilon_\sigma \rightarrow 0$  gilt. Typische verwendete Werte für die Parameter sind  $\zeta_\sigma = \mathcal{O}(1\text{s}^{-1})$  und  $\epsilon_\sigma = \mathcal{O}(10^{-6}\text{m}^2\text{s}^{-1})$ .

### 12.1.2 Auswahl der primären Variablen

Das System (12.1) der drei gekoppelten nichtlinearen partiellen Differentialgleichungen zusammen mit der künstlichen partiellen Differentialgleichung (12.7) enthalten vier Primärvariablen. Diese sind  $u_1 = S_{\text{w}}, u_2 = S_2, u_3 = S_4, u_4 = \sigma$ . Die Gleichungen (12.1) werden von  $i = 1$  für Gleichung (12.1a) bis  $i = 3$  für Gleichung (12.1c) durchnummeriert. Gleichung (12.7) erhält den Index  $i = 4$ .

### 12.1.3 Regularisierung der Sättigungen

Wie bei AMG9 berücksichtigt auch hier der Löser nicht explizit die physikalische Schranke  $S_i > 0$  und es kann bei der numerischen Lösung nichtlinearer Gleichungen vorkommen, dass insbesondere in Zwischenschritten Sättigungen  $S_i < 0$  berechnet werden. Um komplexe Zahlen bzw. einen numerischen Überlauf aufgrund zu großer Zahlen ausgelöst durch negative bzw. kleine Sättigungen zu vermeiden, müssen die Sättigungen regularisiert werden. Durch Ersetzen aller Sättigungen  $S_i$  mit

$$S_i(x, t) \longrightarrow \max(S_i(x, t), \epsilon_S), \quad (12.8)$$

wobei  $\epsilon_S$  ein kleiner Regularisierungsparameter ist, wird genau dies erreicht.

### 12.1.4 Glatter Start

Es zeigt sich, dass der Algorithmus aufgrund der Adaptivität des Gitters nur beschränkte Kräfte zu Beginn der Simulation zulässt. Für beliebige Anfangsbedingungen ist dies nicht gegeben, da insbesondere bei Unstetigkeiten in Sättigungsprofilen unendlich große, diffusive Kräfte wirken. Wenn jedoch zu Beginn überhaupt keine Kräfte wirken, sind sie beschränkt.

Daher werden alle treibenden Terme erst mit Beginn der Simulation durch eine lineare Rampe angeschaltet. In Formeln ausgedrückt lautet das

$$X = \begin{cases} X \frac{t}{\tau_{\text{st}}} & \text{für } t < \tau_{\text{st}}, \\ X & \text{für } t \geq \tau_{\text{st}} \end{cases} \quad (12.9)$$

mit  $X \in \{P_a, P_b, P_2^*, P_4^*, g, q_0\}$ , wobei  $\tau_{\text{st}}$  die Anschaltzeit darstellt. Die Werte für den Parameter sind typischer Weise  $\tau_{\text{st}} \approx 1 - 100 \text{ s.}$

### 12.1.5 Verschobene Grenze zwischen Be- und Entwässerung

Wenn sich an einem Ort der Prozess von Be- nach Entwässerung bzw. von Ent- nach Bewässerung ändert, dann verändern die beschränkenden Sättigungen  $S_{\text{w}}^*$ ,  $S_2^*$ ,  $S_4^*$  aufgrund der Heaviside-Sprungfunktion unstetig ihren Wert. Obwohl dieser Sprung bei kleinen Sättigungsänderungsraten fast keinen Einfluss auf die Sättigungen hat, kann es vorkommen, dass der Algorithmus nicht mehr konvergiert, wenn sich von Zwischenergebnis zu Zwischenergebnis der Newton-Raphson-Iteration lokal die Prozessart ändert. Durch ein Verschieben der Grenze zwischen Be- und Entwässerung von  $\sigma = 0$  nach  $\sigma = \epsilon_{\text{di}}$  oder  $\sigma = -\epsilon_{\text{di}}$  kann dieses Problem behoben werden, ohne die Lösung merklich zu verfälschen. Es werden daher in den Gleichungen (12.6)  $\sigma$  durch  $\sigma + \epsilon_{\text{di}}$  ersetzt, wobei  $\epsilon_{\text{di}}$  der Regularisierungsparameter ist. Die Gleichungen lauten dann

$$S_{\text{w}}^*(\sigma) = (1 - S_{\text{Oim}})\Theta(\sigma + \epsilon_{\text{di}}) + S_{\text{Wdr}}[1 - \Theta(\sigma + \epsilon_{\text{di}})], \quad (12.10a)$$

$$S_2^*(\sigma) = S_{\text{Wdr}}[1 - \Theta(\sigma + \epsilon_{\text{di}})], \quad (12.10b)$$

$$S_4^*(\sigma) = S_{\text{Oim}}\Theta(\sigma + \epsilon_{\text{di}}). \quad (12.10c)$$

### 12.1.6 Regularisierungen im Massenaustauschterm

Einige Komponenten des Massenaustauschterms können Null oder fast Null werden. Dies kann zu numerischen Problemen und Artefakten führen. Um dies zu verhindern, wurden die folgenden Regularisierungen implementiert

$$S_2 = S_2^* \quad \text{für} \quad |S_2 - S_2^*| < \epsilon_{\text{eq}}, \quad (12.11a)$$

$$S_4 = S_4^* \quad \text{für} \quad |S_4 - S_4^*| < \epsilon_{\text{eq}}, \quad (12.11b)$$

$$\sigma = 0 \quad \text{für} \quad |\sigma| < \epsilon_{\text{eq}}, \quad (12.11c)$$

$$S_{\text{w}}^* - S_{\text{w}} \rightarrow \max(|S_{\text{w}}^* - S_{\text{w}}|, \epsilon_{\text{eq}}/2) \text{sign}(S_{\text{w}}^* - S_{\text{w}}). \quad (12.11d)$$

Die Regularisierungen (12.11a,b) verhindern eine Reduktion der Zeitschrittgröße, wenn die Sättigungen der nichtperkolierenden Phasen nahezu ihre beschränkende Sättigung erreicht haben. Die Regularisierung (12.11c) verhindert, dass die verschobene Grenze aus Kapitel 12.1.5 das Ergebnis verfälscht und Regularisierung (12.11d) verhindert eine Division durch Null.

### 12.1.7 Künstliche Diffusion der nichtperkolierenden Phasen

Die Gleichungen (12.1b) und (12.1c) enthalten aufgrund der Immobilität der nichtperkolierenden Phasen keine räumlichen Ableitungen. Dadurch wird der Algorithmus instabil. Dieses Problem kann durch einen künstlichen linearen Term zweiter Ordnung in den Gleichungen (12.1b) und (12.1c) verhindert werden. Allerdings muss darauf geachtet werden, dass diese Diffusion das Ergebnis nicht verfälscht. Die neuen Gleichungen lauten damit

$$\frac{\partial S_2}{\partial t} = -\eta_2 \left( \frac{S_2 - S_2^*}{S_{\text{W}}^* - S_{\text{W}}} \right) \frac{\partial S_{\text{W}}}{\partial t} + \epsilon_{\text{np}} \frac{\partial^2 S_2}{\partial x^2}, \quad (12.12a)$$

$$\frac{\partial S_4}{\partial t} = -\eta_4 \left( \frac{S_4 - S_4^*}{S_{\text{W}}^* - S_{\text{W}}} \right) \frac{\partial S_{\text{W}}}{\partial t} + \epsilon_{\text{np}} \frac{\partial^2 S_4}{\partial x^2}. \quad (12.12b)$$

## 12.2 Implementierung des Modells

Mit dieser Vorarbeit ist es möglich, die Gleichungen (12.1) und (12.7) in die Form der Gleichung (11.1) zu bringen. Die Zeitentwicklungsmatrix  $C$  hat dann die Form

$$C = \begin{pmatrix} \phi & 0 & 0 & 0 \\ \eta_2 \left( \frac{u_2 - S_2^*(u_4)}{S_{\text{W}}^*(u_4) - u_1} \right) & 1 & 0 & 0 \\ \eta_4 \left( \frac{u_4 - S_4^*(u_4)}{S_{\text{W}}^*(u_4) - u_1} \right) & 0 & 1 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 1 \end{pmatrix} \quad (12.13)$$

mit den Regularisierungen (12.11) und  $S_2^*$ ,  $S_4^*$ ,  $S_{\text{W}}^*$  nach den Gleichungen (12.10). Der Flussvektor lautet

$$R = \begin{pmatrix} -q_{\text{W}}(u_1, u_2, u_3) \\ \epsilon_{\text{np}} \frac{\partial u_2}{\partial x} \\ \epsilon_{\text{np}} \frac{\partial u_3}{\partial x} \\ -\zeta_{\sigma} q_{\text{W}}(u_1, u_2, u_3) + \epsilon_{\sigma} \frac{\partial u_4}{\partial x} \end{pmatrix}, \quad (12.14)$$

wobei der Volumenstrom des Wassers durch

$$q_{\mathbb{W}}(u_1, u_2, u_3) = q_{\text{tot}}(t) f_{\mathbb{W}}(u_1, u_2, u_3) + (\rho_{\mathbb{W}} - \rho_{\mathbb{D}}) g \sin \vartheta(t) \lambda(u_1, u_2, u_3) + \lambda(u_1, u_2, u_3) \left( \frac{\partial P_c}{\partial S_{\mathbb{W}}}(u_1, u_2, u_3) \frac{\partial u_1}{\partial x} + \frac{\partial P_c}{\partial S_2}(u_1, u_2, u_3) \frac{\partial u_2}{\partial x} + \frac{\partial P_c}{\partial S_4}(u_1, u_2, u_3) \frac{\partial u_3}{\partial x} \right) \quad (12.15)$$

gegeben ist. Die partiellen Ableitungen aus (12.4) sind dabei Funktionen von  $u_1, u_2, u_3$  und die Regularisierung (12.8) wird auch in diesen Funktionen für jeweils  $S_1 = u_1 - u_2, S_2 = u_2, S_3 = 1 - u_1 - u_3, S_4 = u_3$  verwendet. Der Quellvektor lautet

$$Q = \begin{pmatrix} 0 \\ 0 \\ 0 \\ \zeta_{\sigma} u_4 \end{pmatrix}. \quad (12.16)$$

## 12.3 Randbedingungen

Es wurden drei unterschiedliche Arten von Randbedingungen in AMG3+1 an jeweils beiden Rändern des Gebietes implementiert. Diese können durch die Wahl entsprechender Parameter in der Steuerungsdatei des Algorithmus ausgewählt werden, ohne dass ein erneutes Kompilieren notwendig ist. Die Wahl wird durch binäre Vektoren getroffen. Mit dem Vektor  $\mathcal{F}_{\ell}^{\text{BC}} \in \{0, 1\}^4$  werden Flussrandbedingungen für die Komponenten  $i$  mit  $\mathcal{F}_{\ell}^{\text{BC}}{}_i = 1$  am linken Rand des Gebiets gesetzt. Mit dem Vektor  $\mathcal{F}_r^{\text{BC}} \in \{0, 1\}^4$  werden entsprechend Flussrandbedingungen am rechten Rand gesetzt. Mit dem Vektor  $\mathcal{D}_{\ell}^{\text{BC}} \in \{0, 1\}^4$  werden Dirichlet-Randbedingungen am linken Rand und mit  $\mathcal{D}_r^{\text{BC}} \in \{0, 1\}^4$  am rechten Rand gewählt. Mit den Vektoren  $\mathcal{N}_{\ell}^{\text{BC}} \in \{0, 1\}^4$  und  $\mathcal{N}_r^{\text{BC}} \in \{0, 1\}^4$  werden Neumann-Randbedingungen am linken und rechten Rand gesetzt. Die Randwerte werden durch zwei weitere Vektoren  $\mathcal{V}_{\ell}^{\text{BC}} \in \mathbb{R}^4, \mathcal{V}_r^{\text{BC}} \in \mathbb{R}^4$  an den jeweiligen Rändern festgelegt.

Im zugrunde liegenden Löser werden die Randbedingungen durch drei Vektoren  $B, \Gamma$  und  $\tilde{\Gamma}$  auf jeder Seite  $x \in (x_{\ell}, x_r)$  spezifiziert. Unter Verwendung der oben definierten Vektoren lauten diese

$$B(x_{\ell}, t) = \mathcal{F}_{\ell}^{\text{BC}}, \quad (12.17a)$$

$$B(x_r, t) = \mathcal{F}_r^{\text{BC}} \quad (12.17b)$$

für die Vektoren, die Flussrandbedingungen entsprechen und

$$\Gamma(x_\ell, t, u(x_\ell, t), \partial_x u|_{x=x_\ell}) = \mathcal{D}_\ell^{\text{BC}} \cdot \mathbf{1} \cdot u^T(x_\ell, t) + \mathcal{N}_\ell^{\text{BC}} \cdot \mathbf{1} \cdot \partial_x u^T|_{x=x_\ell} + \mathcal{V}_\ell^{\text{BC}}, \quad (12.18a)$$

$$\Gamma(x_r, t, u(x_r, t), \partial_x u|_{x=x_r}) = \mathcal{D}_r^{\text{BC}} \cdot \mathbf{1} \cdot u^T(x_\ell, t) + \mathcal{N}_r^{\text{BC}} \cdot \mathbf{1} \cdot \partial_x u^T|_{x=x_\ell} + \mathcal{V}_r^{\text{BC}} \quad (12.18b)$$

für die Vektoren, welche Dirichlet- und Neumann-Randbedingungen ermöglichen. Die Möglichkeit des adaptiven Löser, partielle Differentialgleichungen erster Ordnung auf dem Rand zu lösen, wird in AMG3+1 nicht verwendet. Daher werden die entsprechenden Vektoren identisch Null gesetzt und lauten

$$\tilde{\Gamma}(x_\ell, t, u(x_\ell, t), \partial_x u|_{x=x_\ell}, \partial_t u|_x) = 0, \quad (12.19a)$$

$$\tilde{\Gamma}(x_r, t, u(x_r, t), \partial_x u|_{x=x_r}, \partial_t u|_x) = 0. \quad (12.19b)$$

Die Randbedingungen für die vierte künstliche Gleichung sind im Allgemeinen nicht durch das Experiment vorgegeben. Sie sollten so gewählt werden, dass sie die Ergebnisse nicht verfälschen. Stabilität und Schnelligkeit werden dabei meist durch eine geringere Genauigkeit bzw. Korrektheit erkauft. Dirichlet-Randbedingungen auf der einen Seite und Neumann-Randbedingungen auf der anderen Seite der Säule mit jeweils dem Wert Null stellen in den meisten Fällen eine geeignete Wahl dar. Damit lauten die oben definierten Vektoren

$$\mathcal{F}_\ell^{\text{BC}} = (\cdot, \cdot, \cdot, 0)^T, \quad \mathcal{F}_r^{\text{BC}} = (\cdot, \cdot, \cdot, 0)^T, \quad (12.20a)$$

$$\mathcal{D}_\ell^{\text{BC}} = (\cdot, \cdot, \cdot, 1)^T, \quad \mathcal{D}_r^{\text{BC}} = (\cdot, \cdot, \cdot, 0)^T, \quad (12.20b)$$

$$\mathcal{N}_\ell^{\text{BC}} = (\cdot, \cdot, \cdot, 0)^T, \quad \mathcal{N}_r^{\text{BC}} = (\cdot, \cdot, \cdot, 1)^T, \quad (12.20c)$$

$$\mathcal{V}_\ell^{\text{BC}} = (\cdot, \cdot, \cdot, 0)^T, \quad \mathcal{V}_r^{\text{BC}} = (\cdot, \cdot, \cdot, 0)^T. \quad (12.20d)$$

## 12.4 Anfangsbedingungen

Prinzipiell bestehen durch den Algorithmus keine Beschränkungen an die Anfangsbedingungen. Mit Hinblick auf die durchgeführten Simulationen, welche in Teil IV vorgestellt werden, wurde die Möglichkeit implementiert, die Anfangsbedingungen durch Superposition zweier Tangenshyperbolicusfunktionen zu erzeugen. Die Anfangsbedingungen lauten

$$\begin{aligned} u_i(x, 0) = & u_{\text{b } i}^{\text{IC}} + \frac{1}{2} (1 + \tanh(\kappa_i^{\text{IC}}(x - x_0^{\text{IC}}))) (u_{\text{p } i}^{\text{IC}} - u_{\text{b } i}^{\text{IC}}) \\ & + \frac{1}{2} (1 + \tanh(\kappa_i^{\text{IC}}(x - x_1^{\text{IC}}))) (u_{\text{b } i}^{\text{IC}} - u_{\text{p } i}^{\text{IC}}) \end{aligned} \quad (12.21)$$

für die Komponenten  $i = 1, 2, 3, 4$ . Damit legen fünf Vektoren die Anfangsbedingungen fest. Der Vektor  $u_b^{\text{IC}}$  bestimmt die Werte an den beiden äußeren Rändern und  $u_p^{\text{IC}}$  die Werte des Plateaus in der Mitte. Der Vektor  $x_0^{\text{IC}}$  bestimmt die Position des ersten Übergangs zwischen den konstanten Werten und  $x_1^{\text{IC}}$  die Position des zweiten Übergangs. Die Steilheit des Tangenshyperbolicus ist für beide Funktionen identisch und wird durch  $\kappa^{\text{IC}}$  bestimmt. Wie bei den Randbedingungen werden die Werte der Komponenten  $i = 1, 2, 3$  entsprechend des simulierten Experiments festgelegt. Die vierten Komponenten sind so zu wählen, dass sie die Ergebnisse nicht verfälschen und keine zusätzlichen numerischen Schwierigkeiten bereiten. Hier zeigt sich, dass in den meisten Fällen  $u_4(x, 0) = 0$  eine geeignete Wahl darstellt. Die Vektoren lauten

$$u_b^{\text{IC}} = (\cdot, \cdot, \cdot, 0)^T, \quad (12.22a)$$

$$u_p^{\text{IC}} = (\cdot, \cdot, \cdot, 0)^T, \quad (12.22b)$$

$$\kappa^{\text{IC}} = (\cdot, \cdot, \cdot, 0)^T, \quad (12.22c)$$

$$x_0^{\text{IC}} = (\cdot, \cdot, \cdot, 0)^T, \quad (12.22d)$$

$$x_1^{\text{IC}} = (\cdot, \cdot, \cdot, 0)^T. \quad (12.22e)$$

## 12.5 Überprüfung des Algorithmus

Die Überprüfung von AMG3+1 kann und muss deutlich ausführlicher erfolgen, als dies bei AMG9 der Fall war. Sie muss ausführlicher geschehen, da die verbesserte Leistungsfähigkeit sowohl in Bezug auf Rechenzeit als auch in Bezug auf Anwendungsbreite durch eine größere Zahl an künstlichen und numerischen Parametern erkauft wurde. Im ersten Unterkapitel wird der Einfluss der Parameter anhand eines simulierten Buckley-Leverett-Problems diskutiert. Die Überprüfung kann aber auch deutlich umfangreicher erfolgen da es mit AMG3+1 möglich ist, die Anfangs- und Randwertprobleme, welche in Teil II analytisch gelöst wurden, nachzurechnen. Dieser Vergleich wird im zweiten Unterkapitel durchgeführt.

### 12.5.1 Einfluss der künstlichen und numerischen Parameter

In diesem Kapitel wird der Einfluss der künstlichen und numerischen Parameter anhand der Lösungen eines Buckley Leverett-Problems diskutiert.

Die künstlichen Parameter sind

- die Anschaltzeit  $\tau_{st}$  für den glatten Start,

- die minimalen berücksichtigten Sättigungen  $\epsilon_S$ ,
- der Abstand  $\epsilon_{di}$  der Grenze zwischen Be- und Entwässerung von der echten Grenze  $\sigma = 0$ ,
- die Schwelle  $\epsilon_{eq}$  für dem Abstand, unter welchem zwei Sättigungen als gleich angesehen werden,
- die künstliche Diffusionskonstante  $\epsilon_{np}$  für die nichtperkolierenden Phasen,
- der Reaktionskoeffizient  $\zeta_\sigma$  der künstlichen Reaktions-Diffusionsgleichung (12.7) und
- ihre Diffusionskonstante  $\epsilon_\sigma$ .

Der adaptive Löser funktioniert bei hyperbolischen Problemen nur mit einer Regularisierung. Daher werden Kapillar- und Grenzflächenterme nie ganz vernachlässigt und es wird untersucht, welche Parameterwerte neben der Stabilisierung des Algorithmus, keinen weiteren Einfluss haben. Ebenso wird dargestellt, welchen Einfluss die Anzahl der Gitterpunkte  $N_{pts}$  auf die Lösung hat.

Die Vergleiche werden an der Lösung eines Buckley-Leverett-Problems durchgeführt. Eine detaillierte Beschreibung des Problems ist in Kapitel 7 zu finden. Hier soll die Angabe der Anfangs- und Randbedingungen genügen. Die Vektoren der Anfangsbedingungen lauten

$$u_b^{IC} = (0.2, 0.13, 0.02, 0)^T, \quad (12.23a)$$

$$u_p^{IC} = (0.7, 0.03, 0.15, 0)^T, \quad (12.23b)$$

$$\kappa^{IC} = (1, 1, 1, 0)^T \times 1000 \text{ m}^{-1}, \quad (12.23c)$$

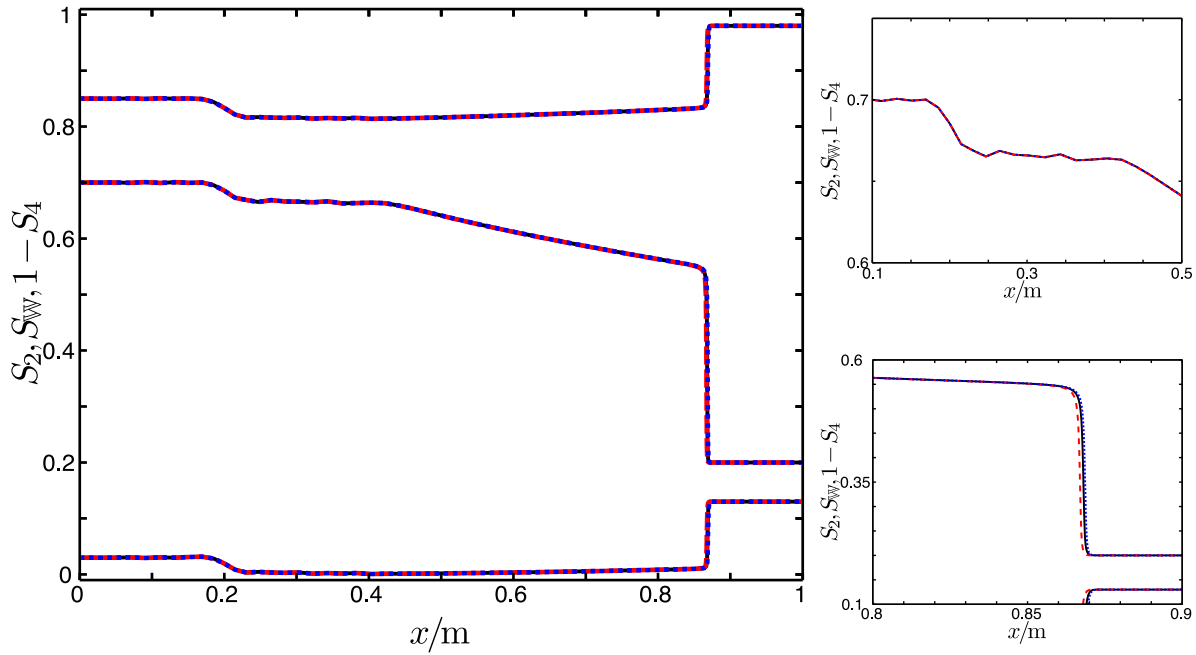
$$x_0^{IC} = (0.2, 0.2, 0.2, 0)^T \text{ m}, \quad (12.23d)$$

$$x_1^{IC} = (-1, -1, -1, 0)^T \text{ m}. \quad (12.23e)$$

Parameter	Wert	Einheit
$\tau_{st}$	10	s
$\epsilon_S$	$10^{-5}$	
$\epsilon_{di}$	$10^{-9}$	$s^{-1}$
$\epsilon_{eq}$	$10^{-5}$	
$\epsilon_{np}$	$10^{-7}$	$\text{m}^2\text{s}^{-1}$
$\epsilon_\sigma$	$10^{-6}$	$\text{m}^2\text{s}^{-1}$
$\zeta_\sigma$	0.1	$s^{-1}$
$N_{pts}$	101	

**Tabelle 12.1:** Werte der künstlichen Parameter für AMG3+1





**Abbildung 12.1:** Vergleich von Sättigungsprofilen für unterschiedliche Anschlagzeiten  $\tau_{st}$ . Schwarze durchgezogene Kurven zeigen Lösungen für den Referenzwert  $\tau_{st} = 10$  s, blau gepunktete Kurven für  $\tau_{st} = 5$  s und rot gestrichelte Kurven für  $\tau_{st} = 20$  s. Die kleinen Abbildungen zeigen vergrößerte Ausschnitte. Die obere Abbildung zeigt das Plateau und die untere die Stoßwelle.

Da nur das Gebiet  $[x_\ell = 0, x_r = 1]$  m untersucht wird, bewirken die Werte  $-1$  m der Komponenten des Vektors  $x_1^{\text{IC}}$ , dass nur eine Sprungstelle in den Anfangsbedingungen auftritt. Die Vektoren der Randbedingungen lauten

$$\mathcal{F}_\ell^{\text{BC}} = (0, 0, 0, 0)^T, \quad \mathcal{F}_r^{\text{BC}} = (0, 0, 0, 0)^T, \quad (12.24a)$$

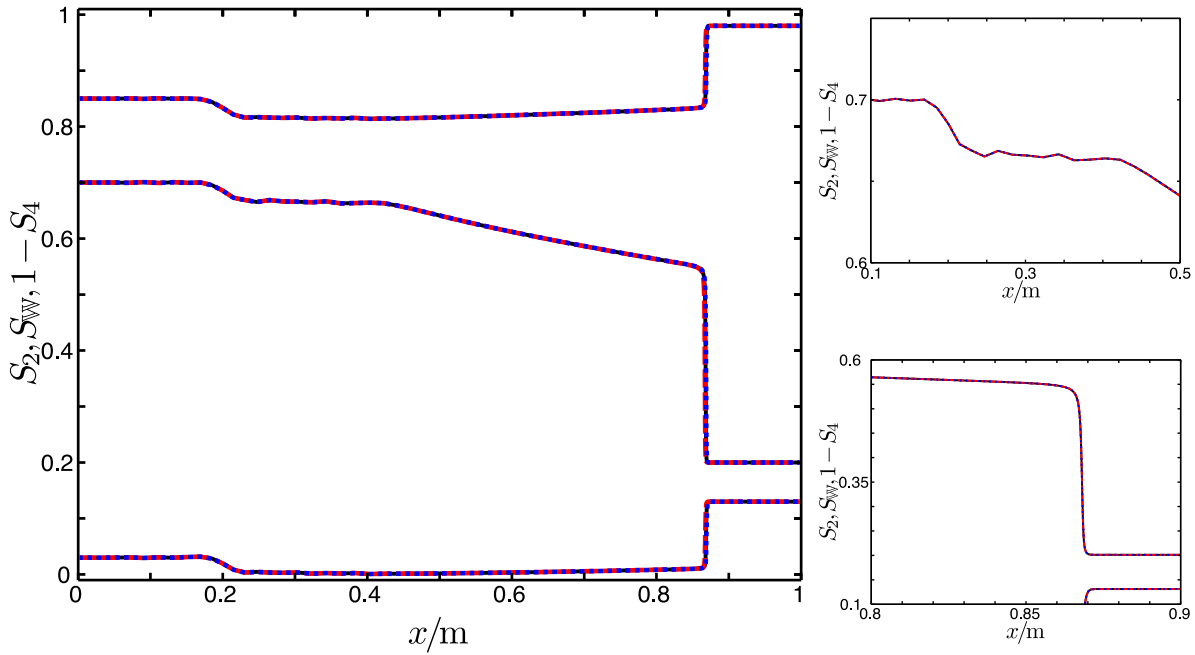
$$\mathcal{D}_\ell^{\text{BC}} = (1, 1, 1, 1)^T, \quad \mathcal{D}_r^{\text{BC}} = (0, 0, 0, 0)^T, \quad (12.24b)$$

$$\mathcal{N}_\ell^{\text{BC}} = (0, 0, 0, 0)^T, \quad \mathcal{N}_r^{\text{BC}} = (1, 1, 1, 1)^T, \quad (12.24c)$$

$$\mathcal{V}_\ell^{\text{BC}} = (0.7, 0.03, 0.15, 0 \text{ s}^{-1})^T, \quad \mathcal{V}_r^{\text{BC}} = (0, 0, 0, 0 \text{ s}^{-1})^T. \quad (12.24d)$$

Der Satz der künstlichen Parameter, an welchem die Vergleiche durchgeführt werden, wird in Tabelle 12.1 angegeben. Es werden geringe Kapillar- und Grenzflächenkräfte angenommen. Die entsprechenden Parameter des Modells sind  $P_a = 1.6$  Pa,  $P_b = 0.025$  Pa,  $P_2^* = 2.5$  Pa,  $P_4^* = 0.4$  Pa und  $\alpha = 0.52$ ,  $\beta = 0.9$ ,  $\gamma = 1.5$ ,  $\delta = 3.5$ . Die weiteren verwendeten Modellparameter sind  $S_{\text{Wdr}} = 0.15$ ,  $S_{\text{Oim}} = 0.19$ ,  $\eta_2 = 4$ ,  $\eta_4 = 3$ ,  $\Lambda_{11} = 0.1 \text{ m}^3 \mu\text{s kg}^{-1}$ ,  $\Lambda_{13} = 0 \text{ m}^3 \text{ s kg}^{-1}$ ,  $\Lambda_{33} = 0.1 \text{ m}^3 \mu\text{s kg}^{-1}$ . Es wird ein Fluss der Stärke  $q_0(t) = 0.1 \text{ mm s}^{-1}$  aufgeprägt, der Winkel zwischen Säule und Gravitation sei  $\vartheta(t) = 0$ , die Porosität des Mediums  $\phi = 0.5$  und die Dichten der beiden Fluide  $\rho_{\text{W}} = 1000 \text{ kg m}^{-3}$  und  $\rho_{\text{O}} = 500 \text{ kg m}^{-3}$ .

Abbildung 12.1 zeigt einen Vergleich von Sättigungsprofilen für unterschiedliche Anschlagzei-

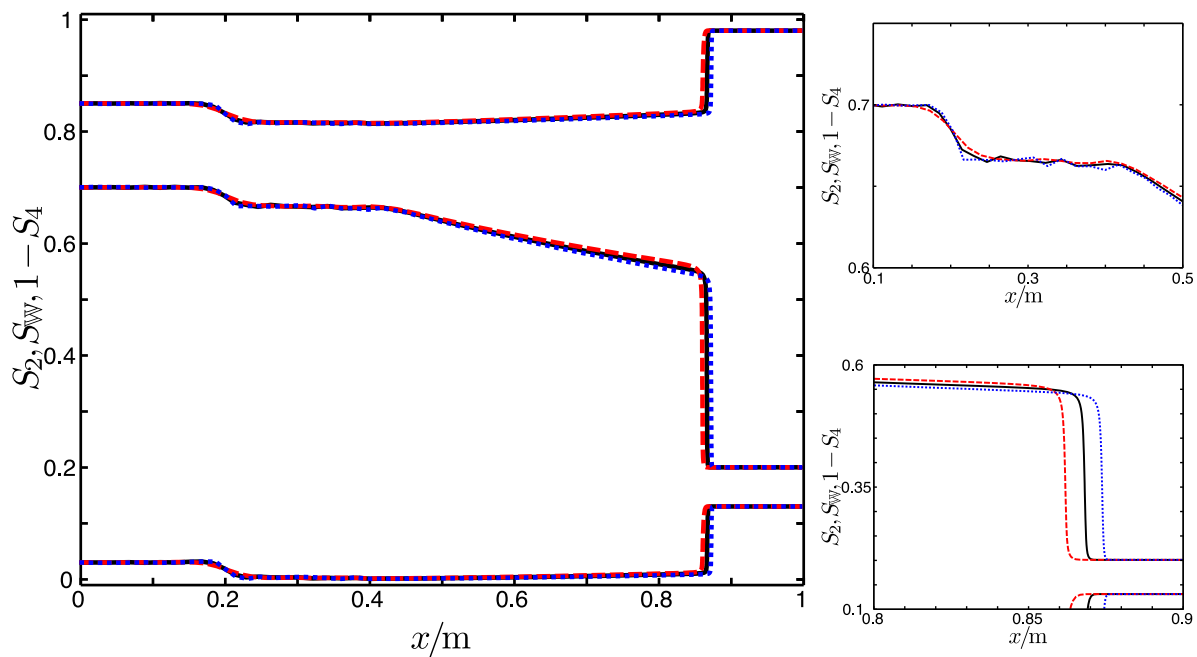


**Abbildung 12.2:** Vergleich von Sättigungsprofilen für unterschiedliche Sättigungsregularisierungen  $\epsilon_S$ . Schwarze durchgezogene Kurven zeigen Lösungen für den Referenzwert  $\epsilon_S = 10^{-5}$ , blau gepunktete Kurven für  $\epsilon_S = 0.5 \times 10^{-5}$  und rot gestrichelte Kurven für  $\epsilon_S = 2 \times 10^{-5}$ . Die kleinen Abbildungen zeigen vergrößerte Ausschnitte. Die obere Abbildung zeigt das Plateau und die untere die Stoßwelle.

ten  $\tau_{st}$ . Ein Einfluss der Anschaltzeit auf die Lösung ist nur im vergrößerten Ausschnitt um die Stoßwelle zu sehen. Wie zu erwarten, bewirkt eine größere Anschaltzeit, dass die Front zum gleichen Zeitpunkt noch nicht so weit in das Medium eingedrungen ist, da die Front dafür effektiv weniger Zeit zur Verfügung hatte.

Abbildung 12.2 zeigt einen Vergleich von Sättigungsprofilen für unterschiedliche Sättigungsregularisierungen  $\epsilon_S$ . Wenig überraschend ist, dass kein Einfluss des Parameters  $\epsilon_S$  zu sehen ist. Schließlich gilt während der Simulation für alle Sättigungen  $S_i$  mit  $i = 1, 2, 3, 4$  die Ungleichung  $S_i(x, t) > \epsilon_S$  für alle  $t > 0, x \in [x_l, x_r]$ .

Ebenso wie die Sättigungsregularisierung haben der Abstand  $\epsilon_{di}$  der Grenze zwischen Be- und Entwässerung von der echten Grenze  $\sigma = 0$  und die Schwelle  $\epsilon_{eq}$  für den Abstand, unter welchem zwei Sättigungen als gleich angesehen werden, keinen Einfluss auf die Lösungen, wenn die Referenzwerte verdoppelt bzw. halbiert werden. Auch für die untersuchten Parameterwerte ist ein Einfluss des Reaktionsparameter  $\zeta_\sigma$  auf die Lösungen nicht zu erkennen. Dies zeigt, dass die Reaktion so schnell im Vergleich zur Dynamik der Sättigungen ist, dass die künstliche Variable  $\sigma$  die Änderungsrate der Wassersättigung  $\partial S_{Ww}/\partial t$  ausreichend genau annähert und  $\sigma \approx \partial S_{Ww}/\partial t$  gilt. Ferner hat der Diffusionskoeffizient  $\epsilon_\sigma$  für die untersuchten Parameterwerte keinen Einfluss auf die Lösung. Dies zeigt, dass die Diffusion in  $\sigma$  so klein

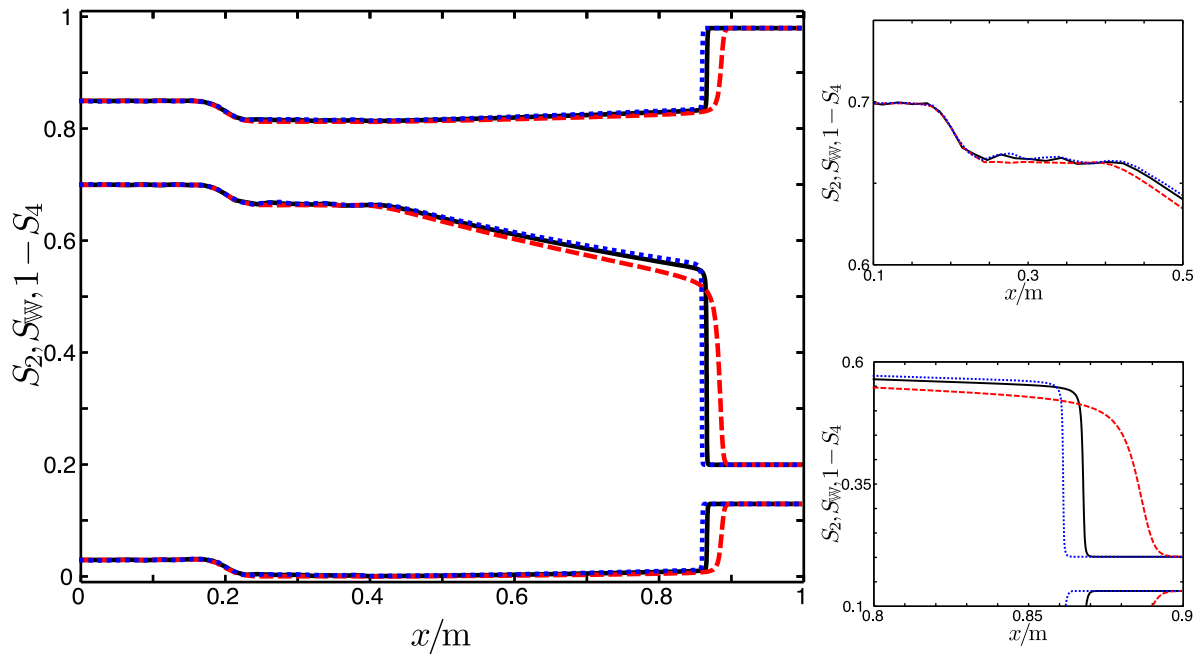


**Abbildung 12.3:** Vergleich von Sättigungsprofilen für unterschiedliche künstliche Diffusionskoeffizienten der nichtperkolierenden Phasen  $\epsilon_{np}$ . Schwarze durchgezogene Kurven zeigen Lösungen für den Referenzwert  $\epsilon_{np} = 0.1 \text{ mm}^2 \text{ s}^{-1}$ , blau gepunktete Kurven für  $\epsilon_{np} = 0.05 \text{ mm}^2 \text{ s}^{-1}$  und rot gestrichelte Kurven für  $\epsilon_{np} = 0.2 \text{ mm}^2 \text{ s}^{-1}$ . Die kleinen Abbildungen zeigen vergrößerte Ausschnitte. Die obere Abbildung zeigt das Plateau und die untere die Stoßwelle.

im Vergleich zur Dynamik der Sättigungen ist, dass in guter Näherung  $\sigma \approx \partial S_W / \partial t$  gilt. Aufgrund des mangelnden Einflusses der Parameter wird für die eben diskutierten Parameter darauf verzichtet, die entsprechenden Abbildungen zu zeigen. Sie sind identisch mit Abbildung 12.2.

Abbildung 12.3 zeigt einen Vergleich von Sättigungsprofilen für unterschiedliche künstliche Diffusionskoeffizienten der nichtperkolierenden Phasen  $\epsilon_{np}$ . Der Einfluss der künstlichen Diffusion ist in allen drei Darstellungen deutlich sichtbar. Eine stärkere Diffusion bewirkt, dass die Oszillationen im Plateau geringer werden und die Stoßwelle etwas langsamer, dafür aber höher ist. Der relative Fehler in der Stoßgeschwindigkeit ist mit ca. 1% vertretbar. Dennoch sollte dieser Parameter sehr vorsichtig gewählt werden, da er sich vor allem auf stationäre Lösungen auswirkt.

Abbildung 12.4 zeigt einen Vergleich von Sättigungsprofilen für unterschiedliche Kapillar- und Grenzflächenterme  $P_a, P_b, P_2^*, P_4^*$ . Bei geringerer Diffusion durch Kapillar- und Grenzflächenterme wird der Sättigungssprung der Stoßwelle höher, die Geschwindigkeit der Stoßwelle wird etwas langsamer und die Oszillationen im Plateau nehmen zu. Das bedeutet, dass für ein rein hyperbolisches Problem mit zunehmender Diffusion die Genauigkeit der Lösung nachlässt, dafür aber die Stabilität zunimmt. So lange also die qualitativen Eigenschaften der



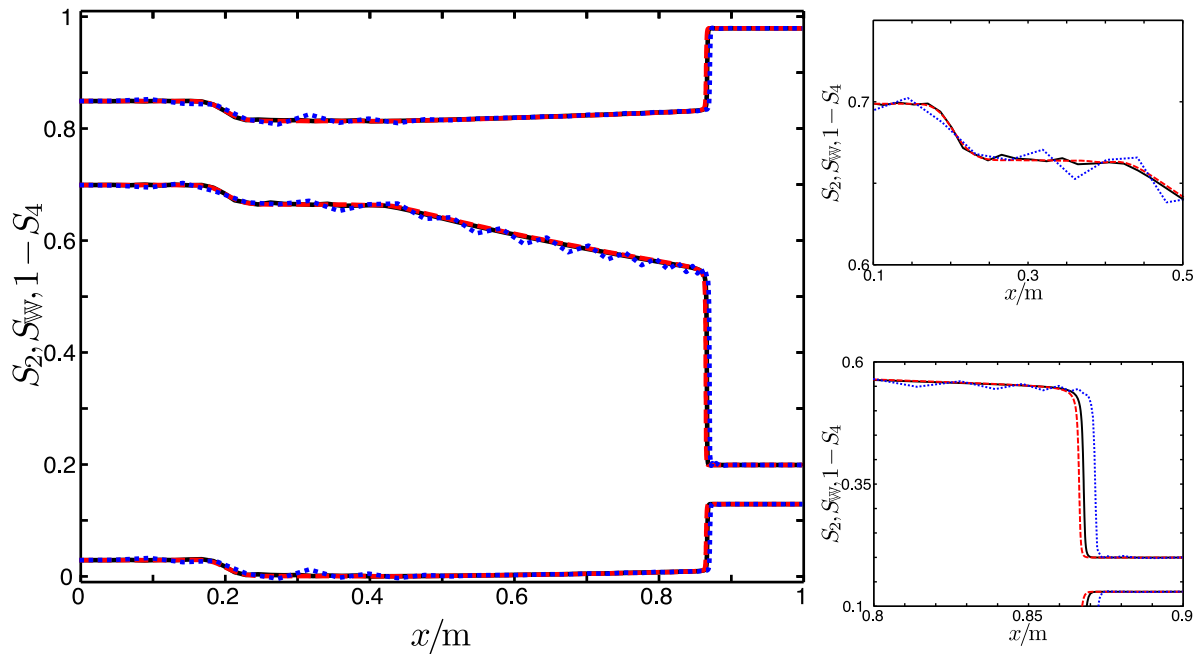
**Abbildung 12.4:** Vergleich von Sättigungsprofilen für unterschiedliche Kapillar- und Grenzflächenenergie  $P_a, P_b, P_2^*, P_4^*$ . Schwarze durchgezogene Kurven zeigen Lösungen für die Referenzwerte  $P_a = 1.6 \text{ Pa}, P_b = 0.025 \text{ Pa}, P_2^* = 2.5 \text{ Pa}, P_4^* = 0.4 \text{ Pa}$ , blau gepunktete Kurven für  $P_a = 0.8 \text{ Pa}, P_b = 0.00125 \text{ Pa}, P_2^* = 1.25 \text{ Pa}, P_4^* = 0.2 \text{ Pa}$  und rot gestrichelte Kurven für  $P_a = 16 \text{ Pa}, P_b = 0.25 \text{ Pa}, P_2^* = 25 \text{ Pa}, P_4^* = 4 \text{ Pa}$ . Die kleinen Abbildungen zeigen vergrößerte Ausschnitte. Die obere Abbildung zeigt das Plateau und die untere die Stoßwelle.

Lösungen und nicht genaue Werte untersucht werden, kann diese Diffusion relativ großzügig verwendet werden.

Abbildung 12.5 zeigt einen Vergleich von Sättigungsprofilen eine unterschiedliche Anzahl an Gitterpunkten  $N_{\text{pts}}$ . Bei vergrößerter Anzahl an Gitterpunkten wird die Stoßwelle steiler, die Geschwindigkeit der Stoßwelle etwas geringer und die numerischen Oszillationen nehmen ab. Das Ergebnis wird erwartungsgemäß besser. Allerdings ist der Unterschied zwischen  $N_{\text{pts}} = 51$  und  $N_{\text{pts}} = 201$  insbesondere in der Darstellung der Unstetigkeit der Stoßwelle relativ gering. Hier ist zu sehen, dass durch die Adaptivität der Positionen des Gitters des zugrunde liegenden Löser bereits mit wenigen Gitterpunkten gute Ergebnisse für steile Fronten erzielt werden können.

## 12.5.2 Vergleich mit analytischen Lösungen

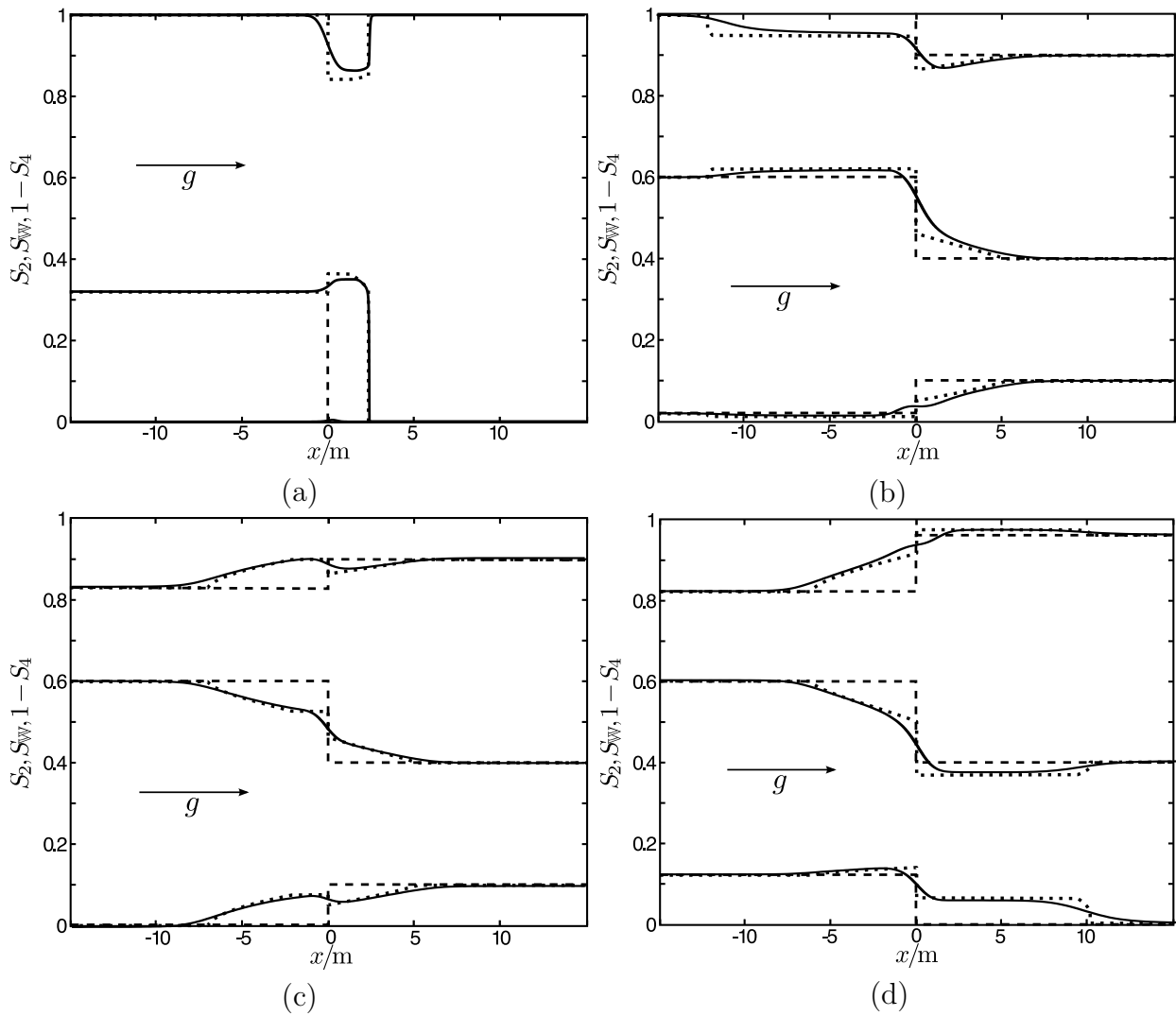
In Teil II dieser Dissertation wurden analytische und quasianalytische Lösungen für vier unterschiedliche Anfangs- und Randwertprobleme vorgestellt. Diese können auch mit AMG3+1 gelöst werden. Die Lösungen des Buckley-Leverett-Problems wurden bereits bei der Unter-



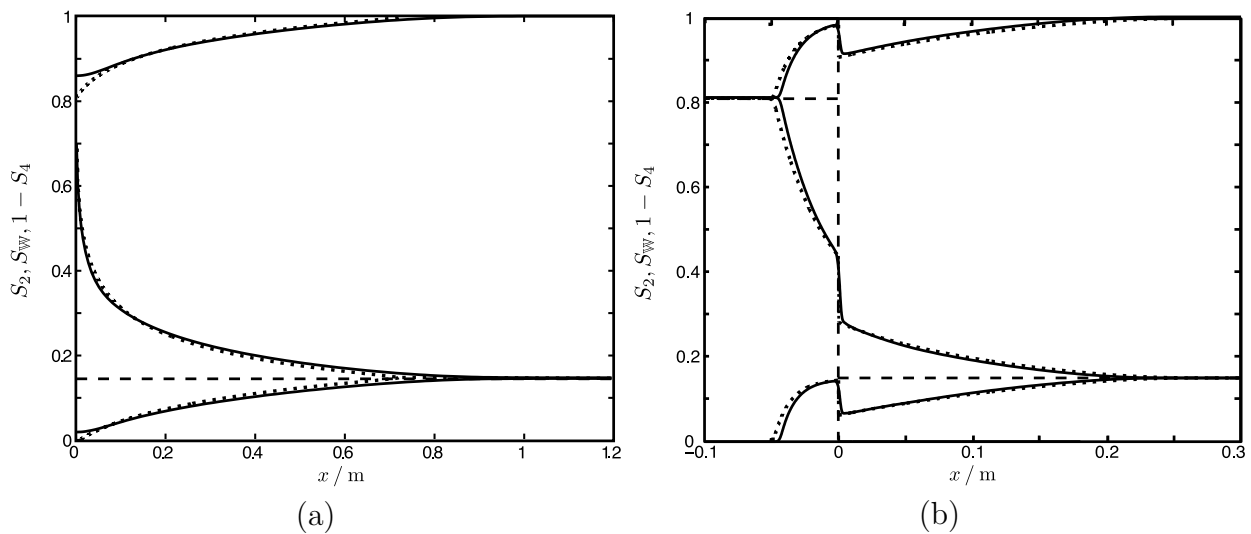
**Abbildung 12.5:** Vergleich von Sättigungsprofilen für eine unterschiedliche Anzahl an Gitterpunkten  $N_{\text{pts}}$ . Schwarze durchgezogene Kurven zeigen Lösungen für den Referenzwert  $N_{\text{pts}} = 101$ , blau gepunktete Kurven für  $N_{\text{pts}} = 51$  und rot gestrichelte Kurven für  $N_{\text{pts}} = 201$ . Die kleinen Abbildungen zeigen vergrößerte Ausschnitte. Die obere Abbildung zeigt das Plateau und die untere die Stoßwelle.

suchung des Einflusses der künstlichen Parameter verwendet. Lösungen der übrigen drei Anfangs- und Randwertproblem werden hier verglichen.

Abbildung 12.6 zeigt den Vergleich von analytischen Lösungen und numerischen Lösungen von AMG3+1 für verschiedene Anfangsbedingungen der schwerkraftgetriebenen Umverteilung. Alle vier Vergleiche zeigen eine gute Übereinstimmung von analytischen und numerischen Lösungen. Allerdings werden einige Details der Lösung mit AMG3+1 nicht erfasst. Die Unstetigkeitsstelle bei  $x = 0$  wird für alle vier Beispiele von AMG3+1 nur deutlich ausgeschmiert wiedergegeben. In Abbildung 12.6a wird die Höhe des Plateaus nicht richtig wiedergegeben. Die Geschwindigkeit der nach links laufenden Welle in Abbildung 12.6b wird numerisch zu gering berechnet. Das Plateau, welches sich in der analytischen Lösung links der Unstetigkeitsstelle bei  $x = 0$  für das Beispiel in Abbildung 12.6c ausbildet, wird vollständig durch die Diffusion an der Unstetigkeitsstelle maskiert. Das Plateau der nach rechts laufenden Welle in Abbildung 12.6d wird nicht korrekt getroffen. Außerdem sind einige Stoßwellen von geringer Stoßhöhe, so dass man aus der numerischen Lösung eher auf eine Verdünnungswelle schließen würde. Charakteristische Werte der numerischen Lösungen werden in Tabelle 12.2 gegeben, die mit den analytischen Werten aus Tabelle 8.2 verglichen werden können.



**Abbildung 12.6:** Vergleich von analytischen Lösungen und numerischen Lösungen von AMG3+1 für unterschiedliche Anfangsbedingungen der schwerkraftgetriebenen Umverteilung. Gestrichelte Kurven zeigen die Anfangsbedingungen, durchgezogene Kurven zeigen die numerischen Lösungen und gepunktete Kurven zeigen die analytischen Lösungen.



**Abbildung 12.7:** Vergleich von quasianalytischen Lösungen und numerischen Lösungen von AMG3+1 für das McWhorter-Sunada-Problem in Abbildung (a) und das Philip-Problem in Abbildung (b). Gestrichelte Kurven zeigen die Anfangsbedingungen, durchgezogene Kurven zeigen die numerischen und gepunktete Kurven die analytischen Lösungen.

Abbildung 12.7a zeigt einen Vergleich von analytischen Lösungen und numerischen Lösungen von AMG3+1 für das McWhorter-Sunada-Problem. Numerische und analytische Lösungen stimmen gut überein. Die Unterschiede in Sättigungen  $S_2(x)$ ,  $S_4(x)$  für  $x \rightarrow 0$  haben ihre Ursachen in Dirichlet-Randbedingungen für die nichtperkolierenden Phasen, deren Werte nur grob geschätzt wurden.

Abbildung 12.7b zeigt einen Vergleich von quasianalytischen Lösungen und numerischen Lösungen von AMG3+1 für das kapillar- und grenzflächenkräftegetriebene Umverteilungsproblem nach Philip. Die Übereinstimmung der Lösungen ist sehr gut. Nur die Entwässerungsfront in der linken Hälfte der Säule ist bei der numerischen Lösung noch nicht so weit wie bei der quasianalytischen Lösung vorgedrungen.

## 12.6 Vor- und Nachteile von AMG3+1

Abschließend sollen hier noch einige Vor- und Nachteile des Algorithmus AMG3+1 diskutiert werden. Es wird außerdem kurz auf mögliche Verbesserungen und Erweiterungen eingegangen.

Zu den Vorteilen von AMG3+1 zählt, dass wie bei AMG9 die Diskretisierung automatisch erfolgt und kein Vorwissen über das zu lösende Gleichungssystem notwendig ist. Es ist aufgrund des adaptiven mobilen Gitters eine hohe Genauigkeit schon mit einer relativ kleinen

Abb.	$i$	$S_i^d$	$S_{2i}^d$	$S_{4i}^d$	$i$	$S_-^{(i)}$	$S_{2-}^{(i)}$	$S_{4-}^{(i)}$	$v^{(i)}/(m/d)$
12.6a	–	0.32	0.00	0.00	$\ell$	---	---	---	---
	+	0.35	0.00	0.13	$r$	0.31	0.00	0.12	0.243
12.6b	–	0.62	0.01	0.05	$\ell$	---	---	---	---
	+	0.47	0.04	0.13	$r$	---	---	---	---
12.6c	–	0.53	0.08	0.10	$\ell$	---	---	---	---
	+	0.45	0.06	0.13	$r$	---	---	---	---
12.6d	–	0.49	0.13	0.07	$\ell$	---	---	---	---
	+	0.37	0.06	0.03	$r$	---	---	---	---

**Tabelle 12.2:** Charakteristische Werte der numerischen Lösungen der in Abbildung 12.6a-d dargestellten Anfangs- und Randwertprobleme. Es werden keine Werte für Stoßwellen angegeben, wenn entweder keine Stoßwellen vorkommen, oder aufgrund der numerischen Diffusion keine eindeutigen Werte zugeordnet werden können.

Zahl  $N_{\text{pts}} \approx 100$  an Gitterpunkten möglich. Im Gegensatz zu **AMG9** wurden die Gleichungen vor der Implementierung stark vereinfacht. Durch Einführung der künstlichen Variablen  $\sigma$  und einer Reaktions-Diffusionsgleichung dafür haben die Gleichungen genau die vom Algorithmus geforderte Form. Dadurch ist **AMG3+1** deutlich schneller und stabiler als **AMG9**.

Ebenso wie **AMG9** ist auch **AMG3+1** nicht auf zwei oder drei Raumdimensionen erweiterbar. Eine Berücksichtigung der Druckgleichung und damit die Möglichkeit, Simulationen mit Druckrandbedingungen durchzuführen ist zwar prinzipiell möglich, würde jedoch wieder eine “pressure-projection” oder Ähnliches erfordern und die Stabilität und Schnelligkeit des Algorithmus beeinträchtigen. Darüber hinaus war die Formulierung einer künstlichen Gleichung nötig. Auch wenn bei den durchgeführten Tests - insbesondere beim Vergleich zu analytischen Lösungen - keine Verfälschung der Ergebnisse festgestellt wurde, ist das natürlich nicht für beliebige Experimente garantiert. Außerdem sei erwähnt, dass **AMG3+1** gelegentlich nicht konvergiert, ohne dass der Grund dafür verstanden ist. Der Algorithmus wurde jedoch nicht direkt auf die Gleichungen zugeschnitten. Ein Algorithmus, welcher explizit Eigenschaften der Gleichungen berücksichtigt, kann nochmals deutlich präziser und schneller Lösungen berechnen. Dies ist zum Beispiel bei dem im nächsten Kapitel 13 vorgestellten Godunov-Löser der Fall.



## 13 SimBL

In diesem Kapitel wird der Algorithmus **SimBL** vorgestellt. **SimBL** ist ein Godunov<sup>1</sup>-Löser und in **CLAWPACK** implementiert. Ein Godunov-Löser ist ein numerischer Löser, der die Lösung des Riemann-Problems für hyperbolische partielle Differentialgleichungen nutzt, um allgemeine Anfangs- und Randwertprobleme zu lösen. Godunov-Löser werden im ersten Unterkapitel dieses Kapitels definiert. Das Paket **CLAWPACK** bietet einen Rahmen, um komfortabel und schnell Godunov-Löser in **FORTTRAN** zu implementieren. Es ist außerdem frei verfügbar. Ein Überblick über **CLAWPACK** wird im zweiten Unterkapitel gegeben. Der Algorithmus **SimBL** basiert auf der fraktionalen Flussformulierung des Modells unter der Verwendung der Näherung der immobilen nichtperkolierenden Phasen. Im nächsten Unterkapitel werden die Gleichungen zusammengefasst und die nötigen Anpassungen diskutiert. Nachfolgend wird die Implementierung diskutiert. Im Unterschied zu den Kapiteln 11 über **AMG9** und 12 über **AMG3+1** ist dieses Unterkapitel deutlich umfangreicher, da die Diskretisierung der Gleichungen in **CLAWPACK** selbst vorgenommen werden muss. Nach weiteren Unterkapiteln über die Anfangs- und Randbedingungen folgt ein Unterkapitel, in welchem Konvergenz und Genauigkeit anhand von Vergleichen von analytischen Lösungen mit Lösungen des Algorithmus **SimBL**, sowie eine Parameterstudie der numerischen Parameter durchgeführt wird. Abschließend werden Vor- und Nachteile des Algorithmus erörtert.

### 13.1 Definition eines Godunov-Lösers

Godunov-Löser sind numerische Löser für hyperbolische partielle Differentialgleichungen, die die (analytische) Lösung des Riemann-Problems (siehe Kapitel 2.2.4) als elementaren Baustein verwenden. Die Lösungen sind Wellen, die sich mit im Allgemeinen endlicher Geschwindigkeit von der Sprungstelle ausbreiten. Eine Finite-Volumen-Diskretisierung kann im Raum als diskontinuierliche Stufenapproximation an eine kontinuierliche Funktion interpretiert werden, wobei der Wert jeder Stufe der Mittelwert über das entsprechende finite

---

<sup>1</sup>Sergei Konstantinowitsch Godunov (\*1929), russischer Mathematiker

Volumen ist. Eine Diskretisierung eines Systems von hyperbolischen partiellen Differentialgleichungen durch  $N_{\text{cls}}$  finite Volumina liefert demnach in einer Dimension  $N_{\text{cls}} - 1$  Riemann-Probleme. Es ist darauf zu achten, dass der Zeitraum so gewählt ist, dass die Wellen von benachbarten Sprungstellen nicht interferieren.

Ein Godunov-Löser besteht aus folgenden drei elementaren Schritten (vgl. Kapitel 4, [LeVe 07])

1. Bestimme eine stückweise polynomiale Funktion  $\tilde{u}(x, t_k)$  zum Zeitpunkt  $t_k$  auf  $x \in \mathcal{D}$  aus den Zellmittelwerten, wobei  $\mathcal{D}$  das diskretisierte Gebiet ist. Im einfachsten Fall ist diese Funktion eine stückweise konstante Funktion, die jeweils den Mittelwert  $u_i^k$  der jeweiligen Zelle  $i$  im Gebiet der Zelle  $i$  annimmt:  $\tilde{u}(x, t_k) = u_i^k$  für alle  $x \in \mathcal{C}_i$ , wobei  $\mathcal{C}_i$  die  $i$ -te Zelle bezeichnet.
2. Löse die Riemann-Probleme an den Zellgrenzen analytisch exakt oder auch numerisch approximativ und bestimme damit  $\tilde{u}(x, t_{k+1})$  zu einem späteren Zeitpunkt  $t_{k+1} = t_k + \Delta t$  aus der Lösung.
3. Bestimme die neuen Zellmittelwerte in den  $N_{\text{cls}}$  Zellen  $\mathcal{C}_i$ .

Interferenzen zwischen benachbarten Wellen sind zu vermeiden, da diese nicht durch die Lösung der Riemann-Probleme beschrieben werden. Um dies zu gewährleisten, darf der Zeitschritt nicht größer als

$$\Delta t \leq \frac{1}{2} \frac{\Delta x}{v^{\max}} \quad (13.1)$$

gewählt werden, wobei  $v^{\max}$  die Geschwindigkeit der schnellsten Welle bezeichnet. Dieses Kriterium wird gewöhnlich nach den Mathematikern Courant<sup>2</sup>, Friedrich<sup>3</sup> und Lewy<sup>4</sup> auch CFL-Kriterium genannt. Eine charakteristische Zahl, welche bei Verfahren mit adaptivem Zeitschritt häufig verwendet wird, ist die Courant-Zahl

$$\text{Co} = v^{\max} \frac{\Delta t}{\Delta x}. \quad (13.2)$$

Sie wird verwendet, um einzustellen, wie weit die schnellste Welle in eine Zelle propagieren darf. Weiß man zum Beispiel, dass alle Wellen in dieselbe Richtung propagieren, so kann bei der Zeitschrittbeschränkung auf den Faktor 1/2 in Gleichung (13.1) verzichtet werden und eine Courant-Zahl von  $\text{Co} = 1$  erlaubt werden.

---

<sup>2</sup>Richard Courant (1888-1972), deutsch-amerikanischer Mathematiker

<sup>3</sup>Kurt Otto Friedrichs (1901-1982), deutsch-amerikanischer Mathematiker

<sup>4</sup>Hans Lewy (1904-1988), deutsch-amerikanischer Mathematiker

## 13.2 Überblick über CLAWPACK

CLAWPACK ist ein Paket von FORTRAN-Routinen, um zeitabhängige Systeme hyperbolischer partieller Differentialgleichungen in 1, 2 und 3 Raumdimensionen zu lösen. Der Name ist ein Akronym und steht für “Conservation LAWS PACKage”. Trotz des Titels kann das Paket neben Erhaltungssätzen auch Gleichungen, die nicht als Erhaltungssatz formuliert werden können, lösen. Das Paket ist frei verfügbar<sup>5</sup>.

Für Gleichungen in einer Raumdimension bietet CLAWPACK die Routine `claw1ez` an, die verwendet werden kann, um Riemann-Löser für Gleichungssysteme der Form

$$C(x) \frac{\partial u}{\partial t} + \frac{\partial R(u, x, t)}{\partial x} = Q(u, x, t) \quad (13.3)$$

zu implementieren, wobei  $u = u(x, t) \in \mathbb{R}^n$ ,  $C(x)$  eine diagonale Matrixfunktion  $\mathbb{R} \rightarrow \mathbb{R}^n \times \mathbb{R}^n$  und  $R(u, x, t)$  und  $Q(u, x, t)$  Vektorfunktionen  $\mathbb{R}^n \times \mathbb{R} \times \mathbb{R}_+ \rightarrow \mathbb{R}^n$  sind. Für homogene Erhaltungssätze gilt  $C = 1$  und  $Q = 0$ . Hyperbolische Gleichungssysteme, welche nicht die Form eines Erhaltungssatzes, sondern die quasi lineare Form

$$\frac{\partial u}{\partial t} + A(u, x, t) \frac{\partial u}{\partial x} = 0 \quad (13.4)$$

haben, können ebenso gelöst werden. Dabei gilt  $A : \mathbb{R}^n \times \mathbb{R} \times \mathbb{R}_+ \rightarrow \mathbb{R}^n \times \mathbb{R}^n$ .

Ein homogenes Gleichungssystem kann mit CLAWPACK gelöst werden, wenn es streng hyperbolisch ist und ein Riemann-Löser bekannt ist. Ein Riemann-Löser hat für zwei beliebige Zustandsvariablen  $u_{i-1}, u_i$  einen Satz von  $n$  Wellen  $\mathcal{W}_{i-1/2}^p$  und  $n$  Wellengeschwindigkeiten  $v_{i-1/2}^p$  zu liefern. Für die Wellen gilt

$$\sum_{p=1}^n \mathcal{W}_{i-1/2}^p = u_i - u_{i-1} \equiv \Delta u_{i-1/2}. \quad (13.5)$$

Außerdem muss der Riemann-Löser linkslaufende Fluktuationen  $\mathcal{A}^- \Delta u_{i-1/2}$  und rechtslaufende Fluktuationen  $\mathcal{A}^+ \Delta u_{i-1/2}$  berechnen. Bei Erhaltungssätzen müssen die Fluktuationen die Bedingung

$$\mathcal{A}^- \Delta u_{i-1/2} + \mathcal{A}^+ \Delta u_{i-1/2} = f(u_i) - f(u_{i-1}) \quad (13.6)$$

<sup>5</sup>CLAWPACK kann von <http://www.amath.washington.edu/~claw> heruntergeladen werden.

erfüllen. Eine übliche Wahl für die Fluktuationen ist

$$\mathcal{A}^- \Delta u_{i-1/2} = \sum_{p=1}^n (v_{i-1/2}^-)^p \mathcal{W}_{i-1/2}^p \quad \text{mit } v^- = \min(v, 0), \quad (13.7a)$$

$$\mathcal{A}^+ \Delta u_{i-1/2} = \sum_{p=1}^n (v_{i-1/2}^+)^p \mathcal{W}_{i-1/2}^p \quad \text{mit } v^+ = \max(v, 0). \quad (13.7b)$$

Bei Godunov-Lösern erster Ordnung werden nur die Fluktuationen benötigt. Die Implementierung lautet dann

$$u_i^{k+1} = u_i^k - \frac{\Delta t}{\Delta x} (\mathcal{A}^+ \Delta u_{i-1/2} + \mathcal{A}^- \Delta u_{i+1/2}) \quad (13.8)$$

wenn  $C = 1$  ist, wobei  $k$  den  $k$ -ten Zeitschritt bezeichnet. Methoden von höherer Ordnung im Raum benötigen auch die Wellen  $\mathcal{W}_{i-1/2}^p$  und ihre Geschwindigkeiten  $v_{i-1/2}^p$ . Soll ein Verfahren mit adaptivem Zeitschritt verwendet werden, werden auch für Methoden erster Ordnung die Wellengeschwindigkeiten benötigt, um das CFL-Kriterium (13.1) zu überprüfen.

Diese Dissertation hat nicht zum Ziel, möglichst genaue Ergebnisse zu berechnen, sondern vielmehr die Existenz von Lösungen und die Vorteile und Grenzen des Modells, welches perkolierende und nichtperkolierende Phasen unterscheidet, zu untersuchen. Da außerdem nur eindimensionale Probleme gelöst werden, ist ein Godunov-Löser erster Ordnung vollkommen ausreichend.

### 13.3 Anpassung der Gleichungen

Es wurde ein Godunov-Löser für den hyperbolischen Limes der Näherung mit immobilen nichtperkolierenden Phasen aus Kapitel 5.3.2 entwickelt. Er basiert auf der Lösung des Riemann-Problems, welches in Teil II, "Analytische und quasianalytische Lösungen", vorgestellt wurde. Im Folgenden werden die entsprechenden Gleichungen zusammengefasst.

Wie im analytischen Teil wird auch hier von der fraktionalen Flussformulierung mit Flussrandbedingungen in einer Dimension ausgegangen. Das entsprechende Gleichungssystem besteht aus drei Gleichungen für die Sättigungen  $S_{\text{w}}, S_2, S_4$ . Die Gleichungen für die nichtperkolierenden Phasen können analytisch integriert werden, so dass ein differentialalgebraisches System von Gleichungen mit einer hyperbolischen partiellen Differentialgleichung

$$\frac{\partial S_{\text{w}}}{\partial t} = -\frac{\partial}{\partial x} G(S_{\text{w}}, S_2, S_4, t) \quad (13.9a)$$

und den zwei algebraischen Gleichungen (5.12),

$$S_2(S_{\mathbb{W}}, \partial_t S_{\mathbb{W}}, x, t) = S_2^*(\partial_t S_{\mathbb{W}}) + [S_{20}(x, t) - S_2^*(\partial_t S_{\mathbb{W}})] \left( \frac{S_{\mathbb{W}}^*(\partial_t S_{\mathbb{W}}) - S_{\mathbb{W}}}{S_{\mathbb{W}}^*(\partial_t S_{\mathbb{W}}) - S_{\mathbb{W}0}(x, t)} \right)^{\eta_2}, \quad (13.9b)$$

$$S_4(S_{\mathbb{W}}, \partial_t S_{\mathbb{W}}, x, t) = S_4^*(\partial_t S_{\mathbb{W}}) + [S_{40}(x, t) - S_4^*(\partial_t S_{\mathbb{W}})] \left( \frac{S_{\mathbb{W}} - S_{\mathbb{W}}^*(\partial_t S_{\mathbb{W}})}{S_{\mathbb{W}0}(x, t) - S_{\mathbb{W}}^*(\partial_t S_{\mathbb{W}})} \right)^{\eta_4} \quad (13.9c)$$

gelöst werden soll, wobei die advektive Flussfunktion (6.1),

$$G(S_{\mathbb{W}}, S_2, S_4, t) = \frac{1}{\phi} (q_{\text{tot}}(t) f_{\mathbb{W}}(S_{\mathbb{W}}, S_2, S_4) + (\varrho_{\mathbb{W}} - \varrho_{\mathbb{O}}) g \sin \vartheta(t) \lambda(S_{\mathbb{W}}, S_2, S_4)) \quad (13.10)$$

verwendet wird. Es werden zunächst die Parameterfunktionen

$$S_{\mathbb{W}}^*(\partial_t S_{\mathbb{W}}) = (1 - S_{\mathbb{O} \text{im}}) \Theta(\partial_t S_{\mathbb{W}}) + S_{\mathbb{W} \text{dr}} [1 - \Theta(\partial_t S_{\mathbb{W}})], \quad (13.11a)$$

$$S_2^*(\partial_t S_{\mathbb{W}}) = S_{\mathbb{W} \text{dr}} [1 - \Theta(\partial_t S_{\mathbb{W}})], \quad (13.11b)$$

$$S_4^*(\partial_t S_{\mathbb{W}}) = S_{\mathbb{O} \text{im}} \Theta(\partial_t S_{\mathbb{W}}) \quad (13.11c)$$

aus Gleichung (3.7) verwendet. Die Anfangssättigungen  $S_{\mathbb{W}0}(x, t)$ ,  $S_{20}(x, t)$ ,  $S_{40}(x, t)$  sind die Sättigungen, welche lokal zu Beginn eines Prozesses vorlagen. Sie können zeitabhängig sein, da sich der Prozess im Laufe der Zeit verändern kann. Da die Parameterfunktionen (13.11) für Bewässerungsprozesse bei Wassersättigungen  $S_{\mathbb{W}} > 1 - S_{\mathbb{O} \text{im}}$  und für Entwässerungsprozesse  $S_{\mathbb{W}} < S_{\mathbb{W} \text{dr}}$  unphysikalische nichtperkolierende Sättigungen erzeugen, werden gegebenenfalls die modifizierten Parameterfunktionen (3.9),

$$S_{\mathbb{W}}^*(\partial_t S_{\mathbb{W}}, S_{\mathbb{W}}) = (1 - \min(S_{\mathbb{O} \text{im}}, (1 - \epsilon_{\text{M}})(1 - S_{\mathbb{W}}))) \Theta(\partial_t S_{\mathbb{W}}) + \min(S_{\mathbb{W} \text{dr}}, (1 - \epsilon_{\text{M}})S_{\mathbb{W}}) [1 - \Theta(\partial_t S_{\mathbb{W}})], \quad (13.12a)$$

$$S_2^*(\partial_t S_{\mathbb{W}}, S_{\mathbb{W}}) = \min(S_{\mathbb{W} \text{dr}}, (1 - \epsilon_{\text{M}})S_{\mathbb{W}}) [1 - \Theta(\partial_t S_{\mathbb{W}})], \quad (13.12b)$$

$$S_4^*(\partial_t S_{\mathbb{W}}, S_{\mathbb{W}}) = \min(S_{\mathbb{O} \text{im}}, (1 - \epsilon_{\text{M}})(1 - S_{\mathbb{W}})) \Theta(\partial_t S_{\mathbb{W}}). \quad (13.12c)$$

verwendet.

Streng genommen, kann man bei den Gleichungen (13.9b,c) nicht von algebraischen Gleichungen reden, da in ihnen über die Parameterfunktionen (13.11) sehr wohl ein Differentialoperator vorkommt. Dieser taucht jedoch nur innerhalb der Heaviside-Sprungfunktion auf und wird im Code durch eine Fallunterscheidung berücksichtigt, so dass an der Bezeichnung algebraische Gleichung festgehalten werden kann.

### 13.3.1 Auswahl der primären Variablen

Das System (13.9) der nichtlinearen partiellen Differentialgleichung (13.9a) und der beiden algebraischen Gleichungen (13.9b,c) enthält die drei Variablen  $S_{\mathbb{W}}, S_2, S_4$  und die drei Anfangssättigungen  $S_{\mathbb{W}0}(x, t), S_{20}(x, t), S_{40}(x, t)$ , die sich ebenfalls mit Raum und Zeit verändern können. Davon wird  $u = S_{\mathbb{W}}$  als primäre Variable gewählt. Die beiden Sättigungen der nichtperkolierenden Phasen  $S_2$  und  $S_4$  werden als Hilfsvariablen gespeichert. Die Anfangssättigungen müssen nicht gesondert berücksichtigt werden. Dies wird im nächsten Unterkapitel verständlich werden.

## 13.4 Implementierung des Modells

In diesem Unterkapitel wird dargelegt, wie die im vorherigen Unterkapitel zusammengefassten und modifizierten Gleichungen in CLAWPACK implementiert werden. Dazu werden die Gleichungen zunächst explizit in der Zeit und räumlich in finiten Volumina diskretisiert. Dann wird mit Hilfe der analytischen Lösungen aus Kapitel 6, 7 und 8 ein Riemann-Löser formuliert, der Fluktuationen und Geschwindigkeiten an den Zellgrenzen berechnet. Zuletzt werden die beiden algebraischen Gleichungen gelöst.

### 13.4.1 Zeitlich explizite Finite-Volumen-Diskretisierung

Die Diskretisierung der partiellen Differentialgleichung (13.9) erhält man durch Integration der Gleichung über die Zelle  $i$  und den Zeitschritt  $k$ ,

$$\int_{t^k}^{t^k + \Delta t} \int_{x_i - \frac{\Delta x}{2}}^{x_i + \frac{\Delta x}{2}} \left( \frac{\partial S_{\mathbb{W}}}{\partial t} + \frac{\partial}{\partial x} G(S_{\mathbb{W}}, S_2, S_4, t) \right) dx dt = 0. \quad (13.13)$$

Das Zeitintegral über die Zeitableitung und das Raumintegral über die Raumableitungen können direkt ausgeführt werden, so dass

$$\int_{x_i - \frac{\Delta x}{2}}^{x_i + \frac{\Delta x}{2}} (S_{\mathbb{W}}^{k+1} - S_{\mathbb{W}}^k) dx + \int_{t^k}^{t^k + \Delta t} \left( G_{i+\frac{1}{2}} - G_{i-\frac{1}{2}} \right) dt = 0 \quad (13.14)$$

gilt, wobei der obere Index  $k + 1$  den Wert der Variablen zur Zeit  $t = t^k + \Delta t$  und der Index  $k$  den Wert zur Zeit  $t^k$  bezeichnet. Der untere Index  $i + \frac{1}{2}$  bezeichnet den Wert der

entsprechenden Funktion an der Stelle  $x = x_i + \Delta x/2$  und der Index  $i - \frac{1}{2}$  an der Stelle  $x = x_i - \Delta x/2$ . In einer zellzentrierten, zeitlich expliziten Diskretisierung werden die Werte der Integranden der räumlichen Integrale durch ihre Mittelwerte und die Integranden der zeitlichen Integrale durch den Wert bei  $t = t^k$  approximiert. Die diskretisierte Gleichung lautet damit

$$\Delta x (S_{\mathbb{W}i}^{k+1} - S_{\mathbb{W}i}^k) + \Delta t \left( G_{i+\frac{1}{2}}^k - G_{i-\frac{1}{2}}^k \right) = 0. \quad (13.15)$$

Die Flussfunktionen  $G_{i+\frac{1}{2}}^k, G_{i-\frac{1}{2}}^k$  können dabei nicht direkt ausgewertet werden, sondern müssen aus der Lösung des Riemann-Problems bestimmt werden, da die Werte der Variablen  $S_{\mathbb{W}}, S_2, S_4$  nur innerhalb der Zellen, nicht jedoch auf den Zellgrenzen definiert sind.

Die Sättigungen der nichtperkolierenden Phasen werden durch die algebraischen Gleichungen (13.9b) und (13.9c) bestimmt. Da sie räumlich und zeitlich lokal gelten, können sie auch als Gleichungen für die räumlichen Mittelwerte zu einem festen Zeitpunkt verwendet werden. Sie lauten dann für die  $i$ -te Zelle zum Zeitpunkt  $k$

$$S_{2i}^k = S_{2i}^{*k} + (S_{20i}^k - S_{2i}^{*k}) \left( \frac{S_{\mathbb{W}i}^{*k} - S_{\mathbb{W}i}^k}{S_{\mathbb{W}i}^{*k} - S_{\mathbb{W}0i}^k} \right)^{\eta_2}, \quad (13.16a)$$

$$S_{4i}^k = S_{4i}^{*k} + (S_{40i}^k - S_{4i}^{*k}) \left( \frac{S_{\mathbb{W}i}^k - S_{\mathbb{W}i}^{*k}}{S_{\mathbb{W}0i}^k - S_{\mathbb{W}i}^{*k}} \right)^{\eta_4}, \quad (13.16b)$$

wobei die diskretisierten Werte der Anfangssättigungen  $S_{\mathbb{W}0i}^k, S_{20i}^k, S_{40i}^k$  sowie der Parameterfunktionen  $S_{\mathbb{W}i}^{*k}, S_{2i}^{*k}, S_{4i}^{*k}$  noch zu bestimmen sind. Für die Anfangssättigungen sei erwähnt, dass ein Tripel  $(S_{\mathbb{W}}, S_2, S_4)$  einen Zustand des Systems für Flussrandbedingungen in einer Dimension vollständig beschreibt und weitere Informationen über das System nicht nötig sind, um seine Dynamik zu berechnen. Insbesondere zeigt die Dynamik keine hysteretischen Eigenschaften, wenn die Sättigungen der nichtperkolierenden Phasen mit berücksichtigt werden. Anstatt der Werte der Sättigungen bei der letzten Prozessänderung können für  $S_{\mathbb{W}0i}^k, S_{20i}^k, S_{40i}^k$  genauso gut die Werte der Sättigungen beim vorherigen Zeitschritt genommen werden. Damit lauten die Anfangssättigungen für die Gleichungen (13.16)

$$S_{\mathbb{W}0i}^k = S_{\mathbb{W}i}^{k-1}, \quad (13.17a)$$

$$S_{20i}^k = S_{2i}^{k-1}, \quad (13.17b)$$

$$S_{40i}^k = S_{4i}^{k-1}. \quad (13.17c)$$

Die Parameterfunktionen  $S_{\mathbb{W}}^*, S_2^*, S_4^*$  sind in der modifizierten Version nach Gleichungen

(13.12) Funktionen von  $\partial_t S_{\mathbb{W}}$  und  $S_{\mathbb{W}}$ . Diese sollen nun diskret formuliert werden. Dabei beachte man, dass aufgrund der zeitlich expliziten Diskretisierung von Gleichung (13.9a) zur Berechnung der Wassersättigung  $S_{\mathbb{W}}^k$  nur die Werte  $S_{\mathbb{W}}^{k-1}, S_2^{k-1}, S_4^{k-1}$  benötigt werden.<sup>6</sup> Für die Berechnung der diskreten Funktionswerte  $S_{\mathbb{W}_i}^{*k}, S_2^{*k}, S_4^{*k}$ , bietet sich daher eine rückwärtsgerichtete Finite-Differenz-Näherung an die Wassersättigungsänderungsrate  $\partial_t S_{\mathbb{W}_i}^k \approx (S_{\mathbb{W}_i}^k - S_{\mathbb{W}_i}^{k-1})/\Delta t$  an, sodass die diskreten Funktionswerte

$$S_{\mathbb{W}_i}^{*k} = S_{\mathbb{W}}^*((S_{\mathbb{W}_i}^k - S_{\mathbb{W}_i}^{k-1})/\Delta t, S_{\mathbb{W}_i}^k), \quad (13.18a)$$

$$S_2^{*k} = S_2^*((S_{\mathbb{W}_i}^k - S_{\mathbb{W}_i}^{k-1})/\Delta t, S_{\mathbb{W}_i}^k), \quad (13.18b)$$

$$S_4^{*k} = S_4^*((S_{\mathbb{W}_i}^k - S_{\mathbb{W}_i}^{k-1})/\Delta t, S_{\mathbb{W}_i}^k) \quad (13.18c)$$

lauten.

Das Vorzeichen der Wassersättigungsänderungsrate hat starken Einfluss auf die Lösung. Es entscheidet, ob lokal be- oder entwässert wird und damit, ob die nichtperkolierenden Phasen entsprechend produziert oder verringert werden. Um dabei den Einfluss möglicher numerischer Rundungsfehler zu begrenzen, werden Wassersättigungsänderungsraten erst ab einer Schwelle berücksichtigt. Damit gilt für die nichtperkolierenden Phasen

$$S_{2_i}^k = \begin{cases} \text{Gleichung (13.16a)} & \text{für } |\partial S_{\mathbb{W}}/\partial t| > \epsilon_{\partial S}, \\ S_{2_i}^{k-1} & \text{für } |\partial S_{\mathbb{W}}/\partial t| \leq \epsilon_{\partial S}, \end{cases} \quad (13.19a)$$

$$S_{4_i}^k = \begin{cases} \text{Gleichung (13.16b)} & \text{für } |\partial S_{\mathbb{W}}/\partial t| > \epsilon_{\partial S}, \\ S_{4_i}^{k-1} & \text{für } |\partial S_{\mathbb{W}}/\partial t| \leq \epsilon_{\partial S}. \end{cases} \quad (13.19b)$$

### 13.4.2 Der Riemann-Löser

Das Riemann-Problem für Gleichung (13.9a) wurde in Kapitel 7 und 8 mit Hilfe der Methode der Charakteristiken gelöst. Hier werden nun die Lösungen dazu verwendet, die Fluktuationen  $\mathcal{A}^- \Delta u_{i-1/2}$  und  $\mathcal{A}^+ \Delta u_{i+1/2}$  für alle Zellen  $i = 1, \dots, N_{\text{cls}}$  zu bestimmen, so dass Gleichung (13.6) gilt und das Verfahren stabil ist. Für die Bestimmung des maximal möglichen Zeitschritts werden außerdem die maximal auftretenden Wellengeschwindigkeiten benötigt.

Nach Kapitel 8 hängt die Lösung des Riemann-Problems davon ab, wie sich die Charakteristiken der linken und rechten Werte des Riemann-Problems in Bezug auf die Sprungstelle

<sup>6</sup>Man beachte, dass auf untere Indizes zur Identifizierung der Zellen verzichtet wurde, da die benötigten Zellen, je nach Riemann-Löser variieren können.



bewegen. Es wird nun das Riemann-Problem zwischen den Zellen  $i - 1$  und  $i$  betrachtet. Zunächst müssen die Geschwindigkeiten der Charakteristiken bestimmt werden. Diese werden numerisch approximativ durch

$$v_j^k = \frac{1}{2\epsilon_{\text{der}}} \left( G(S_{\text{W}j}^k + \epsilon_{\text{der}}, S_{2j}^k, S_{4j}^k, t^k) - G(S_{\text{W}j}^k - \epsilon_{\text{der}}, S_{2j}^k, S_{4j}^k, t^k) \right) \quad (13.20)$$

mit  $j \in \{i - 1, i\}$  und  $\epsilon_{\text{der}} = 10^{-10}$  bestimmt. Eine genauere (analytische) Bestimmung ist nicht erforderlich, da nur das Vorzeichen für die Berechnung der Fluktuationen und nur die Größenordnung für den Zeitschritt relevant ist.

Man überzeuge sich durch Einsetzen des Ergebnisses in Gleichung (13.8), dass - der Diskussion aus Kapitel 7 und 8 folgend - die nach links laufenden Fluktuationen über die Zellgrenze  $i - \frac{1}{2}$

$$\mathcal{A}^- \Delta u_{i-1/2} = \begin{cases} G_i^k - G_{i-1}^k & \text{für } v_i^k < -\epsilon_v \quad \text{und} \quad v_{i-1}^k < -\epsilon_v, \\ 0 & \text{für } v_i^k > \epsilon_v \quad \text{und} \quad v_{i-1}^k > \epsilon_v, \\ \tilde{G}_{i-\frac{1}{2}}^k - G_{i-1}^k & \text{für } v_i^k > \epsilon_v \quad \text{und} \quad v_{i-1}^k < -\epsilon_v, \\ \tilde{G}_{i-\frac{1}{2}}^k - G_{i-1}^k & \text{für } v_i^k < -\epsilon_v \quad \text{und} \quad v_{i-1}^k > \epsilon_v, \\ \frac{1}{2}(G_i^k - G_{i-1}^k) & \text{sonst} \end{cases} \quad (13.21a)$$

und die nach rechts laufenden Fluktuationen bei  $i - \frac{1}{2}$

$$\mathcal{A}^+ \Delta u_{i-1/2} = \begin{cases} 0 & \text{für } v_i^k < -\epsilon_v \quad \text{und} \quad v_{i-1}^k < -\epsilon_v, \\ G_i^k - G_{i-1}^k & \text{für } v_i^k > \epsilon_v \quad \text{und} \quad v_{i-1}^k > \epsilon_v, \\ G_i^k - \tilde{G}_{i-\frac{1}{2}}^k & \text{für } v_i^k > \epsilon_v \quad \text{und} \quad v_{i-1}^k < -\epsilon_v, \\ G_i^k - \tilde{G}_{i-\frac{1}{2}}^k & \text{für } v_i^k < -\epsilon_v \quad \text{und} \quad v_{i-1}^k > \epsilon_v, \\ \frac{1}{2}(G_i^k - G_{i-1}^k) & \text{sonst} \end{cases} \quad (13.21b)$$

lauten, wobei

$$\tilde{G}_{i-\frac{1}{2}}^k = \begin{cases} \min(\hat{G}_i^k, \hat{G}_{i-1}^k) & \text{für } v_i^k > \epsilon_v \quad \text{und} \quad v_{i-1}^k < -\epsilon_v, \\ \min(G_i^k, G_{i-1}^k) & \text{für } v_i^k < -\epsilon_v \quad \text{und} \quad v_{i-1}^k > \epsilon_v \end{cases} \quad (13.22)$$

gilt. Durch  $\min(\cdot, \cdot)$  wird hier nicht das absolute Minimum der beiden Argumente, sondern das betragsmäßig kleinste Argument unter Beibehaltung des Vorzeichens gewählt. Die Werte  $\hat{G}_j^k$  mit  $j \in \{i, i - 1\}$  bezeichnen die Extremwerte der Flussfunktionen  $G(S_{\text{W}}, x_j, t^k) = G(S_{\text{W}}, S_2(S_{\text{W}}, x_j, t^k), S_4(S_{\text{W}}, x_j, t^k))$  in der entsprechenden Zelle  $j$  zum Zeitpunkt  $t^k$ , wobei

wie in Kapitel 7 die Raumabhängigkeit der Flussfunktion durch Einsetzen der algebraischen Gleichungen (13.9b,c) in (13.10) entsteht. Als Anfangssättigungen werden dabei die entsprechenden Sättigungen

$$S_{\mathbb{W}0}(x_j, t^k) = \hat{S}_{\mathbb{W}j}^k, \quad (13.23a)$$

$$S_{20}(x_j, t^k) = S_{2j}^k, \quad (13.23b)$$

$$S_{40}(x_j, t^k) = S_{4j}^k \quad (13.23c)$$

der Zelle verwendet. Der Funktionswert am Extremum ist damit über die Sättigung  $\hat{S}_j^k$  mit

$$\frac{\partial}{\partial S_{\mathbb{W}}} G(\hat{S}_j^k, S_2(\hat{S}_j^k, x_j, t^k), S_4(\hat{S}_j^k, x_j, t^k)) = 0 \quad (13.24)$$

als  $\hat{G}_j^k = G(\hat{S}_j^k, S_2(\hat{S}_j^k, x_j, t^k), S_4(\hat{S}_j^k, x_j, t^k))$  gegeben. Numerisch wird die Nullstelle (13.24) durch ein Newton-Raphson-Iterationsverfahren (siehe Kapitel B.3.1) bestimmt. Da in seltenen Fällen dieses aufgrund der unstetigen Ableitung bei  $S_{\mathbb{W}} = S_{\mathbb{W}j}^k$  nicht konvergiert, ist ein Bisektionsverfahren (siehe Kapitel B.3.2) zur Absicherung hinterher geschaltet. Für das Newton-Raphson-Verfahren ist der erste Schätzer für die Nullstelle fest als  $S_{\mathbb{W}} = 0.5$  implementiert. Auch die Konvergenzschwelle ist fest implementiert. Wenn der Abstand der Sättigungen zwischen zwei Iterationen  $< 10^{-8}$  ist, wird das Iterationsverfahren beendet.

Für die Geschwindigkeiten wurde eine Schwelle  $\epsilon_v$  eingeführt, da aufgrund von numerischen Rundungsfehlern das Vorzeichen der Geschwindigkeit falsch sein kann. Wenn eine der beiden Geschwindigkeiten kleiner als diese Schwelle  $\epsilon_v$  ist, wird der Fluss arithmetisch gemittelt. Eine arithmetische Mittelung der Flüsse ist zwar bedingungslos instabil [LeVe 07], aber nicht falsch. Bei den durchgeführten Simulationen treten diese Fälle nur isoliert und temporär auf. Bereits beim nächsten Zeitschritt sind die Werte der Geschwindigkeit im Normalfall über der Schwelle.

Für die Bestimmung der möglichen maximalen Zeitschrittgröße muss die maximale Wellengeschwindigkeit im Gebiet bestimmt werden. Aufgrund der nichtlinearen Flussfunktionen muss dafür das Riemann-Problem vollständig gelöst werden. Dies erfordert die numerische Bestimmung von Nullstellen einer nichtlinearen Gleichung an jeder Zellgrenze, da entsprechende analytische Lösungen nicht vorhanden sind. Allerdings ermöglicht die genaue Kenntnis der Geschwindigkeit nur etwas größere Zeitschritte. Es ist daher effizienter die Wellengeschwindigkeit nicht genau zu berechnen, sondern sie lediglich zu schätzen. Dazu werden hier zum einen die Geschwindigkeiten der Charakteristiken für unterschiedlich gewichtete arithmetische Mittel aus den Zustandsgrößen der angrenzenden Zellen verwendet und zum anderen die Geschwindigkeit aus der Rankine-Hugoniot Bedingung für eine reine Stoßwelle. Durch

Einführung eines Wichtungsfaktors  $\alpha$  erhält man die gemittelte Geschwindigkeit

$$v_{\alpha i-\frac{1}{2}}^k = \frac{\partial}{\partial S_{\mathbb{W}}} G(\alpha S_{\mathbb{W}_i}^k + (1-\alpha)S_{\mathbb{W}_{i-1}}^k, \alpha S_{2_i}^k + (1-\alpha)S_{2_{i-1}}^k, \alpha S_{4_i}^k + (1-\alpha)S_{4_{i-1}}^k, t^k) \quad (13.25)$$

Die Geschwindigkeit der Welle ist

$$v_{s_{i-\frac{1}{2}}}^k = (G(S_{\mathbb{W}_i}^k, S_{2_i}^k, S_{4_i}^k, t^k) - G(S_{\mathbb{W}_{i-1}}^k, S_{2_{i-1}}^k, S_{4_{i-1}}^k, t^k)) (S_{\mathbb{W}_i}^k - S_{\mathbb{W}_{i-1}}^k)^{-1} \quad (13.26)$$

wenn angenommen wird, dass es sich um eine reine Stoßwelle handelt. Die Wellengeschwindigkeit bei  $x_{i-\frac{1}{2}}$  wird damit für die CFL-Bedingung als

$$v_{i-\frac{1}{2}}^k \approx \max \left( |v_{0_{i-\frac{1}{2}}}^k|, |v_{0.25_{i-\frac{1}{2}}}^k|, |v_{0.5_{i-\frac{1}{2}}}^k|, |v_{0.75_{i-\frac{1}{2}}}^k|, |v_{1_{i-\frac{1}{2}}}^k|, |v_{s_{i-\frac{1}{2}}}^k| \right) \quad (13.27)$$

abgeschätzt. Man beachte, dass das Vorzeichen von  $v_{i-\frac{1}{2}}$  für die CFL-Bedingung irrelevant ist und der Zeitschritt anhand der maximal im Gebiet auftretenden Geschwindigkeit  $\max(v_{j-\frac{1}{2}}^k)$  mit  $j = 1, \dots, N_{\text{cls}}$  bestimmt wird. Der Vollständigkeit halber sei erwähnt, dass die Stoßwellengeschwindigkeit mit Gleichung (13.26) nur berechnet wird, wenn die Sättigungsdifferenz  $|S_{\mathbb{W}_{i-1}}^k - S_{\mathbb{W}_i}^k| > \epsilon_v$  ist, um eine Division durch Null zu verhindern.

## 13.5 Anfangsbedingungen

Prinzipiell bestehen durch den Algorithmus keine Beschränkungen an die Anfangsbedingungen. Im Hinblick auf die durchgeführten Simulationen, welche im Teil IV vorgestellt werden, wurde die Möglichkeit implementiert, die Anfangsbedingungen durch Superposition zweier Heaviside-Sprungfunktionen zu erzeugen, welche durch eine lineare Rampe ausgeschmiert werden. Die Anfangsbedingungen lauten damit

$$S_{\mathbb{W}}(x, 0) = S_{\mathbb{W}_b} + (S_{\mathbb{W}_p} - S_{\mathbb{W}_b})\tilde{\Theta}(x - x_0) + (S_{\mathbb{W}_b} - S_{\mathbb{W}_p})\tilde{\Theta}(x - x_1), \quad (13.28a)$$

$$S_2(x, 0) = S_{2_b} + (S_{2_p} - S_{2_b})\tilde{\Theta}(x - x_0) + (S_{2_b} - S_{2_p})\tilde{\Theta}(x - x_1), \quad (13.28b)$$

$$S_4(x, 0) = S_{4_b} + (S_{4_p} - S_{4_b})\tilde{\Theta}(x - x_0) + (S_{4_b} - S_{4_p})\tilde{\Theta}(x - x_1), \quad (13.28c)$$

wobei eine linear ausgeschmierte Heaviside-Sprungfunktion

$$\tilde{\Theta}(x) = \begin{cases} 0 & \text{für } x < -\kappa_{\text{sm}}, \\ \frac{1}{2}\left(\frac{x}{\kappa_{\text{sm}}} + 1\right) & \text{für } -\kappa_{\text{sm}} \leq x \leq \kappa_{\text{sm}}, \\ 1 & \text{für } x > \kappa_{\text{sm}} \end{cases} \quad (13.29)$$

mit dem Glättungsfaktor  $\kappa_{\text{sm}}$  verwendet wird. Um die Anfangsbedingungen zu spezifizieren, müssen damit die Parameter  $S_{\text{wb}}, S_{\text{wp}}, S_{2\text{b}}, S_{2\text{p}}, S_{4\text{b}}, S_{4\text{p}}, x_0, x_1$  und  $\kappa_{\text{sm}}$  angegeben werden.

## 13.6 Randbedingungen

Randbedingungen werden in CLAWPACK im Allgemeinen über einige Geisterzellen, die an den Rändern des Gebiets angebracht werden, implementiert. Ist ein eindimensionales Gebiet in  $N_{\text{cls}}$  Zellen unterteilt, die von  $i = 1$  bis  $i = N_{\text{cls}}$  von links nach rechts durchnummeriert sind, so können Geisterzellen am linken Rand mit den Indizes  $i = 0, -1, \dots$  und am rechten Rand mit den Indizes  $i = N_{\text{cls}} + 1, N_{\text{cls}} + 2, \dots$  versehen werden. Die Anzahl der Geisterzellen an beiden Rändern kann in CLAWPACK flexibel bestimmt werden. Für den hier vorgestellten Algorithmus erster Ordnung genügt an jedem Rand eine Geisterzelle. Sie wird dementsprechend mit dem Index  $i = 0$  am linken Rand und mit  $i = N_{\text{cls}} + 1$  am rechten Rand versehen. Es sind drei unterschiedliche Paare von Randbedingungen implementiert, die durch die Wahl des Steuerungsparameters `mthbc(1)` am linken Rand und `mthbc(2)` am rechten Rand in `claw1ez.data` gewählt werden können, ohne das ein erneutes Kompilieren notwendig ist. Diese sind

1. Extrapolation nullter Ordnung: `mthbc(.) = 1`,
2. periodische Randbedingungen: `mthbc(.) = 2`,
3. Nullflussrandbedingungen: `mthbc(.) = 0`.

Die Implementierung wird nun kurz vorgestellt. Bei Randbedingungen mit Extrapolation nullter Ordnung werden die Werte der Variablen als konstant über den Rand hinaus extrapoliert. Die Implementierung lautet daher

$$S_{\text{w}0}^k = S_{\text{w}1}^k, \quad S_{\text{w}N_{\text{cls}}+1}^k = S_{\text{w}N_{\text{cls}}}^k, \quad (13.30\text{a})$$

$$S_{20}^k = S_{21}^k, \quad S_{2N_{\text{cls}}+1}^k = S_{2N_{\text{cls}}}^k, \quad (13.30\text{b})$$

$$S_{40}^k = S_{41}^k, \quad S_{4N_{\text{cls}}+1}^k = S_{4N_{\text{cls}}}^k. \quad (13.30\text{c})$$

Bei periodischen Randbedingungen wird der linke mit dem rechten Rand verbunden. Die Implementierung lautet daher

$$S_{\text{w}0}^k = S_{\text{w}N_{\text{cls}}}^k, \quad S_{\text{w}N_{\text{cls}}+1}^k = S_{\text{w}1}^k, \quad (13.31\text{a})$$

$$S_{20}^k = S_{2N_{\text{cls}}}^k, \quad S_{2N_{\text{cls}}+1}^k = S_{21}^k, \quad (13.31\text{b})$$

$$S_{40}^k = S_{4N_{\text{cls}}}^k, \quad S_{4N_{\text{cls}}+1}^k = S_{41}^k. \quad (13.31\text{c})$$

Bei Nullflussrandbedingungen muss bei der Implementierung darauf geachtet werden, dass sie jeweils in zwei Fluktuationen auftauchen. Alles weitere ist in einer zellzentrierten Diskretisierung mit finiten Volumina trivial, da Flüsse an den Grenzen direkt berücksichtigt werden. Sie lauten

$$G_{\frac{1}{2}}^k = 0, \quad G_{n+\frac{1}{2}}^k = 0. \quad (13.32)$$

## 13.7 Überprüfung des Algorithmus

Die Überprüfung des Algorithmus geschieht vor allem durch Vergleiche von numerischen und analytischen Lösungen im zweiten Teil dieses Unterkapitels. Sieht man von den Schwellen  $\epsilon_v$ ,  $\epsilon_{\partial S}$  ab, deren Einfluss von der Größenordnung der numerischen Rechengenauigkeit ist, gibt es außer der räumlichen und der zeitlichen Auflösung keine numerischen Parameter. Im ersten Unterkapitel wird daher der Einfluss der räumlichen Auflösung und der Courantzahl  $Co$  auf Lösungen illustriert.

### 13.7.1 Einfluss der Courantzahl $Co$ und die Anzahl $N_{\text{cls}}$ der Zellen

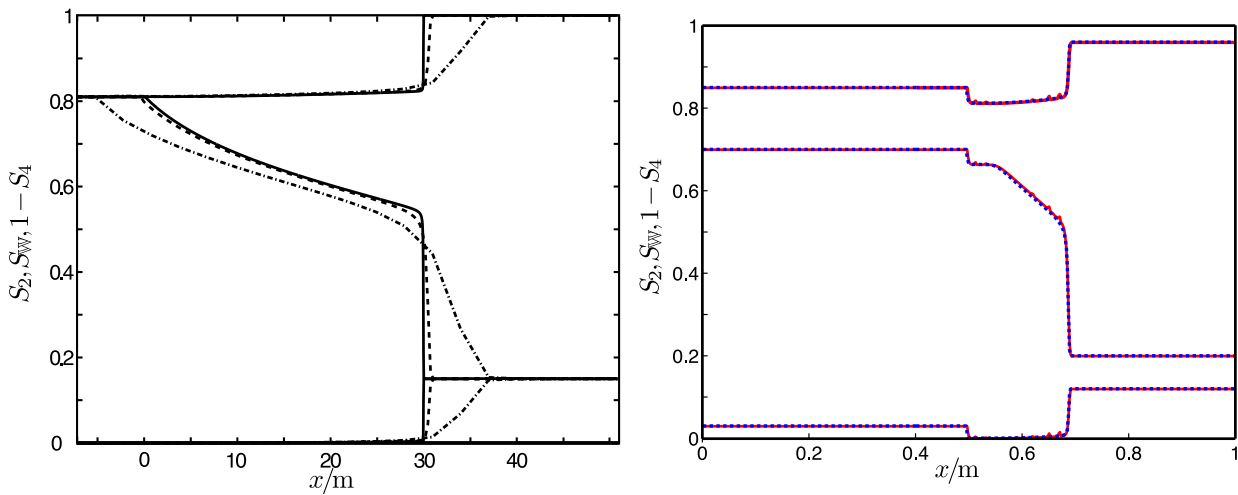
Die numerischen Parameter sind die Courantzahl  $Co$ , die Anzahl der finiten Volumina  $N_{\text{cls}}$  und die Regularisierungsparameter  $\epsilon_{\partial S}$  und  $\epsilon_v$ . Typische Werte sind in Tabelle 13.1 aufgeführt.

Parameter	Wert
$N_{\text{cls}}$	500
$Co$	0.5
$\epsilon_{\partial S}$	$10^{-10}$
$\epsilon_v$	$10^{-10}$

**Tabelle 13.1:** Numerische Parameter für SimBL. Man beachte, dass der Algorithmus dimensionslos formuliert ist und die Parameter  $\epsilon_{\partial S}$  und  $\epsilon_v$  einheitenlos sind.

listet. Der Einfluss der numerischen Parameter auf die Lösung wird in diesem Unterkapitel anhand der Lösung von Buckley-Leverett-Problemen illustriert. Die Regularisierungsparameter  $\epsilon_{\partial S}$  und  $\epsilon_v$  haben bis zu Werten von  $\approx 10^{-5}$  keinerlei Einfluss. Auf eine Darstellung ihres Einflusses wird daher verzichtet.

Abbildung 13.1a zeigt einen Vergleich von Sättigungsprofilen für eine unterschiedliche Anzahl an Zellen. Der Vergleich zeigt, wie die numerische Diffusion mit zunehmender Anzahl an Zellen abnimmt. Für  $N_{\text{cls}} = 50$  Zellen (gestrichpunktete Kurve) hat die Wassersättigung



**Abbildung 13.1:** Abbildung (a) zeigt einen Vergleich von Sättigungsprofilen für eine unterschiedliche Anzahl an Zellen. Gestrichelpunktete Kurven zeigen die Lösung für  $N_{\text{cls}} = 50$  Zellen, gestrichelte Kurven für  $N_{\text{cls}} = 500$  Zellen und durchgezogene Kurven für  $N_{\text{cls}} = 5000$ . Abbildung (b) zeigt die Wirkung einer geringfügig zu großen Courantzahl ( $Co = 1.1$ , rot durchgezogene Kurven) im Vergleich zu einer geeigneten Courantzahl ( $Co = 0.5$ , blau gepunktete Kurven).

$S_{\text{W}}$  aufgrund der numerischen Diffusion stromaufwärts der Unstetigkeitsstelle bei  $x = 0$  abgenommen. Die Front der Stoßwelle wird mit größerer Auflösung steiler und ein Vergleich mit der analytischen Lösung zeigt, dass die Lösung konvergiert.

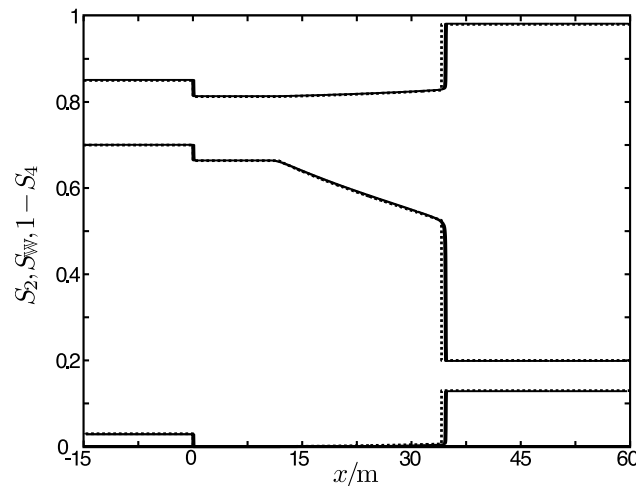
Abbildung 13.1b zeigt den Einfluss der Courantzahl  $Co$  auf die Lösung. Schon für geringfügig zu groß gewählte  $Co$  wird das Ergebnis instabil und Oszillationen treten auf. Für größere  $Co$  werden die Oszillationen so groß, dass die Lösung weder dargestellt noch interpretiert werden kann.

### 13.7.2 Vergleich mit analytischen Lösungen

Der Godunov-Löser basiert auf der hyperbolischen Näherung mit immobilen, nichtperkolierenden Phasen des Modells. In dieser Näherung wurden analytische Lösungen in Kapitel 7 und 8 hergeleitet. Dies ermöglicht einen Vergleich der dort analytisch bestimmten Lösungen mit numerischen Lösungen die mit **SimBL** berechnet wurden.

Für alle Vergleichsrechnungen wurden Randbedingungen mit Extrapolation nullter Ordnung, eine Courantzahl von  $Co = 0.3$  und  $N_{\text{cls}} = 5000$  Zellen verwendet. Die übrigen Werte müssen auch für die analytischen Lösungen spezifiziert werden und sind identisch gewählt.

Abbildung 13.2 zeigt einen Vergleich von Sättigungsprofilen der analytischen Lösung (gepunktete Kurven) und der numerischen Lösung (durchgezogene Kurven) eines Buckley-



**Abbildung 13.2:** Vergleich von Sättigungsprofilen der analytischen Lösung (gepunktete Kurven) und der numerischen Lösung (durchgezogene Kurven) eines Buckley-Leverett-Problems.

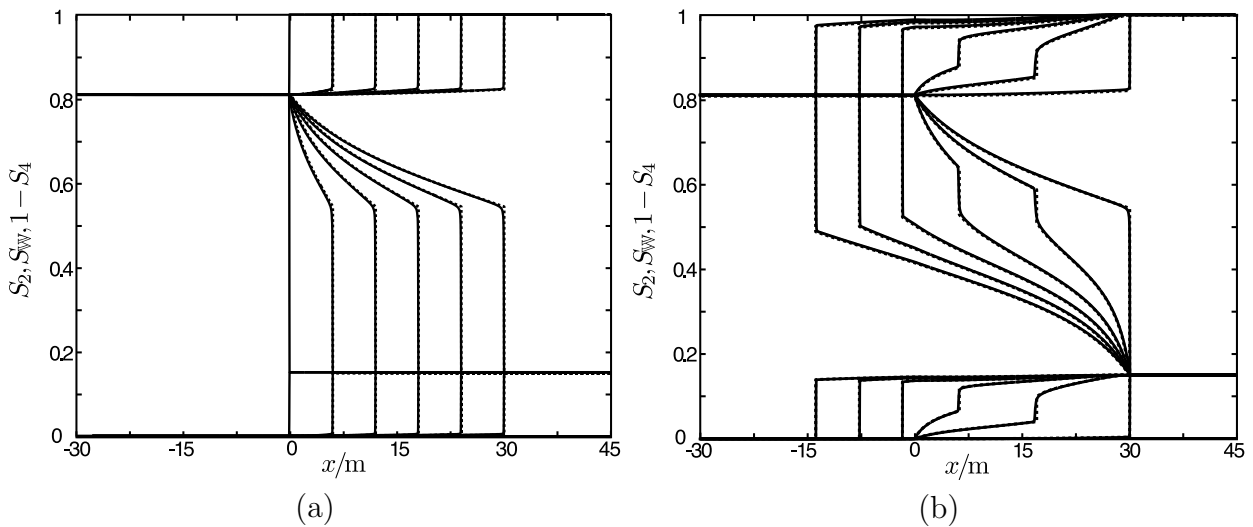
Leverett-Problems. Die Abbildung zeigt, dass beide Lösungen nahezu identisch sind.

Abb.	$i$	$S_i^d$	$S_{2i}^d$	$S_{4i}^d$	$i$	$S_-^{(i)}$	$S_{2-}^{(i)}$	$S_{4-}^{(i)}$	$v^{(i)}/(\text{m/d})$
13.4a	–	0.32	0.00	0.00	$\ell$	–	–	–	–
	+	0.364	0.00	0.158	$r$	0.325	0.00	0.149	0.236
13.4b	–	0.622	0.013	0.053	$\ell$	0.616	0.013	0.044	–1.217
	+	0.459	0.054	0.154	$r$	–	–	–	–
13.4c	–	0.528	0.075	0.101	$\ell$	–	–	–	–
	+	0.454	0.057	0.131	$r$	–	–	–	–
13.4d	–	0.461	0.104	0.064	$\ell$	–	–	–	–
	+	0.380	0.057	0.038	$r$	0.369	0.062	0.027	1.015

**Tabelle 13.2:** Charakteristische Werte der numerischen Lösungen der in Abbildung 13.4a-d dargestellten Anfangs- und Randwertprobleme. Es werden keine Werte für Stoßwellen angegeben, wenn entweder keine Stoßwellen vorkommen, oder aufgrund der numerischen Diffusion keine eindeutigen Werte zugeordnet werden können.

Abbildung 13.3 zeigt einen Vergleich von Sättigungsprofilen der analytischen Lösung (gepunktete Kurven) und der numerischen Lösung (durchgezogene Kurven) eines Buckley-Leverett-Problems, wobei die Strömungsrichtung zum Zeitpunkt  $\tau_r$  umgedreht wird. Abbildung 13.3a zeigt Sättigungsprofile in äquidistanten Zeitabständen für die eindringende Bewässerungsfront und Abbildung 13.3b für die zurückweichende Entwässerungsfront. Auch hier sind beide Lösungen nahezu identisch.

Abbildung 13.4 zeigt einen Vergleich von Sättigungsprofilen der analytischen Lösung (gepunktete Kurven) und der numerischen Lösung (durchgezogene Kurven) von vier unter-

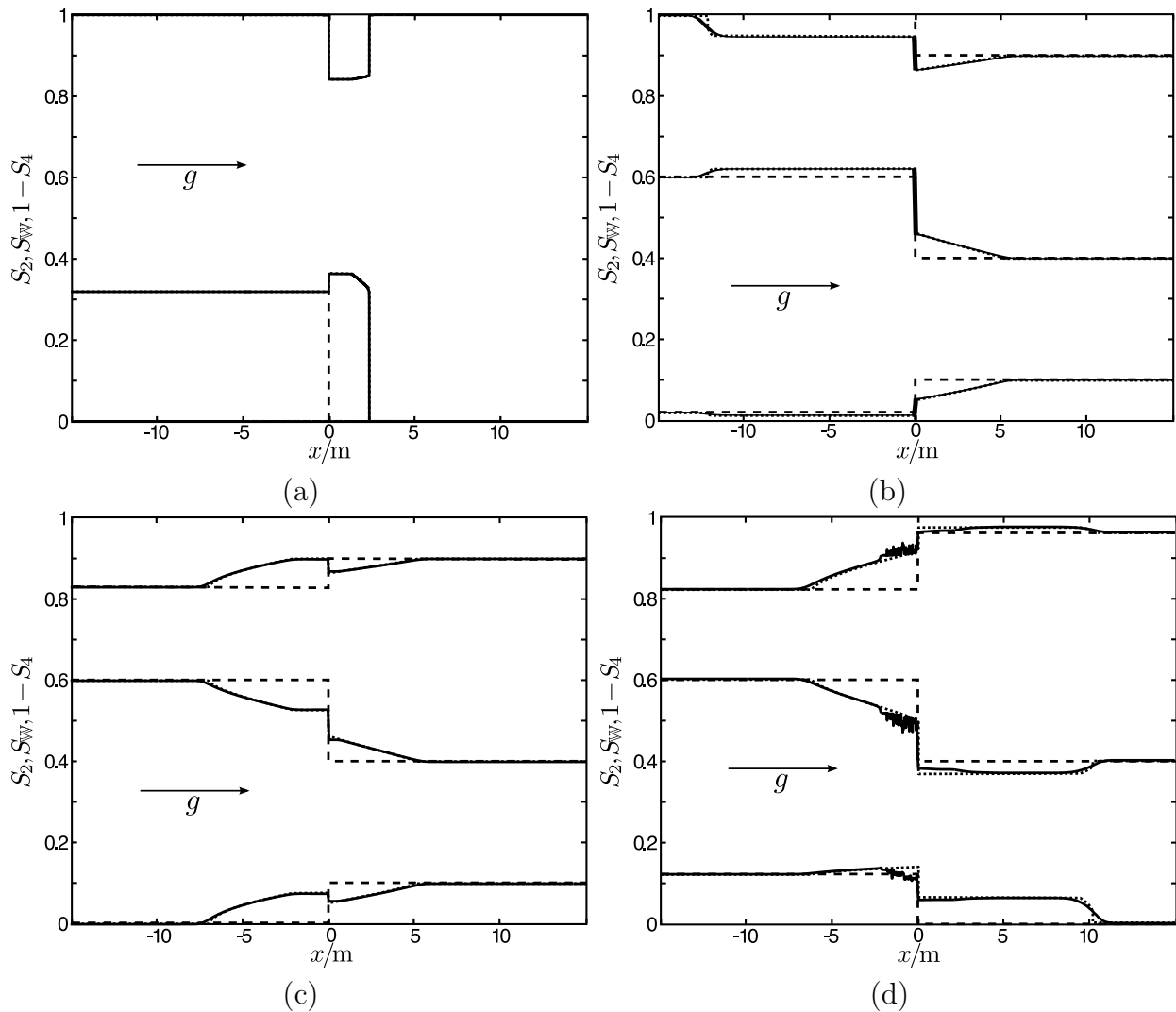


**Abbildung 13.3:** Vergleich von Sättigungsprofilen der analytischen Lösung (gepunktete Kurven) und der numerischen Lösung (durchgezogene Kurven) eines Buckley-Leverett-Problems, wobei die Strömungsrichtung zum Zeitpunkt  $\tau_r$  umgedreht wird. Abbildung (a) zeigt Sättigungsprofile in äquidistanten Zeitabständen für die eindringende Bewässerungsfront und Abbildung (b) für die zurückweichende Entwässerungsfront.

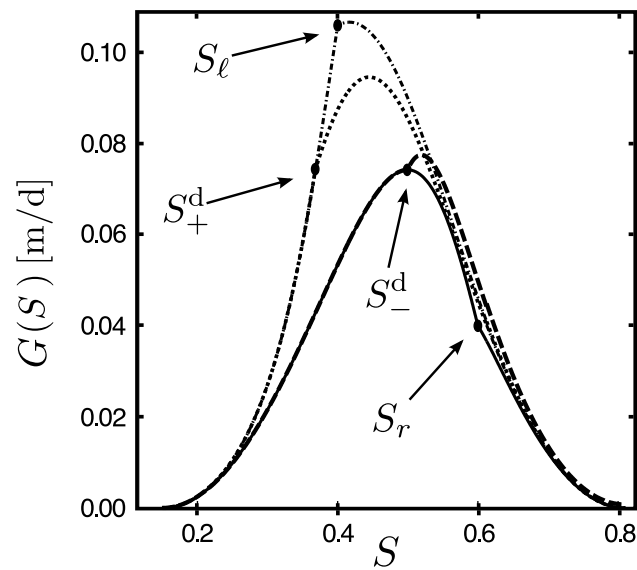
schiedlichen Anfangsbedingungen für die schwerkraftgetriebene Umverteilung. Alle vier Vergleiche zeigen eine gute Übereinstimmung zwischen analytischer und numerischer Lösung. In Abbildung 13.4a-c sind die Lösungen abermals nahezu identisch. Zum Vergleich sind charakteristische Werte der Lösungen in Tabelle 13.2 aufgelistet. Sie können mit den Werten der analytischen Lösung aus Tabelle 8.2 verglichen werden. Nur Abbildung 13.4d zeigt numerische Oszillationen links der Unstetigkeitsstelle der Anfangsbedingungen. Der Grund für diese numerischen Instabilitäten wird verständlich, wenn man die entsprechenden Flussfunktionen grafisch darstellt.

Abbildung 13.5 illustriert den Grund der numerischen Instabilität in Abbildung 13.4d anhand von Flussfunktionen für die vier Tripel von Anfangssättigungen  $S_{w0}, S_{20}, S_{40}$ . Die Charakteristiken der Anfangsbedingungen  $S_{w\ell}$  und  $S_{wr}$  laufen aus der Unstetigkeitsstelle, da  $g_-(S_{w\ell}) < 0$  und  $g_+(S_{wr}) > 0$ . Die analytische Lösung liefert in diesem Fall Sättigungen  $S_-^d, S_+^d$  an den beiden Seiten der Unstetigkeit, wobei für eine der beiden Sättigungen  $g_{\pm}(S_{\pm}^d) = 0$  gilt. In dem betrachteten Fall ist dies für  $S_-^d$  der Fall. Die Instabilität im Algorithmus entsteht dadurch, dass nur für den Bewässerungsast  $g_-^{im}(S_-^d, S_-^d, S_{2-}^d, S_{4-}^d) = 0$  gilt und der Entwässerungsast  $g_-^{dr}(S_-^d, S_-^d, S_{2-}^d, S_{4-}^d) > 0$  ist. Das bedeutet, dass sich die Ausgangssituation verändert, wenn kurzzeitig in einem Zeitschritt die Sättigung an der Unstetigkeit  $S_-^d$  zunimmt. Die Charakteristiken laufen dann nicht mehr auf beiden Seiten aus der Unstetigkeit heraus, sondern überqueren die Unstetigkeit. Die entsprechenden Lösungen für die Sättigungen  $S_{\pm}^d$  unterscheiden sich erheblich. Eine kleine Störung kann daher die Lösung





**Abbildung 13.4:** Vergleich von Sättigungsprofilen der analytischen Lösung (gepunktete Kurven) und der numerischen Lösung (durchgezogene Kurven) von vier unterschiedlichen Anfangsbedingungen für die schwerkraftgetriebene Umverteilung. Die Anfangsbedingungen werden durch gestrichelte Kurven dargestellt.



**Abbildung 13.5:** Illustration des Grundes der numerischen Instabilität in Abbildung 13.4d. Dargestellt sind die vier relevanten Flussfunktionen für die dort gezeigte schwerkraftgetriebene Umverteilung. Die durchgezogene Kurve zeigt die Flussfunktion  $G(S, S_{w0\ell}, S_{20\ell}, S_{40\ell})$ , die gestrichelte Kurve  $G(S, S_{w0r}, S_{20r}, S_{40r})$ , die gepunktete Kurve zeigt  $G(S, S_+^d, S_{2+}^d, S_{4+}^d)$  und die gestrichelte Kurve zeigt  $G(S, S_-^d, S_{2-}^d, S_{4-}^d)$ . Die entsprechenden Anfangssättigungen werden durch Pfeile identifiziert.

stark verändern. Dies führt zu den Oszillationen.

## 13.8 Vor- und Nachteile von SimBL

Abschließend sollen hier noch einige Vor- und Nachteile des Algorithmus **SimBL** diskutiert werden. Außerdem wird noch kurz auf mögliche Verbesserungen und Erweiterungen eingegangen.

Der Algorithmus ist schnell und genau. Bis auf die diskutierte Instabilität ist er auch stabil. Er ist einfach zu programmieren und kann als Baustein für aufwendigere Algorithmen dienen, die Kapillar- und Grenzflächenterme, mobile nichtperkolierende Phasen, Druckrandbedingungen und mehrere Raumdimensionen berücksichtigen. Der einzige Nachteil dabei ist, dass nicht alle diese Erweiterungen in CLAWPACK implementiert werden können.

## 14 FlmPSSS

In diesem Kapitel wird der Algorithmus **FlmPSSS** vorgestellt. Er ist ein voll impliziter Finite-Volumen-Algorithmus für vier nichtlineare, gekoppelte partielle Differentialgleichungen und in MATLAB implementiert. Der Algorithmus löst die Massenbilanzgleichungen des Modells. Dabei wurden die Impulsbilanzen nach den Flüssen aufgelöst und in die Massenbilanzen eingesetzt. Im ersten Unterkapitel werden die Gleichungen zusammengefasst und nötige Anpassungen auf analytischer Ebene diskutiert. Die Implementierung wird im zweiten Unterkapitel diskutiert. Auch für **FlmPSSS** ist dieses Unterkapitel deutlich umfangreicher als bei **AMG9** und **AMG3+1**, da der Algorithmus von Grund auf neu entwickelt und implementiert wurde. Nach Unterkapiteln über die Anfangs- und Randbedingungen folgt ein Unterkapitel, in welchem Konvergenz und Genauigkeit anhand von Vergleichen von analytischen Lösungen mit Lösungen des Algorithmus **FlmPSSS** sowie eine Parameterstudie der numerischen Parameter durchgeführt wird. Abschließend werden Vor- und Nachteile des Algorithmus erörtert.

### 14.1 Anpassung der Gleichungen

Der Algorithmus basiert auf den Massenbilanzgleichungen des Modells. Diese lauten für die vier Phasen perkolierendes Wasser (Index 1), nichtperkolierendes Wasser (Index 2), perkolierendes Öl (Index 3) und nichtperkolierendes Öl (Index 4)

$$\varrho_{\text{w}}\phi \frac{\partial S_1}{\partial t} + \varrho_{\text{w}} \frac{\partial q_1}{\partial x} = M_1, \quad (14.1a)$$

$$\varrho_{\text{w}}\phi \frac{\partial S_2}{\partial t} + \varrho_{\text{w}} \frac{\partial q_2}{\partial x} = M_2 = -M_1, \quad (14.1b)$$

$$\varrho_{\text{o}}\phi \frac{\partial S_3}{\partial t} + \varrho_{\text{o}} \frac{\partial q_3}{\partial x} = M_3, \quad (14.1c)$$

$$\varrho_{\text{o}}\phi \frac{\partial S_4}{\partial t} + \varrho_{\text{o}} \frac{\partial q_4}{\partial x} = M_4 = -M_3, \quad (14.1d)$$

wobei  $q_i$  den Volumenfluss der  $i$ -ten Phase bezeichnet. Der Massenaustauschterm des Wassers wird  $M_1$  bezeichnet und der Massenaustauschterm des Öls  $M_3$ . Sie haben die Form

$$M_1(S_1, S_2, \partial_t S_1, \partial_t S_2) = \eta_2 \phi \varrho_{\text{W}} \left( \frac{S_2 - S_2^*}{S_{\text{W}}^* - S_1 - S_2} \right) \frac{\partial(S_1 + S_2)}{\partial t}, \quad (14.2a)$$

$$M_3(S_3, S_4, \partial_t S_3, \partial_t S_4) = \eta_4 \phi \varrho_{\text{O}} \left( \frac{S_4 - S_4^*}{S_{\text{O}}^* - S_3 - S_4} \right) \frac{\partial(S_3 + S_4)}{\partial t}. \quad (14.2b)$$

Es werden die modifizierten Parameterfunktionen  $S_{\text{W}}^*$ ,  $S_2^*$ ,  $S_4^*$  aus Gleichung (3.9)

$$\begin{aligned} S_{\text{W}}^*(S_1, S_2, \partial_t S_1, \partial_t S_2) &= (1 - \min(S_{\text{O im}}, (1 - \epsilon_{\text{M}})(1 - S_1 - S_2))) \Theta(\partial_t S_1 + \partial_t S_2) \\ &\quad + \min(S_{\text{W dr}}, (1 - \epsilon_{\text{M}})(S_1 + S_2)) [1 - \Theta(\partial_t S_1 + \partial_t S_2)], \end{aligned} \quad (14.3a)$$

$$S_2^*(S_1, S_2, \partial_t S_1, \partial_t S_2) = \min(S_{\text{W dr}}, (1 - \epsilon_{\text{M}})(S_1 + S_2)) [1 - \Theta(\partial_t S_1 + \partial_t S_2)], \quad (14.3b)$$

$$S_4^*(S_3, S_4, \partial_t S_3, \partial_t S_4) = \min(S_{\text{O im}}, (1 - \epsilon_{\text{M}})(S_3 + S_4)) [1 - \Theta(\partial_t S_3 + \partial_t S_4)] \quad (14.3c)$$

verwendet. Die Impulsbilanzen können nach den Flüssen aufgelöst werden (siehe Kapitel 5.1) und man erhält

$$\begin{pmatrix} q_1 \\ q_2 \\ q_3 \\ q_4 \end{pmatrix} = \Lambda \begin{pmatrix} -\partial_x P_1 + \varrho_{\text{W}} g \sin \vartheta \\ -\partial_x (P_3 - \gamma P_2^* S_2^{\gamma-1}) + \varrho_{\text{W}} g \sin \vartheta + P_{\text{a}} \partial_x S_1^{-\alpha} \\ -\partial_x P_3 + \varrho_{\text{O}} g \sin \vartheta \\ -\partial_x (P_1 - \delta P_4^* S_4^{\delta-1}) + \varrho_{\text{O}} g \sin \vartheta + P_{\text{b}} \partial_x S_3^{-\beta} \end{pmatrix}. \quad (14.4)$$

Es wird außerdem die Näherung der viskosen Dominanz (siehe Kapitel 4.2) verwendet, sodass die verallgemeinerte Mobilitätsmatrix nur eine Funktion der Sättigungen ist. Ihre Komponenten lauten

$$\lambda_{ij}(S_1, S_2, S_3, S_4) = \phi^2 S_i S_j [\tilde{R}^{-1}]_{ij} \quad (14.5)$$

mit den viskosen Kopplungsparametern  $R_{ij}$  mit  $i = 1, 2, 3, 4$  und  $j = 1, 2, 3, 4, 5$  und der Porosität  $\phi$ . Der Vektor auf der rechten Seite von Gleichung (14.4) wird im Folgenden in Analogie zur Hydrologie als  $-\text{grad } H$  mit den Komponenten der hydraulischen Druckhöhe  $H$  bezeichnet:

$$H_1 := P_1 - \varrho_{\text{W}} g \sin \vartheta x, \quad (14.6a)$$

$$H_2 := P_3 - \gamma P_2^* S_2^{\gamma-1} - P_{\text{a}} S_1^{-\alpha} - \varrho_{\text{W}} g \sin \vartheta x, \quad (14.6b)$$

$$H_3 := P_3 - \varrho_{\text{O}} g \sin \vartheta x, \quad (14.6c)$$

$$H_4 := P_1 - \delta P_4^* S_4^{\delta-1} - P_{\text{b}} S_3^{-\beta} - \varrho_{\text{O}} g \sin \vartheta x. \quad (14.6d)$$

Das Gleichungssystem ist geschlossen, da außerdem die Volumenerhaltung für inkompressible Fluide

$$S_1 + S_2 + S_3 + S_4 = 1 \quad (14.7)$$

und die selbstkonsistente Schließbedingung

$$\frac{\partial P_3}{\partial x} = \frac{\partial P_1}{\partial x} + \frac{1}{2} \frac{\partial}{\partial x} \left( P_a S_1^{-\alpha} - P_b S_3^{-\beta} + \gamma P_2^* S_2^{\gamma-1} - \delta P_4^* S_4^{\delta-1} \right) \quad (14.8)$$

für die Drücke berücksichtigt werden.

### 14.1.1 Auswahl der primären Variablen

Das System der sechs gekoppelten differentialalgebraischen Gleichungen (14.1), (14.7) und (14.8) kann auf vier nichtlineare partielle Differentialgleichungen reduziert werden, wenn Gleichung (14.7) nach  $S_4$  aufgelöst wird und das Ergebnis zusammen mit Gleichung (14.8) verwendet wird, um in Gleichung (14.1)  $S_4$  und  $P_3$  zu eliminieren. Die verbleibenden vier primären Variablen lauten dann  $S_1$ ,  $S_2$ ,  $S_3$  und  $P_1$ .

### 14.1.2 Regularisierung der Sättigungen

Da der Löser nicht explizit die physikalische Schranke  $S_i > 0$  berücksichtigt, kann es insbesondere während Iterationen zur Lösung von nichtlinearen Gleichungen vorkommen, dass Sättigungen  $S_i < 0$  berechnet werden. Um komplexe Zahlen bzw. einen numerischen Überlauf aufgrund zu großer Zahlen ausgelöst durch negative bzw. kleine Sättigungen zu vermeiden, müssen die Sättigungen regularisiert werden. Durch das Ersetzen aller Sättigungen  $S_i$  durch

$$S_i(x, t) \longrightarrow \max(S_i(x, t), \epsilon_S), \quad (14.9)$$

wobei  $\epsilon_S$  ein kleiner Regularisierungsparameter ist, wird genau dies erreicht.

## 14.2 Implementierung des Modells

In diesem Unterkapitel wird dargelegt, wie die vier im vorherigen Kapitel zusammengefassten nichtlinearen, partiellen Differentialgleichungen in einer voll impliziten, zellzentrierten Finite-Volumen-Diskretisierung implementiert werden. Die Flüsse werden mit dem CIR-Verfahren

(nach Courant, Isaacson<sup>1</sup> und Rees<sup>2</sup>), auch bekannt unter dem Namen Upwind-Verfahren, bestimmt. Das Unterkapitel ist seinerseits wieder in Unterkapitel gegliedert. Im ersten Unterkapitel wird die Diskretisierung durchgeführt. Die Gleichungen in der diskreten Form erfordern die Lösung nichtlinearer Gleichungssysteme. Die verwendete Methode wird im zweiten Unterkapitel vorgestellt. Die Berechnung der Elemente der Jacobi-Matrix wird im nächsten Unterkapitel vorgestellt. Danach wird das verwendete adaptive Zeitschrittverfahren vorgestellt. In den letzten drei Unterkapiteln werden Tricks beschrieben, die das Konvergenzverhalten verbessern. Es wird das CIR-Verfahren bei Vorzeichenwechseln ebenso geglättet wie das Umschalten von Be- und Entwässerung und die Heaviside-Sprungfunktion in Gleichung (14.3).

### 14.2.1 Zeitlich implizite Finite-Volumen-Diskretisierung

Die Diskretisierung der partiellen Differentialgleichung in finite Volumina (14.1) erhält man durch Integration der Gleichung für jede Fluidphase  $j$  mit  $j = 1, 2, 3, 4$  über die Zelle  $i$  und den Zeitschritt  $k$

$$\int_{t^k}^{t^k + \Delta t} \int_{x_i - \frac{\Delta x}{2}}^{x_i + \frac{\Delta x}{2}} \left( \frac{\partial S_j}{\partial t} + \frac{1}{\phi} \frac{\partial}{\partial x} q_j - \frac{M_j}{\phi \varrho_j} \right) dx dt = 0, \quad (14.10)$$

wobei die einzelnen Gleichungen jeweils durch  $\phi$  und  $\varrho_j$  geteilt wurden. Das Zeitintegral über die Zeitableitung und das Raumintegral über die Raumableitungen können direkt ausgeführt werden, so dass

$$\int_{x_i - \frac{\Delta x}{2}}^{x_i + \frac{\Delta x}{2}} (S_j^{k+1} - S_j^k) dx + \frac{1}{\phi} \int_{t^k}^{t^k + \Delta t} \left( q_{j, i+\frac{1}{2}} - q_{j, i-\frac{1}{2}} \right) dt - \int_{t^k}^{t^k + \Delta t} \int_{x_i - \frac{\Delta x}{2}}^{x_i + \frac{\Delta x}{2}} \frac{M_j}{\phi \varrho_j} dx dt = 0 \quad (14.11)$$

gilt, wobei der obere Index  $k + 1$  den Wert der Variablen zur Zeit  $t = t^k + \Delta t$  und der Index  $k$  zur Zeit  $t^k$  bezeichnet. Der untere Index  $i + \frac{1}{2}$  bezeichnet den Wert der entsprechenden Funktion an der Stelle  $x = x_i + \Delta x/2$  und der Index  $i - \frac{1}{2}$  an der Stelle  $x = x_i - \Delta x/2$ . Man beachte, dass der Index  $j$  eine Phase identifiziert.

In einer zellzentrierten, zeitlich impliziten Diskretisierung werden die Werte der Integranden der räumlichen Integrale durch ihre Mittelwerte und die Integranden der zeitlichen Integrale

<sup>1</sup>Eugene Isaacson (1919-2008), amerikanischer Mathematiker

<sup>2</sup>Mina Rees (1902-1997), amerikanische Mathematikerin

durch den Wert bei  $t = t^{k+1}$  approximiert. Die diskretisierte Gleichung lautet damit

$$\Delta x (S_{j_i}^{k+1} - S_{j_i}^k) + \Delta t \frac{1}{\phi} \left( q_{j_{i+\frac{1}{2}}}^{k+1} - q_{j_{i-\frac{1}{2}}}^{k+1} \right) - \Delta t \Delta x \frac{M_{j_i}^{k+1}}{\phi \varrho_j} = 0, \quad (14.12)$$

wobei der Fluss  $q_{j_{i-\frac{1}{2}}}^{k+1}$  durch die Zellgrenze zwischen Zelle  $i$  und  $i-1$  durch die finite Differenz der Druckhöhen in den Zentren der Zellen und den Mobilitäten an den Zellgrenzen

$$q_{j_{i-\frac{1}{2}}}^{k+1} = - \sum_{m=1}^4 \lambda_{jm_{i-\frac{1}{2}}}^{k+1} \frac{H_{m_i}^{k+1} - H_{m_{i-1}}^{k+1}}{\Delta x} \quad (14.13)$$

gegeben ist. Die diskreten Werte der Komponenten der hydraulischen Druckhöhe  $H$  in den Zentren der Zellen sind durch die Mittelwerte der Primärvariablen

$$H_{m_i}^{k+1} = H_m (S_{1_i}^{k+1}, S_{2_i}^{k+1}, S_{3_i}^{k+1}, P_{1_i}^{k+1}) \quad (14.14)$$

gegeben. Die Komponenten der Mobilitätsmatrix an den Zellgrenzen werden voll stromaufwärts entsprechend des jeweiligen Druckhöhengradienten gewichtet (CIR-Verfahren). Sie lauten

$$\lambda_{jm_{i-\frac{1}{2}}}^{k+1} = \begin{cases} \lambda_{jm} (S_{1_{i-1}}^{k+1}, S_{2_{i-1}}^{k+1}, S_{3_{i-1}}^{k+1}) & \text{für } H_{m_i}^{k+1} - H_{m_{i-1}}^{k+1} < 0 \\ \lambda_{jm} (S_{1_i}^{k+1}, S_{2_i}^{k+1}, S_{3_i}^{k+1}) & \text{für } H_{m_i}^{k+1} - H_{m_{i-1}}^{k+1} > 0 \end{cases}. \quad (14.15)$$

Die diskreten Massenaustauschterme in den Zellen werden aus den Massenaustauschfunktion aus den Gleichungen (14.2) durch Einsetzen der Zellmittelwerte zum Zeitpunkt  $t^{k+1}$  sowie rückwärts gewichteten zeitlichen finiten Differenzen der Zellmittelwerte zum Zeitpunkt  $t^{k+1}$  als

$$M_{1_i}^{k+1} = M_1 \left( S_{1_i}^{k+1}, S_{2_i}^{k+1}, \frac{S_{1_i}^{k+1} - S_{1_i}^k}{\Delta t}, \frac{S_{2_i}^{k+1} - S_{2_i}^k}{\Delta t} \right) \quad (14.16a)$$

$$M_{3_i}^{k+1} = M_3 \left( S_{3_i}^{k+1}, S_{4_i}^{k+1}, \frac{S_{3_i}^{k+1} - S_{3_i}^k}{\Delta t}, \frac{S_{4_i}^{k+1} - S_{4_i}^k}{\Delta t} \right) \quad (14.16b)$$

approximiert. In Gleichung (14.16b) wird dabei  $S_4$  lediglich als Kurzschreibweise für  $1 - S_1 - S_2 - S_3$  verstanden, da bei der Wahl der primären Variablen  $S_4$  eliminiert wurde.

Gleichung (14.12) ist mit diesen Überlegungen der Baustein für ein nichtlineares Gleichungssystem von  $4 \times N_{\text{cls}}$  gekoppelten Gleichungen mit  $j = 1, \dots, 4$  und  $i = 1, \dots, N_{\text{cls}}$  für die Variablen  $S_{1_i}^{k+1}, S_{2_i}^{k+1}, S_{3_i}^{k+1}, P_{1_i}^{k+1}$  zum nächsten Zeitpunkt  $t^{k+1} = t^k + \Delta t$ . Es muss numerisch gelöst werden.

### 14.2.2 Der Löser für das nichtlineare Gleichungssystem

Zur Lösung des nichtlinearen Gleichungssystem (14.12) wird ein Newton-Raphson Schema (siehe Anhang B.3.1) verwendet. Das linearisierte Gleichungssystem wird mit `mldivide` von MATLAB (siehe Anhang B.2) gelöst. Bei einer impliziten Diskretisierung sind die Werte der Primärvariablen des nächsten Zeitschritts  $t^{k+1}$  die Lösung des Gleichungssystems. Es bietet sich daher an, die Lösung des aktuellen Zeitschritts  $t^k$  als Startwert für das iterative Verfahren zu verwenden. Man beachte, dass dann durch den Konvergenzbereich des Verfahrens eine obere Schranke für den Zeitschritt gesetzt wird, obwohl ein voll implizites Verfahren theoretisch bedingungslos stabil ist. Eine weitere Schranke kann durch die Konditionierung der Jacobi-Matrix erzeugt werden. Numerische Verfahren zur Lösung linearer Gleichungssysteme können versagen, wenn die Matrix ungünstige Eigenschaften hat.

Die linke Seite von Gleichung (14.12) ist der Baustein für das zu lösende nichtlineare Gleichungssystem. Es sei formal als  $f(\cdot) = 0$  geschrieben. In den Gleichungen wird eine dreifache Indizierung verwendet, wobei  $k = 0, 1, \dots$  den Zeitschritt,  $i = 1, \dots, N_{\text{cls}}$  die Zelle und  $j = 1, 2, 3, 4$  die Phase indiziert. Zur Bestimmung der Werte am Zeitpunkt  $t^{k+1}$  werden die Gleichungen derart sortiert, dass die Funktionskomponente  $f_{m=4(i-1)+j}$  die linke Seite der Gleichung der  $j$ -ten Phase in der  $i$ -ten Zelle mit  $m = 1, \dots, 4 \times N_{\text{cls}}$  ist. Die Primärvariablen sind ebenso gruppiert mit  $u_{o=4(i-1)+j}$ , wobei hier  $u_{4(i-1)+1} = S_{1i}$ ,  $u_{4(i-1)+2} = S_{2i}$ ,  $u_{4(i-1)+3} = S_{3i}$  und  $u_{4(i-1)+4} = P_{1i}$  mit  $o = 1, \dots, 4 \times N_{\text{cls}}$  ist. Die Komponenten der Jacobi-Matrix  $J$  werden numerisch durch

$$J_{mo} = \frac{1}{2\epsilon_{\text{der}}} (f_m(u_1, \dots, u_o + \epsilon_{\text{der}}, \dots, u_{4N_{\text{cls}}}) - f_m(u_1, \dots, u_o - \epsilon_{\text{der}}, \dots, u_{4N_{\text{cls}}})) \quad (14.17)$$

mit  $\epsilon_{\text{der}} = 10^{-10}$  bestimmt. Eine analytische Berechnung ist zwar prinzipiell möglich, bringt jedoch keinen zusätzlichen Nutzen. Das Verfahren wird als konvergiert betrachtet, wenn

$$\max (|S_{ji}^r - S_{ji}^{r-1}|, 0.001 \text{ Pa}^{-1} |P_{1i}^r - P_{1i}^{r-1}|) < \epsilon_{\text{tol}} \quad (14.18)$$

gilt, wobei der obere Index  $r$  die  $r$ -te Iteration, der untere Index  $j$  die Phase  $j = 1, 2, 3$  und der untere Index  $i$  die Zelle  $i = 1, \dots, N_{\text{cls}}$  bezeichnet.

Aufgrund der Heaviside-Sprungfunktionen in den Parameterfunktionen von Gleichung (14.3) sind die Funktionen  $f$  des Gleichungssystems nicht überall differenzierbar, da sich linksseitiger und rechtsseitiger Limes an bestimmten Sättigungen unterscheiden. Auch wenn dies bereits durch die numerische Differentiation (14.17) gemildert wird, kann dies zu Schwierigkeiten bei der Lösung des  $4 \times N_{\text{cls}}$  nichtlinearen Gleichungssystems führen. Es sind daher



noch einige kleinere Anpassungen am Verfahren und an den Gleichungen nötig, die in den folgenden Abschnitten diskutiert werden.

### Adaptive Zeitschritte

Obwohl ein voll implizites Schema zur Lösung von partiellen Differentialgleichungen prinzipiell bedingungslos stabil ist, kann der Konvergenzbereich und die Konditionierung der Jacobi-Matrix den Zeitschritt begrenzen.

Der Konvergenzbereich ist im Einzelfall nicht bekannt und seine Bestimmung wäre bezüglich des Rechenaufwands teurer als das Gleichungssystem zu lösen. Empirisch kann man jedoch in Abhängigkeit der zu erzielenden Genauigkeit  $\epsilon_{\text{tol}}$  eine Schwelle für die Anzahl der Iterationen wählen. Ist nach  $n$  Iterationen das Verfahren nicht konvergiert, wird der Zeitschritt z.B. halbiert.

Die Konditionierung einer Matrix kann mit einer Routine in MATLAB geschätzt werden, die die Methoden aus [Hage 84, High 00] verwendet. Es zeigt sich, dass  $\kappa_c = 10^{10}$  eine geeignete Schwelle ist, um den Zeitschritt zu halbieren.

Die beiden Methoden zur Verfeinerung des Zeitschritts lassen sich mit Sicherheit noch deutlich verbessern. Allerdings genügen die implementierten Varianten, um eine deutlich verbesserte Stabilität zu gewährleisten.

### Glättung des CIR-Verfahrens

In Gleichung (14.15) werden die Mobilitäten an den Zellgrenzen nach dem CIR-Verfahren stromaufwärts gewichtet bestimmt. Bei kleinen hydraulischen Druckhöhengradienten kann es vorkommen, dass sich das Vorzeichen des Gradienten mit un stetigen Änderungen der Mobilitätsmatrixkomponenten aufgrund der veränderten Strömungsrichtung ändert. Im schlimmsten Fall kann dies eine Konvergenz des Newton-Raphson-Verfahren verhindern. Um dies zu vermeiden, wird das Umschalten durch eine Tangenshyperbolicusfunktion geglättet. Damit lautet die Mobilität  $\lambda_{jm_{i+\frac{1}{2}}}^{k+1}$  zwischen den Zellen  $i$  und  $i+1$  zum Zeitpunkt  $t = t^{k+1}$

$$\begin{aligned} \lambda_{jm_{i-\frac{1}{2}}}^{k+1} = & \lambda_{jm}(S_{1_{i-1}}^{k+1}, S_{2_{i-1}}^{k+1}, S_{3_{i-1}}^{k+1}) \frac{1}{2} \left( 1 - \tanh \left( \kappa_h \frac{H_i^{k+1} - H_{i-1}^{k+1}}{\Delta x} \right) \right) \\ & + \lambda_{jm}(S_{1_i}^{k+1}, S_{2_i}^{k+1}, S_{3_i}^{k+1}) - \frac{1}{2} \left( 1 + \tanh \left( \kappa_h \frac{H_i^{k+1} - H_{i-1}^{k+1}}{\Delta x} \right) \right), \end{aligned} \quad (14.19)$$

wobei  $\kappa_h$  ein künstlicher numerischer Glättungsparameter ist, der so gewählt wird, dass er die Konvergenz verbessert, aber das Ergebnis nicht verfälscht.

### Glättung der Heaviside-Sprungfunktion in den Parameterfunktionen $S_{\text{w}}^*$ , $S_2^*$ , $S_4^*$

In den Parameterfunktionen  $S_{\text{w}}^*$ ,  $S_2^*$ ,  $S_4^*$  aus Gleichung (13.11) bzw. (13.12) schalten Heaviside Sprungfunktionen  $\Theta$  zwischen Be- und Entwässerung. Auch diese Unstetigkeit kann schlimmstenfalls die Konvergenz des Newton-Raphson-Verfahrens verhindern. Durch Ersetzen der Heaviside-Sprungfunktion  $\Theta$  durch eine Tangenshyperbolicusfunktion

$$\Theta(x) \rightarrow \frac{1}{2} (1 + \tanh(\kappa_{\text{di}} x)) \quad (14.20)$$

wird dies vermieden, wobei  $\kappa_{\text{di}}$  ein künstlicher numerischer Glättungsparameter ist, der so gewählt wird, dass er die Konvergenz verbessert, aber das Ergebnis nicht verfälscht.

### Schwelle für den Massenaustausch

Schon kleine Änderungen der Wassersättigung können starke Veränderungen im Verhältnis der perkolierenden zu den nichtperkolierenden Phasen bewirken. Auf der einen Seite ist dies Bestandteil des Modells und muss berücksichtigt werden. Auf der anderen Seite können kleine Änderungen der Sättigungen auch durch Rundungsfehler oder während der Iteration zur Lösung der nichtlinearen Gleichungen entstehen. Diese beschränken u.U. den Zeitschritt oder erfordern eine deutlich höhere Genauigkeit als für die konzeptionellen Studien erwartet wird. Aus diesem Grund wird eine Schwelle  $\epsilon_{\partial S}$  im Massenaustausch eingesetzt, die verhindert, dass künstliche geringe Sättigungsänderungen die Zeitschrittgröße limitieren. Dabei ist festzuhalten, dass die Schwelle auch die Berücksichtigung geringer realer Sättigungsänderungen verhindert. Die Schwelle muss daher mit Vorsicht gewählt werden. Die Implementierung der Schwelle lautet

$$M_i^{n+1} \rightarrow M_i^{n+1} \times \begin{cases} 0 & \text{für } \left| \frac{S_{1i}^{n+1} + S_{2i}^{n+1} - S_{1i}^n - S_{2i}^n}{\Delta t} \right| \leq \epsilon_{\partial S}, \\ 1 & \text{für } \left| \frac{S_{1i}^{n+1} + S_{2i}^{n+1} - S_{1i}^n - S_{2i}^n}{\Delta t} \right| > \epsilon_{\partial S}. \end{cases} \quad (14.21)$$

## 14.3 Anfangsbedingungen

Prinzipiell bestehen durch den Algorithmus keine Beschränkungen an die Anfangsbedingungen. Im Hinblick auf die durchgeführten Simulationen, welche in Teil IV vorgestellt werden,

wurde die Möglichkeit implementiert, die Anfangsbedingungen für die Sättigungen durch Superposition zweier Heaviside-Sprungfunktionen zu erzeugen. Die Anfangsbedingungen lauten

$$S_1(x, 0) = S_{1b} + (S_{1p} - S_{1b})\tilde{\Theta}(x - x_0) + (S_{1b} - S_{1p})\tilde{\Theta}(x - x_1), \quad (14.22a)$$

$$S_2(x, 0) = S_{2b} + (S_{2p} - S_{2b})\tilde{\Theta}(x - x_0) + (S_{2b} - S_{2p})\tilde{\Theta}(x - x_1), \quad (14.22b)$$

$$S_3(x, 0) = S_{3b} + (S_{3p} - S_{3b})\tilde{\Theta}(x - x_0) + (S_{3b} - S_{3p})\tilde{\Theta}(x - x_1), \quad (14.22c)$$

wobei die Heaviside-Sprungfunktion durch eine Tangenshyperbolicusfunktion

$$\tilde{\Theta}(x) = \frac{1}{2} (1 + \tanh(\kappa_{sm}x)) \quad (14.23)$$

mit dem Glättungsfaktor  $\kappa_{sm}$  angenähert wird. Um die Anfangsbedingungen zu spezifizieren müssen damit die Parameter  $S_{wb}, S_{wp}, S_{2b}, S_{2p}, S_{4b}, S_{4p}, x_0, x_1$  und  $\kappa_{sm}$  angegeben werden. Man beachte, dass aufgrund der Inkompressibilität der Phasen und der impliziten Formulierung keine Anfangsbedingungen für den Druck angegeben werden müssen. Der Druck wird dennoch bei der Initialisierung als

$$P_1(x, 0) = P_1(x_\ell, 0) + \frac{P_1(x_r, 0)}{x_r - x_\ell}x \quad (14.24)$$

gesetzt. Sind an einem Rand  $x_\ell$  oder  $x_r$  keine Werte für den Druck gegeben, wird an der entsprechenden Stelle  $P_1(x \in \{x_\ell, x_r\}, 0) = 0$  gesetzt.

## 14.4 Randbedingungen

Es sind drei Arten von Randbedingungen implementiert, die in den ersten drei Unterkapiteln vorgestellt werden. Zunächst werden Dirichlet-Randbedingungen, dann Flussrandbedingungen und dann freie Ausflussrandbedingungen diskutiert. Da die Randbedingungen nicht beliebig kombinierbar sind, werden mögliche Kombinationen von Randbedingungen in einem letzten Unterkapitel separat diskutiert.

### 14.4.1 Dirichlet-Randbedingungen

Die Dirichlet-Randbedingungen müssen für Sättigungen und Druck unterschiedlich implementiert werden. Beiden gemeinsam ist jedoch, dass berücksichtigt werden muss, dass das

Gebiet mit den Seitenflächen der Zellen endet. Der linke Rand liegt damit bei  $x_{\frac{1}{2}} = x_1 - \frac{1}{2}\Delta x$  und der rechte Rand bei  $x_{N_{\text{cls}}+\frac{1}{2}} = x_{N_{\text{cls}}} + \frac{1}{2}\Delta x$ .

Ein CIR-Verfahren bei der Bestimmung der Mobilitäten am Rand ist nicht erforderlich, da die Sättigungen genau an diesen Stellen definiert sind. In den Approximationen von Gradienten durch finite Differenzen muss jedoch die halbierte Schrittgröße berücksichtigt werden.

Damit werden Dirichlet-Randbedingungen an der linken Seite mit  $j = 1, 2, 3, 4$  als

$$S_{j1}^{k+1} - S_{j1}^k - \frac{\Delta t}{\Delta x} \frac{1}{\phi} \left( q_{j\frac{3}{2}}^{k+1} - 2 \sum_{m=1}^4 \lambda_{jm\frac{1}{2}}^{k+1} \frac{H_{m1}^{k+1} - H_{m\frac{1}{2}}^{k+1}}{\Delta x} \right) = \frac{1}{\phi} M_{j1}^{k+1} \Delta t \quad (14.25a)$$

implementiert, wobei  $q_{j\frac{3}{2}}^{k+1}$  genau wie im Gebiet bestimmt wird und  $\lambda_{jm\frac{1}{2}}^{k+1}$  sowie  $H_{m\frac{1}{2}}^{k+1}$  durch die vorgegeben Randwerte  $S_{1\frac{1}{2}}^{k+1}$ ,  $S_{2\frac{1}{2}}^{k+1}$ ,  $S_{3\frac{1}{2}}^{k+1}$  und  $P_{1\frac{1}{2}}^{k+1}$  berechnet werden. Die diskreten Gleichungen auf der rechten Seite lauten entsprechend

$$S_{jN_{\text{cls}}}^{k+1} - S_{jN_{\text{cls}}}^k - \frac{\Delta t}{\Delta x} \frac{1}{\phi} \left( 2 \sum_{m=1}^4 \lambda_{jmN_{\text{cls}}+\frac{1}{2}}^{k+1} \frac{H_{mN_{\text{cls}}+\frac{1}{2}}^{k+1} - H_{mN_{\text{cls}}}^{k+1}}{\Delta x} - q_{jN_{\text{cls}}-\frac{1}{2}}^{k+1} \right) = \frac{1}{\phi} M_{jN_{\text{cls}}}^{k+1} \Delta t, \quad (14.25b)$$

wobei  $q_{jN_{\text{cls}}-\frac{1}{2}}^{k+1}$  genau wie im Gebiet bestimmt wird und  $\lambda_{jmN_{\text{cls}}+\frac{1}{2}}^{k+1}$  sowie  $H_{mN_{\text{cls}}+\frac{1}{2}}^{k+1}$  durch die vorgegeben Randwerte  $S_{1N_{\text{cls}}+\frac{1}{2}}^{k+1}$ ,  $S_{2N_{\text{cls}}+\frac{1}{2}}^{k+1}$ ,  $S_{3N_{\text{cls}}+\frac{1}{2}}^{k+1}$  und  $P_{1N_{\text{cls}}+\frac{1}{2}}^{k+1}$  berechnet werden.

Dadurch, dass am Rand die Werte aller Variablen benötigt werden, ist die Flexibilität bezüglich unterschiedlicher Typen von Randbedingungen für unterschiedliche Phasen eingeschränkt.

## 14.4.2 Flussrandbedingungen

Da der Raum in finite Volumina aufgeteilt ist und die Flüsse über die Zellränder explizit berechnet werden, ist die Implementierung von Flussrandbedingungen unkompliziert. Der Fluss über die äußerste Zellfläche wird durch die Flussrandbedingung ersetzt. Damit lautet die Flussrandbedingung am linken Rand

$$S_{j1}^{k+1} - S_{j1}^n - \frac{\Delta t}{\Delta x} \frac{1}{\phi} \left( q_{j\frac{3}{2}}^{k+1} - q_{j\ell} \right) = \frac{1}{\phi} M_{j1}^{k+1} \Delta t, \quad (14.26a)$$

wobei  $q_{j\ell}$  der Fluss der  $j$ -ten Phase über den linken Rand ist und  $q_{j\frac{3}{2}}^{k+1}$  genau wie im Gebiet bestimmt wird. Am rechten Rand lautet die Flussrandbedingung

$$S_{jN_{\text{cls}}}^{k+1} - S_{jN_{\text{cls}}}^n - \frac{\Delta t}{\Delta x} \frac{1}{\phi} \left( q_{jr} - q_{jN_{\text{cls}}-\frac{1}{2}}^{k+1} \right) = \frac{1}{\phi} M_{jN_{\text{cls}}}^{k+1} \Delta t, \quad (14.26b)$$

wobei  $q_{jr}$  der Fluss der  $j$ -ten Phase über den rechten Rand ist und  $q_{jN_{\text{cls}}-\frac{1}{2}}^{k+1}$  genau wie im Gebiet bestimmt wird.

### 14.4.3 Freie Ausflussrandbedingungen

Freie Ausflussrandbedingungen können unterschiedlich interpretiert und implementiert werden. Häufig werden sie in der computergestützten Fluidodynamik (CFD) als Extrapolation nullter Ordnung der Variablenwerte implementiert. Diese Implementierung wurde beim Algorithmus SimBL verwendet. Hier wird sie indirekt verwendet. Bei Extrapolation nullter Ordnung liegen keine Sättigungsgradienten an den Rändern an. Wenn außerdem das poröse Medium senkrecht zur Schwerkraft ausgerichtet ist oder beide Fluide dieselbe Dichte haben, werden die Flüsse alleine durch die fraktionalen Flussfunktionen  $f_i$  mit  $i = 1, 2, 3, 4$  aus Gleichungen (5.26) und dem Gesamtfluss  $q_{\text{tot}}$  bestimmt. Damit lauten die Gleichungen für freie Ausflussrandbedingungen am linken Rand

$$S_{j1}^{k+1} - S_{j1}^n - \frac{\Delta t}{\Delta x} \frac{1}{\phi} \left( q_{j\frac{3}{2}}^{k+1} - q_{\text{tot}} f_i(S_{11}^{k+1}, S_{21}^{k+1}, S_{31}^{k+1}) \right) = \frac{1}{\phi} M_{j1}^{k+1} \Delta t \quad (14.27a)$$

und am rechten Rand

$$S_{jN_{\text{cls}}}^{k+1} - S_{jN_{\text{cls}}}^n - \frac{\Delta t}{\Delta x} \frac{1}{\phi} \left( q_{\text{tot}} f_i(S_{1N_{\text{cls}}}^{k+1}, S_{2N_{\text{cls}}}^{k+1}, S_{3N_{\text{cls}}}^{k+1}) - q_{jN_{\text{cls}}-\frac{1}{2}}^{k+1} \right) = \frac{1}{\phi} M_{jN_{\text{cls}}}^{k+1} \Delta t. \quad (14.27b)$$

In der vorliegenden Implementierung können freie Ausflussrandbedingungen nur mit vollständigen Flussrandbedingungen auf der anderen Seite des Mediums kombiniert werden. Dann ist  $q_{\text{tot}}$  von außen vorgegeben. Eine Verallgemeinerung ist prinzipiell möglich, wurde jedoch nicht benötigt und implementiert.

### 14.4.4 Anmerkungen zu den implementierten Gruppen von Randbedingungen

Zwei unterschiedliche Kombinationen von Randbedingungen wurden implementiert und können durch die Wahl entsprechender Schalter ausgewählt werden. Sie sind ausführlich für die

selbstkonsistente Schließbedingung (3.4.1) getestet. Der Algorithmus sollte jedoch auch für andere Schließbedingungen und Kombinationen von Randbedingungen funktionieren. Man beachte dabei, dass, wenn Dirichlet-Randbedingungen an einer Seite für eine Gleichung gewählt werden, alle Variablen festgelegt werden müssen. Das schließt nicht zwingend Flussrandbedingungen aus. Es muss jedoch darauf geachtet werden, dass die Randbedingungen konsistent sind.

Die beiden unterschiedlichen Gruppen werden im Folgenden kurz beschrieben und in Tabelle 14.1 zusammengefasst:

**Kapillardruckmessung (KD)** Diese Randbedingungen werden verwendet, um Experimente zur Bestimmung von Kapillardrucksättigungsbeziehungen zu simulieren. In diesen Experimenten wird eine Säule verwendet, die an einer Seite mit einem Ölbad und an der anderen Seite mit einem Wasserbad verbunden ist. An der Seite des Ölbad ist eine semipermeable Membran angebracht, die nur perkolierendes Öl durchlässt und an der Seite des Wasserbads ist eine semipermeable Membran angebracht, die nur perkolierendes Wasser durchlässt. Der Öldruck im Ölbad und der Wasserdruck im Wasserbad können frei eingestellt werden. Die Sättigungen im Ölbad sind  $S_{1\ell} = 0, S_{2\ell} = 0, S_{3\ell} = 1, S_{4\ell} = 0$  und im Wasserbad  $S_{1r} = 1, S_{2r} = 0, S_{3r} = 0, S_{4r} = 0$ .

**Buckley-Leverett-Problem (BL)** Die Randbedingungen werden verwendet um Experimente mit einer porösen Säule zu simulieren, in welche perkolierendes Wasser von der linken Seite injiziert wird und an der rechten Seite freie Ausflussrandbedingungen gelten. Der Fluss  $q_{\text{tot}} = q_{1\ell}$  wird in der Parameterdatei angegeben. Die übrigen Flüsse  $q_{2\ell} = q_{3\ell} = q_{4\ell} = 0$  verschwinden. Soll statt Wasser Öl am linken Rand injiziert werden, müssen die Wasser- und Ölphasen vertauscht werden. Dies ist möglich, da das Modell abgesehen von den Parameterwerten für beide Fluide vollkommen symmetrisch ist.

Gleichungsnr.	KD		BL	
	links	rechts	links	rechts
1	FX	DC	FX	OF
2	FX	FX	FX	OF
3	DC	FX	FX	OF
4	FX	FX	FX	OF

**Tabelle 14.1:** Zwei Gruppen von Randbedingungen: Kapillardruckmessung (KD) und Buckley-Leverett-Problem (BL). Dirichlet-Randbedingungen werden durch DC, Flussrandbedingungen durch FX und freie Ausflussrandbedingungen durch OF bezeichnet.

## 14.5 Überprüfung des Algorithmus

In diesem Unterkapitel wird der Einfluss der räumlichen Auflösung anhand einer Parameterstudie und eines Vergleichs mit analytischen bzw. quasianalytischen Lösungen durchgeführt. Außerdem wird der Einfluss des numerischen Parameters  $\kappa_h$  von der CIR-Glättung, des Glättungsfaktors  $\kappa_{di}$  der Heaviside Sprungfunktion für die begrenzenden Sättigungen, der Sättigungsregularisierung  $\epsilon_S$ , der Konvergenztoleranz des Newton-Raphson-Verfahrens  $\epsilon_{tol}$  und der Schwelle im Massenaustauschterm  $\epsilon_{\partial S}$  untersucht. Die Referenzparameter sind in Tabelle 14.2 aufgelistet.

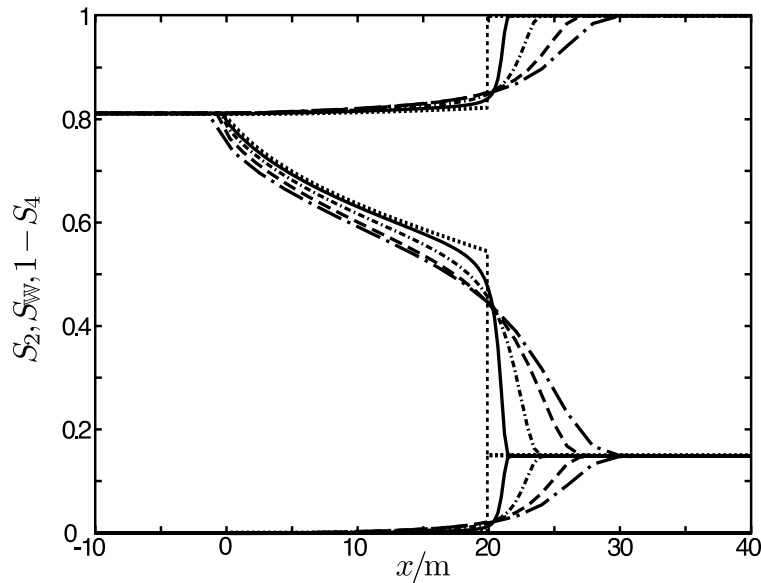
Parameter	Wert	Einheit
$N_{cls}$	400	
$\Delta t$	10	s
$\epsilon_M$	0.01	
$\epsilon_{tol}$	0.0005	
$\epsilon_{\partial S}$	$10^{-6}$	$s^{-1}$
$\kappa_h$	1000	$m s^2 kg^{-1}$
$\kappa_{di}$	$10^8$	$s^{-1}$
$\epsilon_S$	$10^{-5}$	

**Tabelle 14.2:** Numerische Parameter für FlmPSSS.

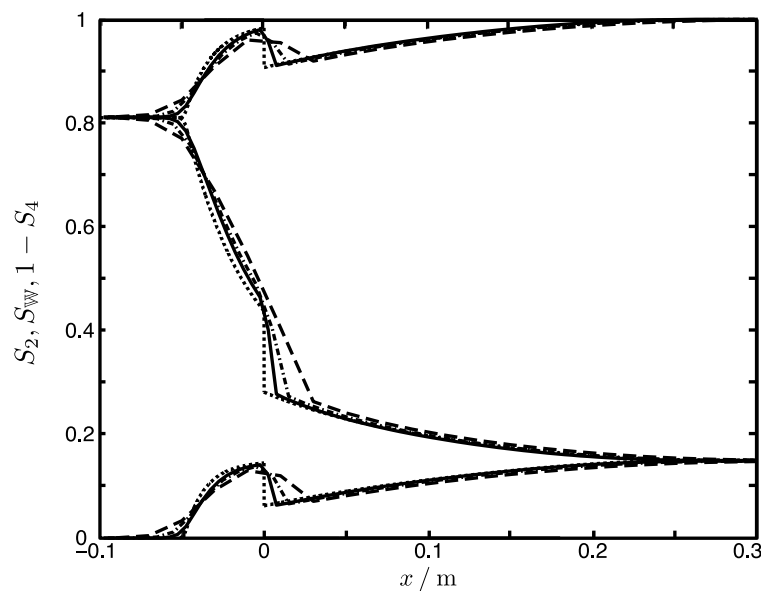
Abbildung 14.1 zeigt Sättigungsprofile eines sekundären Buckley-Leverett-Problems (siehe Kapitel 7) für vier unterschiedliche räumliche Auflösungen und einen Vergleich mit der dazugehörigen analytischen Lösung. Der Vergleich zeigt, dass durch eine Erhöhung der Auflösung die numerische Diffusion ab- und die Genauigkeit zunimmt. Der Vergleich lässt erwarten, dass die numerische Lösung für  $N_{cls} \rightarrow \infty$  gegen die analytische Lösung konvergiert.

Abbildung 14.2 zeigt Sättigungsprofile für das sekundäre Philip-Problem (siehe Kapitel 10) für drei unterschiedliche räumliche Auflösungen und einen Vergleich mit der dazugehörigen analytischen Lösung. Der Vergleich zeigt, wie schon für das Buckley-Leverett-Problem, dass eine bessere Auflösung die numerische Diffusion reduziert. Dies ist für das Philip-Problem von besonderer Bedeutung, da es eine Unstetigkeitsstelle bei  $x = 0$  besitzt, welche im Gegensatz zur Stoßwelle des Buckley-Leverett-Problems nicht durch die Lösung stabilisiert wird und damit besonders anfällig für numerische Diffusion ist. Sie ist z.B. für  $N_{cls} = 26$  völlig von numerischer Diffusion maskiert. Auch hier lässt der Vergleich erwarten, dass die numerische Lösung für  $N_{cls} \rightarrow \infty$  gegen die analytische Lösung konvergiert.

Abbildung 14.3 zeigt den Einfluss der numerischen Parameters anhand eines Experiments mit KD-Randbedingungen. Die Anfangsbedingungen sind ein stationärer Kapillarsaum. Dann

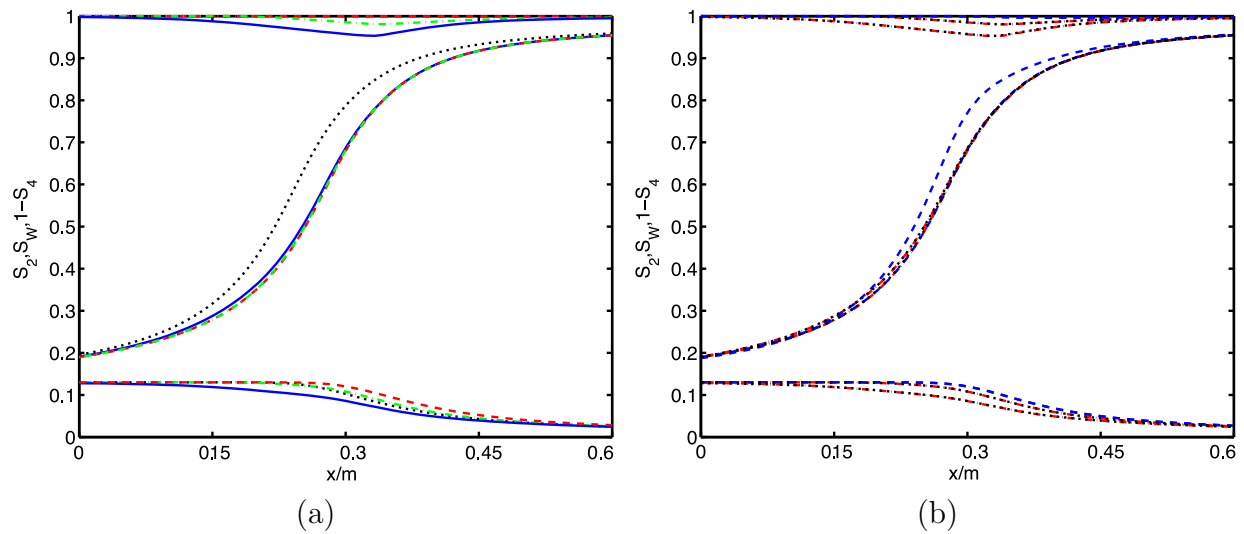


**Abbildung 14.1:** Vergleich der Lösung für das sekundäre Buckley-Leverett-Problem für unterschiedliche räumliche Auflösungen. Gestrichpunktete Kurven mit langen Strichen zeigen die Lösung mit  $N_{\text{cls}} = 51$  Zellen, gestrichelte Kurven zeigen die Lösung mit  $N_{\text{cls}} = 101$  Zellen, gestrichpunktete Kurven mit kurzen Strichen zeigen die Lösung mit  $N_{\text{cls}} = 201$  Zellen und die durchgezogenen Kurven zeigen die Lösung für  $N_{\text{cls}} = 401$  Zellen. Die dazugehörige analytische Lösung wird durch gepunktete Kurven gezeigt.



**Abbildung 14.2:** Vergleich der Lösung für das sekundäre kapillar- und grenzflächenkraftgetriebene Umverteilungsproblem nach Philip für unterschiedliche räumliche Auflösungen. Gestrichelte Kurven zeigen die Lösung mit  $N_{\text{cls}} = 26$  Zellen, gestrichpunktete Kurven zeigen die Lösung mit  $N_{\text{cls}} = 51$  Zellen und die durchgezogenen Kurven zeigen die Lösung für  $N_{\text{cls}} = 101$  Zellen. Die dazugehörige analytische Lösung wird durch gepunktete Kurven gezeigt.





**Abbildung 14.3:** Einfluss der numerischen Parameter bei KD-Randbedingungen. Abbildung (a) zeigt vier Sättigungsprofile zu unterschiedlichen Zeitpunkten. Die Anfangsbedingungen sind schwarz gepunktet dargestellt, die Profile am ersten Zeitpunkt sind rot gestrichelt, die am zweiten Zeitpunkt grün gestrichelt und am letzten gezeigten Zeitpunkt blau durchgezogen dargestellt. Abbildung (b) zeigt einen Vergleich der Profile für  $\epsilon_{\partial S} = 10^{-6} \text{ s}^{-1}$  (schwarz gepunktet),  $\epsilon_{\partial S} = 0,5 \times 10^{-6} \text{ s}^{-1}$  (rot gestrichelt) und  $\epsilon_{\partial S} = 2 \times 10^{-6} \text{ s}^{-1}$  (blau gestrichelt) an den beiden letzten Zeitpunkten aus Abbildung (a).

wird der Wasserdruck am unteren Ende (rechts) abgesenkt, so dass auch der Kapillarsaum sinkt. Nach einiger Zeit wird der Druck wieder erhöht, so dass sich die Prozessrichtung umdreht. Charakteristische Profile während des Experiments sind in Abbildung 14.3a dargestellt. Das erste zeitabhängige Profil zeigt einen Zustand kurz bevor der Druck wieder angehoben wird, das zweite kurze Zeit später und das dritte zeigt einen neuen stationären Zustand. Durch die Umkehr der Prozessrichtung ist dieses Beispiel besonders sensibel auf die künstlichen numerischen Parameter. Dennoch ist bei Verdopplung bzw. Halbierung der Parameter  $\kappa_h$ ,  $\kappa_{di}$ ,  $\epsilon_S$  und  $\epsilon_{tol}$  kein sichtbarer Einfluss auf die Sättigungen vorhanden. Nur die Schwelle im Massenaustauschterm  $\epsilon_{\partial S}$  bewirkt eine Veränderung der Sättigungsprofile. Dies ist in Abbildung 14.3b zu sehen. Eine Verdopplung ihres Wertes (blau gestrichelte Kurven) verhindert, dass die ‐echte‐ Sättigungsänderung berücksichtigt wird. Daher wird bei der Druckerhöhung weder nichtperkolierendes Öl produziert noch nichtperkolierendes Wasser reduziert. Der Kapillarsaum wandert als Folge der Druckerhöhung nach oben. Bei den beiden geringeren Werten für die Schwelle  $\epsilon_{\partial S}$  wird stattdessen nichtperkolierendes Öl produziert und nichtperkolierendes Wasser reduziert und die Druckerhöhung wird durch eine Veränderung der Verbundenheit der Phasen kompensiert. Die Position des Kapillarsaums ändert sich fast nicht. Detaillierte Angaben zum Experiment sind in Kapitel 17 zu finden.

## 14.6 Vor- und Nachteile von FlmPSSS

Abschließend sollen hier noch einige Vor- und Nachteile des Algorithmus FlmPSSS diskutiert werden. Ebenso wird auf mögliche Verbesserungen und Erweiterungen eingegangen.

Das Hauptmerkmal von FlmPSSS ist, dass er bisher der einzige Algorithmus ist, mit dem es möglich ist, Anfangs- und Randwertprobleme mit Dirichlet-Randbedingungen für den Druck zu lösen. Dies ist insbesondere deshalb von großer Bedeutung, da in vielen Experimenten die Drücke an den Rändern kontrolliert werden. Außerdem löst FlmPSSS - bis auf die Trägheitsterme in der Impulsbilanz - das volle Modell, wenn auch wirklich mobile nichtperkolierende Phasen mit  $R_{i5} \sim R_{j5}$ , wobei  $i = 2, 4$  und  $j = 1, 3$  gilt, nicht getestet wurden. Der Algorithmus ist relativ stabil, da er zeitlich implizit diskretisiert ist. Er ist jedoch nicht bedingungslos stabil, da die Konditionierung des linearisierten Gleichungssystems und der Konvergenzradius des Newton-Raphson Verfahrens den maximalen Zeitschritt beschränken.

Der schwerwiegendste Nachteil von FlmPSSS ist, dass er relativ langsam ist und damit Erweiterungen zu zwei oder drei räumlichen Dimensionen praktisch unmöglich sind. Außerdem sind einige Regularisierungen nötig, die zwar an analytischen Lösungen getestet wurden, aber dennoch u.U. das Ergebnis leicht verfälschen.

## **Teil IV**

# **Numerische Simulationen**

In diesem Teil der Dissertation werden numerische Studien mit den vier Algorithmen AMG9, AMG3+1, SimBL und FlmPSSS, die in Teil III vorgestellt wurden, durchgeführt. Die numerischen Studien simulieren mögliche Experimente, die sich in drei Kategorien aufteilen lassen. In Kapitel 15 werden Experimente mit Nullflussrandbedingungen behandelt. Mit deren Hilfe können Experimente mit einer geschlossenen Säule simuliert werden. Dabei sorgen Schwerkraft sowie Kapillar- und Grenzflächenkräfte für eine Umverteilung der Fluide im Verlauf des Experiments. Teile des Kapitels sind in [Hilf 10, Dost 10d] veröffentlicht. Im Kapitel 16 werden Simulationen mit Flussrandbedingungen vorgestellt. Diese beschreiben Experimente, bei denen einer porösen Säule durch Pumpen ein fester Volumenstrom aufgeprägt wird. Solche Simulationen beschreiben in sehr vereinfachter Form Situationen, wie sie bei der Erdölförderung oder der Altlastensanierung in kontaminierten Böden auftauchen. Im letzten Kapitel 17 dieser Dissertation werden Simulationen mit Druckrandbedingungen diskutiert. Mit Druckrandbedingungen können insbesondere Experimente modelliert werden, die zur Bestimmung von Kapillardrucksättigungsbeziehungen im Labor durchgeführt werden. Ein Vergleich mit experimentellen Daten ist daher möglich und zeigt gute Übereinstimmung.

---

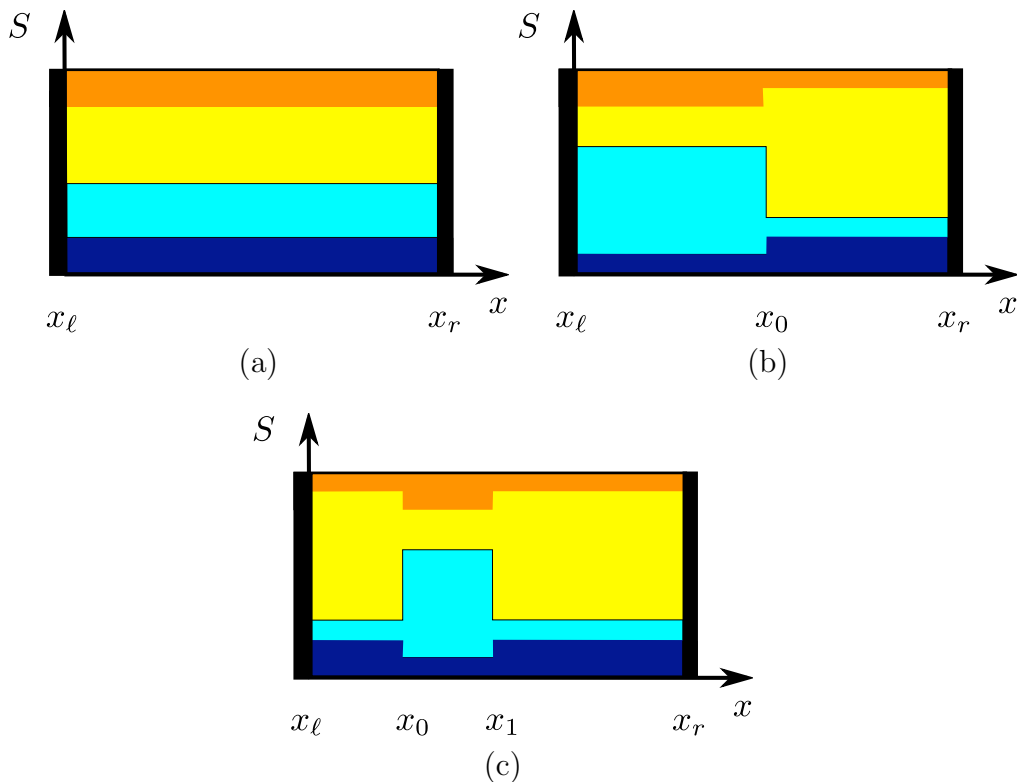
## 15 Simulationen von Experimenten mit einer geschlossenen porösen Säule

In diesem Kapitel werden Simulationen von gedachten Experimenten mit einer geschlossenen porösen Säule vorgestellt. Dazu wird eine zylindrische Säule eines homogenen, isotropen und inkompressiblen porösen Mediums betrachtet, die an allen Rändern geschlossen ist. Die Säule sei mit zwei inkompressiblen, nicht mischenden Fluiden unterschiedlicher Dichte gefüllt und der Kapillarsaum sei deutlich breiter als der Säulendurchmesser, so dass die Säule physikalisch als eindimensional angenommen werden kann.

Im ersten Teil des Kapitels werden die Umsetzung des Experiments in den verschiedenen Algorithmen diskutiert. Dazu müssen die undurchlässigen Ränder und die Anfangsbedingungen mathematisch formuliert werden. Das nächste Unterkapitel widmet sich den verwendeten Parametern. Dabei wird sowohl auf die Modellparameter als auch auf die entsprechenden künstlichen numerischen Parameter der unterschiedlichen Algorithmen eingegangen.

Die numerisch durchgeführten Experimente lassen sich fünf Gruppen zuordnen, die in jeweils eigenen Unterkapiteln diskutiert werden. In den ersten drei Unterkapiteln werden Experimente mit homogenen Anfangsbedingungen behandelt. Zunächst werden Lösungen für das Aufstellen der Säule im Schwerfeld gezeigt. Als zweites werden Lösungen zu Experimenten gezeigt, bei denen eine Säule mehrere Male um  $180^\circ$  im Schwerfeld gedreht wird. In der dritten Gruppe wird die Säule nach dem Aufstellen wieder in eine horizontale Position gebracht. Die vierte Gruppe behandelt die Umverteilung der Fluide nach einer Anfangsbedingung, die einen Sprung in den Fluidsättigungen an einer Stelle  $x_0$  zeigt. Zuletzt wird die Umverteilung einer Wasser- bzw. Ölblase betrachtet.

Abbildung 15.1 illustriert die Anfangs- und Randbedingungen für die fünf Gruppen. Die ersten drei unterscheiden sich nur in der Durchführung des Experiments. Die gemeinsamen Anfangs- und Randbedingungen werden in Abbildung 15.1a illustriert. Die Anfangs- und Randbedingungen für die Umverteilung von Fluiden, wobei die Anfangsverteilung einen



**Abbildung 15.1:** Illustration der Anfangs- und Randbedingungen für die Simulation von Experimenten mit einer geschlossenen porösen Säule im Schwerfeld. Abbildung (a) zeigt homogene Anfangsbedingungen, Abbildung (b) zeigt Anfangsbedingungen für Experimente zur Umverteilung eines Sprungs in der Anfangsverteilung der Fluidsättigungen und Abbildung (c) zeigt die Anfangsbedingungen für Experimente zur Umverteilung einer Öl- oder Wasserblase in der Säule. In der Abbildung sind Sättigungen  $S_i$  gegen die Raumkoordinate  $x$  aufgetragen. Hellblau steht für perkolierendes Wasser  $S_1$ , dunkelblau für nichtperkolierendes Wasser  $S_2$ . Gelb steht für perkolierendes Öl  $S_3$  und orange für nichtperkolierendes Öl  $S_4$ . Der schwarze Balken an den Rändern stellt die undurchlässigen Randbedingungen dar.

Sprung in den Fluidsättigungen bei der Stelle  $x_0$  zeigt, werden in Abbildung 15.1b schematisch dargestellt. Die Anfangs- und Randbedingungen der Umverteilung einer Öl- bzw. Wasserblase, also konstante Fluidsättigungen mit Sprüngen an zwei Stellen  $x_0$  und  $x_1$ , illustriert Abbildung 15.1c.

## 15.1 Randbedingungen

Die Säule hat impermeable Wände an allen Seiten. Diese werden in diesem Unterkapitel durch entsprechende mathematische Randbedingungen modelliert. Die Berechnungen werden mit den vier Algorithmen AMG9, AMG3+1, SimBL und FlmpSSS durchgeführt. Diesen Algorithmen liegen unterschiedliche mathematische Formulierungen zugrunde, die durch un-

Variable	linker Rand	rechter Rand
$S_1$	frei	frei
$S_2$	frei	frei
$S_3$	frei	frei
$S_4$	frei	frei
$v_1$	$v_1 = 0$	$v_1 = 0$
$v_2$	$v_2 = 0$	$v_2 = 0$
$v_3$	$v_3 = 0$	$v_3 = 0$
$v_4$	$v_4 = 0$	$v_4 = 0$
$P_1$	$P_1 = 0$	frei

**Tabelle 15.1:** Randbedingungen für Simulationen von Experimenten mit einer geschlossenen porösen Säule im Schwerfeld mit AMG9.

terschiedliche Näherungen im Modell und unterschiedliche numerische Näherungen motiviert sind. Die Modellierung wird für jeden Algorithmus in je einem eigenen Unterkapitel diskutiert.

### 15.1.1 AMG9

Der Algorithmus AMG9 basiert auf den neun partiellen Differentialgleichungen (11.5), für welche Randbedingungen spezifiziert werden müssen. Die ersten vier Gleichungen stehen für die Massenbilanzen der vier Phasen, Gleichungen fünf bis acht stehen für die Impulsbilanzen und Gleichung neun repräsentiert die Volumenerhaltung für inkompressible Fluide.

Die impermeablen Wände stellen keine Einschränkungen für die Sättigungen an den Rändern dar. Da die Massenbilanzen partielle Differentialgleichungen erster Ordnung sind, kann das Merkmal des Algorithmus, solche Gleichungen auf dem Rand zu lösen, verwendet werden. Die Sättigungen bleiben daher am Rand frei.

Die impermeablen Wände verhindern einen Fluss durch den Rand. Auch die Strömungsgeschwindigkeiten  $v_i$  verschwinden dort für alle Phasen. Dirichlet-Randbedingungen beschreiben dies durch

$$v_i(x_\ell, t) = 0, \quad i = 1, 2, 3, 4, \quad (15.1a)$$

$$v_i(x_r, t) = 0, \quad i = 1, 2, 3, 4. \quad (15.1b)$$

Es werden inkompressible Fluide angenommen. Dies hat zur Folge, dass nur Druckunterschiede von Bedeutung für die Dynamik sind. Ein Referenzdruck kann daher beliebig gewählt

werden. Dies geschieht hier durch eine Dirichlet-Randbedingung am linken Rand

$$P_1(0, t) = 0. \quad (15.2)$$

Der Druck am rechten Rand bleibt frei. Da es sich bei der Gleichung wieder um eine partielle Differentialgleichung erster Ordnung handelt, kann diese Gleichung am rechten Rand gelöst werden.

Tabelle 15.1 fasst die Randbedingungen zusammen. Da für neun partielle Differentialgleichungen, welche von erster Ordnung bezüglich der Ortsableitung sind, insgesamt neun Randbedingungen angegeben werden, ist zu erwarten, dass das Randwertproblem wohlgestellt ist. Die Anfangsbedingungen werden im Kapitel 15.2 behandelt. Es sei an dieser Stelle noch erwähnt, dass dieses Anfangs- und Randwertproblem das Einzige ist, welches mit AMG9 gelöst wird. Die Randbedingungen sind daher direkt im Code implementiert.

### 15.1.2 AMG3+1

Der Algorithmus AMG3+1 basiert auf den vier Differentialgleichungen (12.1a), (12.1b), (12.1c) und (12.7), für welche Randbedingungen spezifiziert werden müssen. Die ersten drei Gleichungen stehen für die Massenbilanzen von Wasser und den beiden nichtperkolierenden Phasen. Die vierte Gleichung ist eine künstliche Reaktionsdiffusionsgleichung für die künstliche Größe  $\sigma$ , welche so gewählt ist, dass  $\sigma \approx \partial_t S_{\text{W}}$  gilt.

Die Säule lässt keinen Fluss durch ihre Ränder zu. Dies erfordert, dass der Wasserfluss an den Rändern verschwindet. Nullflussrandbedingungen

$$q_{\text{W}}(x_{\ell}, t) = 0, \quad q_{\text{W}}(x_r, t) = 0 \quad (15.3a)$$

für die erste Gleichung gewährleistet dies. Die nichtperkolierenden Phasen sind im betrachteten Limes immobil. Die entsprechenden Differentialgleichungen enthalten keine räumlichen Differentialoperatoren. Von daher sind eigentlich für Gleichung zwei und drei keine Randbedingungen nötig. Allerdings wurde zur Verbesserung der Stabilität eine geringe künstliche Diffusion (Differentialoperator zweiter Ordnung im Raum) addiert. Der entsprechende Fluss ist gering. Da das Verhalten des Algorithmus mit Neumann-Randbedingungen am gutmütigsten ist, werden diese mit verschwindendem Gradienten verwendet, obwohl Nullflussrand-



bedingungen naheliegend wären. Explizit lauten sie

$$\frac{\partial S_2}{\partial x}(x_\ell, t) = 0, \quad \frac{\partial S_2}{\partial x}(x_r, t) = 0, \quad (15.3b)$$

$$\frac{\partial S_4}{\partial x}(x_\ell, t) = 0, \quad \frac{\partial S_4}{\partial x}(x_r, t) = 0. \quad (15.3c)$$

Als Randbedingungen für die vierte Gleichung wird eine Dirichlet-Randbedingung am linken Rand und eine Neumann-Randbedingung am rechten Rand

$$\sigma(x_\ell, t) = 0, \quad \frac{\partial \sigma}{\partial x}(x_r, t) = 0 \quad (15.3d)$$

verwendet. Es sei erwähnt, dass speziell die Randbedingung am linken Rand unter Umständen nicht konsistent mit den durchgeführten Experimenten ist, da sich die Sättigung am Rand der Säule sehr wohl ändern kann. Da  $\sigma$  die Änderungsrate der Sättigung lediglich annähert, spiegelt sich diese Inkonsistenz in einem geringen Fehler der Lösung wider, welcher jedoch durch die künstliche Diffusion in den nichtperkolierenden Phasen teilweise kompensiert wird.

Die Randbedingungen werden dem Algorithmus in Form von Vektoren übergeben. Sie lauten hier

$$\mathcal{F}_\ell^{\text{BC}} = (1, 0, 0, 0)^T, \quad \mathcal{F}_r^{\text{BC}} = (1, 0, 0, 0)^T, \quad (15.4a)$$

$$\mathcal{D}_\ell^{\text{BC}} = (0, 0, 0, 1)^T, \quad \mathcal{D}_r^{\text{BC}} = (0, 0, 0, 0)^T, \quad (15.4b)$$

$$\mathcal{N}_\ell^{\text{BC}} = (0, 1, 1, 0)^T, \quad \mathcal{N}_r^{\text{BC}} = (0, 1, 1, 1)^T, \quad (15.4c)$$

$$\mathcal{V}_\ell^{\text{BC}} = (0, 0, 0, 0)^T, \quad \mathcal{V}_r^{\text{BC}} = (0, 0, 0, 0)^T. \quad (15.4d)$$

Auf die Angabe von Einheiten kann in Gleichung (15.4d) verzichtet werden, da alle Werte identisch Null sind.

### 15.1.3 SimBL

Der Algorithmus **SimBL** basiert auf der partiellen Differentialgleichung (13.9a) und den algebraischen Gleichungen (13.9b) und (13.9c). Für die algebraischen Gleichungen müssen keine Randbedingungen spezifiziert werden. Die geschlossene Säule wird durch Nullflussrandbedingungen für die die partiellen Differentialgleichung (13.9a) modelliert. Diese werden durch

$$\text{mthbc}(1) = 0$$

$$\text{mthbc}(2) = 0$$

in `claw1ez.data` ausgewählt.

### 15.1.4 FlmPSSS

Der Algorithmus FlmPSSS basiert auf den vier partiellen Differentialgleichungen (14.1) der Massenbilanzen. Die geschlossene Säule wird durch Nullflussrandbedingungen für alle vier Gleichungen modelliert. Dazu werden die Randbedingungen für das Buckley-Leverett-Problem aus Tabelle 14.1 mit  $q_{\text{tot}} = 0$  verwendet.

## 15.2 Anfangsbedingungen

Die Säule ist gefüllt mit zwei Fluiden unterschiedlicher Dichte. In den Anfangsbedingungen muss die Verteilung der Fluide auf perkolierende und nicht perkolierende Phasen spezifiziert werden. Bei SimBL sind die Sättigungen die alleinigen unabhängigen Variablen, AMG9 benötigt jedoch die Spezifikation der Anfangsbedingungen für die Geschwindigkeiten  $v_i(x, 0)$  der Phasen und den Druck  $P_1(x, 0)$  der perkolierenden Wasserphase, AMG3+1 die Anfangsbedingungen für die Änderungsrate der Wassersättigung  $\sigma(x, 0) \approx \partial S_w / \partial t$  und FlmPSSS die Angabe des Drucks  $P_1(x, 0)$  der perkolierenden Wasserphase zu Beginn des Experiments. Diese Bedingungen werden in diesem Unterkapitel angegeben.

### 15.2.1 AMG9

Der Algorithmus AMG9 wird nur für die Simulation von homogenen Anfangsbedingungen, wie sie in Abbildung 15.1a illustriert werden, verwendet. Die Anfangssättigungen sind daher durch ihren Wert

$$S_i(x, 0) = S_{i0}(x) = S_{i0} \quad (15.5a)$$

mit  $i = 1, 2, 3, 4$  zur Zeit  $t = 0$  bestimmt. Die Säule liegt zu Beginn senkrecht zur Schwerkraft und die Fluide bewegen sich nicht

$$v_i(x, 0) = v_{i0}(x) = 0. \quad (15.5b)$$

Damit muss auch der Druck konstant sein und kann auf einen Referenzdruck

$$P_1 = P_{10}(x) = 0 \quad (15.5c)$$

	A	B	C	D	E	F	G
$u_{10}(x)$	0.449	0.302	0.450	0.499	0.354	0.299	0.151
$u_{20}(x)$	0.001	0.148	0.050	0.001	0.146	0.001	0.149
$u_{30}(x)$	0.377	0.549	0.470	0.321	0.499	0.557	0.699
$u_{40}(x)$	0.173	0.001	0.030	0.179	0.001	0.143	0.001
$u_{50}(x)$	0.0	0.0	0.0	0.0	0.0	0.0	0.0
$u_{60}(x)$	0.0	0.0	0.0	0.0	0.0	0.0	0.0
$u_{70}(x)$	0.0	0.0	0.0	0.0	0.0	0.0	0.0
$u_{80}(x)$	0.0	0.0	0.0	0.0	0.0	0.0	0.0
$u_{90}(x)$	0.0	0.0	0.0	0.0	0.0	0.0	0.0

**Tabelle 15.2:** Anfangsbedingungen für Simulationen von Experimenten mit einer geschlossenen porösen Säule im Schwerfeld mit AMG9.

festgelegt werden. Tabelle 15.2 fasst die gewählten Anfangsbedingungen für die später gezeigten Simulationen zusammen. Die Anfangsbedingungen A und B entsprechen 45% Wasser und 55% Öl, wobei die Anteile der nichtperkolierenden Phasen durch die Gleichungen (5.12) der RDA für primäre Bewässerung (A) und primäre Entwässerung (B) berechnet wurden. Anfangsbedingungen C sind der Arbeit [Hilf 06a] entnommen. Die Anfangsbedingungen D und E entsprechen 50% Wasser und 50% Öl. Die Anteile der nichtperkolierenden Phasen wurden wieder durch die Gleichungen (5.12) der RDA für primäre Bewässerung (D) und primäre Entwässerung (E) berechnet. Die Anfangsbedingungen F und G entsprechen 30% Wasser und 70% Öl, wobei F das Ergebnis einer primären Bewässerung und G das Ergebnis einer primären Entwässerung darstellt, wenn Gleichungen (5.12) der RDA zugrunde gelegt werden.

### 15.2.2 AMG3+1

Der Algorithmus AMG3+1 wird für Simulationen mit homogenen Anfangsbedingungen, sowie mit Anfangsbedingungen mit einer und mit zwei Unstetigkeiten verwendet, wie sie in Abbildung 15.1 dargestellt werden. Numerisch werden die Anfangsbedingungen durch eine Superposition zweier Tangenshyperbolicusfunktionen dargestellt, die durch ihre "Raumfrequenz"  $\kappa_i^{\text{IC}}$ , ihren Nulldurchgang  $x_0^{\text{IC}}, x_1^{\text{IC}}$  sowie die Höhe der Plateaus an der linken und der rechten Seite des jeweiligen Astes festgelegt werden. In den durchgeführten Experimenten wird die Höhe des linken Plateaus des linken Tangenshyperbolicus mit dem rechten Plateau des rechten Tangenshyperbolicus gleichgesetzt. Es genügt also die Spezifikation

Größe	Einheit	Einfluss $P_c$	Umverteilung		
			Primär	Sekundär	Blase
$x_0^{\text{IC}}$	m	1.25	1.25	1.25	1.125
$x_1^{\text{IC}}$	m	-3.75	-3.75	-3.75	1.375
$\kappa^{\text{IC}}$	$\text{m}^{-1}$	$4 \times 10^3$	$4 \times 10^3$	$4 \times 10^3$	40
$u_{\text{p}1}^{\text{IC}} = S_{\text{WP}}$		0.5	0.98	0.809	0.808
$u_{\text{p}2}^{\text{IC}} = S_{2\text{p}}$		0.1	0.01	0.01	0.002
$u_{\text{p}3}^{\text{IC}} = S_{4\text{p}}$		0.1	0.01	0.189	0.188
$u_{\text{p}4}^{\text{IC}} = \sigma_{\text{p}}$	$\text{s}^{-1}$	$-10^{-5}$	$-10^{-5}$	$-10^{-5}$	$-10^{-5}$
$u_{\text{b}1}^{\text{IC}} = S_{\text{Wb}}$		0.5	0.02	0.151	0.152
$u_{\text{b}2}^{\text{IC}} = S_{2\text{b}}$		0.1	0.01	0.149	0.148
$u_{\text{b}3}^{\text{IC}} = S_{4\text{b}}$		0.1	0.01	0.01	0.002
$u_{\text{b}4}^{\text{IC}} = \sigma_{\text{b}}$	$\text{s}^{-1}$	$-10^{-5}$	$-10^{-5}$	$-10^{-5}$	$-10^{-5}$

**Tabelle 15.3:** Anfangsbedingungen für Simulationen von Experimenten mit einer geschlossenen porösen Säule im Schwerefeld mit AMG3+1.

von zwei Wertevektoren  $u_{\text{p}i}^{\text{IC}}, u_{\text{b}i}^{\text{IC}}$ . Der Index  $i = 1, 2, 3, 4$  steht hier für die vier Variablen  $u_1 = S_{\text{W}}, u_2 = S_2, u_3 = S_4, u_4 = \sigma$ .

Die ‘‘Raumfrequenzen’’ der Anfangsbedingungen aller vier Variablen werden gleich gewählt. Ebenso die Nulldurchgänge  $x_0^{\text{IC}}, x_1^{\text{IC}}$ . Die Anfangsbedingungen werden demnach durch Werte  $x_0^{\text{IC}}, x_1^{\text{IC}}, \kappa^{\text{IC}}, u_{\text{p}i}^{\text{IC}}$  und  $u_{\text{b}i}^{\text{IC}}$  mit  $i = 1, 2, 3, 4$  festgelegt. Tabelle 15.3 zeigt zusammenfassend die Anfangsbedingungen der durchgeführten numerischen Experimente mit dem Algorithmus AMG3+1.

### 15.2.3 SimBL

Der Algorithmus SimBL wird für Simulationen mit homogenen Anfangsbedingungen mit ein oder zwei Unstetigkeiten verwendet, wie sie in Abbildung 15.1 dargestellt werden. Numerisch werden die Anfangsbedingungen durch eine Superposition zweier Tangenshyperbolicusfunktionen dargestellt, die durch ihre ‘‘Raumfrequenz’’  $\kappa_{\text{sm}}$ , ihren Nulldurchgang  $x_0, x_1$  sowie die Höhe der Plateaus an der linken und der rechten Seite des jeweiligen Astes festgelegt werden. Wird  $x_0$  oder  $x_1$  so gewählt, dass sie außerhalb der Säule liegen, können auch Anfangsbedingungen mit einer bzw. keiner Unstetigkeit realisiert werden. In den durchgeführten Experimenten wird die Höhe des linken Plateaus des linken Tangenshyperbolicus mit dem

			Wasserblase		Ölblase		
			Prim.	Sek.	Prim.	Sek.	
	Umverteilung	Blase					
$S_{Wb}$	0.01	0.16	$S_{1b}$	0.002	0.002	0.994	0.808
$S_{2b}$	0.00	0.14	$S_{2b}$	0.002	0.148	0.002	0.002
$S_{4b}$	0.00	0.01	$S_{3b}$	0.994	0.848	0.002	0.002
$S_{Wp}$	0.99	0.50	$S_{1p}$	0.994	0.808	0.002	0.002
$S_{2p}$	0.00	0.02	$S_{2p}$	0.002	0.002	0.002	0.148
$S_{4p}$	0.00	0.1	$S_{3p}$	0.002	0.002	0.994	0.848
$x_0/m$	1.25	1.0	$x_0/m$	1.125	1.125	1.125	1.125
$x_1/m$	-1.	1.5	$x_1/m$	1.375	1.375	1.375	1.375
$\kappa_{sm}/\Delta x$	2	1	$\kappa_{sm}/m^{-1}$	20	20	20	20

(a) (b)

**Tabelle 15.4:** Anfangsbedingungen für Simulationen von Experimenten mit einer geschlossenen porösen Säule mit SimBL in Tabelle (a) und FlmPSSS in Tabelle (b).

rechten Plateau des rechten Tangenshyperbolicus gleichgesetzt. Es genügt also die Spezifikation der zwei Wertetripel  $(S_{1p}, S_{2p}, S_{3p})$ ,  $(S_{1b}, S_{2b}, S_{3b})$  für die Sättigung und des Tripels  $(x_0, x_1, \kappa_{sm})$  für die Lage. Tabelle 15.4a zeigt zusammenfassend die Anfangsbedingungen der durchgeführten numerischen Experimente mit dem Algorithmus SimBL.

### 15.2.4 FlmPSSS

Der Algorithmus FlmPSSS wird für Simulationen mit homogenen Anfangsbedingungen mit zwei Unstetigkeiten verwendet, wie sie in Abbildung 15.1c dargestellt werden. Numerisch werden die Anfangsbedingungen durch eine Superposition zweier Tangenshyperbolicusfunktionen dargestellt, die durch ihre "Raumfrequenz"  $\kappa_{sm}$ , ihren Nulldurchgang  $x_0, x_1$  sowie die Höhe der Plateaus an der linken und der rechten Seite des jeweiligen Astes festgelegt werden. In den durchgeführten Experimenten wird die Höhe des linken Plateaus des linken Tangenshyperbolicus mit dem rechten Plateau des rechten Tangenshyperbolicus gleichgesetzt. Es genügt also die Spezifikation der zwei Wertetripel  $(S_{1p}, S_{2p}, S_{3p})$ ,  $(S_{1b}, S_{2b}, S_{3b})$  für die Sättigung und des Tripels  $(x_0, x_1, \kappa_{sm})$  für die Lage. Tabelle 15.4b zeigt zusammenfassend die Anfangsbedingungen der durchgeführten numerischen Experimente mit dem Algorithmus FlmPSSS.

### 15.3 Parameter der Simulationen

Zur numerischen Berechnung müssen neben Anfangs- und Randbedingungen auch die Parameter spezifiziert werden. Die Parameter sind in zwei Klassen unterteilt. Zunächst werden die physikalischen Parameter des Modells so gewählt, dass sie zumindest nahe an realistischen Werten sind. Dies ermöglicht Plausibilitätsprüfungen, wenn experimentelle Daten nicht vorhanden sind. Die numerischen Parameter der Algorithmen werden so gewählt, dass sie ein stabiles Verhalten des Algorithmus garantieren, die Lösung jedoch nicht signifikant verfälschen. Zwei Sätze von physikalischen Parametern wurden verwendet. Sie sind in Tabelle 15.5 aufgeführt. Die Parameter aus Satz 1 wurden durch Anpassen der  $P_c$ -Kurven [Hilf 06a] der RDA an Daten von Experimenten, die in der Versuchseinrichtung zur Grundwasser- und Altlastensanierung (VEGAS) an der Universität Stuttgart [Shet 99] durchgeführt wurden, gewonnen. Die viskosen Widerstände wurden in Satz 1 so gewählt, dass sie nach Gleichung (5.13) Viskositäten von  $\mu_{\mathbb{W}} = 0.001 \text{ kg m}^{-1} \text{ s}^{-1}$ ,  $\mu_{\mathbb{O}} = 0.001 \text{ kg m}^{-1} \text{ s}^{-1}$  und einer Permeabilität von  $K = 1.0 \times 10^{-12} \text{ m}^2$  entsprechen. Die Parameter aus Satz 2 wurde durch Anpassen der  $P_c$ -Kurven der RDA an eine van-Genuchten-Parametrierung, die zur Simulation eines Experiments [Papa 08] verwendet wurde, bestimmt. Die viskosen Widerstände des zweiten Parametersatzes wurden durch das Anpassen der Mobilitätsfunktionen  $\lambda_{\mathbb{W}}$  und  $\lambda_{\mathbb{O}}$  an die entsprechenden Funktionen einer van-Genuchten-Parametrierung [Laus 08] bestimmt. Die viskosen Widerstände entsprechen Viskositäten von  $\mu_{\mathbb{W}} = 0.001 \text{ kg m}^{-1} \text{ s}^{-1}$ ,  $\mu_{\mathbb{O}} = 18 \times 10^{-6} \text{ kg m}^{-1} \text{ s}^{-1}$  und einer Permeabilität von  $K = 3.37 \times 10^{-11} \text{ m}^2$ .

Parameter		Einheiten	Satz 1		Satz 2	
$\phi$			0.34		0.34	
$\epsilon_{\text{M}}$			0.01		0.01	
$\mathbb{W}$	$\mathbb{O}$		$\mathbb{W}$	$\mathbb{O}$	$\mathbb{W}$	$\mathbb{O}$
$\varrho_{\mathbb{W}}$	$\varrho_{\mathbb{O}}$	$\text{kg m}^{-3}$	1000	800	1000	1.2
$S_{\mathbb{W} \text{ dr}}$	$S_{\mathbb{O} \text{ im}}$		0.15	0.19	0.13	0.21
$\eta_2$	$\eta_4$		4	3	6	4
$\alpha$	$\beta$		0.52	0.9	0.42	1.6
$P_{\text{a}}$	$P_{\text{b}}$	Pa	1620	25	2700	3
$\gamma$	$\delta$		1.5	3.5	2.4	2.9
$P_2^*$	$P_4^*$	Pa	2500	400	11000	3000
$R_{11}$	$R_{33}$	$\text{kg m}^{-3} \text{ s}^{-1}$	$2.31 \times 10^8$	$2.31 \times 10^8$	$2.47 \times 10^7$	$2.97 \times 10^4$
$R_{22}$	$R_{44}$	$\text{kg m}^{-3} \text{ s}^{-1}$	$10^{16}$	$10^{16}$	$10^{16}$	$10^{16}$
$R_{ij}, i \neq j$		$\text{kg m}^{-3} \text{ s}^{-1}$	0		0	

**Tabelle 15.5:** Die verwendeten Parametersätze

### 15.3.1 Die numerischen Parameter für AMG9

Die numerischen Parameter für AMG9 wurden in Kapitel 11.6 diskutiert. Die verwendeten Werte sind dort in Tabelle 11.1 zusammengefasst. Die charakteristische Zeit für das Aufstellen der Säule ist  $\tau_r = 10^4 \text{ s} = 2 \text{ h } 46 \text{ min } 40 \text{ s}$ .

### 15.3.2 Die numerischen Parameter für AMG3+1

Die numerischen Parameter für AMG3+1 wurden in Kapitel 12.5 diskutiert. Die verwendeten Werte sind in Tabelle 15.6 zusammengefasst. Sie wurden jeweils den Problemen angepasst, um die Leistungsfähigkeit des Algorithmus zu optimieren.

Parameter	Einheit	Kapitel 15.4.1	Kapitel 15.7	Kapitel 15.8
$N_{\text{pts}}$		101	101	201
$\tau_{\text{sm}}$		1.0	$10^{-5}$	1.0
$\sigma_{\text{sm}}$		2.0	2.0	2.0
$\epsilon_{\text{tol}}$		$10^{-5}$ (fest im Code)		
$\epsilon_{\text{np}}$	$\frac{\text{mm}^2}{\text{s}}$	0.01	0.05	0.1
$\epsilon_{\sigma}$	$\frac{\text{mm}^2}{\text{s}}$	10	5	2
$\zeta_{\sigma}$	s	1	0.5	0.1
$\epsilon_{\text{S}}$		$10^{-5}$	$10^{-5}$	$10^{-5}$
$\tau_{\text{st}}$	s	10	10	10
$\epsilon_{\text{di}}$		$10^{-6}$ (fest im Code)		
$\epsilon_{\text{eq}}$		$10^{-5}$ (fest im Code)		

**Tabelle 15.6:** Numerische Parameter für AMG3+1 für Experimente mit einer geschlossenen porösen Säule

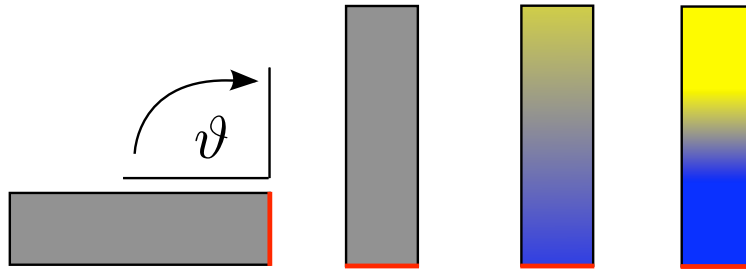
### 15.3.3 Die numerischen Parameter für SimBL

Die numerischen Parameter für SimBL wurden in Kapitel 13.7 diskutiert. Die verwendeten Werte sind dort in Tabelle 13.1 zusammengefasst.

### 15.3.4 Die numerischen Parameter für FlmPSSS

Die numerischen Parameter für FlmPSSS wurden in Kapitel 14.5 diskutiert. Die verwendeten Werte sind dort in Tabelle 14.2 zusammengefasst.

## 15.4 Aufstellen einer geschlossenen Säule



**Abbildung 15.2:** Schematische Darstellung des Aufstellens einer geschlossenen Säule im Schwerfeld nach Gleichung (15.6). Anfangs ist die Säule senkrecht zur Schwerkraft ausgerichtet und die Sättigungen sind konstant in der ganzen Säule. Dies wird durch konstantes Grau in der Säule illustriert. Bereiche mit höherer Wassersättigung werden blau dargestellt, Bereiche mit niedrigerer Sättigung gelb. Die letzten beiden Säulen zeigen das simultane Auftreten von Bewässerung (unterer Teil der Säule) und Entwässerung (oberer Teil der Säule) in der Säule.

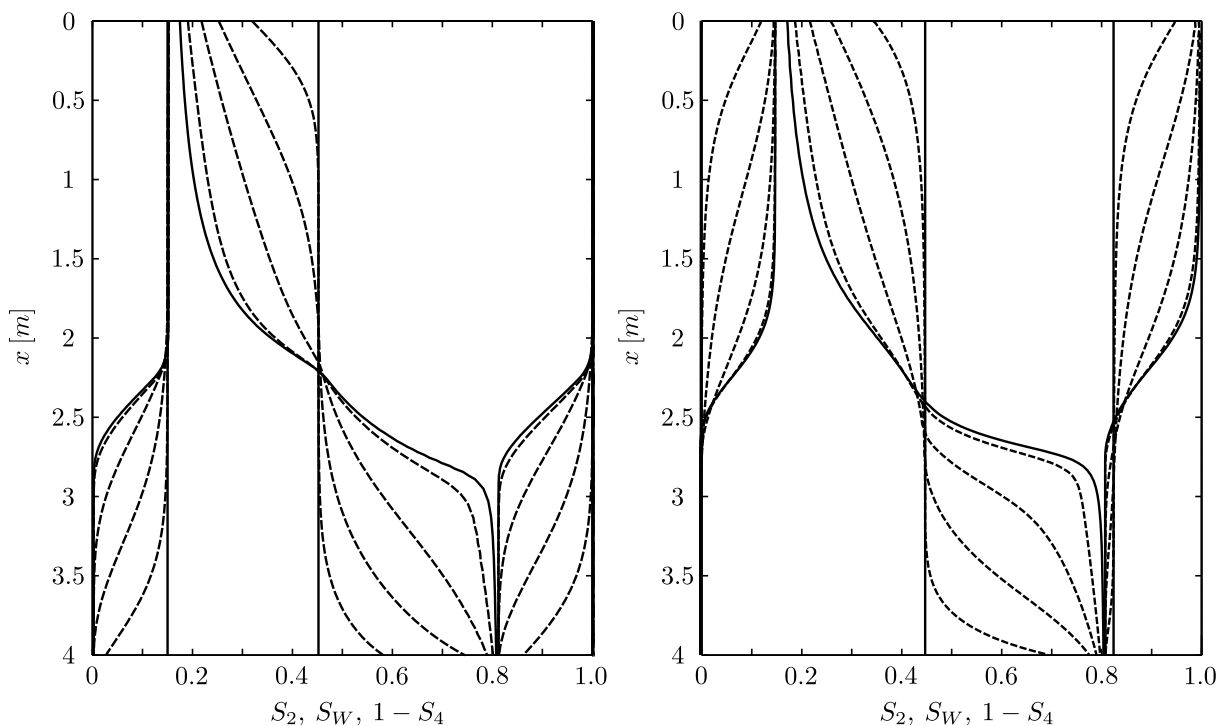
In diesem Unterkapitel werden Lösungen von Simulationen eines Experiments betrachtet, in dem eine geschlossene poröse Säule aufgestellt wird, welche homogen mit zwei Fluiden unterschiedlicher Dichte gefüllt ist. Abbildung 15.2 stellt das Experiment schematisch dar. Zum Zeitpunkt  $t = 0$  ist die Säule senkrecht zur Schwerkraft ausgerichtet ( $\vartheta = 0$ ), und die beiden Fluide ruhen, da auf sie keine Kräfte wirken. Durch das Aufrichten der Säule in eine vertikale Ausrichtung ( $\vartheta = 90^\circ$ ) wird ein Verdrängungsprozess in Gang gesetzt. Das Protokoll für die Orientierung der Säule im Schwerfeld wird durch

$$\sin \vartheta(t) = \frac{1}{2} \left[ \tanh \left( \frac{t}{\tau_r} - 5 \right) + 1 \right] \quad (15.6)$$

beschrieben.

Sobald die Säule aufgerichtet wird, erzeugt die Schwerkraft eine Strömung in der Säule. Das schwerere Wasser drängt nach unten und schiebt das leichtere Öl nach oben. Die untere Hälfte der Säule wird also bewässert und die obere Hälfte entwässert. Im Übergangsbereich zwischen Bewässerung und Entwässerung verändert sich die Art des Prozesses räumlich und zeitlich. Wird ein Bereich der Säule bewässert, so entsteht dort nichtperkolierendes Öl, da ein Teil des zurückweichenden Öls abreißt und als Blasen oder Ganglien zurückbleibt. Hingegen nimmt der Anteil an nichtperkolierendem Wasser ab, da sich das eindringende perkolierende Wasser mit Teilen des vorhandenen nichtperkolierenden Wassers vereinigt und somit Teile des nichtperkolierenden Wassers perkolierend werden. In Bereichen, wo die Wassersättigung abnimmt, die also entwässert werden, wird entsprechend nichtperkolierendes Wasser erzeugt und der Anteil an nichtperkolierendem Öl verringert. Prozesse, bei denen Bewässerung und Entwäs-





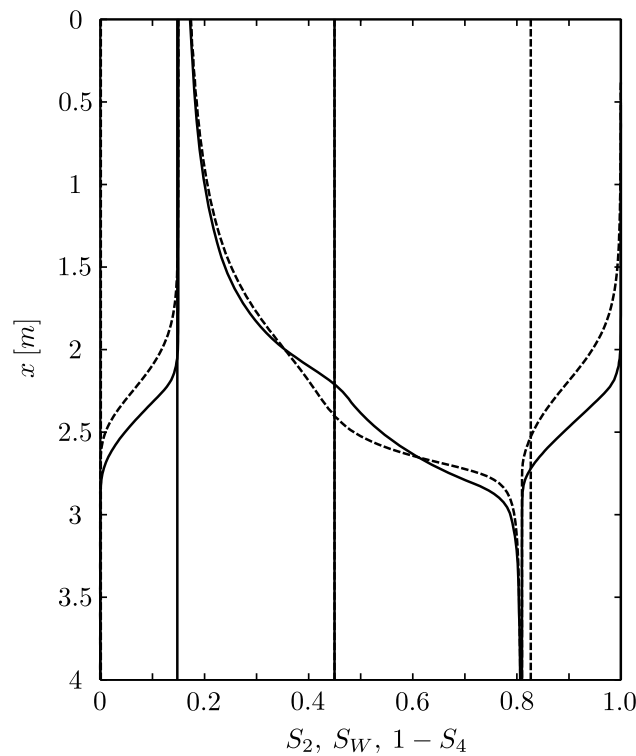
**Abbildung 15.3:** Sättigungsprofile  $S_2(x,t)$ ,  $S_w(x,t)$ ,  $1 - S_4(x,t)$  zu den Zeitpunkten  $t = 0$  s,  $t = 6 \times 10^6$  s (durchgezogene Linien) und  $t = 10^5$  s,  $2.5 \times 10^5$  s,  $5 \times 10^5$  s,  $7.5 \times 10^5$  s (gestrichelte Linien) beim Aufstellen einer geschlossenen Säule. Die linke Abbildung zeigt Profile für Anfangsbedingungen A und die rechte Abbildung für Anfangsbedingungen B.

serung simultan in einem porösen Medium auftreten oder bei denen ein Bereich nacheinander be- und entwässert wird, sind im DBRMMWBL-Modell nur sehr aufwändig zu simulieren, weil Kapillardrucksättigungsbeziehung und relative Permeabilitäten vorab spezifiziert werden müssen. Durch die Änderung des Prozesses in Raum und Zeit während der Simulation werden sie jedoch Teil der Lösung. Das untersuchte Modell hat diese Schwierigkeiten nicht, da die Art der Prozesse, Be- und Entwässerung, direkt berücksichtigt werden.

Nach einiger Zeit im Schwerfeld werden die Fluide wieder zur Ruhe kommen und es wird sich ein neuer Gleichgewichtszustand einstellen. Dieser Zustand wird hier ausführlich diskutiert werden, insbesondere wie sich die Anfangsbedingungen im Gleichgewichtszustand widerspiegeln.

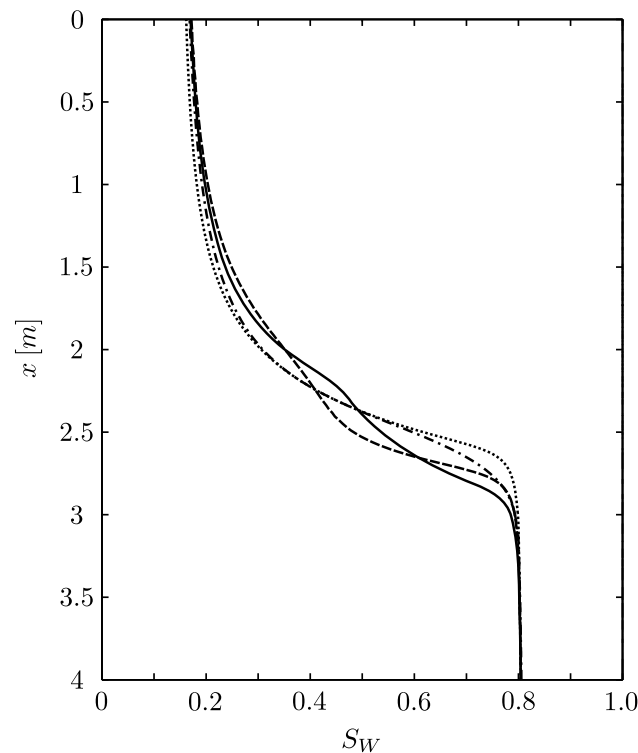
Abbildung 15.3<sup>1</sup> zeigt Sättigungsprofile  $S_2(x,t)$ ,  $S_w(x,t)$ ,  $1 - S_4(x,t)$  zu unterschiedlichen Zeitpunkten. Die linke Abbildung zeigt Profile für Anfangsbedingungen A und die rechte Abbildung für Anfangsbedingungen B. Die Schwerkraft ist entlang der Ordinate nach unten gerichtet. Zum Zeitpunkt  $t = 0$  ist die Säule senkrecht zur Schwerkraft ausgerichtet. Zum Zeitpunkt  $t = 10^5$  s hat sie gerade ihre vertikale Position erreicht. Mit dem Aufstellen fängt

<sup>1</sup>Die Lösungen in den Abbildungen 15.3-15.6 wurden mit AMG9 berechnet.



**Abbildung 15.4:** Anfängliche ( $t = 0$ ) und quasistationäre ( $t = 6 \times 10^6$  s) Sättigungsprofile  $S_i(x, t)$  als Funktion der Höhe  $x$  für das Aufstellen einer geschlossenen porösen Säule der Länge  $x_r - x_\ell = 4$  m. Gezeigt werden jeweils zwei Tripel von Geraden und Kurven. Durchgezogene Kurven und Geraden illustrieren Profile für Anfangsbedingungen A in Tabelle (15.2), gestrichelte Kurven und Geraden für Anfangsbedingungen B. Man beachte, dass die gestrichelte und die durchgezogene Gerade bei  $S = 0.45$  aufeinander liegen. Ebenso fallen die gestrichelte Gerade für  $S_2 = 0$  und die durchgezogene Gerade für  $S_4 = 0$  mit den Achsen zusammen.

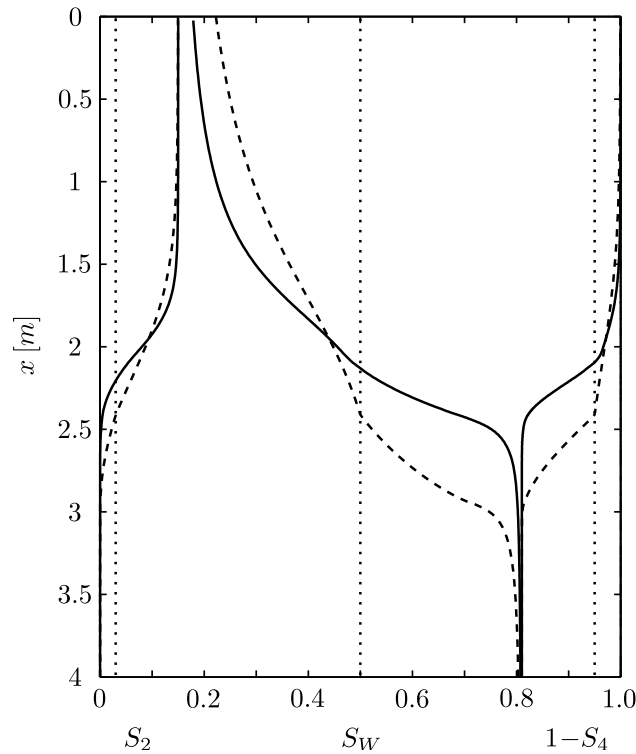
das Wasser an, den unteren Teil der Säule zu bewässern. Simultan dazu wird der obere Teil der Säule entwässert. Das aufsteigende Öl verdrängt das Wasser im oberen Teil. Die Wassersättigung nimmt ab, lässt jedoch nicht verbundenes Wasser zurück, da während des Verdrängungsprozesses einzelne Wasserblasen von der verbundenen Wasserphase getrennt wurden (siehe linke Abbildung). Wenn zu Beginn des Experiments nicht verbundenes Öl im oberen Teil der Säule vorhanden ist (siehe rechte Abbildung), so verringert sich die Menge an unverbundenem Öl, da sich unverbundene Öltropfen und Ganglien mit dem eindringenden, verbundenem Öl vereinigen. Dieselbe Argumentationskette gilt im unteren Teil der Säule, wenn man einen Perspektivwechsel von Öl zu Wasser durchführt. Man beachte, dass keine klare Trennung zwischen Be- und Entwässerungsbereich gemacht werden kann. Vielmehr ändert sich die Art des Prozesses im Laufe der Zeit in einem Bereich um  $x = 2.5$  m. Dort wird zunächst entwässert. Gegen Ende des Experiments nimmt die Wassermenge an dieser Stelle wieder zu. Im Experiment ist damit die Art des Prozesses zeitabhängig.



**Abbildung 15.5:** Vergleich der quasistationären Lösungen aus Abbildung 15.4 mit entsprechenden Lösungen des DBRMMWBL-Modells. Die durchgezogene und gestrichelte Kurve sind dabei identisch mit den mittleren Kurven und gleichem Stil in Abbildung 15.4. Die gestrichpunktete Kurve zeigt das hydrostatische Gleichgewichtsprofil, welches mit Hilfe von Gleichung (15.7) mit der sekundären Entwässerungskapillardrucksättigungskurve der residualen Entkopplungsnäherung berechnet wird. Die gepunktete Kurve zeigt das Gleichgewichtsprofil, wenn stattdessen eine sekundäre Bewässerungskapillardrucksättigungskurve verwendet wird.

Abbildung 15.4 zeigt einen Vergleich stationärer Sättigungsprofile zum Zeitpunkt  $t = 6 \times 10^6$  s für zwei verschiedene Anfangsbedingungen, die sich im DBRMMWBL-Modell nicht unterscheiden lassen. Die Abbildung 15.4 zeigt, dass das quasistationäre Profil der Wassersättigung stark davon abhängt, wie stark zu Beginn des Experiments die beiden Fluide perkolierend und nicht perkolierend sind. Anfangsbedingung A stellt dabei eine Verteilung dar, welche durch eine primäre Bewässerung hergestellt wurde (kein nicht verbundenes Wasser), wohingegen Anfangsbedingung B eine Verteilung darstellt, die durch eine primäre Entwässerung erzeugt wurde (kein nicht verbundenes Öl).

Abbildung 15.5 illustriert Unterschiede zwischen dem untersuchten neuen Modell und dem DBRMMWBL-Modell. Gezeigt werden die quasistationären Wassersättigungsprofile (mittlere durchgezogene und gestrichelte Kurven) aus Abbildung 15.4. Diese werden mit hydrostatischen Lösungen des DBRMMWBL-Modells (gestrichpunktete und gepunktete Kurve) verglichen. Im DBRMMWBL-Modell ist die Wassersättigung in einer vertikalen Säule im



**Abbildung 15.6:** Vergleich numerisch berechneter Sättigungsprofile  $S_2(x)$ ,  $S_W(x)$  und  $1 - S_4(x)$  als Funktion von  $x$  zum Zeitpunkt  $t = 150\tau_r$  (durchgezogene Kurven) mit analytisch berechneten quasistatischen Profilen (gestrichelte Kurven), die in [Hilf 06c, Fig.6] vorgestellt wurden. Die Anfangsbedingungen werden als gepunktete vertikale Geraden gezeigt.

hydrostatischen Gleichgewicht durch

$$S_W(x) = P_c^{-1}(C^* + (\rho_0 - \rho_W)gx) \quad (15.7)$$

gegeben [Bear 72], wobei  $P_c$  die Kapillardrucksättigungsbeziehung und  $C^*$  eine Integrationskonstante ist. Die Randbedingungen (geschlossene Säule) und die Anfangsbedingungen (45% Wassersättigung) legen dabei die Konstante durch

$$\int_{x_\ell}^{x_r} S_W(x)dx = 0.45(x_r - x_\ell) \quad (15.8)$$

fest. Für die gestrichpunkteten Kurve wurde dabei für  $P_c$  eine sekundären Entwässerungskapillardrucksättigungskurve aus der residualen Entkopplungsnäherung und für die gepunktete Kurve eine sekundäre Bewässerungskapillardrucksättigungskurve zugrunde gelegt. Im Vergleich wird deutlich, dass sich die quasistationären Lösungen im Kapillarsaum merklich von Lösungen des DBRMMWBL-Modells unterscheiden.

In Abbildung 15.6 werden quasistationäre Gleichgewichtsprofile für Anfangsbedingungen

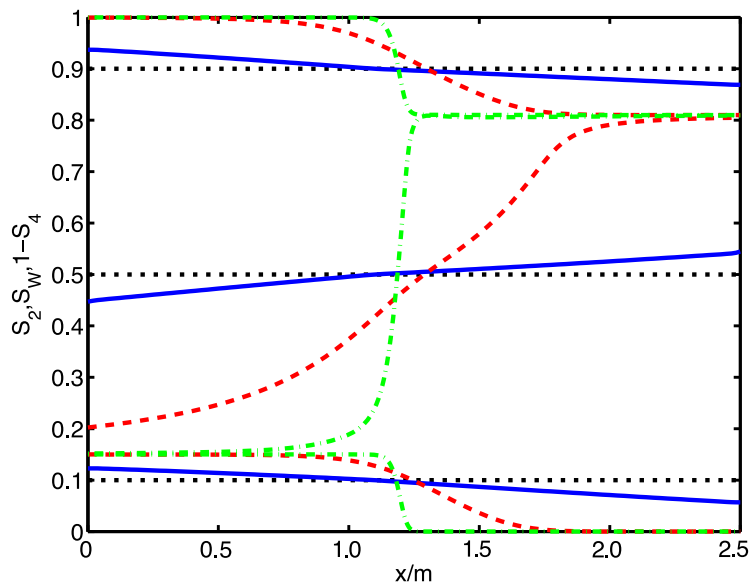
A (durchgezogene Kurven) mit quasistatischen Sättigungsprofilen, die analytisch berechnet wurden [Hilf 06c, Fig.6] (gestrichelte Kurven), verglichen. Die Profile wurden mit AMG9 numerisch berechnet. Beiden Profilen liegen dieselben Anfangsbedingungen zugrunde, die durch gepunktete vertikale Geraden illustriert werden. Die Profile unterscheiden sich deutlich. Der Unterschied lässt sich anhand mehrerer Punkte erläutern. Bei der analytischen Lösung wird angenommen, dass die Geschwindigkeiten der Phasen verschwindend klein sind. Während des Experiments treten allerdings Geschwindigkeiten bis  $v_i \approx 10^{-3}$  m/s auf. Die Annahme verschwindend kleiner Geschwindigkeiten wird demnach bei der numerischen Berechnung klar verletzt. Außerdem sei erwähnt, dass die viskosen Kopplungsterme  $R_{ij}$ , insbesondere der große Unterschied zwischen  $R_{25}$ ,  $R_{45}$ , nicht bei den analytischen Berechnungen berücksichtigt werden. Zuletzt finden auch die Randbedingungen in der Berechnung der analytischen Lösung keine Berücksichtigung. Dennoch zeigen beide Profile qualitative Ähnlichkeiten. So entsprechen den Knicken bei  $x \approx 2.4$  m in den quasistatischen Profilen Wendepunkte bei ca.  $x \approx 2.1$  m in den numerischen Profilen.

### 15.4.1 Der Einfluss der Kapillar- und Grenzflächenterme

Die bisher gezeigten Sättigungsprofile zum Aufstellen einer geschlossenen, homogen gefüllten, porösen Säule wurden alle mit dem Parametersatz 1 aus Tabelle 15.5 gerechnet. Dies ist unter anderem der Tatsache geschuldet, dass AMG9 nur für einen sehr eingeschränkten Parameterbereich stabil ist und konvergiert. Der auf dem reduzierten Modell mit immobilen nichtperkolierenden Phasen beruhende AMG3+1 ist diesbezüglich deutlich großzügiger. Er soll hier verwendet werden, um zu zeigen, wie sich eine Umskalierung der Kapillar- und Grenzflächenterme  $P_a, P_b, P_2^*, P_4^*$  in den Gleichgewichtsprofilen zeigt. Experimentell ist das direkte Umskalieren der Kapillar- und Grenzflächenterme schwierig umzusetzen. Allerdings hat ein Umskalieren der Kapillar- und Grenzflächenterme in den Gleichungen denselben Effekt wie eine Veränderung der Säulenlänge. Die Änderung der Säulenlänge ist experimentell in gewissem Rahmen umsetzbar. Ein Verringern der Kapillar- und Grenzflächenterme entspricht dabei einer Vergrößerung der Skala bzw. einer verkleinerten Ansicht des Kapillarsaums.

Abbildung 15.7<sup>2</sup> zeigt einen Vergleich der Gleichgewichtslösungen für Kapillar- und Grenzflächenterme, die um einen Faktor 10 größer sind (blau durchgezogene Kurven) und welche, die um einen Faktor 10 kleiner sind (grün gestrichpunktete Kurven) als die bisher verwendeten (rot gestrichelte Kurven). Die Abbildung zeigt, wie stärkere Kapillar- und Grenzflächenterme der Gravitation entgegenwirken. Für sehr starke Kräfte (blaue Kurven) reicht schon ein

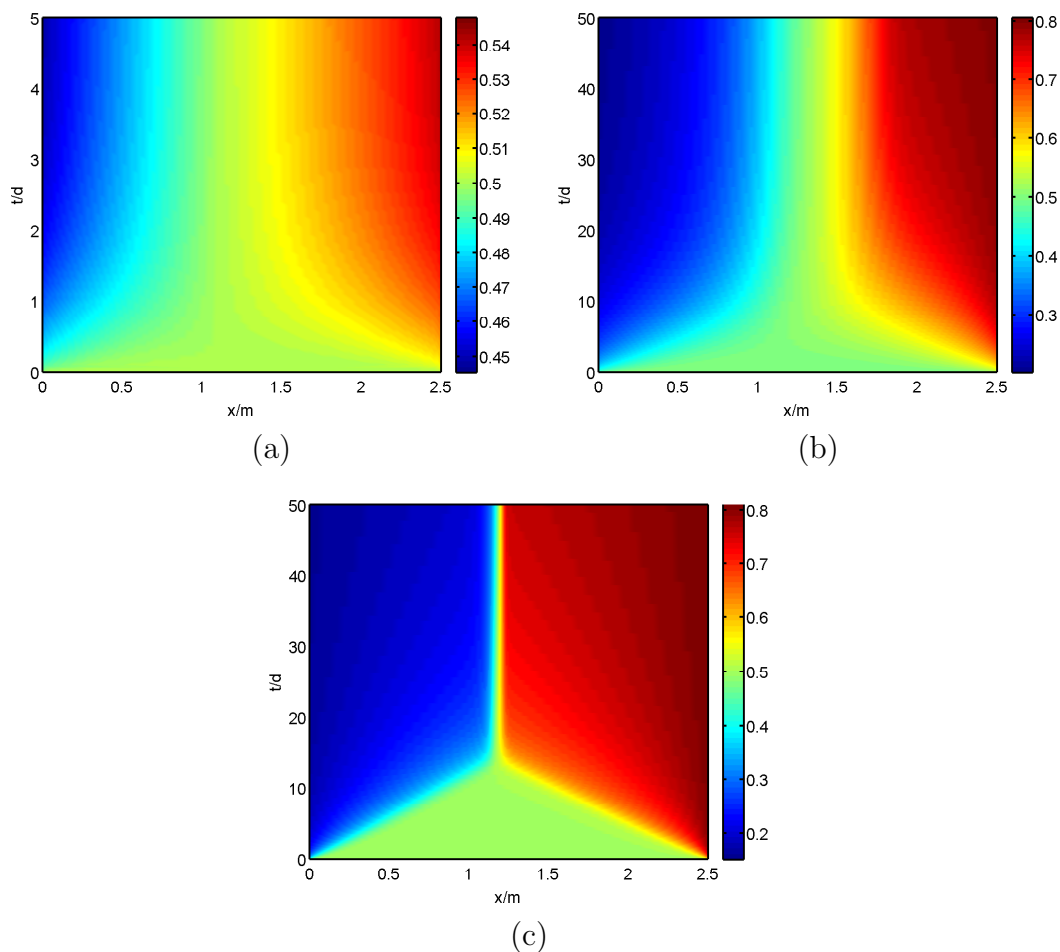
<sup>2</sup>Die Lösungen in den Abbildungen 15.7 und 15.8 wurden mit AMG3+1 berechnet.



**Abbildung 15.7:** Vergleich von Sättigungsprofilen für Kapillar- und Grenzflächenterme unterschiedlicher Stärke. Die Parameter  $P_a, P_b, P_2^*, P_4^*$  der rot gestrichelten Kurven entsprechen denen der vorangehenden Simulationen. Sie wurden mit Faktor 10 multipliziert für die blau durchgezogenen Kurven und durch 10 geteilt für die grün gestrichpunkteten Kurven. Die schwarz gepunkteten Geraden zeigen die Anfangsbedingungen.

geringer Sättigungsgradient aus, so dass sich die Fluide beim Aufstellen fast nicht umverteilen. Für schwächere Terme werden beide Fluide nahezu vollständig getrennt und nur die erzeugten nichtperkolierenden Phasen bleiben zurück.

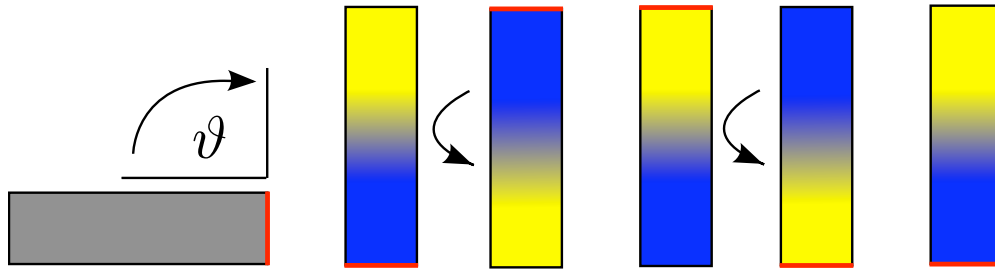
Abbildung 15.8 zeigt die Entwicklung der Wassersättigung  $S_w(x, t)$  in Raum und Zeit. Die Parameter für Kapillar- und Grenzflächenterme sind in Abbildung 15.8a identisch mit denen der blau durchgezogenen Kurven aus Abbildung 15.7, in Abbildung 15.8b identisch mit denen der rot gestrichelten Kurven aus Abbildung 15.7 und in Abbildung 15.8c identisch mit denen der grün gestrichpunkteten Kurven aus Abbildung 15.7. Ein Vergleich der gezeigten Farbverläufe bestätigt die Folgerungen aus Abbildung 15.7. Die Umverteilung für geringere Kapillar- und Grenzflächenterme ist deutlich stärker ausgeprägt. Ein Vergleich der Zeitachsen zeigt, dass der Prozess für die stärkeren Kapillar- und Grenzflächenterme deutlich schneller das Gleichgewicht erreicht. Die Zeit bis zum Erreichen eines stationären Zustandes für die geringen Kapillar- und Grenzflächenterme unterscheidet sich hingegen nicht merklich vom Fall ohne Kapillar- und Grenzflächenterme. In allen drei Fällen wird deutlich, wie sich Fronten von den Rändern der Säule mit zunächst weitgehend konstanter Geschwindigkeit in der Säule bewegen. Man sieht wie die Kapillar- und Grenzflächenterme diffusiv auf die Fronten wirken und diese ‐ausschmieren‐. Ein diffusiver Prozess verhält sich proportional  $xt^{-1/2}$  ein hyperbolischer proportional  $x/t$ . An den Konturen (zusammenhängende Gebiete



**Abbildung 15.8:** Zeitliche Entwicklung der Wassersättigung  $S_w(x,t)$  für unterschiedlich starke Kapillar- und Grenzflächenterme. Die Wassersättigung  $S_w(x,t)$  wird farblich dargestellt. Die Farbtabelle befindet sich jeweils rechts in der Abbildung. Die Parameter für Kapillar- und Grenzflächenterme  $P_a, P_b, P_2^*, P_4^*$  sind für Abbildung (a) um den Faktor 10 größer als für Abbildung (b) die wiederum um den Faktor 10 größer sind als für Abbildung (c). Für Abbildung (b) wurden dieselben Parameter wie für die rot gestrichelten Kurven in Abbildung 15.7 verwendet.

mit identischer Farbe) kann man diese Prozesse unterscheiden. Um  $90^\circ$  gedreht sind die Konturen Geraden in Abbildung 15.8c. In Abbildung 15.8a und b sind sie jedoch nur zu Beginn linear und nähern sich dann einer Wurzelfunktion an.

## 15.5 Wiederholtes Umdrehen einer geschlossenen Säule



**Abbildung 15.9:** Schematische Darstellung des Aufstellens und wiederholten Umdrehens einer geschlossenen Säule im Schwerfeld nach Gleichung (15.9). Anfangs ist die Säule senkrecht zur Schwerkraft ausgerichtet und die Sättigungen sind konstant in der ganzen Säule und die Säule ist entsprechend grau eingefärbt. In den übrigen Säulen werden Bereiche mit höherer Wassersättigung blau und Bereiche mit niedrigerer Sättigung gelb dargestellt. Die Säule wird aufgestellt und das Wasser sammelt sich im unteren Teil der Säule. Diese Seite ist durch einen roten Balken markiert. Die Säule wird nacheinander zweimal um  $180^\circ$  gedreht, wobei zwischen den beiden Rotationen gewartet wird, bis die Fluidkonfiguration im Gleichgewicht ist.

In diesem Unterkapitel werden Lösungen von Simulationen eines Experiments betrachtet, bei dem eine geschlossene poröse Säule, welche homogen mit zwei Fluiden gefüllt ist, zunächst senkrecht zur Schwerkraft liegt. Sie wird dann in eine vertikale Position gedreht und nachdem ein Gleichgewichtszustand in der Fluidkonfiguration erreicht wurde, zweimal um jeweils  $180^\circ$  gedreht, wobei zwischen den Drehungen gewartet wird, bis sich ein Gleichgewichtszustand ausgebildet hat. Abbildung 15.9 stellt das Experiment schematisch dar. Das Protokoll für die Orientierung der Säule im Schwerfeld wird durch

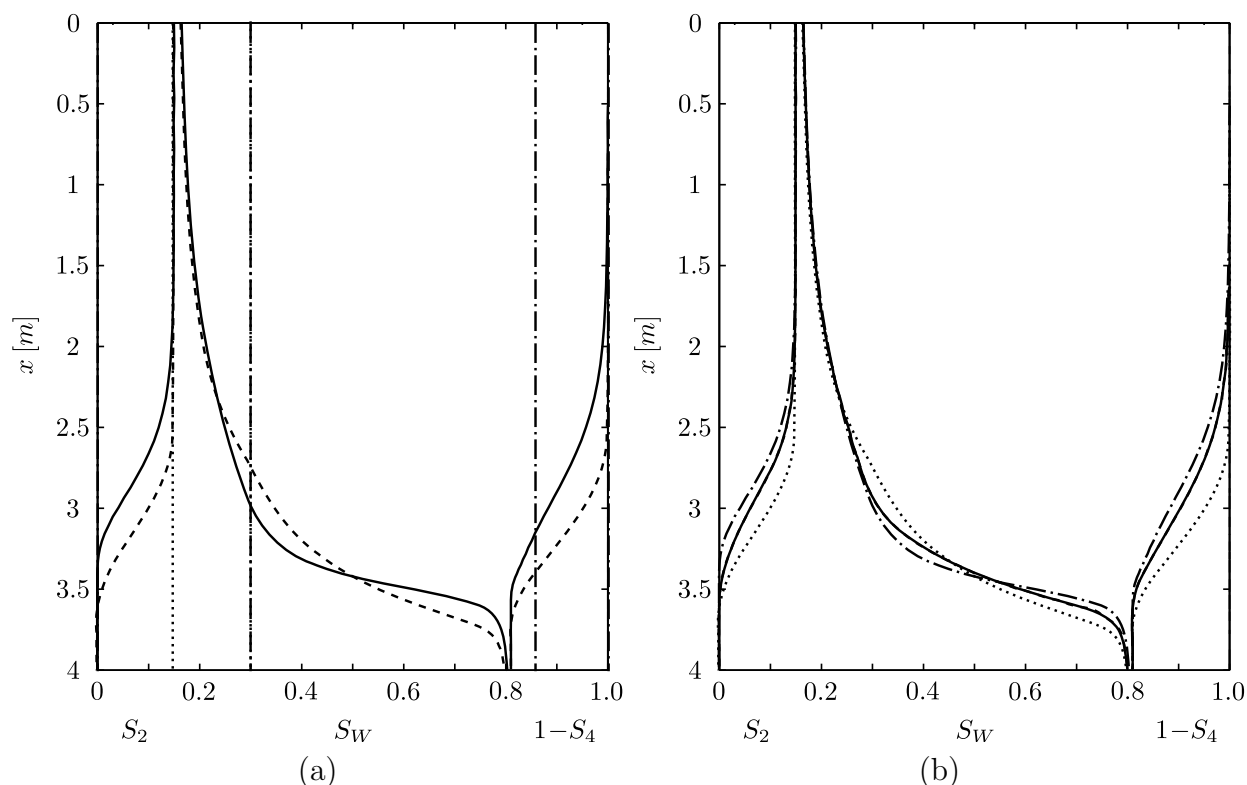
$$\sin \vartheta(t) = \begin{cases} \frac{1}{2} \left[ \tanh \left( \frac{t}{\tau_r} - 5 \right) + 1 \right] & \text{für } t < 50 \tau_r, \\ -\tanh \left( \frac{t}{\tau_r} - 105 \right) & \text{für } 50 \tau_r \leq t < 150 \tau_r, \\ \tanh \left( \frac{t}{\tau_r} - 205 \right) & \text{für } t \geq 150 \tau_r. \end{cases} \quad (15.9)$$

beschrieben. Nachdem die Säule präpariert wurde, wird sie wie im Experiment des vorangehenden Kapitel 15.4 zunächst in eine vertikale Position gebracht. Dies wird durch die erste Zeile in Gleichung (15.9) beschrieben. Dann wird gewartet, bis die Fluide eine stationäre Konfiguration eingenommen haben. Dies ist hier nach ca.  $t \approx 100 \tau_r$  geschehen. Dann wird die Säule um  $180^\circ$  gedreht, so dass sie nun kopfüber im Schwerfeld steht. Die Zeitkonstante ist dabei dieselbe wie für das erste Aufstellen. Dieser Prozess wird durch die zweite Zeile in Gleichung (15.9) beschrieben. Nachdem abermals eine stationäre Konfiguration erreicht wurde, wird bei  $t \approx 200 \tau_r$  die Säule erneut mit derselben Geschwindigkeit um  $180^\circ$  gedreht

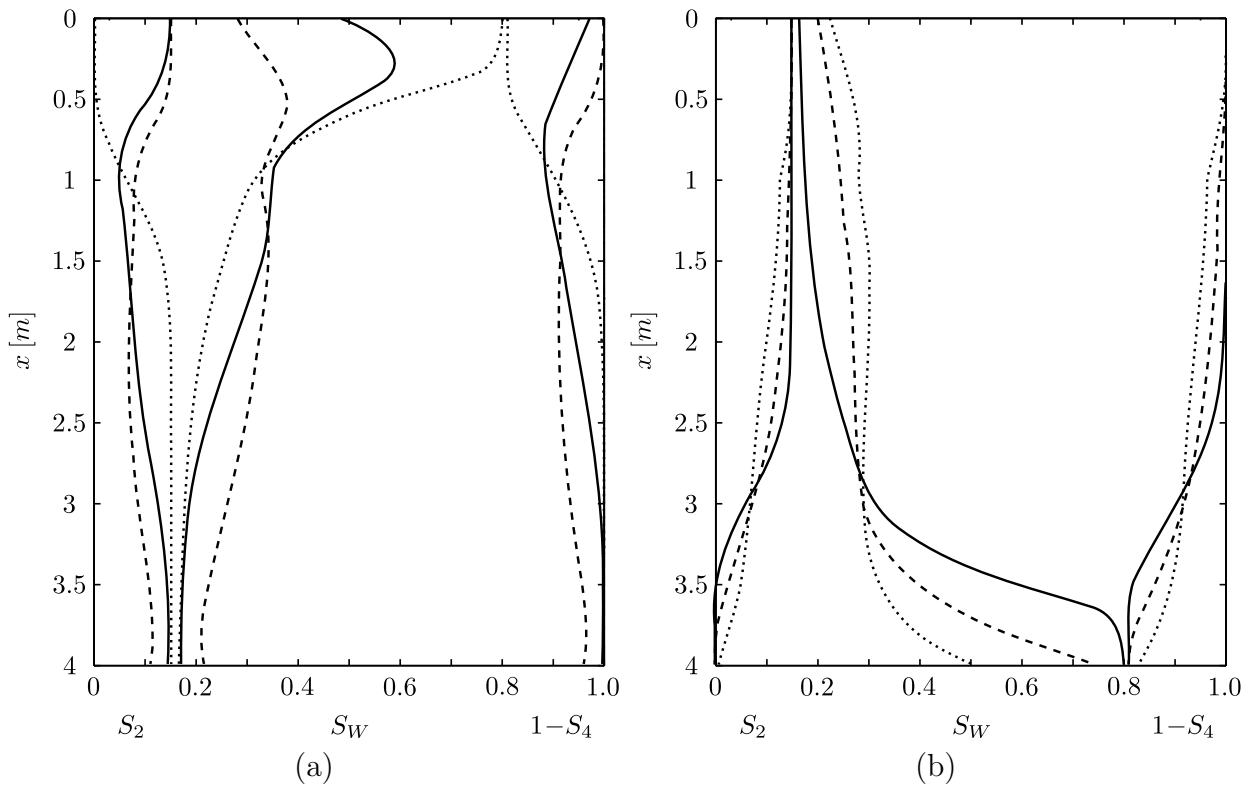


und gewartet, bis sich ein stationärer Zustand eingestellt hat. Dieser Teil des Protokolls wird durch die dritte Zeile in Gleichung (15.9) beschrieben.

Es werden die Ergebnisse von Simulationen mit zwei unterschiedlichen Anfangsbedingungen vorgestellt. Diese werden in Tabelle 15.2 als Anfangsbedingung Typ F und Typ G bezeichnet. In beiden Fällen ist die Säule homogen mit 30% Wasser und 70% Öl gefüllt. Im Vergleich zu den 50% bzw. 45% Wasser im vorherigen Unterkapitel wird der stationäre Zustand früher erreicht. Daher genügt es  $t = 100 \tau_r$  zu warten, bevor die Säule erneut bewegt wird.



**Abbildung 15.10:** Stationäre Sättigungsprofile  $S_i(x)$  als Funktion der Höhe  $x$  für das wiederholte Umdrehen einer geschlossenen Säule der Länge  $x_r - x_\ell = 4$  m. In beiden Abbildungen werden jeweils vier Tripel von Kurven gezeigt. Durchgezogene und gestrichpunktete Kurven zeigen Profile für Anfangsbedingungen vom Typ G und gestrichelte und gepunktete Kurven zeigen Profile für Anfangsbedingungen vom Typ F. In Abbildung (a) zeigen die gestrichpunkteten und gepunkteten Kurven die Anfangsbedingungen und die durchgezogenen und gestrichelten die Gleichgewichtsprofile nach dem ersten Aufstellen. In Abbildung (b) zeigen die gestrichpunkteten und gepunkteten Kurven die Gleichgewichtsprofile nach dem ersten Aufstellen und die durchgezogenen und gestrichelten die Gleichgewichtsprofile nach zwei Rotationen. Man beachte, dass in Abbildung (a) eine gestrichpunktete Gerade fast mit der Achse auf der linken Seite und eine gepunktete Gerade mit der rechten Achse zusammenfällt. Außerdem ist die Gerade bei  $S_w = 0.3$  eine Superposition einer gepunkteten und einer gestrichpunkteten Geraden. In Abbildung (b) sind die durchgezogenen und gestrichelten Kurven fast nicht zu unterscheiden.



**Abbildung 15.11:** Sättigungsprofile  $S_2(x,t)$ ,  $S_W(x,t)$  und  $1 - S_4(x,t)$  zu den Zeitpunkten  $t = 200 \tau_r$  (gepunktete Kurven),  $t = 208 \tau_r$  (durchgezogene Kurven) und  $t = 210 \tau_r$  (gestrichelte Kurven) in Abbildung (a) und zu den Zeitpunkten  $t = 214.5 \tau_r$  (gepunktete Kurven),  $t = 219 \tau_r$  (gestrichelte Kurven) und  $t = 300 \tau_r$  (durchgezogene Kurven) in Abbildung (b).

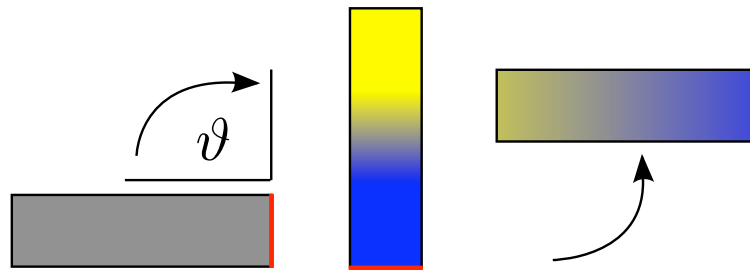
Abbildung 15.10<sup>3</sup> zeigt einen Vergleich der stationären Profile für beide Anfangsbedingungen. Abbildung 15.10a zeigt Profile nach dem Aufstellen und Abbildung 15.10b nach zwei Rotationen. Abbildung 15.10a zeigt wie schon die Abbildungen im vorherigen Kapitel zum Aufstellen der Säule, dass die Gleichgewichtsprofile stark von der anfänglichen Verteilung der Fluide zwischen perkolierenden und nichtperkolierenden Phasen abhängen. Beide Anfangsbedingungen, Typ F und G, haben einen Wasseranteil von 30% und sind ununterscheidbar im DBRMMWBL-Modell, führen hier jedoch zu unterschiedlichen Profilen. Alle Phänomene, die im vorherigen Kapitel diskutiert wurden, können auch hier beobachtet werden. Abbildung 15.10b zeigt, dass mehrfaches Rotieren um  $180^\circ$  schließlich zu einem sekundären Bewässerungsprofil im unteren Teil der Säule und zu einem sekundären Entwässerungsprofil im oberen Teil der Säule führt. Profile der Anfangsbedingungen F und G lassen sich dann nicht mehr unterscheiden. Das Modell beschreibt also Irreversibilität. Außerdem kann das resultierende Profil als eine Art Hybridkapillardrucksättigungskurve interpretiert werden, da in der Nähe des oberen Randes nach der letzten Rotation eine sekundäre Entwässerung stattgefunden

<sup>3</sup>Die Lösungen in den Abbildungen 15.10 und 15.11 wurden mit AMG9 berechnet.

hat. Am unteren Rand hat eine sekundäre Bewässerung stattgefunden.

Die Momentaufnahmen der Sättigungsdynamik an ausgewählten Zeitpunkten in Abbildung 15.11 zeigen deutlich, dass die Sättigungsprofile als Hybridkurven interpretiert werden können. Zu Beginn ist am oberen Rand der Säule die Wassersättigung nahezu  $S_{\text{W}}(x_{\ell}, 200 \tau_{\text{r}}) \approx 1 - S_{\text{O}_{\text{im}}}$  und am unteren Rand nahezu  $S_{\text{W}}(x_{\text{r}}, 200 \tau_{\text{r}}) \approx S_{\text{W}_{\text{dr}}}$ . Es findet demnach eine sekundäre Entwässerung am oberen Rand und eine sekundäre Entwässerung am unteren Rand statt. Mit abnehmender Wassersättigung wird im oberen Bereich der Säule ( $0 \text{ m} \leq x \leq 1 \text{ m}$ ) nichtperkolierendes Wasser durch Abreißen von Blasen produziert und nichtperkolierendes Öl durch Vereinigung mit dem eindringenden Öl reduziert. Im unteren Bereich ( $1 \text{ m} \leq x \leq 4 \text{ m}$ ) wird zunächst nur leicht bewässert und damit verändert sich auch die Verteilung auf perkolierende und nichtperkolierende Phasen nur leicht. Nach einiger Zeit erreicht die Wasserfront den unteren Rand der Säule und der untere Bereich ( $3 \text{ m} \leq 4 \text{ m}$ ) wird bewässert. Dieser Abschnitt des Prozesses wird in Abbildung 15.11b gezeigt. Die Wassersättigung am unteren Rand erreicht schließlich nahezu  $S_{\text{W}}(4 \text{ m}, 200 \tau_{\text{r}}) \approx 1 - S_{\text{O}_{\text{im}}}$  und am oberen Rand nahezu  $S_{\text{W}}(0 \text{ m}, 200 \tau_{\text{r}}) \approx S_{\text{W}_{\text{dr}}}$ , so dass nahezu ein an  $x = 2 \text{ m}$  gespiegeltes Profil erzeugt wurde. Dies erklärt, warum die Profile der unterschiedlichen Anfangsbedingungen F und G nicht mehr zu unterscheiden sind und die Säule quasi ihre Vergangenheit vergessen hat. Es sei an dieser Stelle auch nochmals hervorgehoben, dass in der Abbildung deutlich wird, dass im mittleren Bereich der Säule zunächst be- und dann entwässert wird. Das stellt das DBRM-MWBL-Modell vor große Schwierigkeiten, denn dies erfordert die Spezifikation von Kapillardrucksättigungskurven und relativen Permeabilitäten für unzählige Zwischenkurven.

## 15.6 Hinlegen einer zuvor aufgestellten geschlossenen Säule



**Abbildung 15.12:** Schematische Darstellung des Aufstellens und anschließende Hinlegen einer geschlossenen Säule im Schwerfeld nach Gleichung (15.10). Anfangs ist die Säule senkrecht zur Schwerkraft ausgerichtet und die Sättigungen sind konstant in der ganzen Säule und die Säule ist entsprechend grau eingefärbt. In den beiden anderen Säulen werden Bereiche mit höherer Wassersättigung werden blau und Bereiche mit niedrigerer Sättigung gelb dargestellt. Die Säule wird aufgestellt und das Wasser sammelt sich im unteren Teil der Säule. Diese Seite ist durch einen roten Balken markiert. Dann wird die Säule aufgestellt und das schwerere Wasser sammelt sich im unteren Teil der Säule. Nachdem die Säule wieder hingelegt wurde, verteilen sich die Fluide erneut um. Eine homogene Verteilung wird jedoch nicht mehr erreicht.

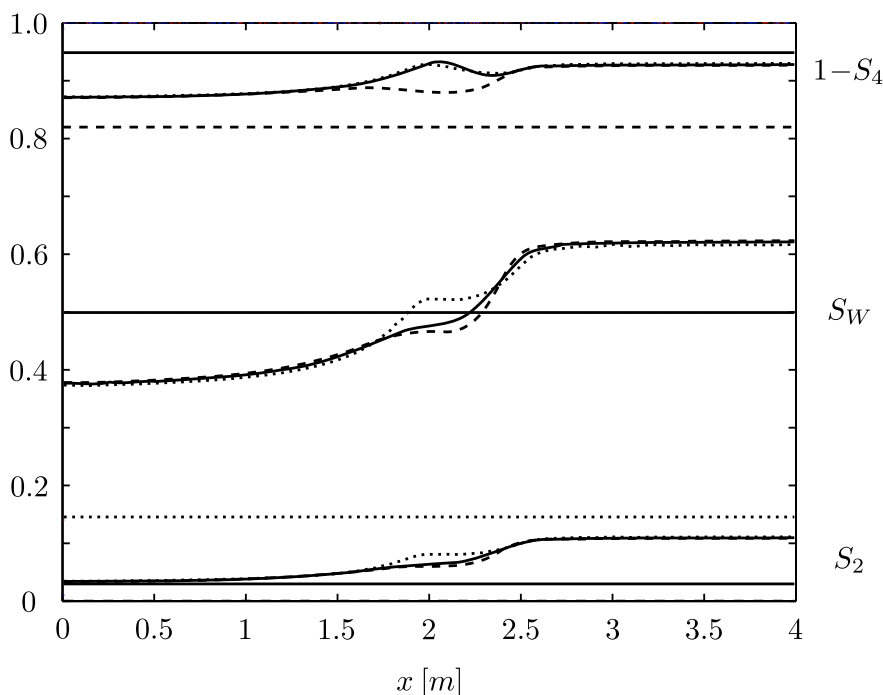
In diesem Unterkapitel werden Simulationen eines Experiments vorgestellt, bei dem eine geschlossene poröse Säule, welche homogen mit zwei Fluiden gefüllt ist, zunächst senkrecht zur Schwerkraft liegt. Die Säule wird dann in eine vertikale Position gedreht und nach Erreichen eines Gleichgewichtszustandes (nach ca.  $100 \tau_r$ ) wieder in eine horizontale Position gedreht. Abbildung 15.12 stellt das Experiment schematisch dar. Das Protokoll für die Orientierung der Säule im Schwerfeld ist durch

$$\sin \vartheta(t) = \begin{cases} \frac{1}{2} \left[ 1 + \tanh \left( \frac{t}{\tau_r} - 5 \right) \right] & \text{für } t < 50 \tau_r, \\ \frac{1}{2} \left[ 1 - \tanh \left( \frac{t}{\tau_r} - 105 \right) \right] & \text{für } t \geq 50 \tau_r \end{cases} \quad (15.10)$$

gegeben. Das numerische Experiment wurde für drei unterschiedliche Anfangsbedingungen durchgeführt. Diese sind in Tabelle 15.2 durch C, D und E bezeichnet. Allen diesen Anfangsbedingungen ist eine Wassersättigung von 50% gemeinsam. Sie unterscheiden sich nur durch die Verteilung der Fluide auf perkolierende und nichtperkolierende Phasen.

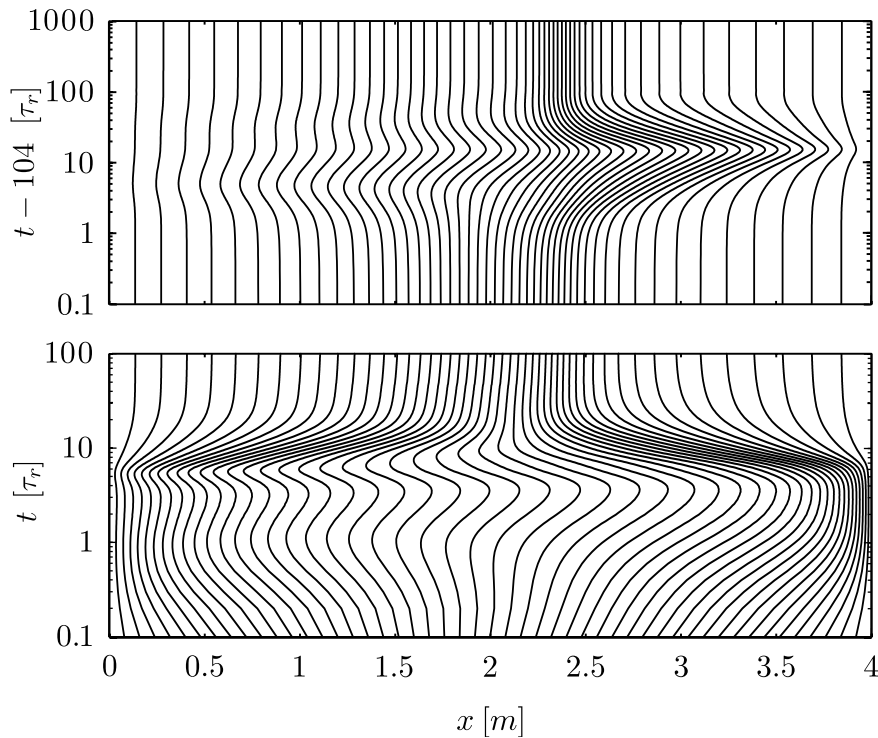
Abbildung 15.13<sup>4</sup> zeigt einen Vergleich der stationären Profile für die drei Anfangsbedingungen. Die Abbildung 15.13 zeigt, dass die Endprofile nicht konstant sind. Im DBRMMW-BL-Modell hingegen werden konstante Wasser- und Ölsättigungen von  $S_w = S_o = 0.5$  in

<sup>4</sup>Die Lösungen in den Abbildungen 15.13 und 15.14 wurden mit AMG9 berechnet.



**Abbildung 15.13:** Stationäre Sättigungsprofile  $S_i(x)$  als Funktion der Position  $x$  in der Säule für das Hinlegen einer zuvor aufgestellten geschlossenen Säule. Gezeigt werden die Anfangsprofile zur Zeit  $t = 0$  als Geraden und die Endprofile zur Zeit  $t = 200 \tau_r$  als Kurven. Es werden Profile für die Anfangsbedingungen C (durchgezogene Linien), D (gepunktete Linien) und C (gestrichelte Linien) aus Tabelle 15.2 gezeigt. Man beachte, dass eine gestrichelte Linie bei  $S_2 = 0.001$  und eine gepunktete Linie bei  $1 - S_4 = 0.999$  fast mit der jeweiligen Achse zusammenfällt. Außerdem ist die durchgezogene Linie bei  $S_W = 0.5$  eine Superposition von drei Linien.

der ganzen Säule für alle drei Anfangsbedingungen vorhersagt. Das irreversible Umschalten zwischen den unterschiedlichen Verdrängungsprozessen verhindert jedoch, dass das System in seine ursprüngliche Konfiguration zurückkehrt. Die Umverteilung stoppt, noch bevor die ursprüngliche Verteilung von perkolierenden und nichtperkolierenden Phasen wieder hergestellt ist. Stationäre Profile werden erreicht, welche dieselbe Unterteilung in be- und entwässerungsgeprägte Bereiche zeigen, wie die Profile nach dem Aufstellen der Säule. Die beiden Bereiche werden durch eine Übergangszone voneinander getrennt, die Ähnlichkeiten mit dem Kapillarsaum zeigt. Hier herrscht jedoch kein Kräftegleichgewicht zwischen Kapillar- und Grenzflächenkräften auf der einen Seite und der Schwerkraft auf der anderen Seite. Vielmehr kompensieren sich hier Kapillar- und Grenzflächenkräfte gegenseitig und ermöglichen eine inhomogene Fluidverteilung in einem homogenen Medium in Abwesenheit externer Kräfte. Die Übergangszone unterscheidet sich für die drei Anfangsbedingungen in der Ausprägung und der Sättigung eines Zwischenplateaus. Wie zuvor beim Aufstellen und auch beim Drehen der Säule sind die Unterschiede durch unterschiedliche Positionen in der Hystereseschleife begründet. Ebenso wie das mehrmalige Drehen der Säule sorgt auch hier eine mehrmalige



**Abbildung 15.14:** Trajektorien der Gitterpunkte des numerischen Lösers für partielle Differentialgleichungen mit adaptivem mobilem Gitter. Die untere Abbildung zeigt die Trajektorien für das Aufstellen der Säule und die obere für das Zurücklegen. Die Zeitachsen sind logarithmisch gewählt und die obere Zeitachse ist um  $t = 104 \tau_T$  verschoben, um die Dynamik adäquat wiederzugeben

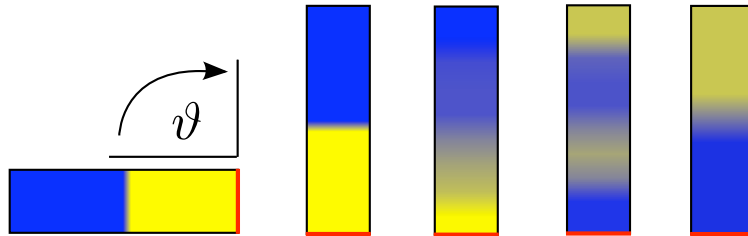
Wiederholung des Experiments für ein Angleichen der Kurven. Es sind hier allerdings deutlich mehr Wiederholungen nötig, da nicht die ganze Hystereseschleife “durchfahren” wird.

Abbildung 15.14 illustriert die Dynamik des Experiments und die Gitteradaptivität des Algorithmus anhand der Position der Gitterpunkte des numerischen Lösers für partielle Differentialgleichungen mit adaptivem mobilem Gitter. Die Gitterpunkte sammeln sich bei starken Gradienten. Geringe Gradienten erlauben hingegen eine geringere Punktdichte. Daher deuten hohe Gitterpunktdichten den Ort von Sättigungsfronten an. So kann man aus den gezeigten Trajektorien der Gitterpunkte in der  $(x, t)$ -Ebene die Entwicklung der Sättigungsprofile qualitativ ablesen. Die Zeitskala der Abbildungen ist logarithmisch gewählt, da die Umverteilung zunächst sehr rasch geschieht, die Annäherung an das Gleichgewicht jedoch immer langsamer erfolgt. Der Abbildung ist außerdem in der Zeit zweigeteilt, um auch die Dynamik nach dem Zurücklegen adäquat erfassen zu können.

Zu Beginn ist das Sättigungsprofil homogen und die Gitterpunkte sind äquidistant über die gesamte Säulenlänge verteilt (siehe unterer Rand der unteren Abbildung 15.14). Dann wird die Säule aufgestellt und eine Wasserfront bildet sich am unteren Rand und eine nicht ganz so stark ausgeprägte Ölfront am oberen Rand. Die unterschiedliche Ausprägung der Fron-

ten ist dabei den unterschiedlichen Benetzungseigenschaften geschuldet. Die beiden Fronten laufen vom Rand der Säule zur Mitte und treffen sich dort. Der Gradient des Kapillarsaums kann an der Trajektoriendichte abgelesen werden. Im Gleichgewicht bewegen sich die Gitterpunkte nicht mehr und ihre Trajektorien zeigen parallel zur Zeitachse. Wird die Säule wieder hingelegt, so bilden sich abermals an den Rändern der Säule Sättigungsfronten. Dieses Mal sammelt sich Öl am unteren, bzw. jetzt rechten Ende der Säule und Wasser am oberen bzw. linken Rand der Säule. Der stärkere Gradient ist in der rechten Säulenhälfte und die Gitterpunkte sammeln sich dort. Es wandert jeweils eine Front von den Rändern zur Mitte der Säule. Die Gitterpunkte sind am Ende der Simulation inhomogen verteilt, da das Gleichgewichtssättigungsprofil inhomogen ist.

## 15.7 Umverteilung von Wasser und Öl in einer geschlossenen Säule



**Abbildung 15.15:** Schematische Darstellung zur Umverteilung von Wasser und Öl in einer geschlossenen Säule im Schwerfeld. Anfangs ist die Säule senkrecht zur Schwerkraft ausgerichtet und die Sättigungen sind konstant mit einer Unstetigkeit in der Mitte der Säule. Bereiche mit höherer Wassersättigung werden dunkler dargestellt, Bereiche mit niedrigerer Sättigung heller. Dann wird die Säule aufgestellt und die Schwerkraft sorgt für eine Umverteilung der Fluide.

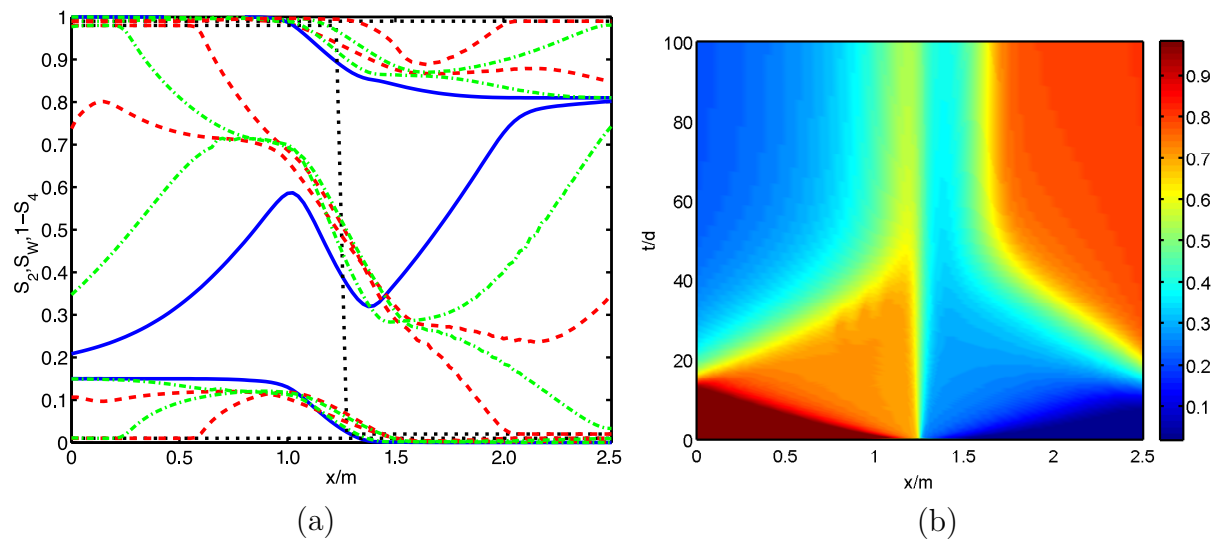
In diesem Unterkapitel werden Lösungen von Simulationen eines Experiments, in welchem eine geschlossene poröse Säule, welche bis auf eine Unstetigkeit in der Mitte mit zwei Fluiden konstanter Sättigung gefüllt ist, betrachtet. Die Anfangsbedingungen sind schematisch in Abbildung 15.1b dargestellt. Eine schematische Darstellung des Experiments zeigt Abbildung 15.15. Zu Beginn des Experiments ist die Säule senkrecht zur Schwerkraft ausgerichtet. Sie wird dann in die Schwerkraft gedreht, so dass die Achse parallel zur Schwerkraft ausgerichtet ist. Da die numerischen Experimente nicht mit AMG9 sondern nur mit AMG3+1 und SimBL simuliert werden, ist es nicht erforderlich, das Aufstellen derart sanft durchzuführen wie in den Experimenten zuvor. Es geschieht jetzt auf einer deutlich kleineren Zeitskala als die Dynamik der Fluide in der Säule und kann daher als instantan angenähert werden.

Es werden zunächst eine primäre und eine sekundäre Umverteilung gezeigt. Primär bzw. sekundär bedeutet hier, dass sowohl die Verdrängung von Wasser durch Öl in der linken Seite der Säule als auch die Verdrängung von Öl durch Wasser in der rechten Seite der Säule eine primäre bzw. sekundäre Verdrängung sind. Dabei wird Parametersatz 1 aus Tabelle 15.5 verwendet. Zum Schluss werden noch Kapillar- und Grenzflächenterme “ausgeschaltet”, so dass allein der hyperbolische Anteil des Modells übrig bleibt.

Abbildung 15.16<sup>5</sup> zeigt eine Umverteilung von Wasser und Öl in einer geschlossenen Säule durch primäre Verdrängungsprozesse. Die Profile in Abbildung 15.16a zeigen wie zunächst Wasser- und Ölfronten - jeweils “ausgeschmiert” durch Kapillar- und Grenzflächenterme zweiter Ordnung - in den jeweils “fremden” Bereich vordringen bis sie den Rand der Säule er-

<sup>5</sup>Die Lösungen in den Abbildungen 15.16-15.18 wurden mit AMG3+1 berechnet.

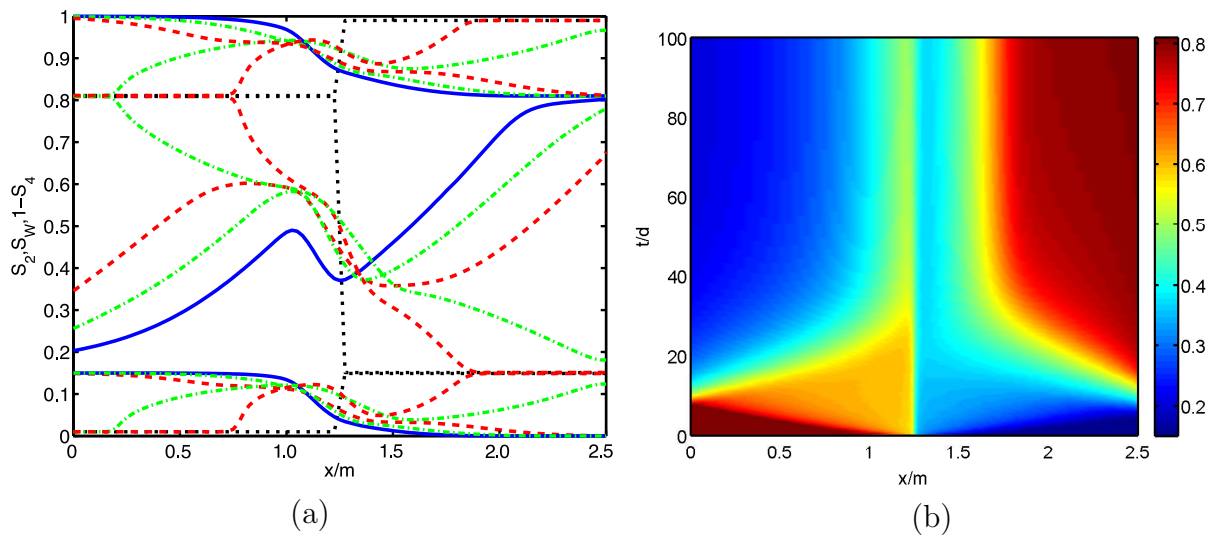




**Abbildung 15.16:** Umverteilung von Wasser und Öl in einer geschlossenen Säule durch primäre Verdrängungsprozesse. Abbildung (a) zeigt Sättigungsprofile zu den Zeitpunkten  $t = 0$  d, 0.5 d, 7.5 d, 15 d, 25 d und 100 d. Schwarz gepunktete Kurven zeigen die Anfangsbedingungen. Man beachte, dass die entsprechenden Kurven  $S_2(x, 0) = 0$  und  $1 - S_4(x, 0) = 1$  mit den Achsen zusammenfallen. Blaue durchgezogene Kurven zeigen die Gleichgewichtsprofile am Ende des Prozesses. Rot gestrichelte Kurven zeigen Profile bei  $t = 0.5$  d und  $t = 15$  d und grün gestrichelpunktete Kurven Profile bei  $t = 7.5$  d und  $t = 25$  d. Abbildung (b) zeigt die Entwicklung der Wassersättigung  $S_W(x, t)$  in Raum und Zeit als Farbverlauf. Eine Farbtabelle für die Sättigungen ist rechts gegeben.

reichen. Dort angekommen staut sich das Wasser bzw. das Öl und die Front wird quasi reflektiert. Sie laufen zurück in die Säule bis sich die Fronten wieder in der Mitte treffen. Es stellt sich ein Gleichgewicht ähnlich wie beim Aufstellen mit homogenen Anfangsbedingungen ein. Allerdings sind nun Be- und Entwässerungsbereich schärfer voneinander getrennt, da es sich hier um primäre Verdrängungsprozesse handelt und die Trennlinie zwischen Be- und Entwässerung nahezu stationär ist. Das Gleichgewichtsprofil der Wassersättigung ist nicht monoton. Es ist in drei Bereiche aufgeteilt. Von  $x = 0$  m bis  $x \approx 1.0$  m steigt die Wassersättigung, von  $x \approx 1.0$  m bis  $x \approx 1.5$  m fällt sie und von  $x \approx 1.5$  m bis  $x = 2.5$  m steigt sie wieder. Die Sättigungen der nichtperkolierenden Phasen sind monoton. In der oberen Hälfte hat sich durch die Entwässerung nichtperkolierendes Wasser gebildet und in der unteren Hälfte durch die Bewässerung nichtperkolierendes Öl. Trotz eines homogenen Mediums sind aufgrund der Hysterese nichtmonotone Sättigungsprofile möglich.

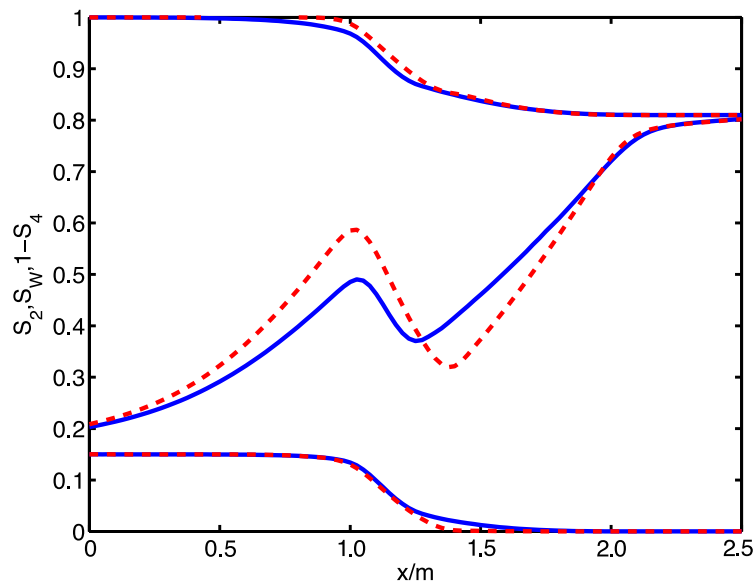
Der Farbverlauf der Wassersättigung in Abbildung 15.16b illustriert das bereits Diskutierte mit einer stärkeren Gewichtung des Zeitverlaufs. Zu Beginn (unterer Rand) liegt eine binäre Verteilung vor mit 100% Wasser in der oberen Hälfte und 100% Öl in der unteren Hälfte. Derartige Sättigungen werden im Laufe des Experiments nicht mehr erreicht. Die scharfen Farbverlaufskanten, die von der Mitte zu Rändern laufen und von dort zurück bis zur Mitte



**Abbildung 15.17:** Umverteilung von Wasser und Öl in einer geschlossenen Säule durch sekundäre Verdrängungsprozesse. Abbildung (a) zeigt Sättigungsprofile zu den Zeitpunkten  $t = 0$  d, 0.5 d, 5 d, 20 d, 25 d und 100 d. Schwarz gepunktete Kurven zeigen die Anfangsbedingungen. Blaue durchgezogene Kurven zeigen die Gleichgewichtsprofile am Ende des Prozesses. Rot gestrichelte Kurven zeigen Profile bei  $t = 0.5$  d und  $t = 20$  d und grün gestrichelpunktete Kurven Profile bei  $t = 5$  d und  $t = 25$  d. Abbildung (b) zeigt die Entwicklung der Wassersättigung  $S_W(x, t)$  in Raum und Zeit als Farbverlauf. Eine Farbtabelle für die Sättigungen wird rechts von der Abbildung gegeben.

zeigen die Sättigungsfronten. Ihr nahezu linearer Verlauf zeigt, dass die Dynamik advektiv bzw. hyperbolisch dominiert ist. Erst wenn sich die Fronten in der Mitte wieder getroffen haben, zeigen sie das diffusive “ $x \propto t^{1/2}$ ”-Verhalten. Der nichtmonotone Farbverlauf bei  $t = 100$  d zeigt schließlich den Gleichgewichtszustand mit nichtmonotonen Sättigungen. Man beachte, dass zu dieser Zeit die Konturen nahezu parallel zur Zeitachse verlaufen und der Gleichgewichtszustand - zumindest was die Sättigungen betrifft - nahezu erreicht ist.

Abbildung 15.17 zeigt eine Umverteilung von Wasser und Öl in einer geschlossenen Säule durch sekundäre Verdrängungsprozesse. Die Profile in Abbildung 15.17a zeigen wieder, wie zunächst Wasser- und Ölfronten - jeweils ausgeschmiert durch Kapillar- und Grenzflächen-terme zweiter Ordnung - in den jeweils “fremden” Bereich vordringen, bis sie den Rand der Säule erreichen. Dort angekommen werden sie reflektiert und laufen zurück in die Säule bis sich die Fronten wieder in der Mitte treffen. Das Gleichgewichtsprofil der Wassersättigung ist wie bei der primären Umverteilung nichtmonoton. Es ist in drei Bereiche aufgeteilt. Von  $x = 0$  m bis  $x \approx 1$  m steigt die Wassersättigung, von  $x \approx 1.0$  m bis  $x \approx 1.5$  m fällt sie und von  $x \approx 1.5$  m bis  $x = 2.5$  m steigt sie wieder. Die Sättigungen der nichtperkolierenden Phasen sind im Gleichgewicht monoton. In der oberen Hälfte hat sich durch die Entwässerung nichtperkolierendes Wasser gebildet und nichtperkolierendes Öl wurde vernichtet. In der unteren

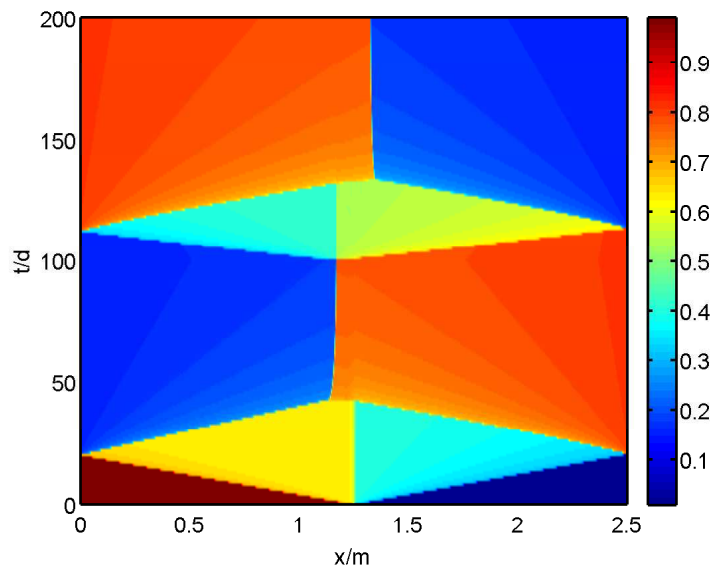


**Abbildung 15.18:** Vergleich von Gleichgewichtssättigungsprofilen für primäre (rot gestrichelte Kurven) und sekundäre (blau durchgezogene Kurven) Verdrängungsprozesse in einer geschlossenen Säule.

Hälfte wurde durch die Bewässerung nichtperkolierendes Öl gebildet und nichtperkolierendes Wasser vernichtet. Trotz eines homogenen Mediums sind auch bei der sekundären Umverteilung aufgrund der Hysterese nichtmonotone Sättigungsprofile möglich. Allerdings ist der Sprung nicht ganz so stark ausgeprägt wie bei der primären Umverteilung.

Der Farbverlauf der Wassersättigung in Abbildung 15.17b illustriert wieder das bereits Diskutierte mit einer stärkeren Gewichtung des Zeitverlaufs. Zu Beginn (unterer Rand) liegt eine binäre Verteilung vor; da es sich um sekundäre Prozesse handelt, befindet sich jetzt 81% Wasser in der oberen Hälfte und 85% Öl in der unteren Hälfte. Derartige Sättigungen werden im Laufe des Experiments zumindest an den Rändern näherungsweise wieder erreicht. Auch die scharfen Farbverlaufskanten treten wieder auf. Ein Vergleich mit dem Farbverlauf aus Abbildung 15.16b zeigt, dass die sekundäre Umverteilung deutlich rascher als die primäre Umverteilung geschieht, da die Vereinigung der eindringenden perkolierenden Phase mit der dort bereits vorhandenen nichtperkolierenden Phase die Mobilität des entsprechenden Fluids drastisch erhöht. Der Verlauf ist abermals am Anfang nahezu linear. Er wird erst nichtlinear ( $x \propto t^{1/2}$ ), wenn die Fronten sich getroffen haben. Der nichtmonotone Farbverlauf bei  $t = 100$  d zeigt schließlich wieder den Gleichgewichtszustand mit nichtmonotonen Sättigungen. Man beachte, dass zu dieser Zeit die Konturen nahezu parallel zur Zeitachse verlaufen und der Gleichgewichtszustand - zumindest was die Sättigungen betrifft - nahezu erreicht ist.

Abbildung 15.18 zeigt einen Vergleich von Gleichgewichtssättigungsprofilen für primäre (rot



**Abbildung 15.19:** Farbverlaufsbild der Wassersättigung  $S_w(x, t)$  zur Umverteilung von Wasser und Öl in einer geschlossenen Säule durch zunächst primäre, dann sekundäre Verdrängungsprozesse. Eine Farbtabelle für die Sättigungen wird rechts von der Abbildung gegeben.

gestrichelte Kurven) und sekundäre (blau durchgezogene Kurven) Verdrängungsprozesse in einer geschlossenen Säule. Diese entsprechen den Profilen zum Zeitpunkt  $t = 100$  d der Abbildungen 15.16 und 15.17. Das Bild verdeutlicht die zuvor diskutierten Erkenntnisse des größeren Sprunges bei  $x = 1.25$  m für primäre Prozesse. Durch die Abbildung wird nochmals verdeutlicht, dass die Sättigungsprofile, die aus diesem numerischen Experiment gewonnen wurden, als Hybridkurve der Kapillardrucksättigungsbeziehung interpretiert werden können. Sie zeigen im oberen Teil den Entwässerungsast und im unteren Teil den Bewässerungsast. Dabei schließen die primären Kurven die sekundären Kurven ein.

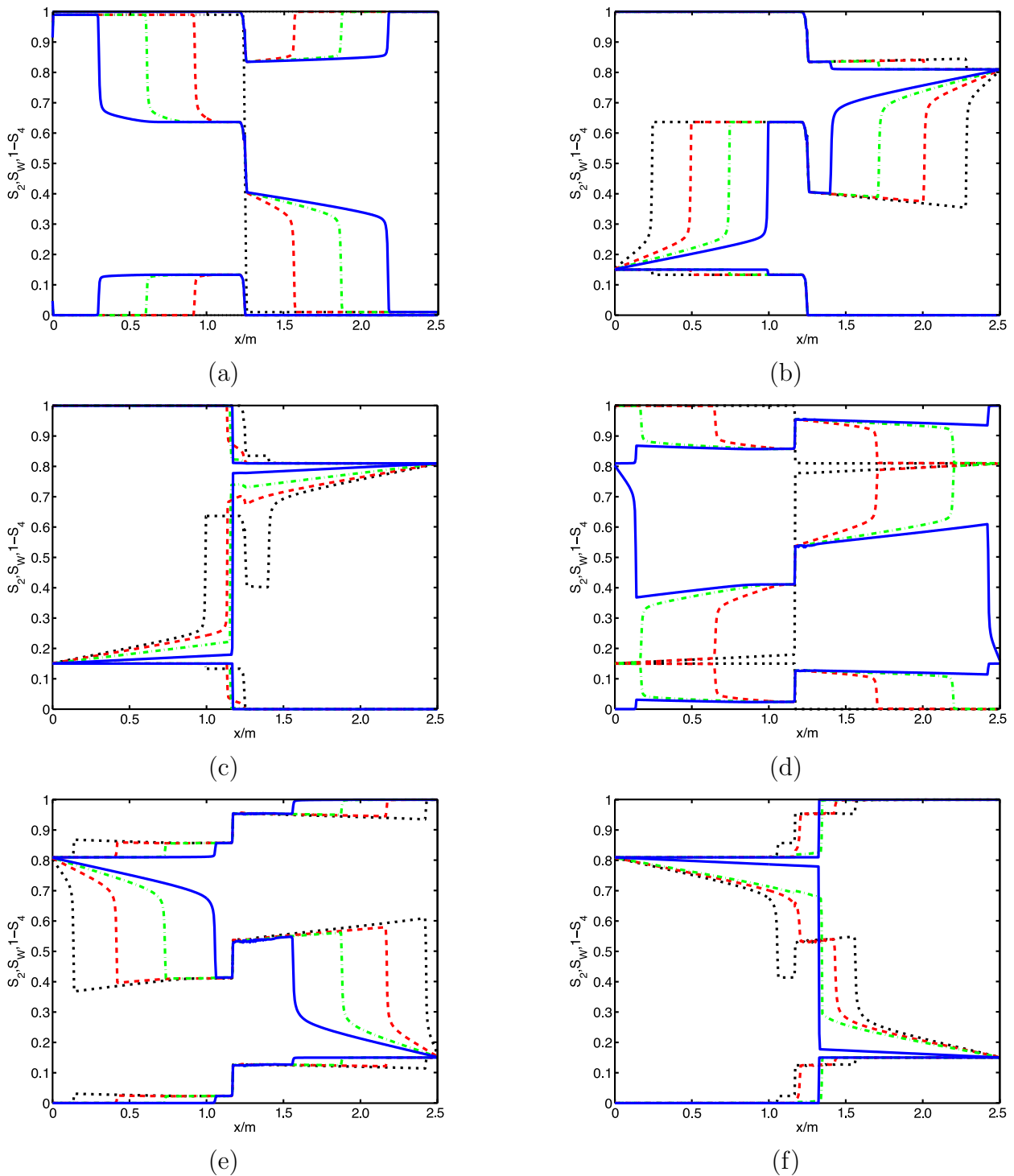
Abbildung 15.19<sup>6</sup> zeigt ein Farbverlaufsbild der Wassersättigung  $S_w(x, t)$  zur Umverteilung von Wasser und Öl in einer geschlossenen Säule durch zunächst primäre, dann sekundäre Verdrängungsprozesse ohne Berücksichtigung von diffusiven Kapillar- und Grenzflächentermen. Das Experiment wurde leicht modifiziert durchgeführt: Nach Erreichen eines Gleichgewichtszustand nach ca.  $t = 100$  d wurde die Säule um  $180^\circ$  Grad gedreht. Dadurch wird in einem Experiment sowohl ein primärer, als auch ein sekundärer Verdrängungsprozess durchgeführt. Wie in Abbildung 15.16b ist die anfängliche Fluidverteilung 100% Wasser in der oberen Hälfte und 100% Öl in der unteren Hälfte. Die Kanten sind jedoch deutlich schärfer ausgeprägt. Bis zum Zeitpunkt  $t \approx 25$  d ist die Lösung identisch mit der analytischen Lösung für die schwerkraftgetriebene Umverteilung. Die Fronten werden wieder an der Wand reflektiert

<sup>6</sup>Die Lösungen in den Abbildungen 15.19-15.21 wurden mit SimBL berechnet.

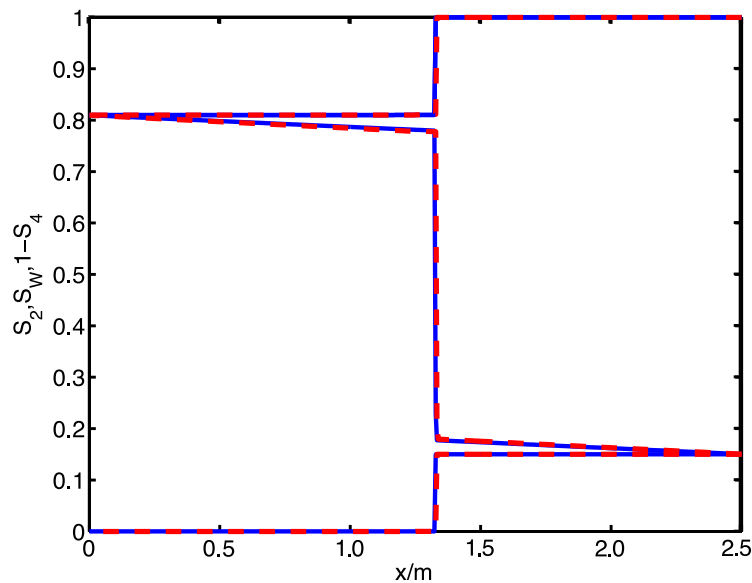
und wandern zurück zur Mitte der Säule. Man beachte, dass im Farbverlaufsbild jetzt auch deutlich wird, dass es sich nicht notwendigerweise um reine Stoßwellen handelt, sondern die Stoßwellen auch einen Verdünnungsfächer nachziehen. Außerdem liegt die Trennlinie nicht genau in der Mitte, obwohl die beiden Fluide jeweils 50% des Porenraums belegen. Dies liegt an den unterschiedlichen Grenzsättigungen  $S_{\text{Öim}}$  und  $S_{\text{Wdr}}$ . Da mehr Öl in der unteren Hälfte der Säule bleibt, ist die Trennlinie zwischen Wasser und Öl leicht oberhalb der Mitte der Säule. An den Konturen der Verdünnungsfächer ist zu erkennen, dass auch bei  $t = 100$  d noch nicht alle Konturlinien parallel zu Zeitachse verlaufen und man streng genommen noch nicht von einem Gleichgewichtszustand sprechen kann. In Abbildung 15.20 wird jedoch deutlich werden, dass der Fehler minimal ist. Die erneute Drehung der Säule bei  $t = 100$  d erkennt man daran, dass wieder Fronten aus der Mitte der Säule, bzw. leicht oberhalb davon, in Richtung der Säulenränder laufen. Auch diese werden an den Rändern der Säule reflektiert und treffen sich nun leicht rechts von der Mitte. Dies ist auf Grund der umgekehrten Orientierung wieder leicht oberhalb der Mitte. Ein Vergleich der Dynamik der Fronten zeigt, dass auch ohne Kapillar- und Grenzflächenkräfte die sekundäre Umverteilung etwas rascher als die primäre Umverteilung geschieht. Die Gründe dafür sind identisch zum zuvor diskutierten Fall mit Kapillar- und Grenzflächenkräften.

Abbildung 15.20 zeigt Sättigungsprofile zu ausgewählten Zeitpunkten für verschwindende Kapillar- und Grenzflächenterme bei der Umverteilung von Wasser und Öl in einer geschlossenen Säule. Nach einer primären Umverteilung wird die Säule auf den Kopf gestellt. Dadurch findet eine sekundäre Umverteilung statt. Jede Abbildung zeigt Sättigungsprofile zu vier ausgewählten Zeitpunkten. In Abbildung 15.20a sieht man wie Verdünnungsstoßwellen von der Unstetigkeit mit jeweils konstanter Geschwindigkeit - die Profile sind zu äquidistanten Zeitpunkten gezeichnet - in die jeweils voll gesättigten Bereiche vordringen. Dabei wird die Ölverdünnungsstoßwelle in die obere Hälfte durch den beschränkten Volumenfluss in die untere Hälfte der Säule beschränkt. Dies zeigt sich durch den abgeschnittenen Verdünnungsfächer und die Ausbildung eines Plateaus. Bis zu diesem Zeitpunkt können die Lösungen auch analytisch mit der in Kapitel 6 und 8 vorgestellten Methode der Charakteristiken gewonnen werden.

Abbildung 15.20b zeigt Profile, nachdem die Wellen an den Rändern der Säule reflektiert wurden. Auch diese Wellen sind abermals Verdünnungsstoßwellen. Sie breiten sich jedoch nicht mit konstanter Geschwindigkeit aus, da sich zumindest im unteren Teil der Säule die Sättigung stromabwärts des Stoßes verändert. Sie nimmt dort zu. Abbildung 15.20c zeigt Profile während der Kollision der Wellen und des Annäherns an den Gleichgewichtszustand. An den gezeigten Zeitpunkten kann man erkennen, dass die Dynamik in den Sättigungen abnimmt. Zwischen den roten und den grünen Profilen liegt  $\Delta t = 10$  d und zwischen den



**Abbildung 15.20:** Sättigungsprofile zu ausgewählten Zeitpunkten für verschwindende Kapillar- und Grenzflächenterme bei der Umverteilung von Wasser und Öl in einer geschlossenen Säule. Nach einer primären Umverteilung wird die Säule auf den Kopf gestellt. Dadurch findet eine sekundäre Umverteilung statt. Jede Abbildung zeigt Sättigungsprofile zu vier ausgewählten Zeitpunkten. Die chronologische Reihenfolge der Profile geht von schwarz gepunkteten über rot gestrichelten und grün gestrichelpunkteten zu blau durchgezogenen Kurven. Abbildung (a) zeigt Sättigungsprofile zu den Zeitpunkten  $t = 0$  d,  $t = 5$  d,  $t = 10$  d und  $t = 15$  d, Abbildung (b) zu den Zeitpunkten  $t = 25$  d,  $t = 30$  d,  $t = 35$  d und  $t = 40$  d, Abbildung (c) zu den Zeitpunkten  $t = 40$  d,  $t = 43$  d,  $t = 53$  d und  $t = 100$  d, Abbildung (d) zu den Zeitpunkten  $t = 100$  d,  $t = 105$  d,  $t = 110$  d und  $t = 115$  d, Abbildung (e) zu den Zeitpunkten  $t = 115$  d,  $t = 125$  d,  $t = 125$  d und  $t = 130$  d und Abbildung (f) zu den Zeitpunkten  $t = 130$  d,  $t = 132$  d,  $t = 134$  d und  $t = 200$  d.



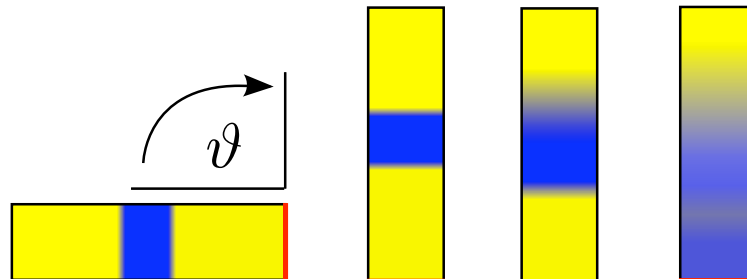
**Abbildung 15.21:** Umverteilung von Wasser und Öl in einer geschlossenen Säule: Vergleich von Sättigungsprofilen nach dem Aufstellen und nach einer Rotation um  $180^\circ$  für verschwindende Kapillar- und Grenzflächenterme. Die blau durchgezogenen Kurven zeigen Gleichgewichtsprofile einer sekundären Umverteilung und die rot gestrichelten Kurven die einer primären Umverteilung

grünen und blauen  $\Delta t \approx 20$  d.

Abbildungen 15.20d-f zeigen Sättigungsprofile für den zweiten Teil des Experiments, nachdem die Säule auf den Kopf gestellt wurde. Die Phänomene sind dieselben wie zuvor, mit dem Unterschied, dass nicht nur nichtperkolierende Phasen der verdrängten Fluide erzeugt werden, sondern auch die nichtperkolierenden Phasen der eindringenden Phasen vernichtet werden. Außerdem wird speziell an Abbildung 15.20d deutlich, dass die Verdrängung rascher geschieht. Obwohl in den Abbildungen 15.20a und d der gleiche Zeitraum dargestellt wird, haben in Abbildung 15.20d die Wellen die Wände bereits erreicht.

Abbildung 15.21 zeigt einen Vergleich von Sättigungsprofilen nach dem Aufstellen und nach einer Rotation um  $180^\circ$  für verschwindende Kapillar- und Grenzflächenterme. Die rot gestrichelten Kurven entsprechen den blau durchgezogenen Kurven in Abbildung 15.20c und die ebenfalls blau durchgezogenen Kurven den blau durchgezogenen in Abbildung 15.20f. Ein Unterschied ist nicht zu erkennen. Dies kann so interpretiert werden, dass die Säule bei Erreichen der residualen Sättigung ihre Geschichte vollständig vergessen hat.

## 15.8 Umverteilung einer Wasser- bzw. Ölblase in einer geschlossenen Säule



**Abbildung 15.22:** Schematische Darstellung zur Umverteilung einer Wasser- bzw. Ölblase in einer geschlossenen Säule im Schwerfeld. Anfangs ist die Säule senkrecht zur Schwerkraft ausgerichtet und die Sättigungen sind konstant mit einer Unstetigkeit in der Mitte der Säule. Bereiche mit höherer Wassersättigung werden blau dargestellt, Bereiche mit niedrigerer Sättigung gelb. Die Schwerkraft sorgt nach dem Aufstellen der Säulen für eine Umverteilung der Fluide.

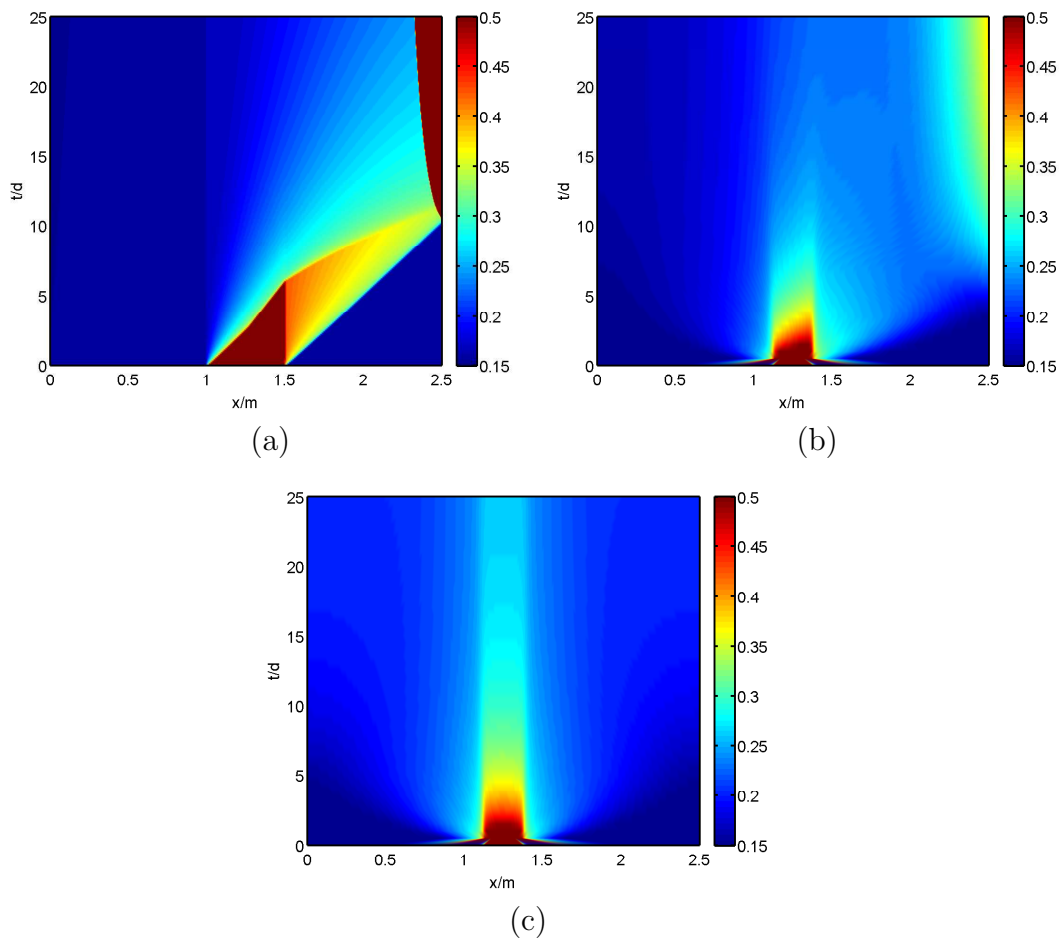
In diesem Unterkapitel werden Lösungen von Simulationen eines Experiments, in welchem sich eine Wasser- bzw. Ölblase in einer geschlossenen porösen Säule aufgrund von Schwerkraft und Kapillar- und Grenzflächenkräften umverteilt. Die Anfangsbedingungen sind schematisch in Abbildung 15.1c dargestellt. Eine schematische Darstellung des Experiments zeigt Abbildung 15.22. Zu Beginn des Experiments ist die Säule senkrecht zur Schwerkraft ausgerichtet. Sie wird dann in die Schwerkraft gedreht, so dass die Achse parallel zur Schwerkraft ausgerichtet ist. Das Aufstellen geschieht auch hier auf einer deutlich kleineren Zeitskala als die Dynamik der Fluide in der Säule und kann daher als instantan angenähert werden.

Es werden zunächst drei Experimente mit gleichen Anfangsbedingungen gezeigt, die sich im Verhältnis von Schwerkraft zu Kapillar- und Grenzflächenkräften unterscheiden. Gezeigt werden ein Experiment mit vernachlässigbaren Kapillar- und Grenzflächenkräften, eines bei dem beide Terme einen signifikanten Beitrag leisten und eines bei dem die Schwerkraft vernachlässigbar ist. Das erste Experiment kann im Labor durch entsprechende Dimensionierung nachgebaut werden. Das letztgenannte durch Verwendung von Fluiden gleicher Dichte oder durch eine horizontale Ausrichtung der Säule. Am Ende des Kapitels wird eine Parameterstudie an Gleichgewichtsprofilen bei den Experimenten mit verschwindender Schwerkraft durchgeführt.

Abbildung 15.23<sup>7</sup> zeigt die Entwicklung der Wassersättigung  $S_w(x, t)$  bei der Umverteilung einer Wasserblase in einer geschlossenen Säule als Farbverlaufsbild. Abbildung 15.23a zeigt

<sup>7</sup>Die Lösungen in den Abbildungen 15.23a und 15.24 wurden mit SimBL und die Lösungen in den Abbildungen 15.23b, 15.23c, 15.25 und 15.26 mit AMG3+1 berechnet.





**Abbildung 15.23:** Farbverlaufsbild der Wassersättigung  $S_W(x, t)$  zur Umverteilung einer Wasserblase in einer geschlossenen Säule. Eine Farbtabelle für die Sättigungen wird rechts der Abbildungen gegeben. Abbildung (a) zeigt das Experiment für verschwindende Kapillar- und Grenzflächenkräfte und Abbildung (b) für signifikante Beiträge von Schwerkraft und Kapillar- und Grenzflächenkräften. Abbildung (c) zeigt das Experiment für verschwindende Schwerkraft.

das Experiment für verschwindende Kapillar- und Grenzflächenkräfte und Abbildung 15.23b für signifikante Beiträge von Schwerkraft und Kapillar- und Grenzflächenkräften. Abbildung 15.23c zeigt das Experiment für verschwindende Schwerkraft.

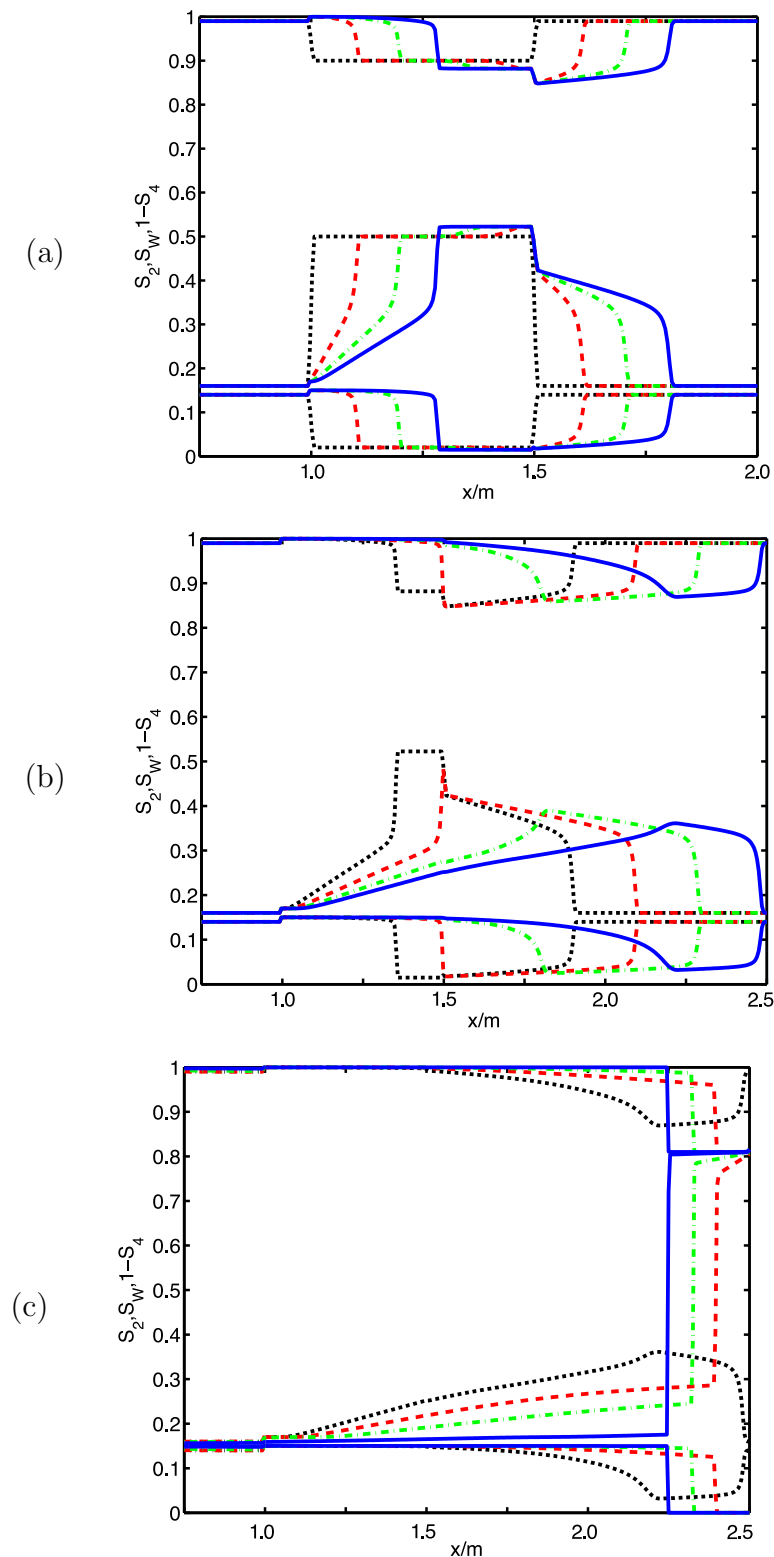
Beginnend mit Abbildung 15.23a und dem Experiment mit vernachlässigbaren Kapillar- und Grenzflächentermen sieht man die Anfangsverteilung mit 50% Wassersättigung in der Mitte und 15% Wassersättigung im Rest der Säule am unteren Rand der Abbildung. An den beiden Unstetigkeitsstellen entstehen Verdünnungsstoßwellen, die nach rechts zum Säulenboden wandern. Diese erkennt man an der harten Farbkante, gefolgt von einem kontinuierlichen Farbverlauf. Beide Wellen bewegen sich zunächst mit konstanter Geschwindigkeit. Dies wird durch den linearen Verlauf der Kante deutlich. Eine weitere Welle, die nach oben läuft, entsteht am unteren Rand der Blase. Sie ist zunächst aufgrund ihrer geringen Stoßhöhe im

Farbverlauf nicht zu erkennen. Wenn die obere Welle jedoch den Ort der anfänglichen unteren Unstetigkeit erreicht, variiert ihre Geschwindigkeit mit der Zeit und wird schneller. Sobald die untere Welle den Säulenboden erreicht, staut sich das Wasser dort auf. Im Gegensatz zur Umverteilung, welche im vorherigen Kapitel diskutiert wurde, wird jedoch zu wenig Wasser bewegt, als dass die Welle reflektiert werden könnte. Man beachte, dass die Wassersättigung am unteren Rand der Säule nahezu die maximal möglichen 81% erreicht, die Farbskala jedoch nur das Intervall 15-50% abdeckt.

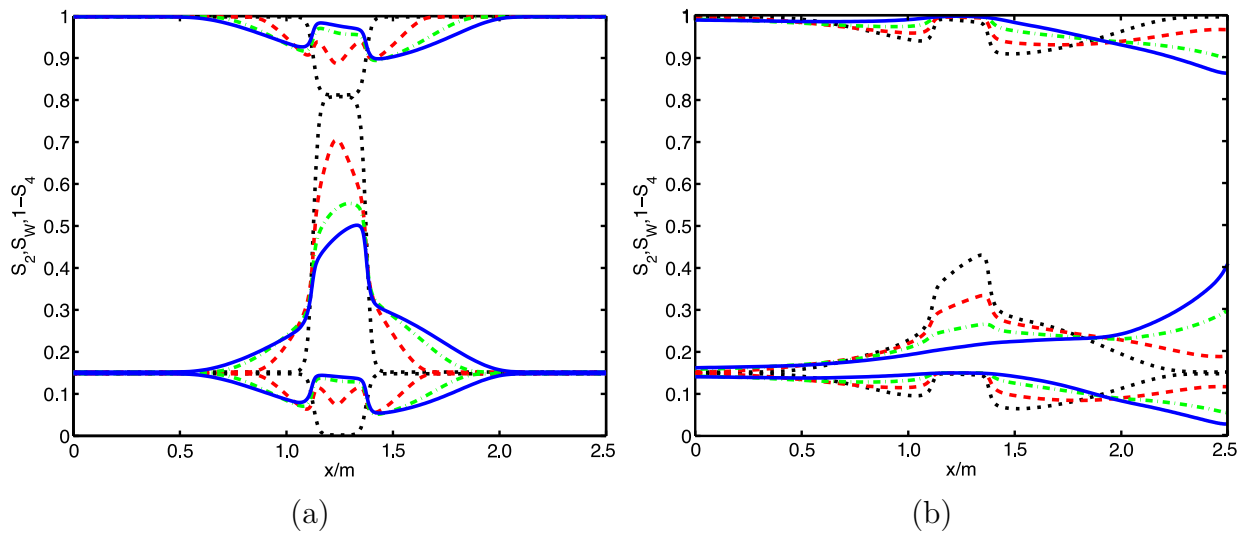
Abbildung 15.23b zeigt das Experiment sowohl mit Schwerkraft als auch Kapillar- und Grenzflächentermen. Dementsprechend sind die nichtlinearen Wellen, wie sie für Abbildung 15.23a diskutiert wurden, wenn auch in ausgeschmierter Form wieder zuerkennen. Im Gegensatz zu dort, verteilt sich nun jedoch das Wasser in beide Richtungen. Wasser wird also durch Kapillar- und Grenzflächenkräfte nach oben gesogen. Schließlich bildet sich am unteren Rand ein kleiner Abschnitt des Kapillarsaums aus, wie er in den vorherigen Kapiteln ausführlich diskutiert wurde.

Abbildung 15.23c zeigt das Experiment ohne Schwerkraft. Die Ausbreitung erfolgt nun symmetrisch in beide Richtungen. Bis die ersten Konturen die Ränder erreichen, kann man daher die Proportionalität der Dynamik  $x \propto \sqrt{t}$  an den Farbverläufen erkennen. Bemerkenswert ist, dass am Ende des Experiments eine inhomogene Sättigungsverteilung stationär ist, obwohl die Materialeigenschaften des porösen Mediums in der Säule homogen sind. Diese Inhomogenitäten haben ihre Ursache in der unterschiedlichen Prozessgeschichte.

Abbildung 15.24 zeigt Sättigungsprofile zu ausgewählten Zeitpunkten für verschwindende Kapillar- und Grenzflächenkräfte. Jede Abbildung zeigt Profile zu vier ausgewählten Zeitpunkten. Abbildung 15.24a zeigt Sättigungsprofile am Anfang des Experiments. Deutlich sind Verdünnungsstoßwellen zu erkennen, die an den Unstetigkeitsstellen entstehen und sich zum unteren Rand der Säule bewegen. Außerdem ist eine stationäre Unstetigkeit bei  $x = 1.5$  m auszumachen, die aufgrund der unterschiedlichen Anfangsbedingungen und der damit einhergehenden unterschiedlichen Flussfunktionen entsteht. Es sei angemerkt, dass die ausgeschmierten Stoßwellen numerische Artefakte sind. Eine Erhöhung der räumlichen Auflösung im Algorithmus würde diese reduzieren. Weniger deutlich zu erkennen sind zwei weitere Merkmale. Zum einen tritt auch eine kleine stationäre Unstetigkeit bei  $x = 1.0$  m auf, die ebenfalls mit den unterschiedlichen Flussfunktionen aufgrund der Anfangsbedingungen begründet werden. Zum anderen propagiert von der Unstetigkeitsstelle bei  $x = 1.5$  m auch eine kleine Bewässerungswelle in der Säule nach oben, die allerdings bereits vor  $\Delta t = 3$  d (blau durchgezogene Kurve) von der von oben kommenden größeren Verdünnungsstoßwelle “geschluckt” wurde.



**Abbildung 15.24:** Sättigungsprofile zu ausgewählten Zeitpunkten für verschwindende Kapillar- und Grenzflächenkräfte. Jede Abbildung zeigt Profile zu vier ausgewählten Zeitpunkten. Die chronologische Reihenfolge der Profile geht von schwarz gepunkteten über rot gestrichelten und grün gestrichelpunkteten zu blau durchgezogenen Kurven. Abbildung (a) zeigt Sättigungsprofile zu den Zeitpunkten  $t = 0$  d,  $t = 1$  d,  $t = 2$  d und  $t = 3$  d, Abbildung (b) zu den Zeitpunkten  $t = 4$  d,  $t = 6$  d,  $t = 8$  d und  $t = 10$  d und Abbildung (c) zu den Zeitpunkten  $t = 1$  d,  $t = 15$  d,  $t = 25$  d und  $t = 100$  d.

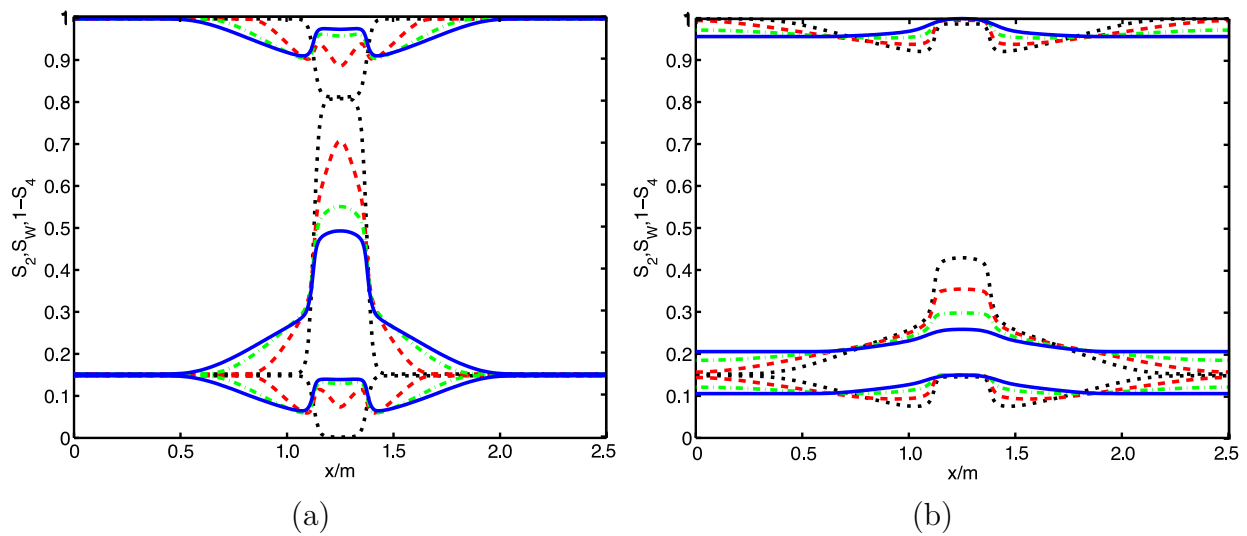


**Abbildung 15.25:** Sättigungsprofile zu ausgewählten Zeitpunkten bei signifikanten Beiträgen sowohl von Kapillar- und Grenzflächenkräften als auch der Schwerkraft. Jede Abbildung zeigt Profile zu vier ausgewählten Zeitpunkten. Die chronologische Reihenfolge der Profile geht von schwarz gepunkteten über rot gestrichelten und grün gestrichelpunkteten zu blau durchgezogenen Kurven. Abbildung (a) zeigt Sättigungsprofile zu den Zeitpunkten  $t = 0$ ,  $t = 0.5$  d,  $t = 1$  d und  $t = 1.5$  d und Abbildung (b) zu den Zeitpunkten  $t = 2.5$  d,  $t = 5$  d,  $t = 10$  d und  $t = 150$  d.

Abbildung 15.24b zeigt Sättigungsprofile des Experiments, bevor die untere Welle den unteren Rand der Säule erreicht hat. Zu sehen ist, wie die obere Welle zunächst die untere Unstetigkeit  $x = 1.5$  m erreicht. Anschließend wird sie aufgrund der abnehmenden Stoßwellenhöhe schneller und verkürzt den Abstand zur vorangehenden Bewässerungswelle. Hier sieht man, wie die Trennlinie zwischen Be- und Entwässerung Teil der Lösung ist und sowohl räumlich als auch zeitlich variiert.

Abbildung 15.24c zeigt Sättigungsprofile gegen Ende des Experiments, wenn sich das perkolierende Wasser am unteren Rand der Säule sammelt. Die Welle von oben wird zwar am unteren Säulenrand reflektiert, kommt dann jedoch aufgrund fehlendem Nachschubs rasch zum Erliegen. Am Ende des Experiments (blau durchgezogene Profile) befindet sich das perkolierende Wasser am unteren Rand der Säule. Nichtperkolierendes Wasser ist jedoch im oberen Teil der Säule entstanden. Im Endprofil ist die anfängliche Position der Wasserblase nicht mehr zu erkennen.

Abbildung 15.25 zeigt Sättigungsprofile zu ausgewählten Zeitpunkten bei signifikanten Beiträgen sowohl von Kapillar- und Grenzflächenkräften als auch der Schwerkraft. Beide Abbildungen zeigen Profile zu vier ausgewählten Zeitpunkten. Abbildung 15.25a zeigt Sättigungsprofile am Anfang des Experiments. Man beachte die leicht veränderten Anfangsbedingungen im Vergleich zu Abbildung 15.24. Von den in Abbildung 15.24a beschriebenen Wellen ist hier



**Abbildung 15.26:** Sättigungsprofile zu ausgewählten Zeitpunkten für verschwindende Beiträge der Schwerkraft zur Dynamik. Jede Abbildung zeigt Profile zu vier ausgewählten Zeitpunkten. Die chronologische Reihenfolge der Profile geht von schwarz gepunkteten über rot gestrichelten und grün gestrichelten zu blau durchgezogenen Kurven. Abbildung (a) zeigt Sättigungsprofile zu den Zeitpunkten  $t = 0$  d,  $t = 0.5$  d,  $t = 1$  d und  $t = 1.5$  d und Abbildung (b) zu den Zeitpunkten  $t = 2.5$  d,  $t = 5$  d,  $t = 10$  d und  $t = 150$  d.

nur die Bewässerungswelle im unteren Teil der Säule zu erkennen. Die anderen beiden werden durch die kapillar- und grenzflächenkräftegetriebene Diffusion maskiert. Nichtperkolierendes Wasser wird erzeugt und nichtperkolierendes Öl vernichtet, da durch das Ausschmieren die Wassersättigung im mittleren Bereich der Säule rasch abnimmt. Im Gegensatz dazu nimmt im angrenzenden Bereich die Wassersättigung zu. Es wird nichtperkolierendes Wasser vernichtet und nichtperkolierendes Öl produziert. Obwohl die Diffusion die Dynamik prägt, erkennt man den Einfluss der Schwerkraft deutlich. Er zeigt sich in der Asymmetrie der Profile.

Abbildung 15.25b zeigt Sättigungsprofile gegen Ende des Experiments, wenn Wasser aus der Blase die Ränder der Säule erreicht. Dabei ist der Einfluss des oberen Randes minimal, da nur eine geringe Wassermenge diesen Rand überhaupt erreicht. Am unteren Rand staut sich jedoch wie in Abbildung 15.24c das Wasser und die Wassersättigung nimmt zu. Allerdings reicht die Wassermenge nicht aus, um den unteren Rand voll zu sättigen, da Kapillar- und Grenzflächenkräfte Teile des Wassers im Rest der Säule festhalten. Es bildet sich ein Kapillarsaum aus. Im Gegensatz zum Experiment mit verschwindenden Kapillar- und Grenzflächenkräften kann man hier am Gleichgewichtsprofil die ursprüngliche Position der Wasserblase erkennen. Dies liegt daran, dass sich die Bereiche der Säule nicht an Endpunkten in der Hystereseschleife befinden, wie dies im anderen Experiment der Fall war.

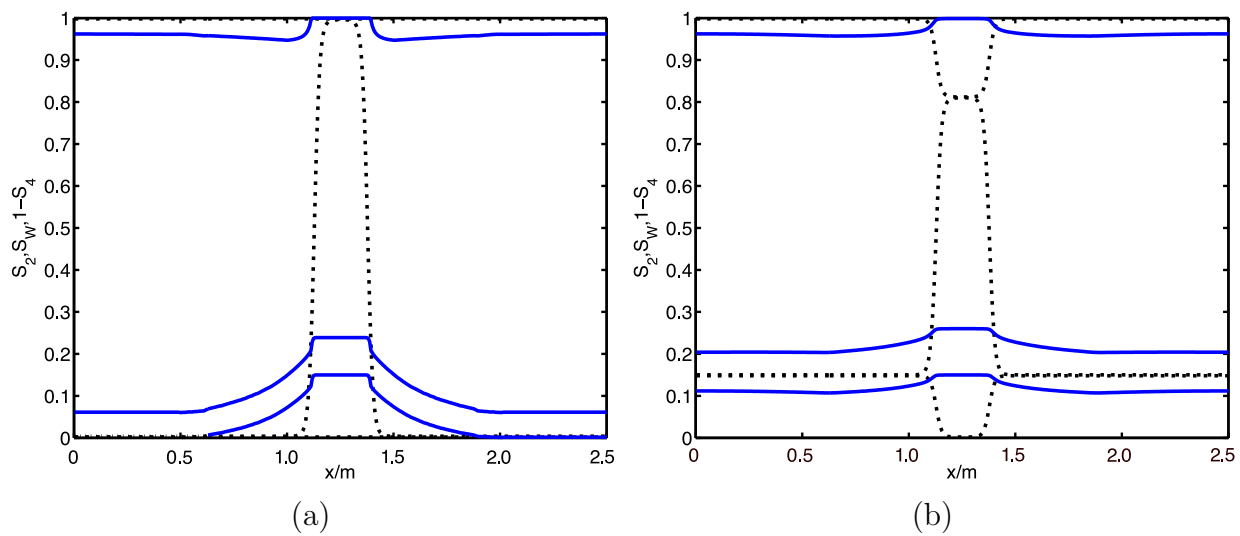
Abbildung 15.26 zeigt Sättigungsprofile zu ausgewählten Zeitpunkten für verschwindende Beiträge der Schwerkraft zur Dynamik. Jede Abbildung zeigt Profile zu vier ausgewählten Zeitpunkten. Abbildung 15.26a zeigt Sättigungsprofile am Anfang des Experiments. Wellen sind hier keine zu sehen, da es sich um ein rein kapillar- und grenzflächenkraftgetriebenes parabolisches Problem handelt. Wie in Abbildung 15.25a sorgen die Kapillar- und Grenzflächenkräfte für ein rasches Ausschmieren der Blase. Da dadurch die Wassersättigung im mittleren Bereich der Säule rasch abnimmt, wird dort, von den anfänglichen Unstetigkeitsstellen ausgehend, nichtperkolierendes Wasser erzeugt und nichtperkolierendes Öl vernichtet. Im Gegensatz dazu nimmt im angrenzenden Bereich die Wassersättigung zu und nichtperkolierendes Wasser wird vernichtet und nichtperkolierendes Öl produziert. Die Profile sind jetzt aufgrund der Abwesenheit der Schwerkraft achsensymmetrisch bzgl.  $x = 1.25$  m.

Abbildung 15.26b zeigt Sättigungsprofile gegen Ende des Experiments. Wasser aus der Blase erreicht dabei die Ränder der Säule. Auch hier staut sich das Wasser beim Erreichen der Ränder auf. Es läuft jedoch keine Welle vom Rand der Säule in den inneren Bereich hinein. Statt dessen steigt die Wassersättigung langsam mit nahezu verschwindendem Gradienten an. Obwohl die Materialeigenschaften der porösen Säule homogen sind, stellt sich auch hier kein homogenes Gleichgewichtsprofil ein, da sich Kapillar- und Grenzflächenkräfte trotz ortsabhängigen Sättigungen kompensieren können. Die ursprüngliche Position der Wasserblase ist daher auch im Endprofil deutlich zu erkennen.

Im restlichen Teil dieses Unterkapitels werden Gleichgewichtsprofile für unterschiedliche Parametersätze und unterschiedliche Wasser- bzw. Ölblasen gezeigt. Die gezeigten Lösungen wurden mit FlmPSSS berechnet. Die Dynamik unterscheidet sich nicht wesentlich von der in Abbildung 15.23c bzw. Abbildung 15.26 gezeigten.

Abbildung 15.27<sup>8</sup> zeigt Gleichgewichtssättigungsprofile für die Umverteilung einer Wasserblase in einer geschlossenen Säule mit dem Parametersatz 1 aus Tabelle 15.5. Abbildung 15.27a zeigt das Experiment für eine “primäre” Blase und Abbildung 15.27b für eine “sekundäre”. Unter einer “primären” Blase wird hier verstanden, dass die Wassersättigung in der Blase 100% und im Rest der Säule 0% ist. Entsprechend wird unter einer “sekundären” Blase eine Situation verstanden, bei der in der Blase eine Wassersättigung von  $S_{\text{W}} = 1 - S_{\text{Oim}} = 0.81$  herrscht und im Rest der Säule  $S_{\text{W}} = S_{\text{Wdr}} = 0.15$ . Wie in Abbildung 15.26 sind die Gleichgewichtsprofile in beiden Fällen in Abbildung 15.27 inhomogen trotz homogener Materialeigenschaften. Die Inhomogenität ist für die “primäre” Blase deutlicher ausgeprägt, was wiederum an der deutlich größeren Fläche liegt, die die Hystereseschleife für primäre Prozesse überspannt. Interessant ist auch, dass am Ende des Experiments mit der “primären”

<sup>8</sup>Die Lösungen in den Abbildungen 15.27-15.29 wurden mit FlmPSSS berechnet.

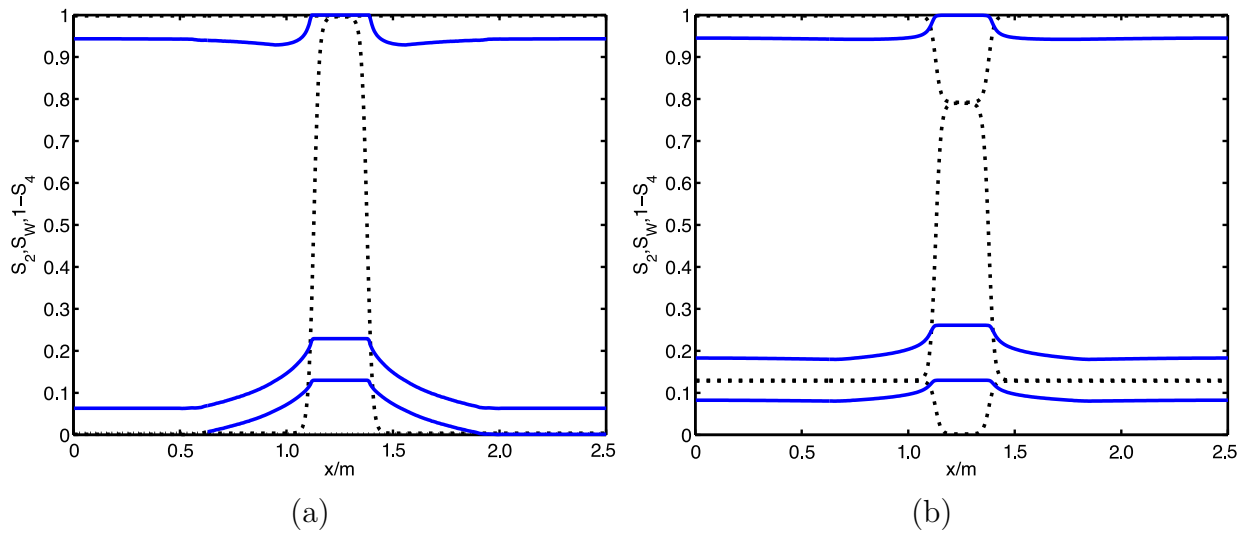


**Abbildung 15.27:** Gleichgewichtssättigungsprofile für die Umverteilung einer Wasserblase in einer geschlossenen Säule mit dem Parametersatz 1 aus Tabelle 15.5. Die Anfangsbedingungen sind schwarz gepunktet gezeichnet und die Gleichgewichtsprofile blau durchgezogen. Abbildung (a) zeigt das Experiment für eine "primäre" Blase und Abbildung (b) für eine "sekundäre".

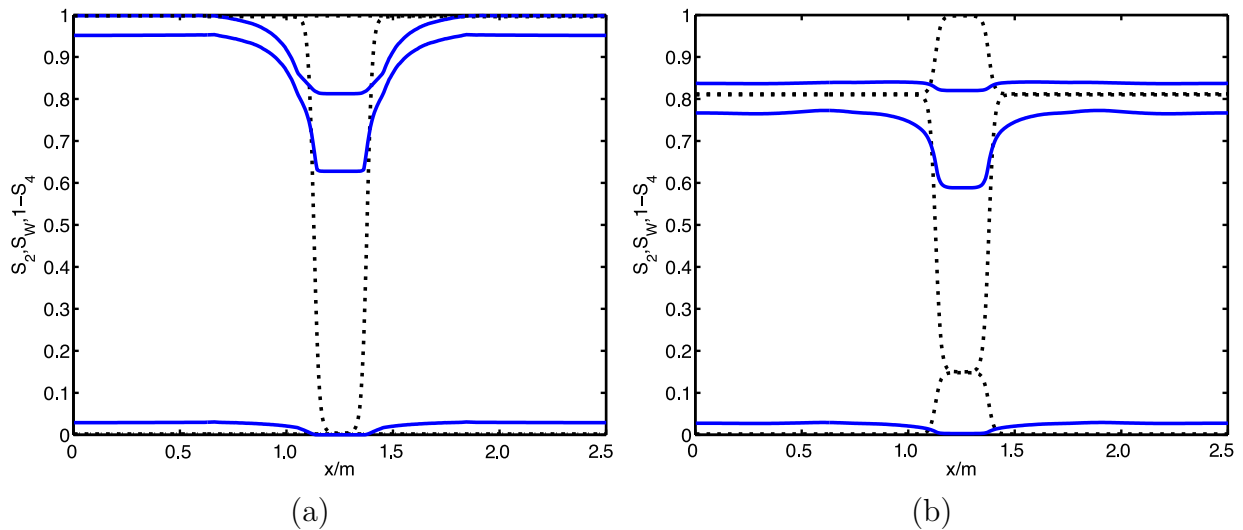
Blase (Abbildung 15.27a) nichtperkolierendes Wasser in Bereichen vorkommt, die ursprünglich vollkommen ölgesättigt waren. Dies liegt daran, dass in direkter Nachbarschaft der Blase die Säule zwar zunächst bewässert wird, im Laufe des Experiments der Wassergehalt jedoch dort wieder abnimmt, um den restlichen Bereich der Säule zu füllen.

Abbildung 15.28 zeigt Gleichgewichtssättigungsprofile für die Umverteilung einer Wasserblase in einer geschlossenen Säule mit dem Parametersatz 2 aus Tabelle 15.5. Abbildung 15.28a zeigt das Experiment für eine "primäre" Blase und Abbildung 15.28b für eine "sekundäre". Qualitativ unterscheiden sich die Gleichgewichtsprofile für den Parametersatz 2 nicht von denen des zuvor studierten Parametersatz 1. Interessant ist jedoch, dass die Inhomogenität des Gleichgewichtsprofils für die "primäre" Blase geringer (vergleiche Abbildung 15.27a und Abbildung 15.28a) und für die "sekundäre" Blase (vergleiche Abbildung 15.27b und Abbildung 15.28b) stärker ausgeprägt ist.

Abbildung 15.29 zeigt Gleichgewichtssättigungsprofile für die Umverteilung einer Ölblase in einer geschlossenen Säule mit dem Parametersatz 1 aus Tabelle 15.5. Abbildung (a) zeigt das Experiment für eine "primäre" Blase und Abbildung (b) für eine "sekundäre". Auch diese Profile unterscheiden sich qualitativ nicht von den zuvor diskutierten. Aufgrund der unterschiedlichen Benetzungseigenschaften, ist hier die Inhomogenität allerdings noch sehr viel deutlicher ausgeprägt.



**Abbildung 15.28:** Gleichgewichtssättigungsprofile für die Umverteilung einer Wasserblase in einer geschlossenen Säule mit dem Parametersatz 2 aus Tabelle 15.5. Die Anfangsbedingungen sind schwarz gepunktet gezeichnet und die Gleichgewichtsprofile blau durchgezogen. Abbildung (a) zeigt das Experiment für eine "primäre" Blase und Abbildung (b) für eine "sekundäre".



**Abbildung 15.29:** Gleichgewichtssättigungsprofile für die Umverteilung einer Ölblase in einer geschlossenen Säule mit dem Parametersatz 1 aus Tabelle 15.5. Die Anfangsbedingungen sind schwarz gepunktet gezeichnet und die Gleichgewichtsprofile blau durchgezogen. Abbildung (a) zeigt das Experiment für eine "primäre" Blase und Abbildung (b) für eine "sekundäre".



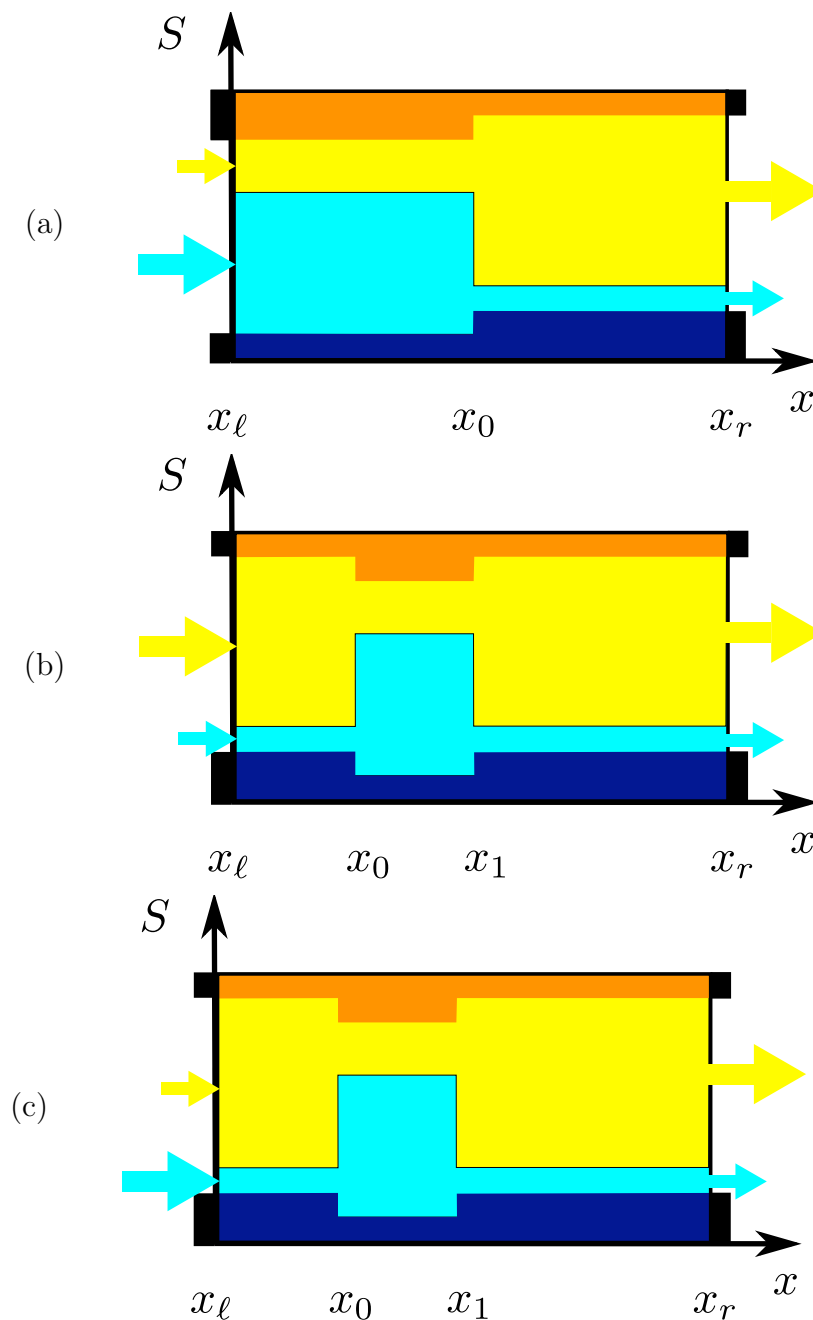
---

## 16 Simulationen von Experimenten mit Flussrandbedingungen

In diesem Kapitel werden Simulationen von gedachten Experimenten mit einer porösen Säule mit Flussrandbedingungen vorgestellt. Dazu wird eine zylindrische Säule eines homogenen, isotropen und inkompressiblen porösen Mediums betrachtet, die an beiden Rändern mit Pumpen verbunden ist, die den Volumenstrom der Fluide festlegen. Die Säule sei mit zwei inkompressiblen, sich nicht mischenden Fluiden unterschiedlicher Dichte gefüllt und der Kapillarsaum sei deutlich breiter als der Säulendurchmesser, so dass die Säule physikalisch als eindimensional angenommen werden kann.

Im ersten Teil dieses Kapitels werden die Umsetzungen des Experiments in den Algorithmen `SimBL` und `FlmPSSS` diskutiert. Dazu müssen die Flussrandbedingungen und die Anfangsbedingungen mathematisch formuliert werden. Das nächste Unterkapitel widmet sich den verwendeten Parametern. Dabei wird sowohl auf die Modellparameter als auch auf entsprechende künstliche numerische Parameter der unterschiedlichen Algorithmen eingegangen.

Die numerisch durchgeführten Experimente lassen sich drei Gruppen zuordnen, die in jeweils eigenen Unterkapiteln diskutiert werden. Im ersten Unterkapitel wird ein verallgemeinertes Buckley-Leverett-Problem diskutiert. Zwar wurde dies bereits im analytischen Teil dieser Dissertation behandelt. Hier wird jedoch zusätzlich der Einfluss der Kapillar- und Grenzflächenenergie auf die Form der Bewässerungsfront diskutiert. Dies ist in dieser Form nur durch numerische Berechnungen möglich. Die zweite Gruppe beschreibt Experimente, bei denen verfolgt wird, wie sich eine Wasser- bzw. Ölblase in der Säule bewegt, wenn das sie umgebende Fluid durch die Säule gepumpt wird. Dieses Experiment modelliert stark vereinfacht die Aufgabenstellung bei einer Altlastensanierung im Untergrund. Es dient außerdem dazu, den Einfluss der Modifizierung des Massenaustauschterms zu illustrieren. Die dritte Gruppe beschreibt Experimente, bei denen nicht das Fluid, welches die Blase umgibt, in die Säule hinein gepumpt wird, sondern das Fluid der Blase selbst. Dadurch kommt es zur Vereinigung der eindringenden Front mit der umströmten Blase. Dieses numerische Experiment



**Abbildung 16.1:** Illustration der Anfangs- und Randbedingungen für die Simulation von Experimenten mit einer geschlossenen porösen Säule mit Flussrandbedingungen. Abbildung (a) zeigt homogene Anfangsbedingungen mit einer Unstetigkeit. Abbildung (b) zeigt Anfangsbedingungen mit einer Wasserblase, wobei Öl in deutlich größerem Umfang hinein gepumpt wird. Abbildung (c) zeigt die Anfangsbedingungen mit einer Wasserblase, wobei der injizierte Wasserstrom deutlich größer ist. In der Abbildung sind Sättigungen  $S$  gegen die Raumkoordinate  $x$  aufgetragen. Hellblau steht für perkolierendes Wasser  $S_1$ , dunkelblau für nichtperkolierendes Wasser  $S_2$ . Gelb steht für perkolierendes Öl  $S_3$  und orange für nichtperkolierendes Öl  $S_4$ . Der schwarze Balken an den Rändern stellt die undurchlässigen Randbedingungen für die nichtperkolierenden Phasen dar. Außerdem werden die Flussrandbedingungen für die perkolierenden Phasen durch Pfeile dargestellt. Die Größe des Pfeils illustriert den Volumenstrom.

wird dazu verwendet, den Einfluss der Kapillar- und Grenzflächenkräfte auf die Interferenz von nichtlinearen Wellen zu studieren.

Abbildung 16.1 illustriert die Anfangs- und Randbedingungen für die drei Gruppen. Abbildung 16.1a illustriert die Anfangs- und Randbedingungen für das erweiterte Buckley-Leverett-Problem, Abbildung 16.1b illustriert die Anfangs- und Randbedingungen, die eine stark vereinfachte Altlastensanierung modellieren und Abbildung 16.1c illustriert die Anfangs- und Randbedingungen für das Studium der Interferenz der nichtlinearen Wellen.

## 16.1 Randbedingungen

Die Säule hat impermeable Seitenwände. An einem Ende wird Wasser bzw. Öl injiziert und am anderen Ende können die Fluide frei abfließen. Das Experiment wird in diesem Unterkapitel durch entsprechende mathematische Randbedingungen modelliert. Die Berechnungen werden mit den beiden Algorithmen `SimBL` und `FlmPSSS` durchgeführt. Diesen Algorithmen liegen unterschiedliche mathematische Formulierungen zugrunde, die durch unterschiedliche Näherungen im Modell und unterschiedliche numerische Näherungen motiviert sind. Die Modellierung wird für jeden Algorithmus in einem eigenen Unterkapitel diskutiert.

### 16.1.1 SimBL

Der Algorithmus `SimBL` basiert auf der partiellen Differentialgleichung (13.9a) und den algebraischen Gleichungen (13.9b) und (13.9c). Für die algebraischen Gleichungen müssen keine Randbedingungen spezifiziert werden. Die Flussrandbedingungen werden durch eine Extrapolation der Sättigung nullter Ordnung für die partielle Differentialgleichung (13.9a) modelliert. Diese werden durch

$$\text{mthbc}(1) = 1$$

$$\text{mthbc}(2) = 1$$

in `claw1ez.data` ausgewählt. Da der Fluss durch  $q_{\text{tot}}$  gegeben ist, modelliert dies das Experiment

### 16.1.2 FlmPSSS

Der Algorithmus FlmPSSS basiert auf den vier partiellen Differentialgleichungen (14.1) der Massenbilanzen. Die Flussrandbedingungen am linken Rand können direkt implementiert werden, da es sich um einen zellzentrierten Finite-Volumen-Algorithmus handelt. Die freien Ausflussrandbedingungen wurden in Kapitel 14.4.2 diskutiert.

## 16.2 Anfangsbedingungen

Die Säule ist gefüllt mit zwei Fluiden unterschiedlicher Dichte. In den Anfangsbedingungen muss die Verteilung der Fluide auf perkolierende und nicht perkolierende Phasen spezifiziert werden. Bei SimBL sind die Sättigungen die alleinigen unabhängigen Variablen, FlmPSSS benötigt die Angabe des Drucks  $P_1(x, 0)$  der perkolierenden Wasserphase zu Beginn des Experiments, wenn auch nur als Platzhalter.

### 16.2.1 SimBL

Der Algorithmus SimBL wird für Simulationen mit homogenen Anfangsbedingungen mit ein oder zwei Unstetigkeiten verwendet, wie sie in Abbildung 16.1 dargestellt werden. Numerisch werden die Anfangsbedingungen durch eine Superposition zweier Tangenshyperbolicusfunktionen dargestellt (siehe Kapitel 13.5), die durch ihre "Raumfrequenz"  $\kappa_{sm}$ , ihren Nulldurchgang  $x_0, x_1$  sowie die Höhe der Plateaus an der linken und der rechten Seite des jeweiligen Astes festgelegt werden. Tabelle 16.1 zeigt zusammenfassend die Anfangsbedingungen der durchgeführten numerischen Experimente mit dem Algorithmus SimBL.

### 16.2.2 FlmPSSS

Der Algorithmus FlmPSSS wird für Simulationen mit homogenen Anfangsbedingungen mit einer oder zwei Unstetigkeiten verwendet, wie sie in Abbildung 16.1 dargestellt werden. Numerisch werden die Anfangsbedingungen durch eine Superposition zweier Tangenshyperbolicusfunktionen dargestellt, die durch ihre "Raumfrequenz"  $\kappa_{sm}$ , ihren Nulldurchgang  $x_0, x_1$  sowie die Höhe der Plateaus an der linken und der rechten Seite des jeweiligen Astes festgelegt werden. In den durchgeführten Experimenten wird die Höhe des linken Plateaus des linken Tangenshyperbolicus mit dem rechten Plateau des rechten Tangenshyperbolicus gleichgesetzt. Es genügt also die Spezifikation der zwei Wertetripel  $(S_{1p}, S_{2p}, S_{3p})$ ,  $(S_{1b}, S_{2b}, S_{3b})$  für

	Sek. Wasserblase	Sek. Ölblase	Prim. Ölblase
$S_{\text{wb}}$	0.151	0.808	0.996
$S_{2\text{b}}$	0.15	0.002	0.002
$S_{4\text{b}}$	0.0	0.19	0.002
$S_{\text{wp}}$	0.809	0.55	0.55
$S_{2\text{p}}$	0.0	0.05	0.048
$S_{4\text{p}}$	0.19	0.1	0.102
$x_0/\text{m}$	0.1	0.1	0.1
$x_1/\text{m}$	0.2	0.2	0.2
$\kappa_{\text{sm}}/\Delta x$	1	1	1

**Tabelle 16.1:** Anfangsbedingungen für Simulationen von Experimenten mit einer durchströmten porösen Säulen mit SimBL.

die Sättigung und des Tripels  $(x_0, x_1, \kappa_{\text{sm}})$  für die Lage. Tabelle 16.2 zeigt zusammenfassend die Anfangsbedingungen der durchgeführten numerischen Experimente mit dem Algorithmus FlmPSSS.

	BL	Sek. Ölblase	Prim. Ölblase	Vereinigung
$S_{1\text{b}}$	0.808	0.808	0.994	0.808
$S_{2\text{b}}$	0.002	0.002	0.002	0.002
$S_{3\text{b}}$	0.002	0.002	0.002	0.002
$S_{1\text{p}}$	0.002	0.502	0.502	0.002
$S_{2\text{p}}$	0.148	0.048	0.048	0.148
$S_{3\text{p}}$	0.848	0.348	0.348	0.848
$x_0/\text{m}$	0.2	0.1	0.1	0.1
$x_1/\text{m}$	-1	0.2	0.2	0.2
$\kappa_{\text{sm}}/\text{m}^{-1}$	100	100	100	100

**Tabelle 16.2:** Anfangsbedingungen für Simulationen von Experimenten mit durchströmten porösen Säule mit FlmPSSS.

## 16.3 Parameter der Simulationen

Neben Anfangs- und Randbedingungen müssen diverse Parameter spezifiziert werden, um Lösungen numerisch zu berechnen. Die Parameter lassen sich in zwei Klassen unterteilen. Es gibt die physikalischen Parameter des Modells, die so gewählt sein sollten, dass sie zu-

mindest nahe an realistischen Werten sind, um Plausibilitätsprüfungen zu ermöglichen, wenn experimentelle Daten nicht vorhanden sind. Außerdem haben die unterschiedlichen Algorithmen künstliche Parameter, die so gewählt werden sollten, dass sie ein stabiles Verhalten des Algorithmus garantieren, jedoch die Lösung nicht verfälschen.

Die Simulationen werden mit dem Parametersatz 1 in Tabelle 15.5 durchgeführt. Die Kapillar- und Grenzflächenkräfte werden allerdings skaliert und sind in den Simulationen mit SimBL überhaupt nicht berücksichtigt. Hier verschwindet der Gesamtfluss jedoch nicht. In allen gezeigten Simulationen ist der Fluss konstant  $q_{\text{tot}}(t) = q_0 = 1\mu\text{m/s}$ . Der Fluss wird jeweils von der linken Seite eingeströmt.

### 16.3.1 Die numerischen Parameter für SimBL

Die numerischen Parameter für SimBL wurden in Kapitel 13.7 diskutiert. Die verwendeten Werte sind dort in Tabelle 13.1 zusammengefasst.

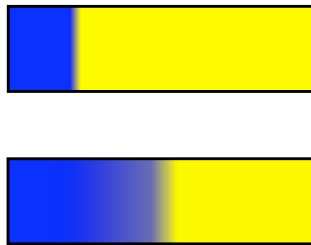
### 16.3.2 Die numerischen Parameter für FlmPSSS

Die numerischen Parameter für FlmPSSS wurden in Kapitel 14.5 diskutiert. Die verwendeten Werte sind in Tabelle 16.3 zusammengefasst.

Parameter	Wert	Einheit
$N_{\text{cls}}$	400	
$\Delta t$	340	s
$\epsilon_{\text{M}}$	0.01	
$\epsilon_{\text{tol}}$	0.0005	
$\epsilon_{\partial S}$	$10^{-6}$	$\text{s}^{-1}$
$\kappa_{\text{h}}$	1000	$\text{m s}^2 \text{kg}^{-1}$
$\kappa_{\text{di}}$	$10^8$	$\text{s}^{-1}$
$\epsilon_{\text{S}}$	$10^{-5}$	

**Tabelle 16.3:** Numerische Parameter für FlmPSSS.

## 16.4 Buckley-Leverett-Problem mit Kapillar- und Grenzflächentermen

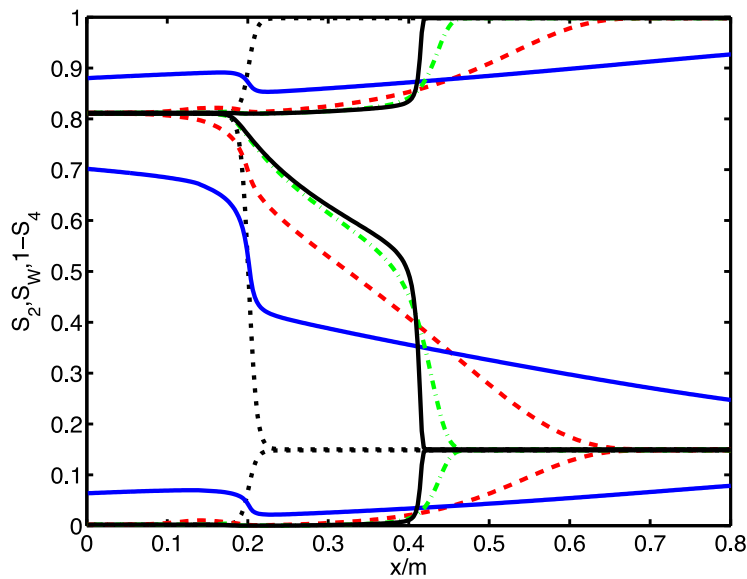


**Abbildung 16.2:** Schematische Darstellung des erweiterten Buckley-Leverett-Problems mit Kapillar- und Grenzflächentermen. Anfangs ist die Säule homogen mit einer Unstetigkeitsstelle gefüllt. Bereiche mit höherer Wassersättigung werden blau dargestellt, Bereiche mit niedrigerer Sättigung gelb.

In diesem Kapitel werden numerische Lösungen des erweiterten Buckley-Leverett-Problems mit Berücksichtigung der Kapillar- und Grenzflächenterme vorgestellt. Abbildung 16.2 stellt das Experiment schematisch dar. Anfangs ist die Säule homogen mit einer Unstetigkeitsstelle gefüllt. Es wird perkolierendes Wasser von links eingeströmt mit  $q_{1\ell} = q_0$ . Es bildet sich eine Verdünnungsstoßwelle an der Unstetigkeitsstelle aus, welche allerdings durch die Kapillar- und Grenzflächenkräfte ausgeschmiert wird. Auf der rechten Seite wird das abgepumpt, was durch die Säule an den Ausfluss heran fließt, so dass sich weder Wasser zurückstaut noch eine Entwässerungswelle in die Säule propagiert.

Abbildung 16.3<sup>1</sup> zeigt einen Vergleich von Sättigungsprofilen für Kapillar- und Grenzflächenterme unterschiedlicher Stärke zu einem festen Zeitpunkt. Unterschiedlich stark skalierte Kapillar- und Grenzflächenterme sind im Labor schwierig herzustellen. Mathematisch ist eine Umskalierung der Kapillar- und Grenzflächenterme jedoch äquivalent zu einer Verlängerung der Säule und entsprechender Verlängerung der Experimentdauer. Ebenso kann der injizierte Volumenstrom erhöht werden. Für verschwindende Kapillar- und Grenzflächenterme (schwarz durchgezogene Kurven) entsprechen die numerischen Profile den analytischen Profilen aus Kapitel 7. Das Ausschmieren der Front ist hier nahezu ausschließlich durch numerische Diffusion verursacht, da ein Erhöhen des Faktors  $P_0$  zunächst keine Auswirkung hat. Erst für  $P_0 = 0.1$  wird der Effekt des Ausschmierens deutlich. Für  $P_0 = 1$  sind advective und diffusive Terme im Modell ungefähr gleich stark. Die Diffusion sorgt nun auch dafür, dass die Wassersättigung stromaufwärts der Unstetigkeit in den Anfangsbedingungen leicht abnimmt. Dies wird unter anderem daran ersichtlich, dass nichtperkolierendes Wasser im Bereich  $x = 0.1 - 0.2$  m entsteht. Für  $P_0 = 10$  dominieren die diffusiven Terme die Dynamik

<sup>1</sup>Die Lösungen in den Abbildungen 16.3 und 16.4 wurden mit FlmPSSS berechnet.

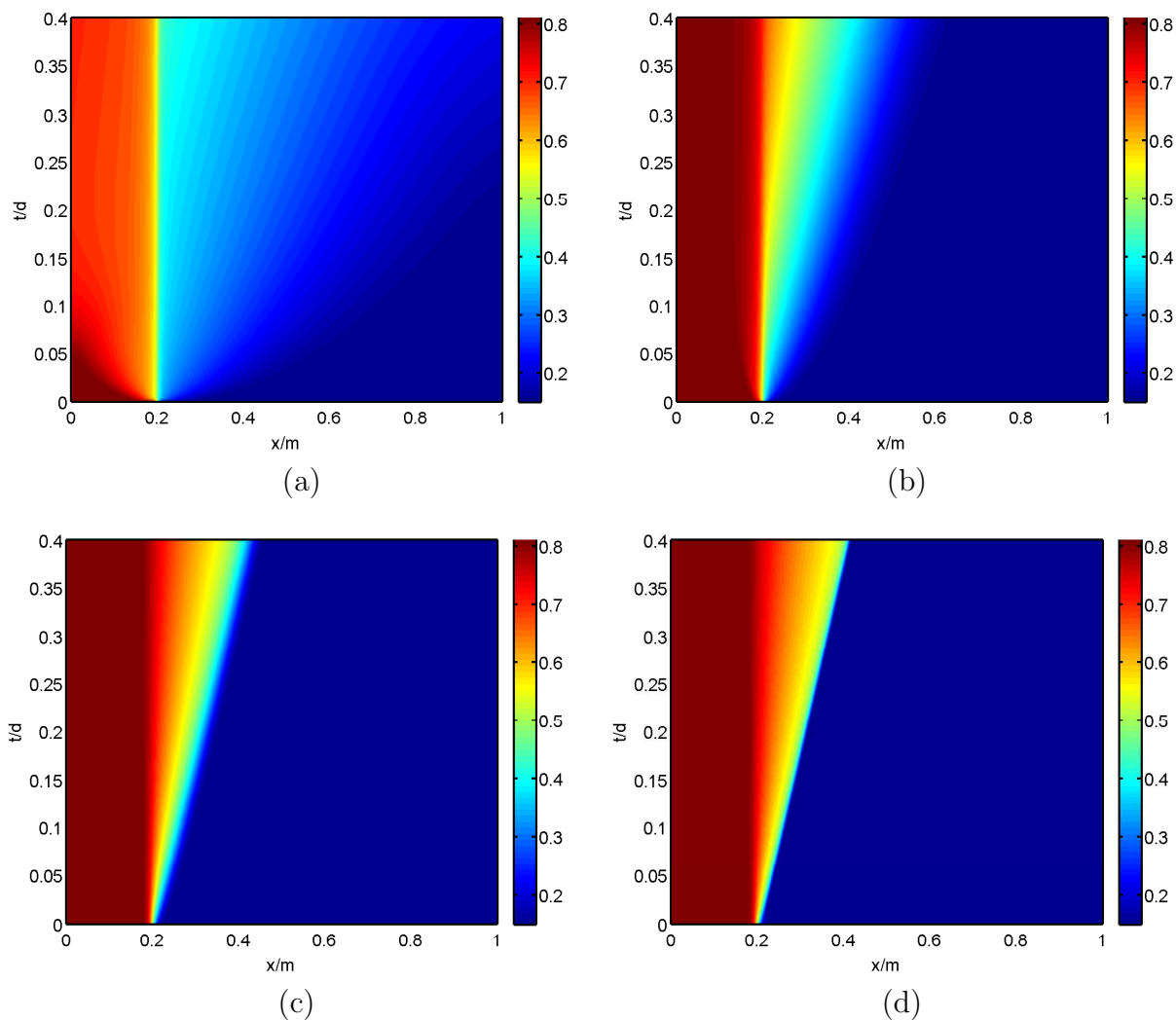


**Abbildung 16.3:** Vergleich von Sättigungsprofilen bei  $t = 0.4$  d für Kapillar- und Grenzflächen-terme unterschiedlicher Stärke. Die Parameter  $P_a, P_b, P_2^*, P_4^*$  werden dabei mit einem Faktor  $P_0$  multipliziert, der die Terme im Vergleich zu Parametersatz 1 umskaliert. Er ist  $P_0 = 10$  für die blau durchgezogenen Kurven  $P_0 = 1$  für die rot gestrichelten Kurven,  $P_0 = 0.1$  für die grün gestrichelpunkteten Kurven und  $P_0 = 10^{-5}$  für die schwarz durchgezogenen Kurven. Die Anfangsbedingungen sind schwarz gepunktet dargestellt.

und die anfängliche Unstetigkeit schmiert aus. Allerdings bleibt wie beim verallgemeinerten Philip-Problem eine Unstetigkeit an der Unstetigkeitsstelle der Anfangsbedingungen erhalten.

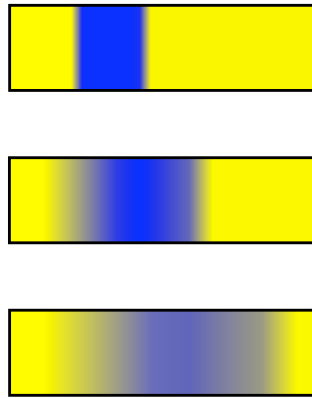
Abbildung 16.4 zeigt Farbverlaufsbilder der Wassersättigung  $S_w(x, t)$  für Kapillar- und Grenzflächenkräfte unterschiedlicher Stärke. Die Farbverlaufsbilder der Wassersättigung illustrieren die zeitliche Entwicklung für die Sättigungsprofile aus Abbildung 16.3. In Abbildung 16.4d sieht man deutlich den hyperbolischen Charakter mit einer Dynamik  $x \propto t$  und einer scharfen Stoßwellenfront. In Abbildung 16.4c bleibt die Selbstähnlichkeit der Dynamik weitgehend erhalten. Allerdings ist die Front etwas stärker ausgeschmiert. Schwach kann man auch die Dominanz der Diffusion mit  $x \propto \sqrt{t}$  für  $t \approx 0$  erkennen. In Abbildung 16.4b tritt dieser Anteil für einen längeren Zeitraum dominant auf und erst gegen Ende des gezeigten Zeitraums geschieht die Dynamik weitgehend mit  $x \propto t$ . In Abbildung 16.4a ist die Dynamik im ganzen betrachteten Zeitraum durch diffusive Terme zweiter Ordnung dominiert. Anhand dieser vier Abbildungen wird nochmals deutlich, dass ein Umskalieren der Kapillar- und Grenzflächen-terme auch als ein Hinein- bzw. Herauszoomen in der  $(x, t)$ -Ebene interpretiert werden kann.





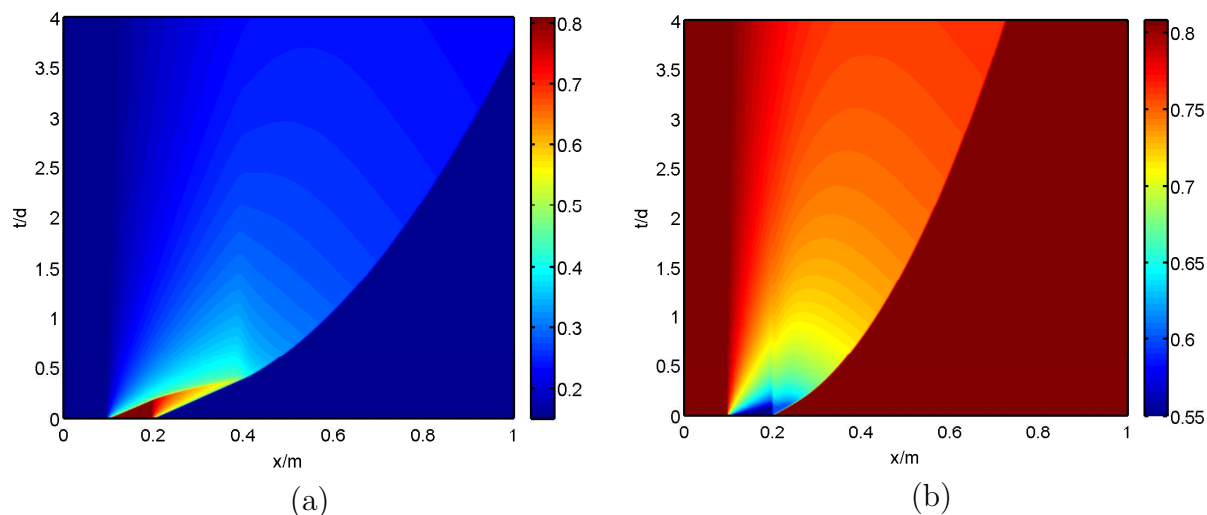
**Abbildung 16.4:** Farbverlaufsbilder der Wassersättigung  $S_w(x, t)$  für Kapillar- und Grenzflächenterme unterschiedlicher Stärke. Farbtafeln für die Sättigungen werden jeweils rechts der Abbildungen gegeben. Die Parameter  $P_a, P_b, P_2^*, P_4^*$  werden für die unterschiedlichen Abbildungen mit einem Faktor  $P_0$  multipliziert, der diese Terme im Vergleich zu Parametersatz 1 umskaliert. In Abbildung (a) ist  $P_0 = 10$ , in Abbildung (b)  $P_0 = 1$ , in Abbildung (c)  $P_0 = 0.1$  und in Abbildung (d)  $P_0 = 10^{-5}$ .

## 16.5 Umströmung einer Blase



**Abbildung 16.5:** Schematische Darstellung der Umströmung einer Blase. Anfangs befindet sich eine Öl- bzw. hier Wasserblase in einem sonst wasser- bzw. hier ölgesättigtem porösen Medium. Bereiche mit hoher Wassersättigung werden blau dargestellt, Bereiche mit niedriger Sättigung gelb.

In diesem Unterkapitel werden numerische Lösungen zur Umströmung einer Blase diskutiert. Abbildung 16.5 stellt das Experiment schematisch dar. Anfangs befindet sich eine Wasserblase in einem sonst ölgesättigtem porösen Medium. Öl wird in perkolierender Form von links mit  $q_{3\ell} = q_0 = q_{\text{tot}}$  in die Säule gepumpt und an der rechten Seite wird das dort vorhandene Gemisch so abgepumpt, dass die Volumenerhaltung gewährleistet ist. Das Öl verschiebt die Wasserblase, wobei diese auch aufgrund der Kapillar- und Grenzflächenkräfte verschmiert. Auch das vertauschte Experiment mit einer von Wasser umströmten Ölblase wird studiert. In diesem Fall ist  $q_{1\ell} = q_0$  und  $q_{3\ell} = 0$ . Anhand dieser Experimente soll untersucht werden, inwieweit das Wasser das Ende der Säule erreicht und welchen Einfluss das Verhältnis zwischen Advektion und Diffusion auf die Dynamik haben. Nichtperkolierenden Phasen wird dabei besondere Aufmerksamkeit gewidmet, da diese zwar den Erfolg- bzw. Misserfolg einer Altlastensanierung bestimmen, im DBRMMWBL-Modell jedoch nicht berücksichtigt werden. Dieses Unterkapitel ist seinerseits in zwei Unterkapitel aufgeteilt. Im ersten Unterkapitel werden sekundäre Prozesse diskutiert. Die Terminologie deutet dabei wie in vorangehenden Kapiteln darauf hin, dass die Anfangssättigungen  $S_{\text{w}} = S_{\text{w,dr}}, S_2 = S_{\text{w,dr}}, S_4 = 0$  bzw.  $S_{\text{w}} = 1 - S_{\text{0,im}}, S_2 = 0$  und  $S_4 = S_{\text{0,im}}$  sind. Das zweite Unterkapitel diskutiert primäre Prozesse, also Anfangssättigungen  $S_{\text{w}} = 0$  bzw.  $S_{\text{w}} = 1$ . Die Sättigungen der nichtperkolierenden Phasen sind dabei jeweils null. Diese erfordern die Verwendung der modifizierten Grenzsättigungen aus Gleichung (3.9), die sich nur in Bereichen  $S_{\text{w}} < S_{\text{w,dr}}$  und  $S_{\text{w}} > 1 - S_{\text{0,im}}$  vom ursprünglich publizierten [Hilf 06a, Hilf 06b] unterscheidet.



**Abbildung 16.6:** Farbverlaufsbilder der Wassersättigung  $S_W(x, t)$  für sekundäre Prozesse mit einer Wasserblase in Abbildung (a) und einer Ölblase in Abbildung (b). Kapillar- und Grenzflächenterme wurden hier nicht berücksichtigt. Farbtafeln für die Sättigungen werden jeweils rechts der Abbildungen gegeben.

### 16.5.1 Sekundäre Prozesse

In diesem Unterkapitel wird die Dynamik einer Wasser- bzw. Ölblase, die von Öl- bzw. Wasser umströmt wird, diskutiert. Dabei ist die Sättigung neben der Blase nicht 100% des anderen Fluids. Vielmehr ist Restsättigung in nichtperkolierender Phase des Fluids der Blase vorhanden. Im DBRMMWBL-Modell würde dies durch eine effektive Sättigung von jeweils 100% beschrieben werden und die Dynamik würde sich nur marginal von der Dynamik der im nächsten Kapitel diskutierten primären Prozesse unterscheiden. Im untersuchten Modell unterscheiden sich die Lösungen für die beiden Prozesse jedoch deutlich. Hier wird zunächst die Dynamik einer Wasserblase, die von Öl umgeben ist und die Dynamik einer Ölblase, die von Wasser umgeben ist, bei Vernachlässigung der Kapillar- und Grenzflächenterme verglichen. Anschließend wird noch anhand der Ölblase diskutiert, welchen Einfluss Kapillar- und Grenzflächenkräfte auf den Sättigungsverlauf während des Experiments haben.

Abbildung 16.6<sup>2</sup> zeigt Farbverlaufsbilder der Wassersättigung  $S_W(x, t)$  für sekundäre Prozesse mit einer Wasserblase in Abbildung 16.6a und einer Ölblase in Abbildung 16.6b. Kapillar- und Grenzflächenterme wurden hier nicht berücksichtigt. Es sei darauf hingewiesen, dass die unterschiedlichen Sättigungsgrade der Blase keine speziellen Eigenschaften von Wasser oder Öl repräsentieren, sondern lediglich der Veranschaulichung der Dynamik unterschiedlicher Sättigungsgrade dienen.

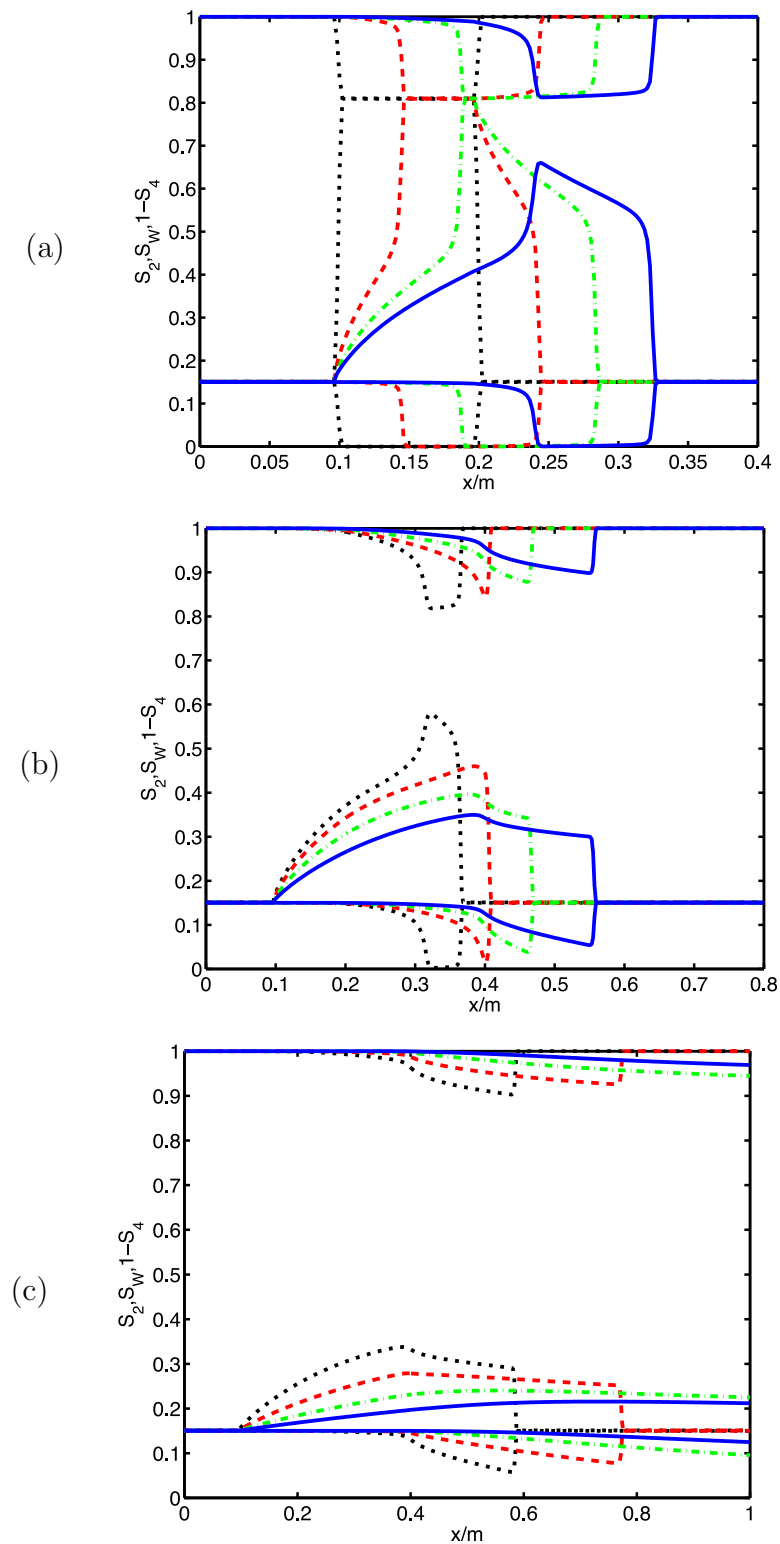
<sup>2</sup>Die Lösungen in den Abbildungen 16.6-16.8 wurden mit SimBL berechnet.

Bei der Wasserblase in Abbildung 16.6a erkennt man am unteren Rand den linearen Verlauf der beiden Wellen, die an den Rändern der Blase entstehen. Die Ausbreitung geschieht also zunächst mit konstanter Geschwindigkeit. In dem Moment, in dem die hintere Welle den rechten Rand der ursprünglichen Blase erreicht, trifft sie jedoch nicht mehr auf konstante Sättigungen stromabwärts der Welle, sondern auf den Verdünnungsfächer der vorderen Welle. Daher ist ihre Geschwindigkeit nicht mehr konstant. Sie wird schneller und holt nach einiger Zeit die vordere Welle ein. Bei der vereinigten Welle nimmt die Sättigung stromaufwärts im Laufe der Zeit ab, da nicht genügend Wasser nachfließt. Damit wird ihre Geschwindigkeit ebenfalls zeitabhängig und nimmt ab. Bemerkenswert ist, dass man den Ort des Auftreffens der hinteren Welle auf die vordere Welle noch einige Zeit später im Farbverlaufsbild an einem Grat parallel zur Zeitachse erkennen kann. Außerdem ist der Verdünnungsfächer der hinteren Welle gerade für große Zeiten deutlich erkennbar.

Die Dynamik für die Ölblase in Abbildung 16.6b ist ähnlich, unterscheidet sich jedoch auch in einigen Punkten. Es sei jedoch bekräftigt, dass dies nicht direkt an den unterschiedlichen Fluideigenschaften festzumachen ist. Vielmehr liegt der Grund darin, dass die anfängliche Ölsättigung der Blase mit 45% deutlich geringer gewählt wurde, als bei der Wasserblase in Abbildung 16.6a. Aufgrund der geringeren Sättigung bildet sich in der hinteren Welle keine Stoßwelle aus. Eine scharfe Kante ist im Farbverlaufsbild nicht zu erkennen. Die Stoßwelle der vorderen Welle bewegt sich mit konstanter Geschwindigkeit bis sie die schnellste Charakteristik der hinteren Verdünnungswelle eingeholt hat. Ein Grat an der Stelle des Auftreffens ist nicht zu erkennen. Dafür sieht man den anfänglichen rechten Rand der Blase noch einige Zeit als Grat parallel zur Zeitachse.

Sättigungsprofile bei der Umströmung einer Wasserblase werden in Abbildung 16.7 zu ausgewählten Zeitpunkten für verschwindende Kapillar- und Grenzflächenkräfte gezeigt. Jeder Graph dieser Abbildung zeigt Profile zu vier ausgewählten Zeitpunkten. Die Abbildungen zeigen die Dynamik der Wasserblase, die bereits anhand der Farbverlaufsbilder in Abbildung 16.6a diskutiert wurde, mit einer stärkeren Gewichtung der Profilform.

Zu Beginn des Prozesses (Abbildung 16.7a) laufen zwei Verdünnungsstoßwellen von den beiden Unstetigkeitsstellen der Anfangsbedingungen aus nach rechts mit der Strömung. Die Ausbreitungsgeschwindigkeit der Stoßwelle ist konstant, was an dem gleichen Abstand zwischen rot gestrichelten und schwarz gepunkteten vertikalen Kurventeilen auf der einen Seite und zwischen grün gestrichpunkteten und rot gestrichelten vertikalen Kurventeilen auf der anderen Seite ersichtlich wird. Zum Zeitpunkt  $t = 2.4 d$  (blau durchgezogene Kurve) hat die hintere Welle die Position des rechten Randes der Blase zu Beginn des Experiments erreicht und die Geschwindigkeit der Stoßwelle hat zugenommen. Dies wird am größeren Abstand



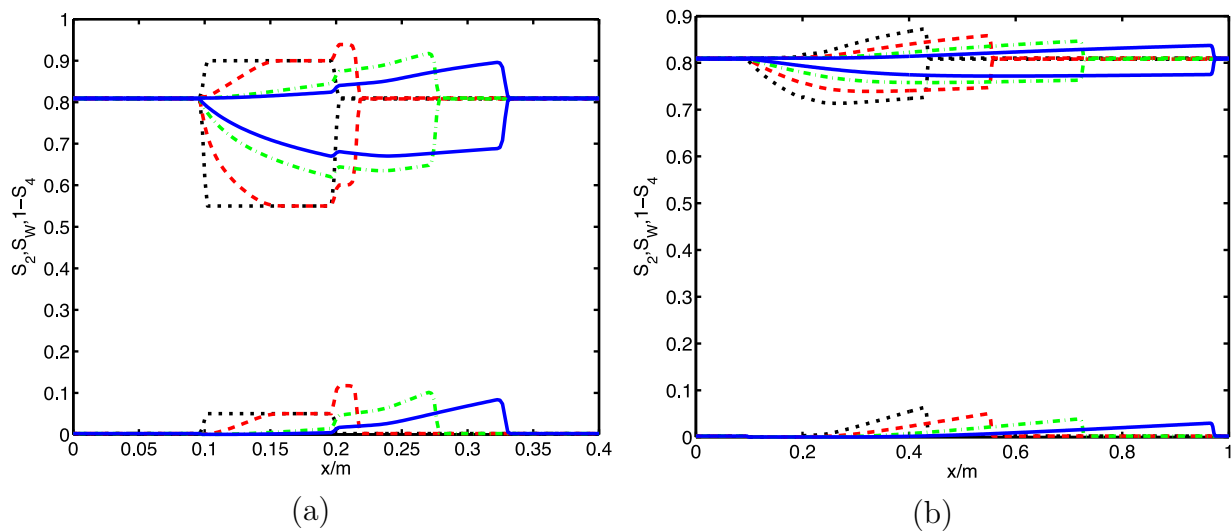
**Abbildung 16.7:** Sättigungsprofile bei der Umströmung einer Wasserblase zu ausgewählten Zeitpunkten für verschwindende Kapillar- und Grenzflächenkräfte. Jede Abbildung zeigt Profile zu vier ausgewählten Zeitpunkten. Die chronologische Reihenfolge der Profile geht dabei von schwarz gepunkteten über rot gestrichelten und grün gestrichpunkteten zu blau durchgezogenen Kurven. Abbildung (a) zeigt Sättigungsprofile zu den Zeitpunkten  $t = 0$  d,  $t = 0.08$  d,  $t = 0.16$  d und  $t = 0.24$  d, Abbildung (b) zu den Zeitpunkten  $t = 0.32$  d,  $t = 0.4$  d,  $t = 0.56$  d und  $t = 0.88$  d, und Abbildung (c) zu den Zeitpunkten  $t = 1$  d,  $t = 2$  d,  $t = 4$  d und  $t = 8$  d.

zwischen den linken vertikalen Kurventeilen der grün gestrichelten und blau durchgezogenen Kurven deutlich. Die rechte Welle hat davon noch nichts “erfahren” und bewegt sich weiter mit konstanter Geschwindigkeit. Dies wird am weiterhin gleich bleibendem Abstand der entsprechenden Kurventeile deutlich. In dieser Abbildung wird außerdem deutlich, wie nichtperkolierendes Öl durch die Bewässerungswelle produziert wird. Die Entwässerungswelle reduziert die Menge an nichtperkolierendem Öl wieder deutlich. Umgekehrt wird nichtperkolierendes Wasser zunächst vernichtet und anschließend wieder produziert.

Abbildung 16.7b stellt die Vereinigung der beiden Wellen dar. Hier sei vor allem das Maximum an der Stelle des Auftreffens der hinteren Welle auf die vordere Welle hervorgehoben. Der Abstand der Wellen zueinander kann hier nicht direkt als Geschwindigkeit interpretiert werden, da zur besseren Darstellung der Profileigenschaften die Zeitschritte nicht äquidistant gewählt wurden.

Abbildung 16.7c zeigt den Zeitraum des Experiments, während dessen die Welle den rechten Rand der Säule erreicht. Die Blase ist dabei über den gesamten Bereich stromabwärts ihrer ursprünglichen Position ausgeschmiert. Es sei an dieser Stelle nochmals auf die Abwesenheit von diffusiven Kräften im diskutierten Limes des Modells hingewiesen. Dieses Ausschmieren geschieht allein durch den nichtlinearen Charakter der Wellen. Außerdem wird in dieser Abbildung dargestellt, wie der Verdünnungsfächer der hinteren Entwässerungswelle langsam das Maximum der Vereinigung der Stoßwellen abträgt und der Grat in Abbildung 16.6a verschwindet. In dieser Abbildung nicht mehr dargestellt ist das Sättigungsprofil für  $t \rightarrow \infty$ . Es lässt sich jedoch erkennen, dass die Blase bis auf die residuale Fluidmenge aus der Säule gepumpt werden kann, auch wenn die Säule dafür aufgrund der nichtlinearen Mobilitäten sehr lange durchströmt werden muss.

Abbildung 16.8 zeigt Sättigungsprofile bei der Umströmung einer Ölblase zu ausgewählten Zeitpunkten für verschwindende Kapillar- und Grenzflächenkräfte. In der Abbildung 16.8a ist zu sehen, wie sich an der rechten Seite der Blase eine reine Stoßwelle und an der linken Seite ein reiner Verdünnungsfächer ausbildet. Es ist außerdem zu sehen, wie nahezu unmittelbar nachdem die Entwässerungsfront über eine Stelle hinweggelaufen ist erneut eine Bewässerung einsetzt. Durch die Bewässerung wird nichtperkolierendes Öl produziert und die nichtperkolierende Wassersättigung verringert. Im Gegensatz zur diskutierten Wasserblase bleibt hier die Unstetigkeit am rechten Rand der Blase noch länger sichtbar. Dies lässt sich dadurch erklären, dass eine Stoßwelle immer irreversibel ist und quasi Information über die Vergangenheit vernichtet. Da hier - im Gegensatz zur vorher diskutierten Wasserblase - die hintere Welle ein reiner Verdünnungswelle ist, bleibt die Vergangenheit erkennbar. Der zweite Teil der Dynamik, der in Abbildung 16.8b dargestellt wird, unterscheidet sich qualitativ nicht



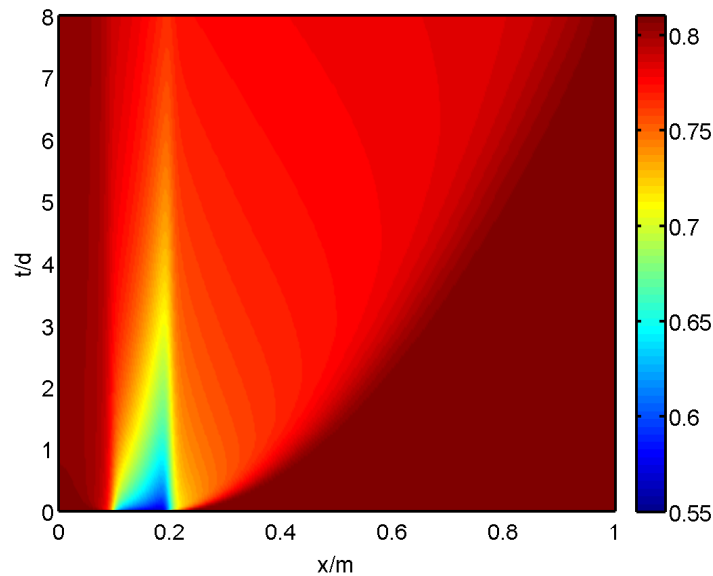
**Abbildung 16.8:** Sättigungsprofile bei der Umströmung einer Ölblase zu ausgewählten Zeitpunkten für verschwindende Kapillar- und Grenzflächenkräfte. Jede Abbildung zeigt Profile zu vier ausgewählten Zeitpunkten. Die chronologische Reihenfolge der Profile geht dabei von schwarz gepunkteten über rot gestrichelten und grün gestrichelten zu blau durchgezogenen Kurven. Abbildung (a) zeigt Sättigungsprofile zu den Zeitpunkten  $t = 0$  d,  $t = 0.04$  d,  $t = 0.2$  d und  $t = 0.4$  d und Abbildung (b) zu den Zeitpunkten  $t = 1$  d,  $t = 2$  d,  $t = 4$  d und  $t = 8$  d.

von dem in Abbildung 16.7c gezeigten Ausschnitt der Dynamik der Wasserblase.

Abbildung 16.9<sup>3</sup> zeigt Farbverlaufsbilder der Wassersättigung  $S_W(x, t)$  für sekundäre Prozesse mit einer Ölblase, wobei Kapillar- und Grenzflächenkräfte berücksichtigt werden. Die Parameter für Kapillar- und Grenzflächenterme sind Tabelle 15.5 entnommen und entsprechen Parametersatz 1. Farbtafeln für die Sättigungen werden jeweils rechts der Abbildungen gegeben. Grundsätzlich ähneln sich der Farbverlauf für die Dynamik mit Berücksichtigung der Kapillar- und Grenzflächenkräfte aus Abbildung 16.9 und der Farbverlauf für die Dynamik ohne Berücksichtigung der Kapillar- und Grenzflächenkräfte aus Abbildung 16.6b. Im Gegensatz zu Abbildung 16.6b verbleibt jedoch eine erhöhte Ölsättigung sehr viel länger am ursprünglichen Ort der Blase. Das Medium vergisst demnach den Ort der Blase nicht so schnell. Dieses Phänomen wird in Kapitel 16.6 ausführlich diskutiert. Mit Berücksichtigung der Kapillar- und Grenzflächenkräfte ist der Bereich, den Öl aus der Blase erreicht hat, deutlich weniger scharf vom Bereich, der nichts von der Ölblase weiß, getrennt. Außerdem erreicht Öl aus der Blase auch in geringem Masse Bereiche stromaufwärts der ursprünglichen Position und ist weiter verteilt.

Abbildung 16.10 zeigt Sättigungsprofile zu ausgewählten Zeitpunkten mit Berücksichtigung von Kapillar- und Grenzflächenkräften. Auch die Sättigungsprofile mit Berücksichtigung der

<sup>3</sup>Die Lösungen in den Abbildungen 16.9 und 16.10 wurden mit FlmPSSS berechnet.



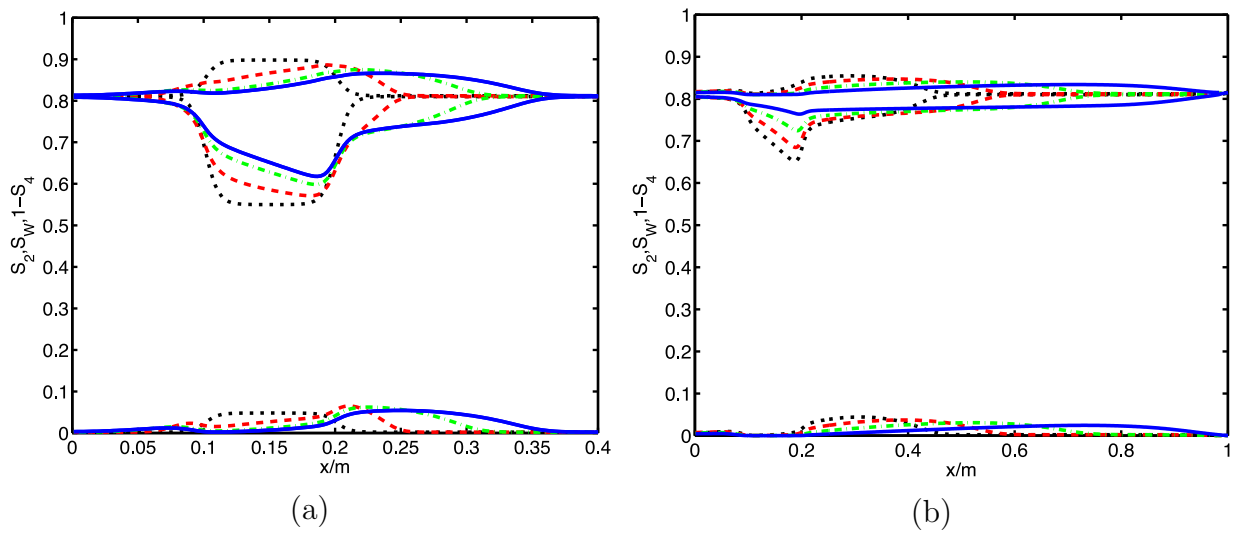
**Abbildung 16.9:** Farbverlaufsbilder der Wassersättigung  $S_W(x, t)$  für sekundäre Prozesse mit einer Ölblase. Die Parameter für Kapillar- und Grenzflächensterme entsprechen Parametersatz 1 aus Tabelle 15.5. Farbtafeln für die Sättigungen werden jeweils rechts der Abbildungen gegeben.

diffusiven Kapillar- und Grenzflächenkräfte ähneln grundsätzlich den Profilen ohne deren Berücksichtigung in Abbildung 16.8. Die Kanten sind jedoch deutlich weniger ausgeprägt und durch die Diffusion abgerundet. Außerdem fällt auf, dass die Entwässerung nicht durch eine scharfe Front geschieht, die von einer schwachen Bewässerung gefolgt wird. Ferner erreicht das Öl der Blase auch Bereiche stromaufwärts von der anfänglichen Position der Blase. Es bleibt auch festzuhalten, dass für  $t \rightarrow \infty$  die Ölsättigung in der Säule - mit und ohne Berücksichtigung der Kapillar- und Grenzflächenkräfte - durch den Wasserstrom bis auf die residuale Menge reduziert werden kann.

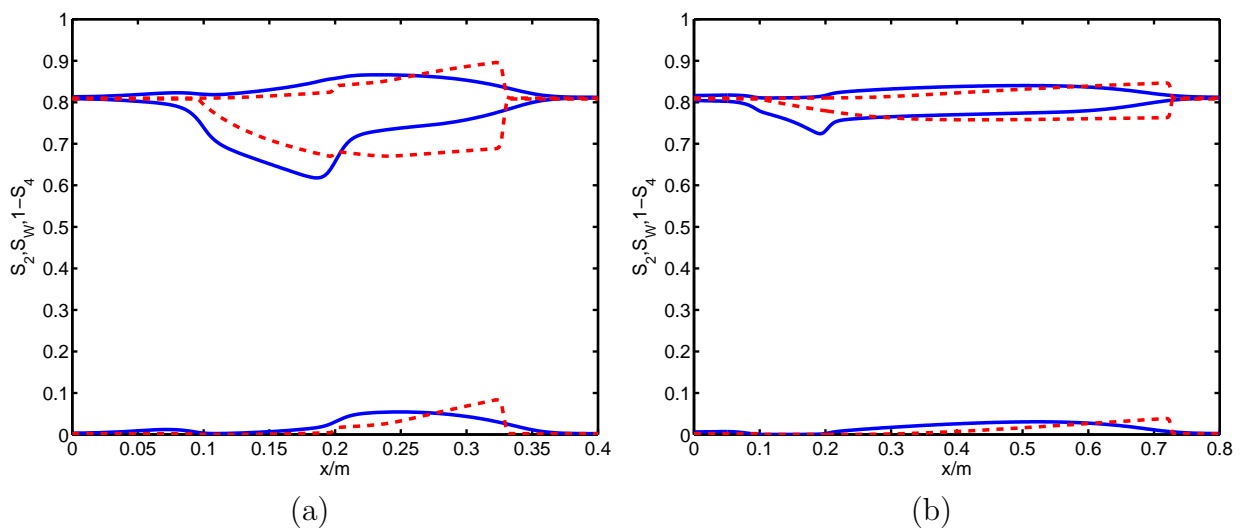
Abbildung 16.11<sup>4</sup> zeigt einen Vergleich der Sättigungsprofile mit und ohne Berücksichtigung der Kapillar- und Grenzflächenkräfte zu zwei ausgewählten Zeitpunkten, um die Unterschiede deutlich zu machen. Der Vergleich zeigt, dass die diffusiven Kräfte dafür sorgen, dass zunächst mehr Öl an seinem ursprünglichen Ort zurückbleibt und damit erst deutlich später den rechten Rand der Säule erreicht. Versteht man das Anfangs- und Randwertproblem als einfaches Modell zur Altlastensanierung, bedeutet dies, dass man für eine möglichst effektive Sanierung frühzeitig anfangen und mit großen Volumenströmen arbeiten sollte, um den Einfluss der Diffusion gering zu halten.

<sup>4</sup>Die Lösungen in Abbildungen 16.11 wurden mit FlmPSSS (blau durchgezogene Kurven) bzw. SimBL (rot gestrichelte Kurven) berechnet.





**Abbildung 16.10:** Sättigungsprofile zu ausgewählten Zeitpunkten mit Berücksichtigung von Kapillar- und Grenzflächenkräften. Jede Abbildung zeigt Profile zu vier ausgewählten Zeitpunkten. Die chronologische Reihenfolge der Profile geht dabei von schwarz gepunkteten über rot gestrichelten und grün gestrichpunkteten zu blau durchgezogenen Kurven. Abbildung (a) zeigt Sättigungsprofile zu den Zeitpunkten  $t = 0$  d,  $t = 0.04$  d,  $t = 0.2$  d und  $t = 0.4$  d und Abbildung (b) zu den Zeitpunkten  $t = 1$  d,  $t = 2$  d,  $t = 4$  d und  $t = 8$  d.



**Abbildung 16.11:** Vergleich von Sättigungsprofilen mit (blau durchgezogene Kurven) und ohne (rot gestrichelte Kurven) Berücksichtigung von Kapillar- und Oberflächenkräften. Abbildung (a) zeigt einen Vergleich bei  $t = 0.4$  d und Abbildung (b) bei  $t = 4$  d.

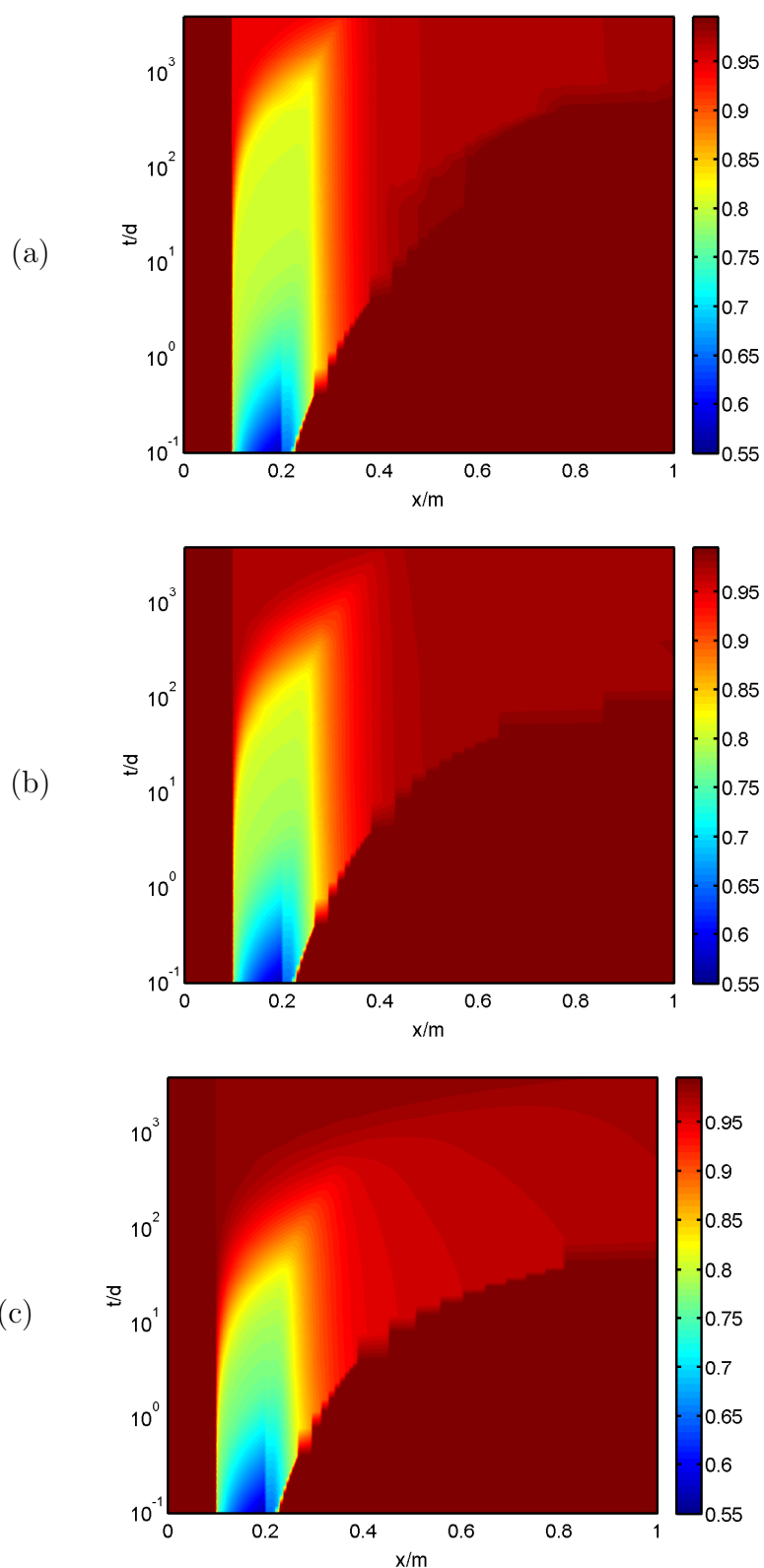
### 16.5.2 Primäre Prozesse

In diesem Unterkapitel wird die Dynamik einer Ölblase, die von Wasser umströmt wird, diskutiert. Die Ölblase mit einer Ölsättigung von 45% befindet sich dabei in einem 100% wassergesättigtem porösen Medium. Dieses Experiment modelliert eine Kontamination von Grundwasser deutlich realistischer als die im vorangehenden Kapitel diskutierten sekundären Prozesse. Durch das Umströmen wird die Blase wie bei sekundären Prozessen bewegt. Allerdings kann es nun passieren, dass auch an Stellen, an denen die Wassersättigung  $S_{\text{W}} > 1 - S_{\text{Oim}}$  ist, durch viskose Kopplung und andere Prozesse eine Bewässerung induziert wird. Die ursprünglich vorgeschlagenen charakteristischen Sättigungen  $S_{\text{W}}^*, S_{\text{O}}^*, S_2^*, S_4^*$  im Massenaustauschterm [Hilf 06a] versagen in solchen Fällen und die modifizierte Variante aus Gleichung (3.9) wird verwendet. Diese besitzen einen weiteren Parameter  $\epsilon_{\text{M}}$ , der beschreibt, wie sehr in den Bereichen  $S_{\text{W}} > 1 - S_{\text{Oim}}$  Öl und in Bereichen  $S_{\text{W}} < S_{\text{Wdr}}$  Wasser in nichtperkolierende Phasen zerreit.

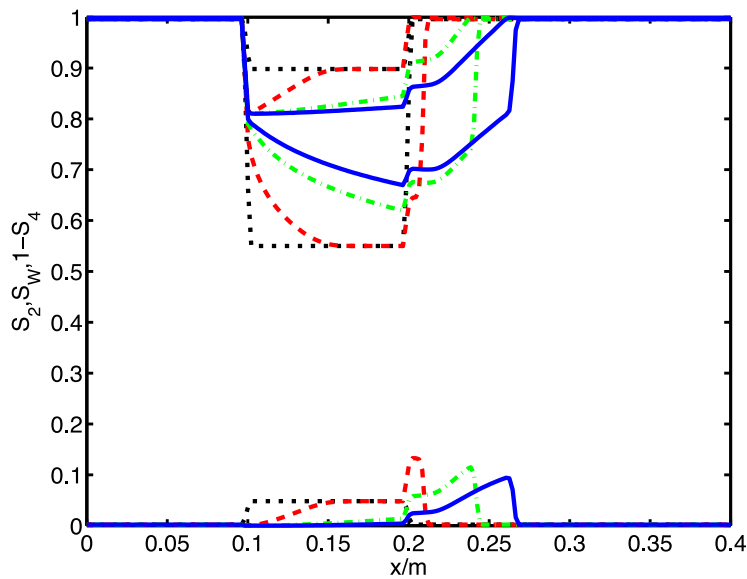
Es wird zunchst der Effekt des Parameters  $\epsilon_{\text{M}}$  unter Vernachlssigung der Kapillar- und Grenzflchenkrfte diskutiert. Am Ende des Kapitels wird fr einen Wert des Parameters noch untersucht, welchen Einfluss diese Kapillar- und Grenzflchenterme auf die Lsung des primren Umstrmproblems haben.

Abbildung 16.12<sup>5</sup> zeigt die Entwicklung der Wassersttigung fr das primre Umstrmen einer Ölblase fr verschwindende Kapillar- und Grenzflchenterme und unterschiedliche Parameter  $\epsilon_{\text{M}}$ . Die Zeitachse ist logarithmisch skaliert, um die ganze Dynamik in jeweils einem Bild darstellen zu knnen. Am Anfang des Experiments, solange die Sttigungen in der Blase kleiner  $S_{\text{W}} < 1 - S_{\text{Oim}} = 0.81$  sind, unterscheiden sich die Verlufe der drei unterschiedlichen Parameter nicht. Qualitativ treten sogar dieselben Phnomene wie bei der sekundren Umstrmung in Abbildung 16.6b auf. Ist die Wassersttigung grer  $S_{\text{W}} > 1 - S_{\text{Oim}} = 0.81$  und findet dennoch Bewsserung statt, so wirkt sich der Wert des Parameters  $\epsilon_{\text{M}}$  auf die Dynamik aus. Fr kleine Werte (z.B.  $\epsilon_{\text{M}} = 0.05$  in Abbildung 16.12a) kommt die Dynamik in diesem Sttigungsbereich nahezu zum Erliegen. Die Konturen des Farbverlaufs verlaufen weitgehend parallel und die Wassersttigung nimmt rechts nur ab, weil noch Öl von der Ölblase mit Sttigung  $S_{\text{W}} < 0.81$  nachstrmt. Auch fr  $\epsilon_{\text{M}} = 0.1$  in Abbildung 16.12b erreicht nur sehr wenig Öl den rechten Rand und die Blase bleibt sehr lange erhalten. Allerdings erreicht das erste Öl den rechten Rand nach einem Zehntel der Zeit, die es fr  $\epsilon_{\text{M}} = 0.05$  bentigt hat. In beiden Fllen kann man jedoch feststellen, dass es im betrachteten Zeitraum nicht mglich ist, die Ölblase aus dem System zu strmen. Fr  $\epsilon_{\text{M}} = 0.2$  in Abbildung 16.12c ist dies mglich. Am Ende des betrachteten Zeitraums ist die Sttigung in der ganzen Sule

<sup>5</sup>Die Lsungen in den Abbildungen 16.12-16.14 wurden mit SimBL berechnet.



**Abbildung 16.12:** Farbverlaufsbilder der Wassersättigung für das primäre Umströmen einer Ölblase für verschwindende Kapillar- und Grenzflächenterme. Eine Farbtabelle für die Wassersättigung wird jeweils rechts der Abbildung gegeben. Die Zeitachse ist logarithmisch skaliert. Abbildung (a) zeigt ein Farbverlaufsbild für  $\epsilon_M = 0.05$ , Abbildung (b) für  $\epsilon_M = 0.1$  und Abbildung (c) für  $\epsilon_M = 0.2$ .

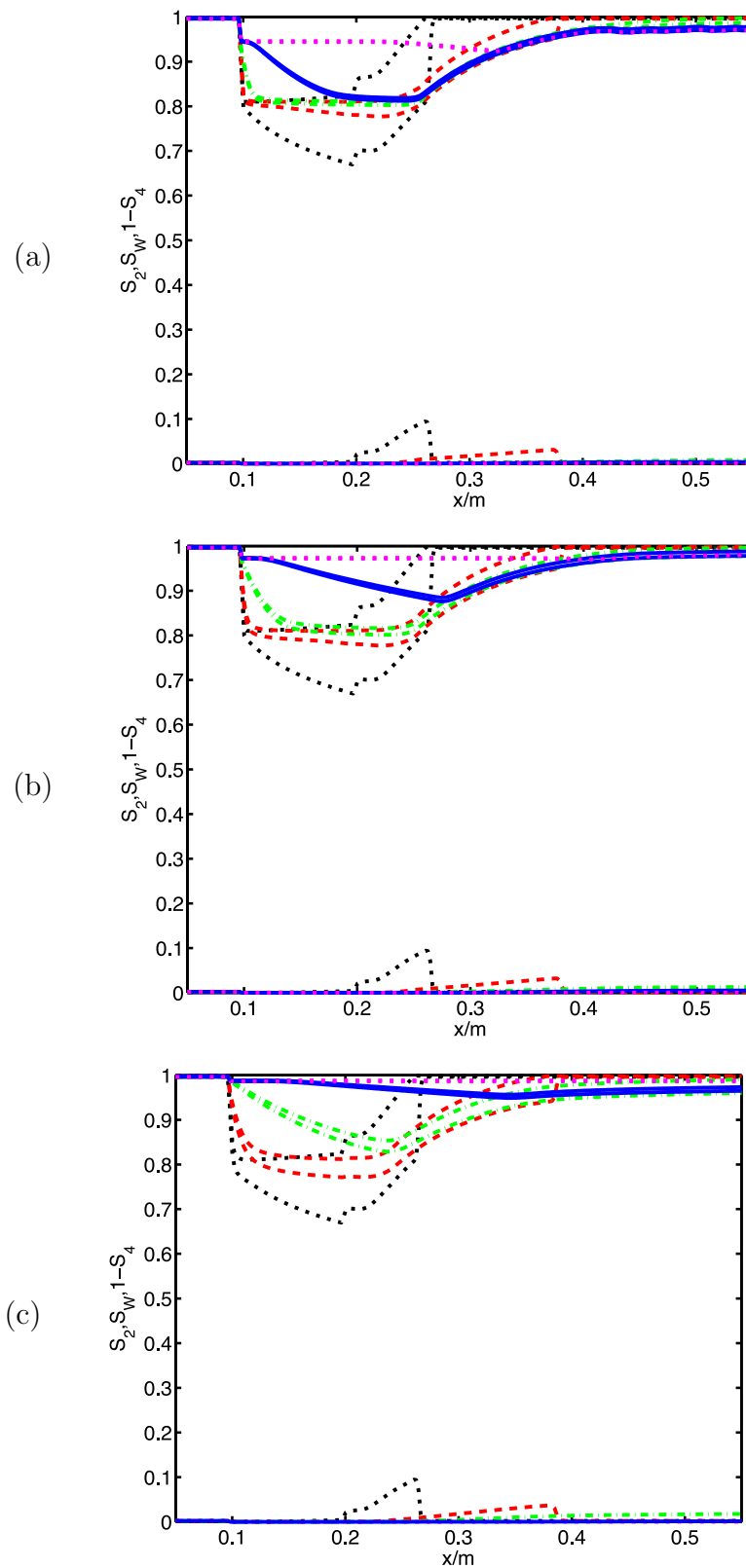


**Abbildung 16.13:** Sättigungsprofile für das primäre Umströmen einer Ölblase. Gezeigt werden Profile zum Zeitpunkt  $t = 0$  d (schwarz gepunktete Kurven),  $t = 0.04$  d (rot gestrichelte Kurven),  $t = 0.2$  d (grün gestrichpunktete Kurven) und  $t = 0.4$  d (blau durchgezogene Kurven). Die Profile sind unabhängig von  $\epsilon_M$ .

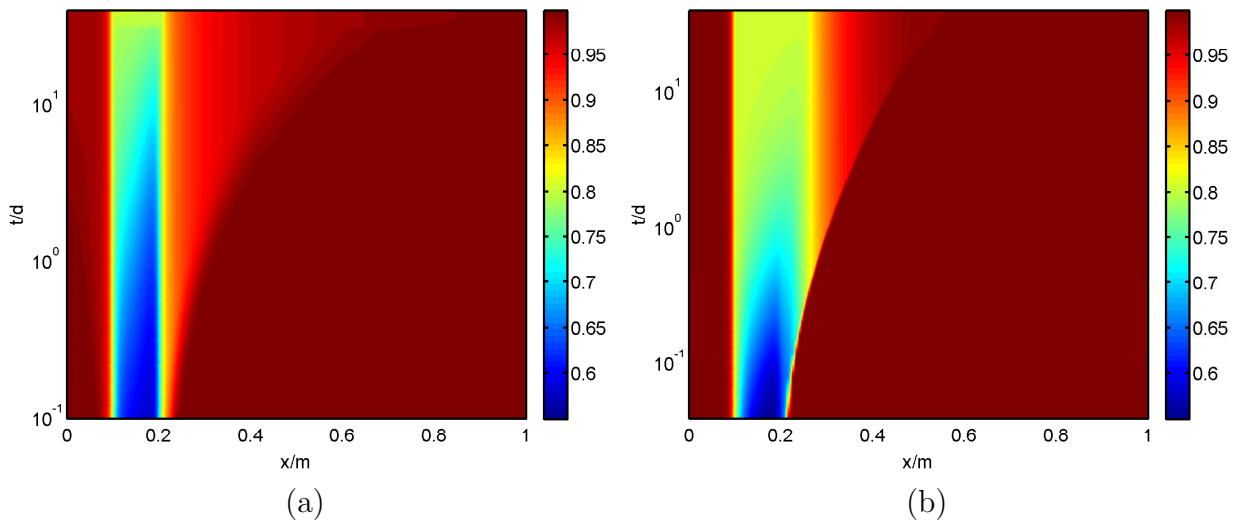
nahezu  $S_W = 1$ , denn eine Dynamik war auch noch für  $S_W > 1 - S_{\text{Oim}} = 0.81$  möglich. Dies wird durch Konturen, die nicht parallel zur Zeitachse verlaufen, ersichtlich.

Anhand von Sättigungsprofilen zu ausgewählten Zeitpunkten wird nun das eben Diskutierte mit einer stärkeren Gewichtung der Profilform erläutert. Dabei wird zunächst der Anfang des Umströmens diskutiert. Anschließend wird der Einfluss des Parameters  $\epsilon_M$  auf die Profile zu späteren Zeitpunkten erläutert. Abbildung 16.13 zeigt Sättigungsprofile für das primäre Umströmen einer Ölblase zu Beginn des Experiments. Da die Profile unabhängig von  $\epsilon_M$  sind, wird pro Zeitpunkt nur jeweils ein Tripel  $(S_W, S_2, 1 - S_4)$  gezeigt. Die Profile zeigen qualitativ dieselben Eigenschaften, die beim sekundären Umströmen anhand Abbildung 16.8a diskutiert wurden.

Abbildung 16.14 zeigt Sättigungsprofile für das primäre Umströmen einer Ölblase zu einem späteren Zeitpunkt im Experiment. Abbildung 16.14a zeigt, dass sobald die Ölsättigung bei einer Bewässerung den Wert  $S_{\text{Oim}}$  unterschreitet, bei  $\epsilon_M = 0.05$  nahezu das komplette Öl in nichtperkolierendes Öl verwandelt wird. Man betrachte hierzu die Entwicklung der Kurven von schwarz gepunktet über rot gestrichelt bis grün gestrichpunktet. Erst für extrem große Zeitskalen (blau durchgezogene und pink gepunktete Kurven) wird deutlich, dass ein geringer Anteil des Öls perkolierend bleibt und somit durch viskose Kopplung nach rechts in der Säule transportiert werden kann. Allerdings bleibt auch nach  $t = 4000$  d ein bedeutender Anteil der Ölblase in der Säule.



**Abbildung 16.14:** Sättigungsprofile für das primäre Umströmen einer Ölblase. Gezeigt werden Profile zum Zeitpunkt  $t = 0.4$  d (schwarz gepunktete Kurven),  $t = 4$  d (rot gestrichelte Kurven),  $t = 40$  d (grün gestrichelpunktete Kurven),  $t = 400$  d (blau durchgezogene Kurven) und  $t = 4000$  d (pink gepunktete Kurven). Abbildung (a) zeigt Profile für  $\epsilon_M = 0.05$ , Abbildung (b) für  $\epsilon_M = 0.1$  und Abbildung (c) für  $\epsilon_M = 0.2$ .



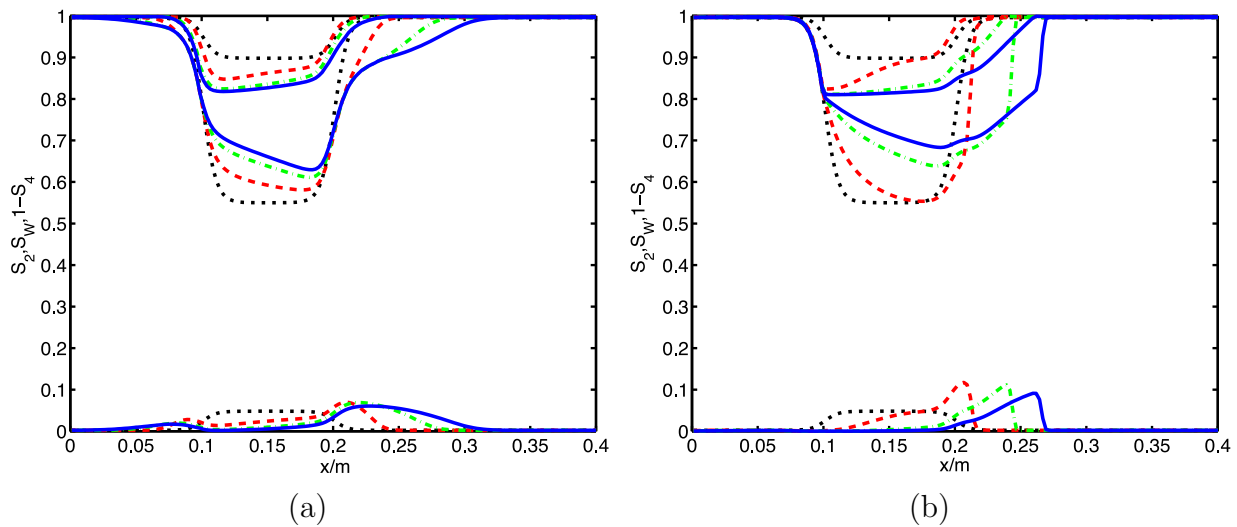
**Abbildung 16.15:** Farbverlaufsbilder der Wassersättigung für das primäre Umströmen einer Ölblase unter Berücksichtigung der Kapillar- und Grenzflächenterme in Abbildung (a) und unter Vernachlässigung der Kapillar- und Grenzflächenterme in Abbildung (b) für  $\epsilon_M = 0.01$ . Farbtafeln sind jeweils rechts der Abbildung angegeben.

Abbildung 16.14b zeigt Profile für  $\epsilon_M = 0.1$ . Zu Beginn ist nahezu dasselbe Verhalten wie für  $\epsilon_M = 0.05$  in Abbildung 16.14a zu beobachten. Erst nach langer Zeit werden die Unterschiede deutlich. Bei  $t = 4000$  d ist die Säule nahezu vollständig von Öl befreit.

Für  $\epsilon_M = 0.2$  ist in Abbildung 16.14c ein deutlicher Unterschied zu den Profilen für  $\epsilon_M = 0.05$  und  $\epsilon_M = 0.1$  zu erkennen. In diesem Fall bleibt immer ein deutlich sichtbarer Anteil von Öl perkolierend, so dass das Öl deutlich schneller den rechten Rand der Säule erreicht. Vergleicht man die blau durchgezogenen Profile in Abbildung 16.14c mit den pink gepunkteten in Abbildung 16.14a so stellt man fest, dass für  $\epsilon_M = 0.2$  zum Zeitpunkt  $t = 400$  d weniger Öl in der Säule ist als für  $\epsilon_M = 0.05$  zum Zeitpunkt  $t = 4000$  d.

Der Parameter  $\epsilon_M$  ermöglicht also die Modellierung des von Experimentatoren beschriebenen Phänomens, dass durch langes Pumpen von Wasser durch ein poröses Medium, eine nahezu 100% Wassersättigung erzielt werden kann. Residuale Sättigungen gibt es also bei genauer Betrachtung nicht. Der Zeitraum, der zum Erreichen dieser Sättigungen benötigt wird, kann jedoch um einige Größenordnungen größer sein, als die Zeiträume, in denen die übrigen Phänomene beobachtet werden.

Abschließend wird der Einfluss der Kapillar- und Grenzflächenkräfte auf die Dynamik bei der primären Umströmung einer Ölblase untersucht. Dazu werden die Ergebnisse für  $\epsilon_M = 0.01$  mit und ohne Kapillar- und Grenzflächenterme miteinander verglichen.



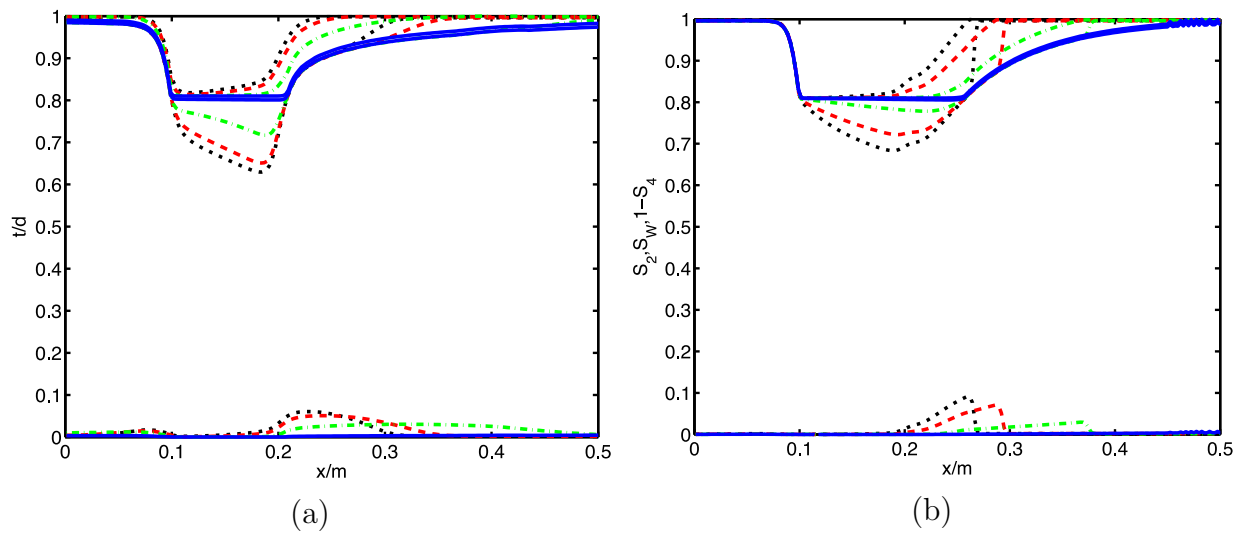
**Abbildung 16.16:** Sättigungsprofile für das primäre Umströmen einer Ölblase unter Berücksichtigung der Kapillar- und Grenzflächenterme in Abbildung (a) und unter Vernachlässigung der Kapillar- und Grenzflächenterme in Abbildung (b) für  $\epsilon_M = 0.01$ . Gezeigt werden Profile zum Zeitpunkt  $t = 0.0$  d (schwarz gepunktete Kurven),  $t = 0.04$  d (rot gestrichelte Kurven),  $t = 0.2$  d (grün gestrichelpunktete Kurven) und  $t = 0.4$  d (blau durchgezogene Kurven).

Abbildung 16.15<sup>6</sup> zeigt die Entwicklung der Wassersättigung  $S_W(x, t)$  für das primäre Umströmen einer Ölblase unter Berücksichtigung der Kapillar- und Grenzflächenterme in Abbildung 16.15a und unter Vernachlässigung der Kapillar- und Grenzflächenterme in Abbildung 16.15b für  $\epsilon_M = 0.01$ .

Grundsätzlich ähneln sich auch die Farbverlaufsbilder für das primäre Umströmen mit und ohne Berücksichtigung der Kapillar- und Grenzflächenkräfte. Wie auch bei der sekundären Umströmung bleibt eine hohe Ölsättigung am Ort der Ölblase länger erhalten, wenn die diffusiven Terme berücksichtigt werden und Öl erreicht ebenfalls wieder in geringem Maße Bereiche stromaufwärts der Blase. Wie zu erwarten war, sind auch die Kanten deutlich ausgeschmiert. Es sei noch angemerkt, dass die Ölsättigung im Bereich rechts der Blase gegen Ende des gezeigten Zeitraums wieder abnimmt. Dies erkennt man an den nach links laufenden Konturen. Dies ist nur in ganz geringem Maße der Fall, wenn Kapillar- und Grenzflächenkräfte nicht berücksichtigt werden.

Abbildung 16.16 zeigt Sättigungsprofile für das primäre Umströmen einer Ölblase unter Berücksichtigung der Kapillar- und Grenzflächenterme in Abbildung 16.16a und unter Vernachlässigung der Kapillar- und Grenzflächenterme in Abbildung 16.16b für  $\epsilon_M = 0.01$ . Auch die Sättigungsprofile zu Beginn des Experiments bestätigen die Ähnlichkeiten zwischen primärem und sekundärem Umströmen, die anhand der Farbverlaufsbilder in Abbildung 16.15

<sup>6</sup>Die Lösungen in den Abbildungen 16.15-16.17 wurden mit FlmPSSS berechnet.

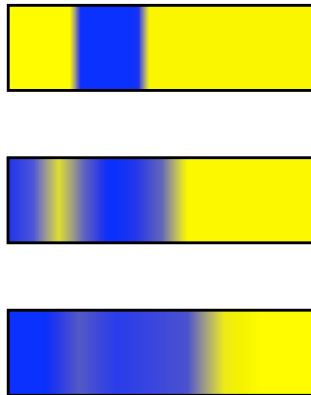


**Abbildung 16.17:** Sättigungsprofile für das primäre Umströmen einer Ölblase unter Berücksichtigung der Kapillar- und Grenzflächenterme in Abbildung (a) und unter Vernachlässigung der Kapillar- und Grenzflächenterme in Abbildung (b) für  $\epsilon_M = 0,01$ . Gezeigt werden Profile zum Zeitpunkt  $t = 0,4$  d (schwarz gepunktete Kurven),  $t = 0,8$  d (rot gestrichelte Kurven),  $t = 4$  d (grün gestrichelpunktete Kurven) und  $t = 40$  d (blau durchgezogene Kurven).

gefunden wurden. Die diffusiven Kräfte bewirken, dass die Ölblase länger an ihrem ursprünglichen Ort erkennbar ist. Außerdem breitet sie sich weiter aus. Abbildung 16.17 zeigt Sättigungsprofile für das primäre Umströmen einer Ölblase unter Berücksichtigung der Kapillar- und Grenzflächenterme in Abbildung 16.17a und unter Vernachlässigung der Kapillar- und Grenzflächenterme in Abbildung 16.17b für  $\epsilon_M = 0,01$ . Im Gegensatz zu den Sättigungsprofilen zu Beginn des Experiments, die in kompletter Analogie zur sekundären Umströmung diskutiert werden können und die einen deutlichen Unterschied zeigen, je nachdem ob die Kapillar- und Grenzflächenterme berücksichtigt werden, unterscheiden sich die Sättigungsprofile gegen später im Experiment nur quantitativ. Das Öl verteilt sich etwas weiter, wenn diffusive Terme berücksichtigt werden. Qualitativ unterscheiden sich die Profile jedoch nicht. Der Unterschied, der bei den Farbverläufen in Abbildung 16.15 diskutiert wurde, kann an den hier gezeigten Sättigungsprofilen aufgrund mangelnder zeitlicher Auflösung nicht festgestellt werden.



## 16.6 Vereinigung einer Wasserblase mit einer Wasserfront

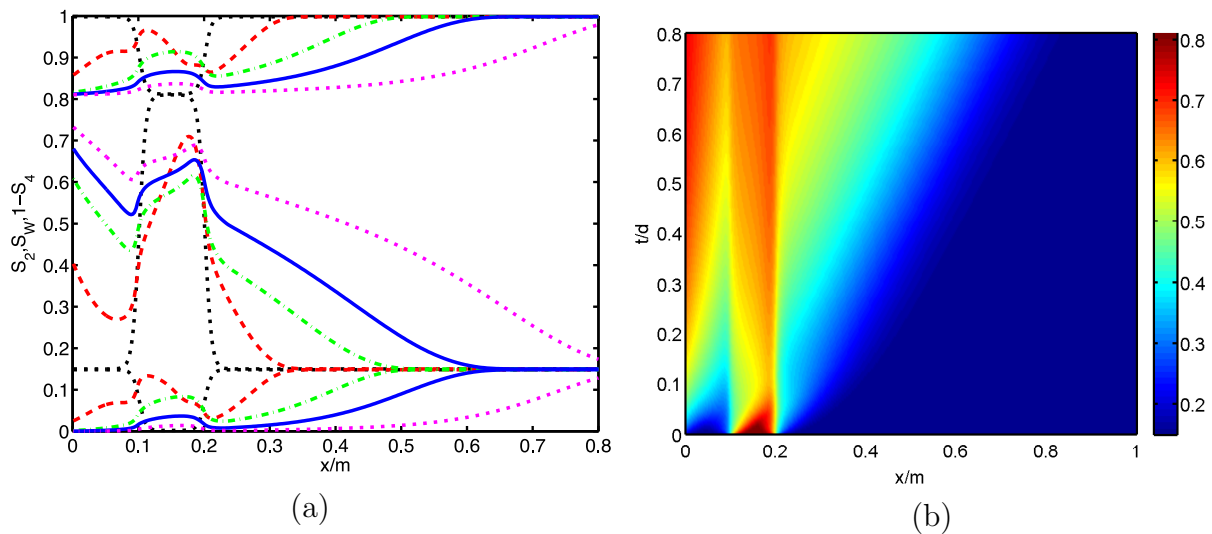


**Abbildung 16.18:** Schematische Darstellung der Vereinigung einer Wasserblase mit einer Wasserfront. Anfangs befindet sich eine Wasserblase in einem sonst ölgesättigtem porösen Medium. Bereiche mit hoher Wassersättigung werden blau dargestellt, Bereiche mit niedriger Sättigung gelb.

In diesem Unterkapitel werden numerische Lösungen zur Vereinigung einer Wasserblase diskutiert. Abbildung 16.18 stellt das Experiment schematisch dar. Anfangs befindet sich eine Wasserblase in einem sonst ölgesättigtem porösen Medium. Wasser wird von links in perkolierender Form mit  $q_{1\ell} = q_0 = q_{tot}$  in die Säule gepumpt und an der rechten Seite wird das dort vorhandene Gemisch so abgepumpt, dass die Volumenerhaltung gewährleistet ist. Durch den angelegten Volumenstrom dringt Wasser von links in die Säule ein und die Wasserblase wird verschoben. Die Wasserblase vergrößert dabei ihre Ausdehnung sowohl aufgrund der Nichtlinearitäten als auch aufgrund der Kapillar- und Grenzflächenkräfte. Im Laufe des Experiments erreicht das injizierte Wasser die Blase. Anhand dieses Experiments soll untersucht werden, welchen Einfluss Kapillar- und Grenzflächenkräfte auf die Vereinigung einer Wasserblase mit einer Wasserfront haben. Im Experiment hängen Be- und Entwässerung von Raum und Zeit ab. Dies stellt das DBRMMWBL-Modell vor große Schwierigkeiten.

Abbildung 16.19<sup>7</sup> zeigt die Vereinigung einer Wasserblase mit einer Wasserfront mit Kapillar- und Grenzflächenkräften. Anhand des rot gestrichelten Sättigungsprofils aus Abbildung 16.19a erkennt man, dass die Dynamik der Wasserblase zu Beginn des Experiments stark der Dynamik einer Blase unter Einfluss der Schwerkraft in einer geschlossenen Säule ähnelt. Hier kommt jedoch hinzu, dass von links eine stark ausgeschmierte Wasserfront in die Säule eindringt, die sich rasch mit der Blase vereinigt. Außerdem beschreibt beim hier gezeigten Experiment die fraktionale Flussfunktion den hyperbolischen advektiven Anteil, während in der geschlossenen Säule die fraktionale Mobilitätsfunktion den hyperbolisch advektiven Anteil beschreibt. Nach der Vereinigung der Front mit der Wasserblase bleibt diese weiterhin

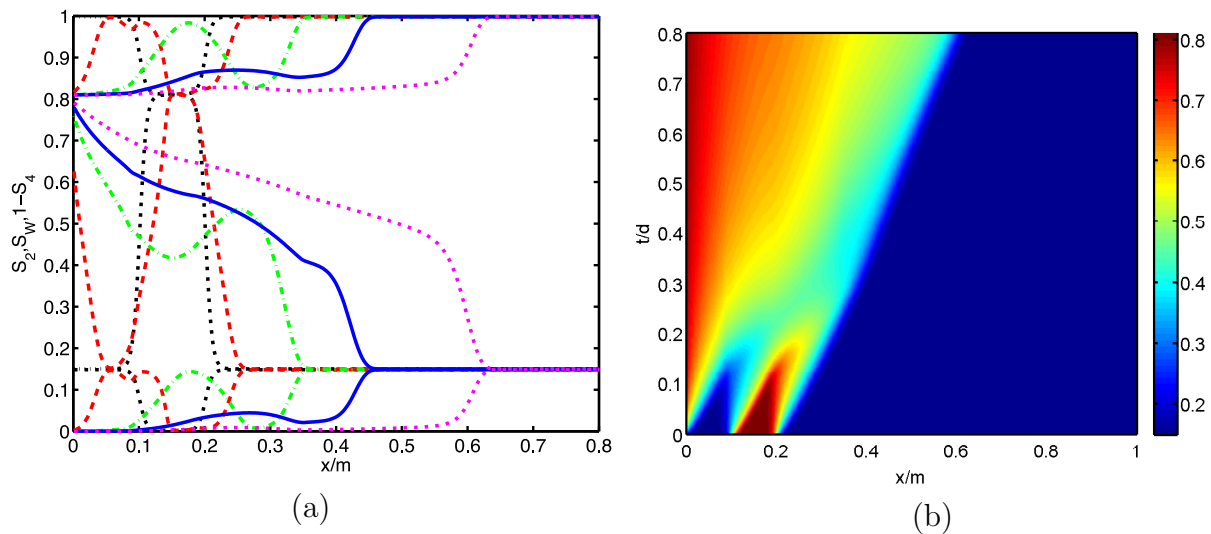
<sup>7</sup>Die Lösungen in den Abbildungen 16.19- 16.22 wurden mit FlmPSSS berechnet.



**Abbildung 16.19:** Vereinigung einer Wasserblase mit einer Wasserfront mit Kapillar- und Grenzflächenkräften. Abbildung (a) zeigt Sättigungsprofile zu den Zeitpunkten  $t = 0$  d (schwarz gepunktete Kurven),  $t = 0.04$  d (rot gestrichelte Kurven),  $t = 0.2$  d (grün gestrichpunktete Kurven),  $t = 0.4$  d (blau durchgezogene Kurven) und  $t = 0.8$  d (pink gepunktete Kurven). Abbildung (b) zeigt die Entwicklung der Wassersättigung  $S_{WW}(x, t)$  in Raum und Zeit als Farbverlauf. Eine Farbtabelle für die Sättigungen ist rechts gegeben. Die Parameter für Kapillar- und Grenzflächenkräfte entsprechen Parametersatz 1 aus Tabelle 15.5 und lauten  $P_a = 1.6 P_0$ ,  $P_b = 0.025 P_0$ ,  $P_2^* = 2.5 P_0$  und  $P_4^* = 0.4 P_0$  mit  $P_0 = 1$  kPa.

deutlich zu erkennen. Zwei Prozesse konkurrieren. Zum einen versuchen die Kapillar- und Grenzflächenkräfte Sättigungsgradienten zu verringern. Dies sorgt für ein Ausschmieren der Blase und eine Entwässerung im Bereich der Blase. Zum anderen fließt mehr Wasser von links nach als nach rechts abfließt. Dies sorgt für eine Bewässerung. So zeigt das blau durchgezogene Profil zum Zeitpunkt  $t = 0.4$  d durchweg größere Wassersättigungen als das grün gestrichpunktete zum Zeitpunkt  $t = 0.2$  d, während zuvor die Sättigung in der Blase noch abgenommen hat. Man vergleiche hierzu die Profile der schwarz gepunkteten, der rot gestrichelten und der grün gestrichpunkteten Kurven. Auch zum Zeitpunkt  $t = 0.8$  d, dargestellt als pink gepunktete Kurven, wenn die Front die Blase schon lange passiert hat, bleibt die ursprüngliche Position der Blase im Sättigungsprofil deutlich zu erkennen.

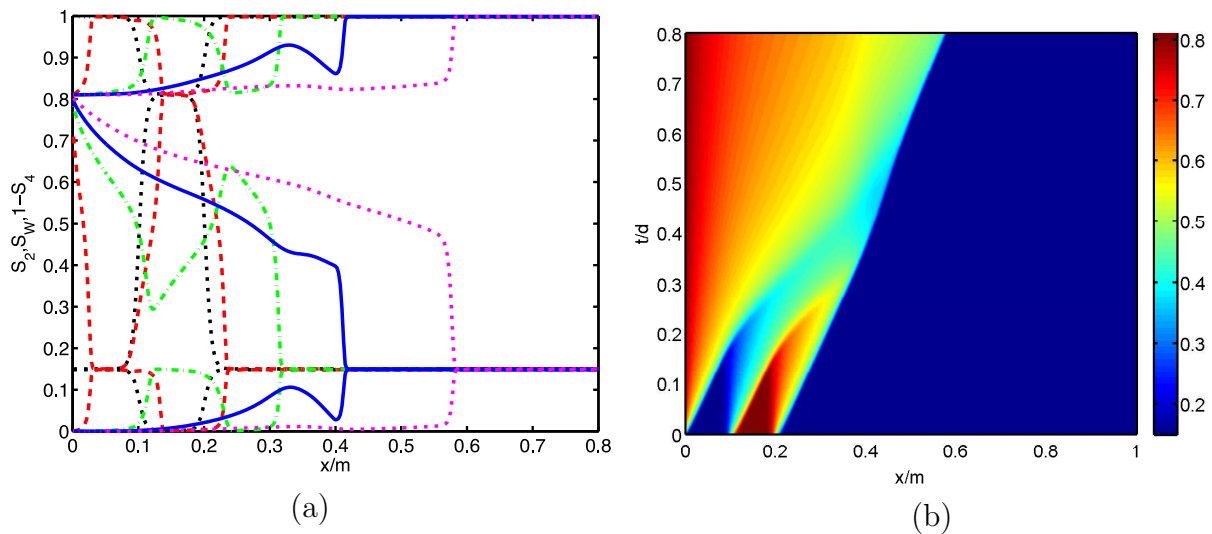
Das Farbverlaufsbild der Wassersättigung in Abbildung 16.19b zeigt dieselben Effekte mit einer stärkeren Gewichtung des zeitlichen Verlaufs. Die Wellen, die an den Unstetigkeiten  $x = 0$  m,  $x = 0.4$  m und  $x = 0.2$  m entstehen, sind deutlich zu erkennen, obwohl sie stark ausgeschmirt sind. Ferner sieht man klar markiert durch parallel zur Zeitachse verlaufende gelbe Konturen den Anfangsort der Blase über den gesamten dargestellten Zeitraum. Außerdem ist zu erkennen, wie die Sättigung in der Blase zunächst ab- und dann wieder zunimmt. Sie nimmt dabei zu, obwohl die Wassersättigung stromaufwärts von ihr geringer ist.



**Abbildung 16.20:** Vereinigung einer Wasserblase mit einer Wasserfront mit geringer Berücksichtigung von Kapillar- und Grenzflächenkräften. Abbildung (a) zeigt Sättigungsprofile zu den Zeitpunkten  $t = 0$  d (schwarz gepunktete Kurven),  $t = 0.04$  d (rot gestrichelte Kurven),  $t = 0.2$  d (grün gestrichelpunktete Kurven),  $t = 0.4$  d (blau durchgezogene Kurven) und  $t = 0.8$  d (pink gepunktete Kurven). Abbildung (b) zeigt die Entwicklung der Wassersättigung  $S_w(x,t)$  in Raum und Zeit als Farbverlauf. Eine Farbtabelle für die Sättigungen ist rechts gegeben. Die Parameter für Kapillar- und Grenzflächenkräfte entsprechen Parametersatz 1 aus Tabelle 15.5 und lauten  $P_a = 1.6 P_0, P_b = 0.025 P_0, P_2^* = 2.5 P_0$  und  $P_4^* = 0.4 P_0$  mit  $P_0 = 100$  Pa.

Abbildung 16.20 zeigt die Vereinigung einer Wasserblase mit einer Wasserfront mit geringer Berücksichtigung der Kapillar- und Grenzflächenkräfte. Im Gegensatz zu dem Fall, der in Abbildung 16.19 dargestellt wurde, “wissen” für geringere Kapillar- und Grenzflächenkräfte die Blase und die Front zum Zeitpunkt  $t = 0.04$  d (rot gestrichelte Kurven in Abbildung 16.20a) noch nichts von der Existenz der jeweils anderen. Die eindringende Front hat die Blase noch nicht erreicht und die Dynamik im Bereich der Blase wäre identisch, wenn statt Wasser Öl injiziert würde. Zum nächsten dargestellten Zeitpunkt hat die Stoßwelle der eindringenden Front den Verdünnungsfächer der Entwässerungswelle, die am linken Rand der Blase entstanden ist, erreicht. Die Blase ist allerdings auch nach rechts gewandert, so dass sie noch nicht “geschluckt” wurde. Zum Zeitpunkt  $t = 0.4$  d (blau durchgezogene Kurven) ist dies geschehen und die Existenz der Blase ist nur noch an einer Wölbung im Verdünnungsfächer auszumachen. Ihr ursprünglicher Ort ist nicht mehr erkennbar.

Der Farbverlauf in Abbildung 16.20b zeigt die diskutierten Phänomene mit einer stärkeren Betonung des Zeitverlaufs. Dabei ist deutlich zu sehen, wie die Blase zunächst nach rechts wandert und schließlich von der eindringenden Wasserfront “geschluckt” wird. Die diffusiven Kapillar- und Grenzflächenterme kann man an den ausgeschmierten Kanten ausmachen. Außerdem kann man erkennen, wie die Stoßwelle der injizierten Welle (gelbe Konturen, die

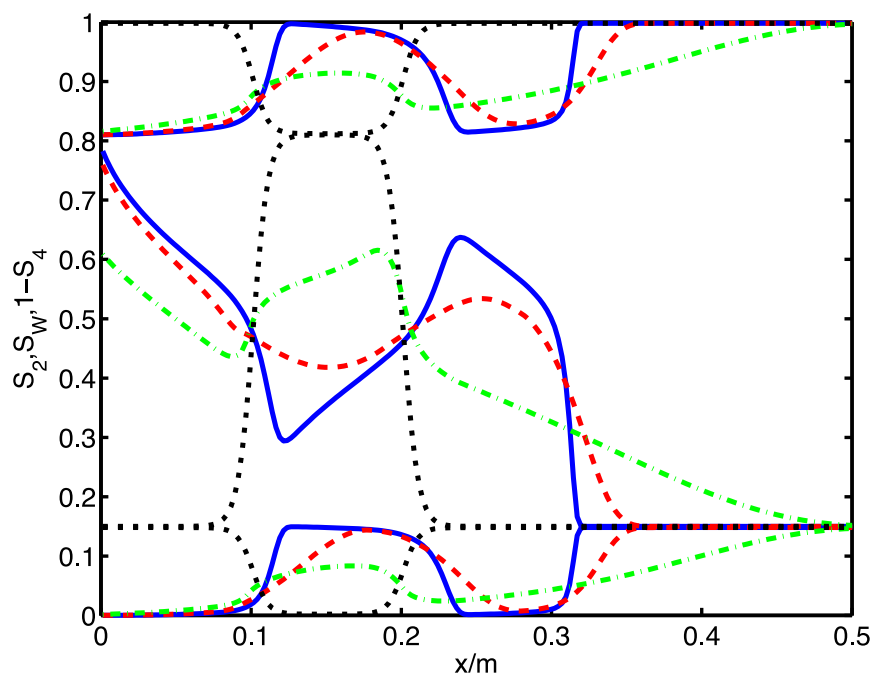


**Abbildung 16.21:** Vereinigung einer Wasserblase mit einer Wasserfront bei nahezu verschwindenden Kapillar- und Grenzflächenkräften. Abbildung (a) zeigt Sättigungsprofile zu den Zeitpunkten  $t = 0$  d (schwarz gepunktete Kurven),  $t = 0.04$  d (rot gestrichelte Kurven),  $t = 0.2$  d (grün gestrichelpunktete Kurven),  $t = 0.4$  d (blau durchgezogene Kurven) und  $t = 0.8$  d (pink gepunktete Kurven). Abbildung (b) zeigt die Entwicklung der Wassersättigung  $S_w(x, t)$  in Raum und Zeit als Farbverlauf. Eine Farbtabelle für die Sättigungen ist rechts gegeben. Die Parameter für Kapillar- und Grenzflächenkräfte entsprechen Parametersatz 1 aus Tabelle 15.5 und lauten  $P_a = 1.6 P_0$ ,  $P_b = 0.025 P_0$ ,  $P_2^* = 2.5 P_0$  und  $P_4^* = 0.4 P_0$  mit  $P_0 = 0.1$  Pa.

den Ursprung des Achsenkreuzes schneiden) den ursprünglichen Ort der Blase in Form einer Zunahme der Geschwindigkeit erfährt. Nachdem die Stoßwelle der eindringenden Welle den Ort der Blase passiert hat, ist der ursprüngliche Ort der Blase im Farbverlaufsbild nicht mehr auszumachen. Dies wird an der starken Krümmung in den gelben Konturen bei ca.  $t = 0.4$  d deutlich.

Abbildung 16.21 zeigt die Vereinigung einer Wasserblase mit einer Wasserfront mit nahezu verschwindenden Kapillar- und Grenzflächenkräften. Der Trend, der von Abbildung 16.19 zu Abbildung 16.20 beobachtet wurde, wird hier sowohl in den Profilen in Abbildung 16.21a als auch im Farbverlauf in Abbildung 16.21b fortgesetzt. Die Kanten sind noch schärfer ausgeprägt und die Existenz der Blase kann zum Zeitpunkt  $t = 0.8$  d (pink gepunktete Kurven) nur noch erahnt werden.

Abbildung 16.22 zeigt einen Vergleich von Sättigungsprofilen zum Zeitpunkt  $t = 0.2$  d für unterschiedlich starke Kapillar- und Grenzflächenterme. Im Vergleich werden die Auswirkungen der Kapillar- und Grenzflächenterme deutlich. Ist ihr Beitrag gering, so sorgen sie lediglich für ein Ausschmieren von eventuell auftretenden Unstetigkeiten. Qualitativ verändert sich die Lösung jedoch nicht. Für stärkere Kapillar- und Grenzflächenterme erhält man jedoch eine Dynamik, welche auch deutliche qualitative Unterschiede zeigt. Bemerkenswert



**Abbildung 16.22:** Vergleich von Sättigungsprofilen zum Zeitpunkt  $t = 0.2$  d für unterschiedlich starke Kapillar- und Grenzflächenterme. Blaue durchgezogene Kurven zeigen Sättigungsprofile für  $P_0 = 0.1$  Pa, rot gestrichelte Kurven für  $P_0 = 100$  Pa und grün gestrichpunktete für  $P_0 = 1$  kPa. Schwarz gepunktete Kurven zeigen die Anfangsbedingungen.

ist, dass diffusive Terme dafür sorgen, dass Information über die Anfangsbedingungen erhalten bleibt. Durch die diffusiven Terme werden nämlich nicht nur die Anfangsbedingungen ausgeschmiert, sondern auch die Stoßwelle, die Informationen über die Anfangsbedingungen weitgehend vernichten würde.

## 17 Simulationen von Experimenten mit Druckrandbedingungen

In diesem Kapitel wird die Simulation eines Experiments zur Bestimmung der primären Entwässerungskapillardrucksättigungskurve und der sekundären Bewässerungskapillardrucksättigungskurve für das DBRMMWBL-Modell vorgestellt. Dieses Experiment wurde vor einigen Jahren in der VEGAS durchgeführt und Messdaten können verwendet werden, um das Modell zu überprüfen. Dabei sei darauf hingewiesen, dass diese Kapillardrucksättigungskurven im präsentierten Modell nicht als Konstitutivgrößen eingehen. Die im Experiment gemessenen Sättigungs- und Druckverläufe können jedoch mit den Simulationsergebnissen verglichen werden. Es sei weiter darauf hingewiesen, dass die Parameter für Kapillar- und Grenzflächenkräfte, sowie für die Massenaustauschtermine des Modells in der RDA mit Hilfe von zwei Kapillardrucksättigungsbeziehungen, die auf unterschiedlichen Hysteresepfaden gemessen wurden, bestimmt werden können.

Im ersten Teil dieses Kapitels werden die Umsetzungen des Experiments im Algorithmus *FlmPSSS* diskutiert. Dazu müssen die Druck- und Flussrandbedingungen und die Anfangsbedingungen mathematisch formuliert werden. Das nächste Unterkapitel widmet sich den verwendeten Parametern. Dabei wird sowohl auf die Modellparameter als auch auf entsprechende künstliche numerische Parameter von *FlmPSSS* eingegangen. Die Simulationsergebnisse werden im hinteren Teil des Kapitels vorgestellt und mit den experimentellen Daten verglichen. Es folgt eine Parameterstudie, die durch Verdopplung und Halbierung einzelner Parameter einen Eindruck vermittelt, welche Phänomene durch das Modell für ähnliche Experimente erfasst werden können.

Vorab wird nun das Experiment erläutert. Für das Experiment wird eine 72 cm lange zylindrische Säule eines homogenen, isotropen und inkompressiblen porösen Mediums mit undurchlässigen Seitenwänden verwendet. Diese ist zunächst 100% wassergesättigt und an beiden Kopfseiten mit einer semipermeablen Membran versehen. Auf der einen Seite lässt die Membran nur Wasser und auf der anderen Seite nur Luft durch. Die Säule ist parallel zur

Schwerkraft aufgestellt und so ausgerichtet, dass die wasserdurchlässige Membran am unteren Ende ist. Dieses Ende ist mit einem Wasserreservoir verbunden, dessen Wasserdruck variiert werden kann. Das obere luftdurchlässige Ende ist frei mit der Atmosphäre verbunden, so dass der Luftdruck am oberen Ende konstant bleibt und Luft entsprechend nachströmen kann. Der Druck im Wasserreservoir ist zu Beginn des Experiments so eingestellt, dass sich der Kapillarsaum am oberen Ende der Säule befindet, also  $P_{\text{W}}(t = 0) = 72 \text{ cmH}_2\text{O}$ <sup>1</sup>. Er wird dann in Zeitintervallen von  $\Delta t = 10 \text{ min}$  um jeweils  $\Delta P = 5 \text{ cmH}_2\text{O}$  insgesamt 13 mal abgesenkt, so dass die Säule entwässert wird. Dann wird  $\Delta t = 50 \text{ min}$  gewartet und anschließend der Wasserdruck insgesamt 7 mal in Zeitintervallen von  $\Delta t = 10 \text{ min}$  um jeweils  $\Delta P = 5 \text{ cmH}_2\text{O}$  erhöht. Dadurch nimmt der Wassergehalt der Säule wieder zu. Nach erneut  $\Delta t = 50 \text{ min}$  wird der Wasserdruck wieder in Zeitintervallen von  $\Delta t = 10 \text{ min}$  um jeweils  $\Delta P = 5 \text{ cmH}_2\text{O}$  5 mal abgesenkt und wieder  $\Delta t = 50 \text{ min}$  gewartet. Dabei nimmt der Wassergehalt wieder ab. Zuletzt wird der Wasserdruck wieder in Zeitintervallen von  $\Delta t = 10 \text{ min}$  um jeweils  $\Delta P = 5 \text{ cmH}_2\text{O}$  elfmal erhöht, bis er wieder den Anfangswert erreicht  $P_{\text{W}}(t > 8 \text{ h}) = 72 \text{ cmH}_2\text{O}$  hat. Die ursprüngliche Wassersättigung der Säule von 100% kann jedoch nicht mehr erreicht werden, da Luft in Blasen eingeschlossen zurückbleibt.

Die Experimentatoren haben die Wassersättigung und Wasserdruck an den Positionen  $x = 0.4 \text{ m}$ ,  $x = 0.5 \text{ m}$ ,  $x = 0.6 \text{ m}$  und  $x = 0.7 \text{ m}$  unregelmäßig in Zeitabständen von ca. 15 min gemessen. Diese können mit den Werten aus der Simulation an diesen Stellen verglichen werden. Da angenommen wird, dass der Luftdruck in der Säule konstant ist, kann aus den Messwerten auch direkt eine Kapillardrucksättigungsbeziehung angegeben werden, wenn der gemessene negative Wasserdruck gegen die dazugehörige gemessene Wassersättigung aufgetragen wird.

Für die Modellierung werden die Fluide als inkompressibel und nicht mischend angenommen. Obwohl das Experiment mit Wasser und Luft durchgeführt wurde, wird, der bisherigen Terminologie folgend, die nicht benetzende Luft als Öl bezeichnet. Die Kompressibilität der Luft wird vernachlässigt. Diese Annahme kann gerade bei Blasen durchaus ungültig sein und das Ergebnis verfälschen. Sie ist aber in der Hydrologie und der Bodenphysik üblich. Der Kapillarsaum ist außerdem breiter als der Säulendurchmesser, so dass die Säule physikalisch als eindimensional angenommen werden kann.

Der Aufbau und die Durchführung des Experiments werden in Abbildung 17.1a bzw. Abbildung 17.1b schematisch dargestellt. Die schematische Darstellung der Anfangs- und Randbedingungen zeigt allgemeine homogene Anfangsbedingungen mit endlichen Sättigungen für

<sup>1</sup>Es werden die Drücke in cm Wassersäule angegeben, da sie hier von einer Wassersäule herrühren. Dabei gilt  $1 \text{ cmH}_2\text{O} = 98.07 \text{ Pa}$ .





## 17.1 Randbedingungen

Der Algorithmus FlmPSSS basiert auf den vier partiellen Differentialgleichungen (14.1) der Massenbilanzen. Die Säule wird durch die Randbedingungen für die Kapillardruckmessung aus Tabelle 14.1 verwendet. Die Säule ist wie in [Laus 08] mit  $x_r - x_\ell = 1.2$  m deutlich länger als im Experiment gewählt. Da die Luft nahezu unendlich mobil ist und im Vergleich zu Wasser eine verschwindende Dichte aufweist, modellieren diese Randbedingungen die Säule im Bereich  $x \in [0, 72]$  cm. In den Abbildungen, die räumliche Profile zeigen, wird jeweils der Ausschnitt  $x \in [0, 80]$  cm gezeigt.

## 17.2 Anfangsbedingungen

Die Säule ist gefüllt mit zwei Fluiden unterschiedlicher Dichte. In den Anfangsbedingungen muss die Verteilung der Fluide auf perkolierende und nicht perkolierende Phasen spezifiziert werden. Außerdem wird der Druck  $P_i(x, 0)$  der perkolierenden Wasserphase zu Beginn des Experiments als Platzhalter benötigt. Tabelle 17.1 zeigt zusammenfassend die Anfangsbedingungen der durchgeführten numerischen Experimente mit dem Algorithmus FlmPSSS.

Parameter	$S_{1b}$	$S_{2b}$	$S_{3b}$	$S_{1p}$	$S_{2p}$	$S_{3p}$	$x_0$	$x_1$	$\kappa_{sm}$
Wert	0.997	0.001	0.001	0.997	0.001	0.001	0.45 m	0.55 m	$100 \text{ m}^{-1}$

**Tabelle 17.1:** Anfangsbedingungen für Simulationen von Experimenten mit einer geschlossenen porösen Säule mit FlmPSSS.

## 17.3 Parameter der Simulationen

Neben Anfangs- und Randbedingungen müssen diverse Parameter spezifiziert werden, um Lösungen numerisch zu berechnen. Die Simulationen wurden mit Parametern durchgeführt, die durch Anpassen der  $P_c$ -Kurven an eine van-Genuchten Parametrierung, die zur Simulation des Experiments am IWS [Papa 08] verwendet wurde, gewonnen wurde. Sie entsprechen Parametersatz 2 aus Tabelle 15.5. Die numerischen Parameter für FlmPSSS wurden in Kapitel 14.5 diskutiert. Die verwendeten Werte sind in Tabelle 17.2 zusammengefasst.

Parameter	Wert	Einheit
$N_{\text{cls}}$	400	
$\Delta t$	10	s
$\epsilon_M$	0.01	
$\epsilon_{\text{tol}}$	0.0005	
$\epsilon_{\partial S}$	$10^{-6}$	$\text{s}^{-1}$
$\kappa_h$	1000	$\text{m s}^2 \text{kg}^{-1}$
$\kappa_{\text{di}}$	$10^8$	$\text{s}^{-1}$
$\epsilon_S$	$10^{-5}$	

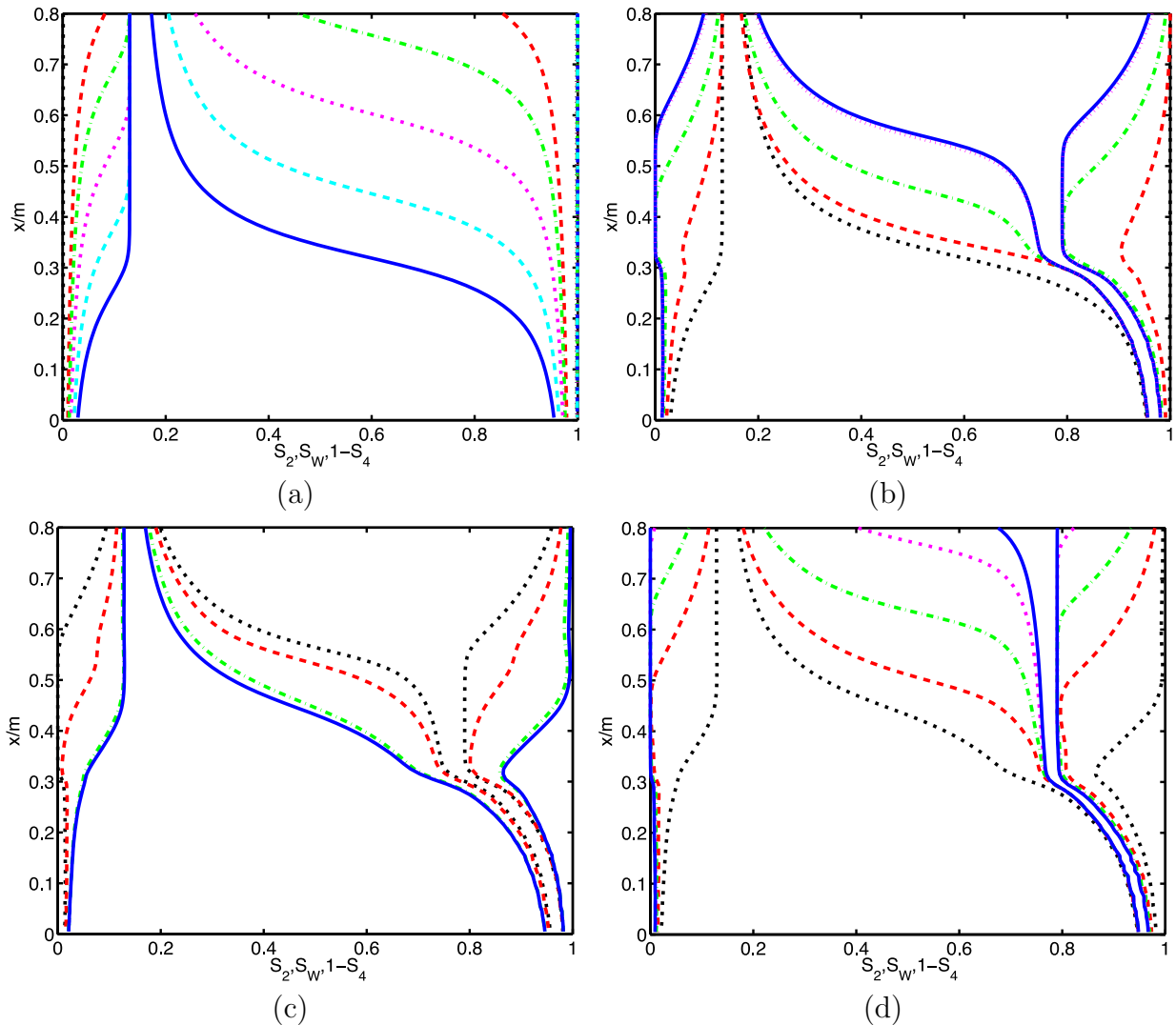
Tabelle 17.2: Numerische Parameter für FlmPSSS.

## 17.4 Ergebnisse und Vergleich von Simulation und Experiment

In diesem Kapitel werden die Lösungen der Simulationen vorgestellt und diese mit experimentellen Daten verglichen. Dazu werden zunächst die Farbverlaufsbilder und Sättigungsprofile der Simulationen diskutiert. Anschließend werden an den Simulationsdaten Messungen wie im Experiment durchgeführt.

Abbildung 17.2 zeigt Sättigungsprofile für die vier Abschnitte des Experiments zur Bestimmung von Kapillardrucksättigungsbeziehungen. Zu Beginn des Experiments in Abbildung 17.2a ist die Säule 100% wassergesättigt. Sättigungsprofile dazu sind nicht zu sehen, da sie für  $S_2(x, 0) = 0$  mit der linken vertikalen Achse und für  $S_{\text{w}}(x, 0) = 1$  und  $1 - S_4(x, 0) = 1$  mit der rechten vertikalen Achse zusammenfallen. Aufgrund des stufenweise abgesenkten Wasserdrucks an der unteren Seite der Säule, sinkt der Wasserspiegel und der Kapillarsaum wandert mit ihm nach unten. Eine geringe Menge Öl dringt sehr schnell sehr tief in die Säule vor. Perkolierendes Wasser verschwindet am oberen Rand nicht vollständig. Durch die Verdrängung von Wasser entsteht nichtperkolierendes Wasser. Am oberen Rand kommt Wasser ab ca.  $t = 2$  h fast nur noch in dieser Form vor. Weiter unten in der Säule ist der Anteil von nichtperkolierendem Wasser deutlich geringer.

Sobald der Druck im unteren Reservoir wieder erhöht wird, steigt auch der Wasserspiegel bzw. der Kapillarsaum wieder. Dies wird in Abbildung 17.2b gezeigt. Dabei wird nichtperkolierendes Öl produziert und das entstandene nichtperkolierende Wasser wird wieder reduziert. Da der Kapillarsaum zu Beginn der Umkehr nicht am unteren Ende der Säule sondern in der Mitte war, treten einige interessante Phänomene auf. Am deutlichsten ist der nichtmonotone Verlauf der Sättigung  $S_4(x, t)$  des nichtperkolierenden Öls zu sehen. Wenn man bedenkt, dass Öl den unteren Teil der Säule fast nicht erreicht hat, überrascht dies nicht. Das Öl hat



**Abbildung 17.2:** Sättigungsprofile für die vier Abschnitte des Experiments zur Bestimmung von Kapillardrucksättigungsbeziehungen. Abbildung (a) zeigt Profile bei  $t = 0.5$  h (rot gestrichelte Kurven),  $t = 1$  h (grün gestrichpunktete Kurven),  $t = 1.5$  h (pink gepunktete Kurven),  $t = 2$  h (hellblau gestrichelte Kurven) und  $t = 3$  h (blau durchgezogene Kurven). Abbildung (b) zeigt Profile  $t = 3$  h (schwarz gepunktete Kurven),  $t = 3.5$  h (rot gestrichelte Kurven),  $t = 4$  h (grün gestrichpunktete Kurven),  $t = 4.5$  h (pink gepunktete Kurven) und  $t = 5$  h (blau durchgezogene Kurven). Abbildung (c) zeigt Profile bei  $t = 5$  h (schwarz gepunktete Kurven),  $t = 5.5$  h (rot gestrichelte Kurven),  $t = 6$  h (grün gestrichpunktete Kurven) und  $t = 6.5$  h (blau durchgezogene Kurven). Abbildung (d) zeigt Profile bei  $t = 6.5$  h (schwarz gepunktete Kurven),  $t = 7.5$  h (rot gestrichelte Kurven),  $t = 8$  h (grün gestrichelte Kurven),  $t = 8.5$  h (pink gepunktete Kurven) und  $t = 10.5$  h (blau durchgezogene Kurven).

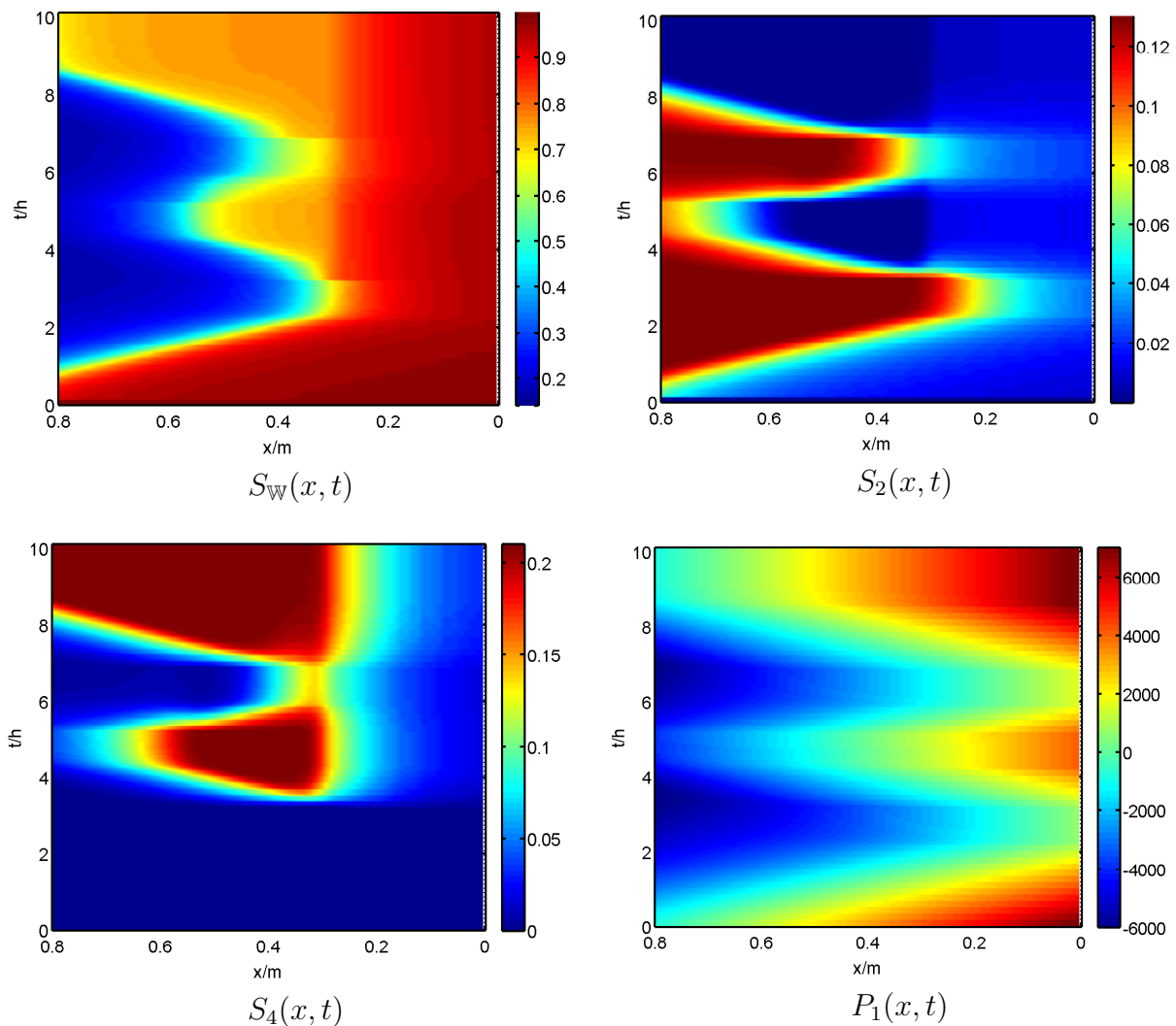
im ersten Abschnitt des Experiments im unteren Teil der Säule noch nicht die begrenzende Sättigung erreicht und es gilt  $S_{\text{w}} > 1 - S_{\text{Oim}}$  für  $x < 0.3$  m. Es wurde daher die modifizierte Version der begrenzenden Sättigungen aus Gleichung (3.9) verwendet. Mit diesen Sättigungen bleibt eine geringe Menge Öl sowohl perkolierend als auch nichtperkolierend im unteren Teil der Säule zurück. Da damit die Wassersättigung weitgehend konstant bleibt, ist auch nichtperkolierendes Wasser nichtmonoton verteilt.

Wenn der Druck im unteren Reservoir wieder gesenkt wird, sinkt auch der Kapillarsaum wieder. Dies ist in Abbildung 17.2c zu sehen. Dabei wird das produzierte nichtperkolierende Öl zu großen Teilen mit der vordringende Ölfront vereinigt und erneut nichtperkolierendes Wasser produziert. Da die Druckabsenkung bei höheren Drücken als beim ersten Absenken beendet wird, ist der Kapillarsaum am Ende etwas höher. Dadurch bleibt auch der erste Umkehrpunkt im Profil noch erkennbar.

Den letzten Abschnitt des Experiments zeigt Abbildung 17.2d. Der Druck im unteren Reservoir wird wieder derart angehoben, dass der Kapillarsaum den oberen Rand der Säule erreicht. Dabei bleibt das nichtperkolierende Öl, welches beim Verdrängen des Öls oberhalb des Kapillarsaums entsteht, in der Säule zurück. Die ursprünglichen 100% Wassersättigung werden nicht mehr erreicht.

Abbildung 17.3 zeigt Farbverlaufsbilder von  $S_{\text{w}}(x, t)$  in Abbildung 17.3a, von  $S_2(x, t)$  in Abbildung 17.3b, von  $S_4(x, t)$  in Abbildung 17.3c und von  $P_1(x, t)$  in Abbildung 17.3d. Die scharfen Kanten zur Zeit  $t \approx 2$  h,  $t \approx 3$  h,  $t \approx 4$  h,  $t \approx 5$  h,  $t \approx 6$  h und  $t \approx 7$  h sind Artefakte in der Darstellung aufgrund unterschiedlicher Zeitschritte in der Ausgabe der Daten. Sie sind in allen vier Bildern vorhanden. Die Farbverläufe der drei Sättigungen  $S_{\text{w}}(x, t)$  in Abbildung 17.3a,  $S_2(x, t)$  in Abbildung 17.3b, und  $S_4(x, t)$  in Abbildung 17.3c zeigen das in Abbildung 17.2 Diskutierte mit einer stärkeren Betonung des Zeitverlaufs.

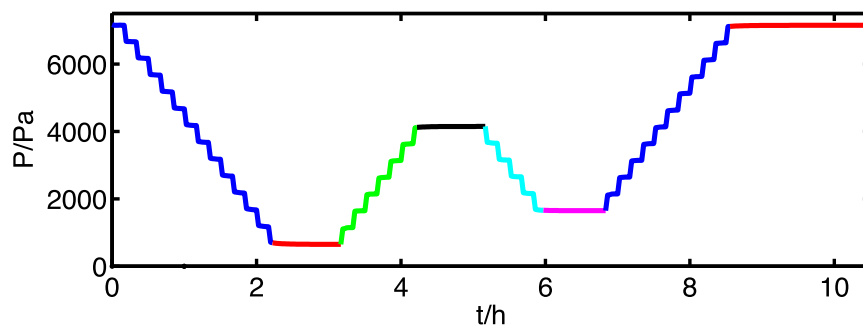
Abbildung 17.3 zeigt, wie zu Beginn des Experiments der Kapillarsaum mit nahezu konstanter Geschwindigkeit in der Säule nach unten wandert und dort zur Ruhe kommt. Dann steigt er wieder, für kurze Zeit sogar wieder mit konstanter Geschwindigkeit, und kommt abermals zur Ruhe. An den Konturen kann man erkennen, dass zum Zeitpunkt der Umkehr die Bewegung in der Sättigung noch nicht vollständig zum Erliegen gekommen ist. Sie verlaufen noch nicht parallel zur Zeitachse. Dann wird der Druck wieder abgesenkt und der Kapillarsaum wandert wieder in der Säule nach unten. Er kommt allerdings etwas höher als zuvor zur Ruhe. Zum Schluss wird der Druck wieder erhöht und der Kapillarsaum erreicht wieder den oberen Rand der Säule. Am Ende ist der Bereich, welcher im Laufe des Experiments entwässert wurde, auch im Farbverlaufsbild deutlich vom Bereich, welcher davon nicht betroffen war, zu unterscheiden.



**Abbildung 17.3:** Farbverlaufsbilder der Variable  $S_{\text{W}}(x, t)$  in Abbildung (a),  $S_2(x, t)$  in Abbildung (b),  $S_4(x, t)$  in Abbildung (c) und  $P_{\text{W}}(x, t)$  in Abbildung (d). Farbtafeln werden jeweils rechts von den Abbildungen gegeben.

Die Dynamik der Wassersättigung spiegelt sich auch in der Dynamik der nichtperkolierenden Phasen wieder. Hervorzuheben ist bei  $S_2(x, t)$  in Abbildung 17.3b, dass sich die Entwässerung schwach aber doch sichtbar in der ganzen Säule bemerkbar macht. Die zwischenzeitlich erneute Bewässerung ist jedoch im unteren Bereich der Säule so schwach, dass sie die Entwässerung nicht vollständig rückgängig machen kann und somit im Farbverlaufsbild eine ‘Insel’ mit Sättigungen  $S_2(x, t) \approx 0$  entsteht. Am Ende des Experiments führt dies sogar dazu, dass im unteren Teil der Säule mehr nichtperkolierendes Wasser als in ihrem oberen Teil vorhanden ist.

Im Farbverlaufsbild der nichtperkolierenden Ölsättigung  $S_4(x, t)$  in Abbildung 17.3c ist zu sehen, dass, bevor der Kapillarsaum wieder nach oben wandert und Regionen der Säule be-



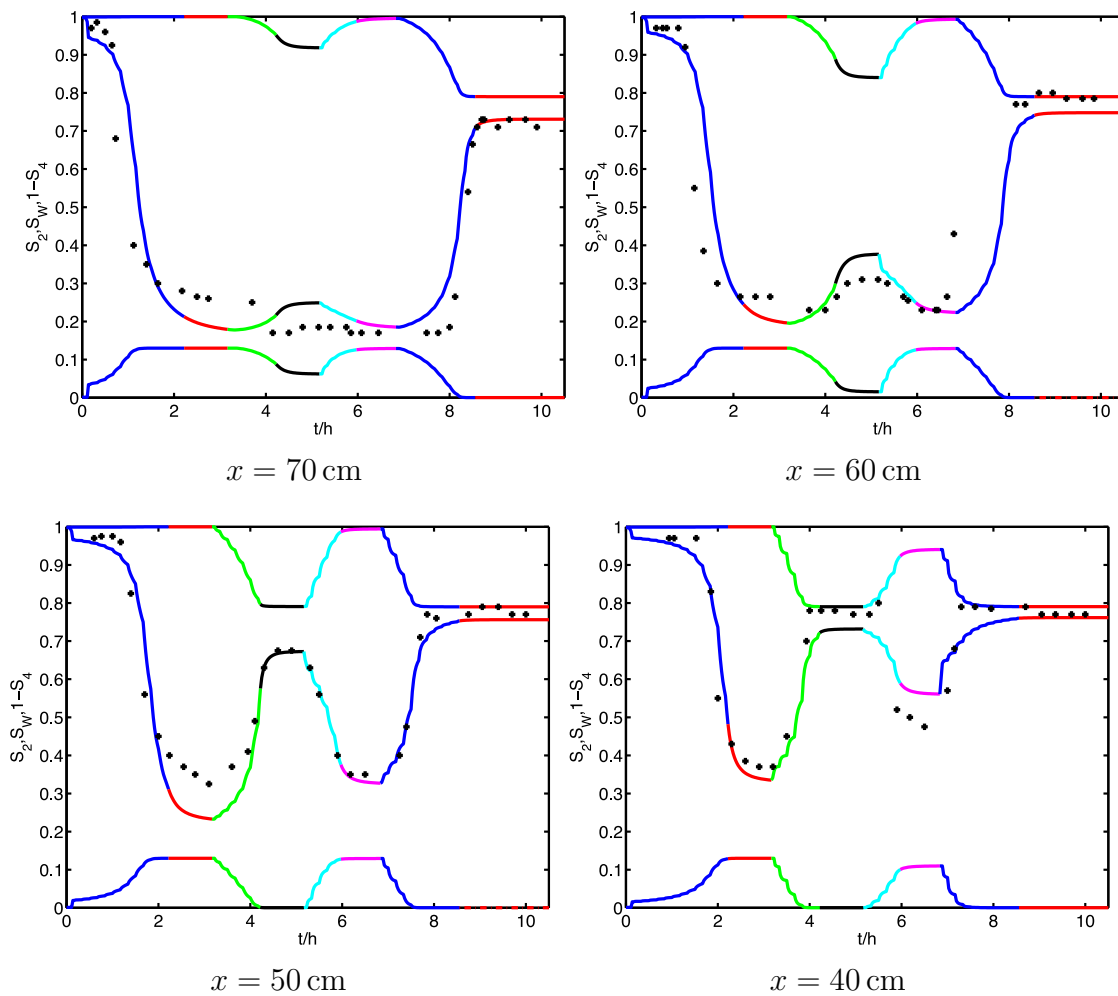
**Abbildung 17.4:** Zeitlicher Verlauf des Drucks  $P_1(x_r, t)$  am unteren Ende der Säule. Farblich gekennzeichnet sind unterschiedliche Abschnitte im Experiment.

wässert werden, kein nichtperkolierendes Öl in der Säule vorhanden ist. Da die Bewässerung zunächst vor allem im mittleren Teil der Säule stattfindet, entsteht nichtperkolierendes Öl vor allem dort. Dies ist anhand der roten “Insel” im Farbverlaufsbild zu erkennen. Bei der anschließenden Entwässerung vereinigt sich nahezu das komplette nichtperkolierende Öl mit der eindringenden perkolierenden Phase. Da die Reduktion des Drucks bereits bei einem höheren Druck als bei der ersten Absenkung beendet wird, bleibt nichtperkolierendes Öl in der Säule. Am Ende des Experiments wird das Öl wieder aus der Säule gedrängt. Dabei entsteht nichtperkolierendes Öl, welches ein Wiederherstellen der Anfangsbedingungen mit einer Wassersättigung  $S_w = 1$  in der Säule verhindert.

Im Farbverlaufsbild des Drucks der perkolierenden Wasserphase  $P_1(x, t)$  in Abbildung 17.3d ist zu sehen, wie sich die Druckänderung am unteren Rand auf den Druck in der Säule auswirkt. Dabei kann man an den Farbverläufen erkennen, dass die Druckverteilung zu jedem Zeitpunkt nahezu linear und monoton ansteigt. Der Druck erreicht sehr rasch eine Gleichgewichtsverteilung, wie an den parallel zur Zeitachse verlaufenden Konturen des Drucks zu sehen ist, wenn der Druck im Wasserreservoir am unteren Ende der Säule konstant ist.

Die Ergebnisse der Simulation werden nun mit den experimentellen Daten verglichen. Um die einzelnen Abschnitte des Experiments in den Abbildungen hervorzuheben, werden sie mit unterschiedlichen Farben dargestellt. Diese können anhand des in Abbildung 17.4 dargestellten zeitlichen Verlaufs des Drucks  $P_1(x_r, t)$  am unteren Rand der Säule zugeordnet werden.

Abbildung 17.5 zeigt einen Vergleich des zeitlichen Verlaufs der Wassersättigung  $S_w(x, t)$  an den Positionen  $x = 0.4$  m,  $x = 0.5$  m,  $x = 0.6$  m und  $x = 0.7$  m aus Simulation und Experiment. Die Übereinstimmung von Simulation und Experiment ist überraschend gut, wenn man berücksichtigt, wie wenig Aufwand betrieben wurde, um die Parameterwerte anzupassen. Der Verlauf der Wassersättigung wird in den meisten Fällen nicht nur qualitativ

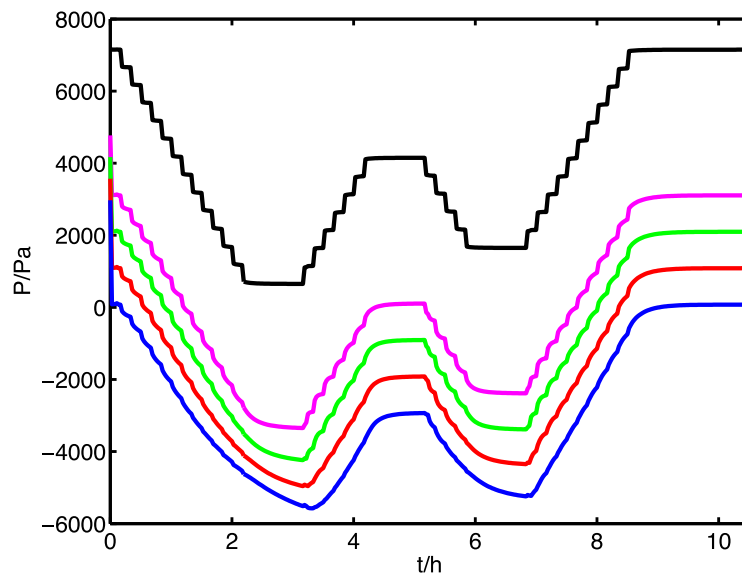


**Abbildung 17.5:** Vergleich des zeitlichen Verlaufs der Wassersättigung  $S_W(x, t)$  an den Positionen  $x = 0.4\text{ m}$ ,  $x = 0.5\text{ m}$ ,  $x = 0.6\text{ m}$  und  $x = 0.7\text{ m}$  aus Simulation und Experiment. Die unterschiedlichen Farbabschnitte entlang der Kurven entsprechen Experimentabschnitten wie sie in Abbildung 17.4 definiert werden. Messwerte werden als schwarze Punkte dargestellt. Zusätzlich werden die zeitlichen Verläufe von  $S_2(x, t)$  und  $1 - S_4(x, t)$  dargestellt.

sondern auch quantitativ getroffen. Die Abweichungen sollen im Folgenden für die einzelnen Messstellen diskutiert werden.

Im Verlauf bei  $x = 0.7\text{ m}$  wird der Abfall der Wassersättigung zu Beginn gut getroffen. Allerdings bleibt die Sättigung etwas höher im Experiment im Vergleich zur Simulation. Zum Zeitpunkt, wenn die Sättigung aufgrund des erhöhten Drucks im Wasserreservoir wieder steigt, fällt sie im Experiment. Außer einem Fehler im Sensor, kann hierfür keine Erklärung angegeben werden. Der Rest des Verlaufs wird jedoch sehr genau getroffen.

Bei  $x = 0.6\text{ m}$  ist der erneute Anstieg der Wassersättigung in den experimentellen Daten erkennbar. Der Zeitpunkt des Anstiegs stimmt in Simulation und Experiments gut überein, allerdings wird die Wassersättigung in der Simulation gegenüber dem Experiment über-



**Abbildung 17.6:** Zeitlicher Verlauf des Drucks  $P_1(x, t)$  am unteren Ende der Säule (schwarze Kurve) und an den Positionen  $x = 0.4$  m (pinkfarbene Kurve),  $x = 0.5$  m (grüne Kurve),  $x = 0.6$  m (rote Kurve) und  $x = 0.7$  m (blaue Kurve).

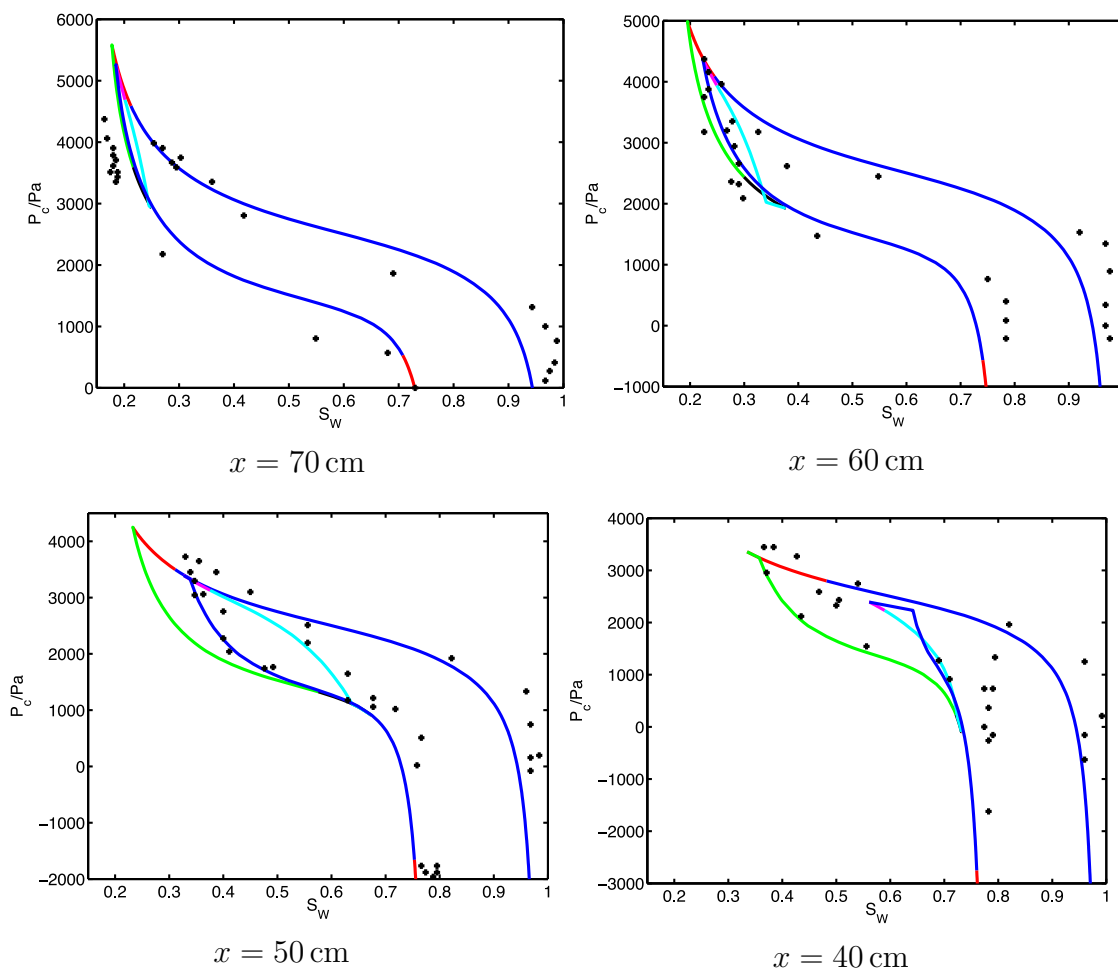
schätzt. Auch der Zeitpunkt der erneuten Wassersättigungsabnahme wird gut getroffen. Hier stimmen auch die Werte der Wassersättigung überein. Der letzte Wassersättigungsanstieg geschieht im Experiment deutlich früher als in der Simulation. Allerdings wird der Anstieg nur durch einen Messwert gegeben und der Zeitpunkt passt nicht zu den gemessenen Wassersättigungen an den anderen Messstellen in der Säule. Die Wassersättigung am Ende des Experiments wird in der Simulation geringfügig unterschätzt.

Bei  $x = 0.5$  m ist die Übereinstimmung von Simulation und Experiment nahezu perfekt. Nur die Wassersättigung nach der ersten Druckabsenkung wird in der Simulation unterschätzt.

Bei  $x = 0.4$  m ist die Übereinstimmung ebenfalls sehr gut. Der Zeitverlauf wird sehr genau getroffen und die Wassersättigungen nach der ersten Druckabsenkung stimmen sehr gut überein. Die Wassersättigung nach der Druckerhöhung wird in der Simulation unterschätzt und die Wassersättigung nach der darauf folgenden Druckabsenkung überschätzt. Bei der letzten Druckerhöhung geschieht der Sättigungsanstieg zunächst sprunghaft und dann deutlich langsamer als in den Verläufen an den drei anderen Positionen.

Abbildung 17.6 zeigt den zeitlichen Verlauf des Drucks  $P_1(x, t)$ . Der Abbildung 17.6 ist zu entnehmen, dass der Druck innerhalb der Säule sehr schnell auf Druckänderungen am unteren Rand der Säule reagiert. Die Kurven verlaufen weitestgehend parallel. Allerdings geschieht das Erreichen des Gleichgewichtsdrucks mit zunehmendem Abstand vom Säulenboden etwas langsamer und die Drucksprünge am unteren Ende werden ausgeschmiert.





**Abbildung 17.7:** Gemessene und simulierte Kapillardrucksättigungsbeziehung  $P_c(S_w(x, t))$  an den Stellen  $x = 0.4$  m,  $x = 0.5$  m,  $x = 0.6$  m und  $x = 0.7$  m. Simulationsergebnisse werden als Kurven dargestellt. Die unterschiedlichen Farbabscritte entlang der Kurven entsprechen Experimentabschnitten wie sie in Abbildung 17.4 definiert werden. Messwerte werden als schwarze Punkte dargestellt.

Abbildung 17.7 zeigt gemessene und simulierte Kapillardrucksättigungsbeziehung  $P_c(S_w(x, t))$  an den Stellen  $x = 0.4$  m,  $x = 0.5$  m,  $x = 0.6$  m und  $x = 0.7$  m. Der Vergleich von Messwerten und Simulationsergebnissen ist auf den ersten Blick nicht so überzeugend wie der Verlauf der Wassersättigungen an den vier Messstellen. Dies ist zum einen dadurch zu begründen, dass hier zwei Messgrößen gegeneinander aufgetragen sind und sich Fehler entsprechend multiplizieren. Leider liegen Daten für den Zeitverlauf des Drucks nicht vor. Ein Vergleich mit den Sättigungsverläufen erklärt jedoch bereits einige der Abweichungen. Dabei hilft die Farbkodierung der Experimentabschnitte.

In Abbildung 17.5 für  $x = 0.7$  m wird die Wassersättigung am Anfang des Experiments unterschätzt. Die Punkte links der Kurven entsprechen den Punkten zwischen  $t = 4$  h und  $t = 6$  h, bei denen die Wassersättigung aus der Simulation über der gemessenen Wassersättigung lag.

Unter der Annahme, dass der Druck von Simulation und Experiment übereinstimmen, ist damit die Abweichung in Abbildung 17.7,  $x = 0.7$  m am Beginn der primären Entwässerungskurve erklärt. Da im Experiment trotz des erhöhten Drucks am unteren Rand keine Sättigungszunahme stattgefunden hat, ist im Experiment keine Hystereseschleife zu sehen, obwohl die Simulation diese zeigt, auch wenn sie fast nicht zu erkennen ist.

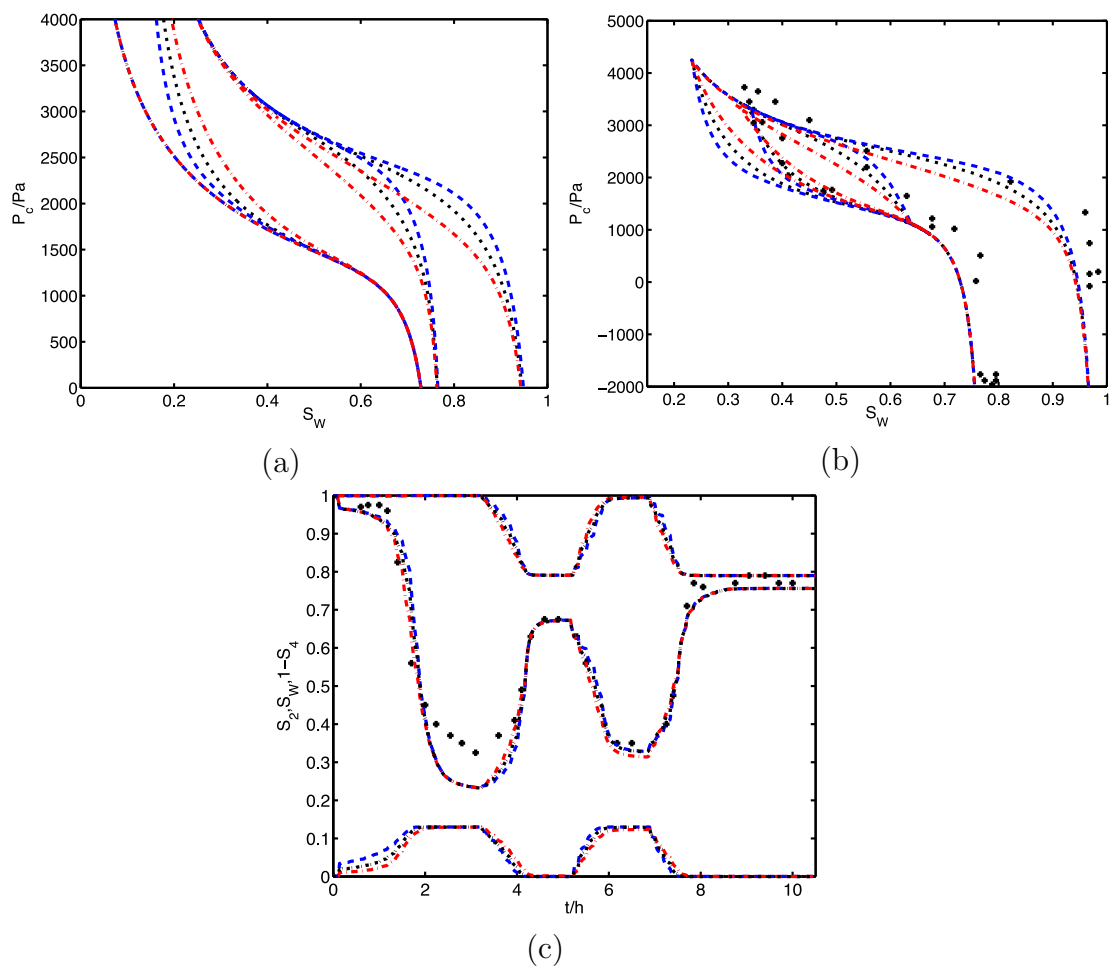
Auch in Abbildung 17.7 für  $x = 0.6$  m erkennt man am primären Ast die Unterschätzung der Wassersättigungen. Die Hystereseschleife im mittleren Teil des Experiments wird ungefähr getroffen. Eine genauere Beurteilung ist nicht möglich, da zu wenige experimentelle Messpunkte vorliegen.

Wie zuvor, spiegelt sich auch in Abbildung 17.7 für  $x = 0.5$  m die unterschätzte Wassersättigung zu Beginn des Experiments wider. Im Sättigungsverlauf wurde die Wassersättigung in der Simulation im ersten Gleichgewichtszustand unterschätzt. Dies begründet die Abweichung der Kurve bei geringen Wassersättigungen. Die Hystereseschleife und die Werte am Ende des Experiments werden dagegen sehr genau getroffen.

In der Kapillardrucksättigungsbeziehung für die Stelle  $x = 0.4$  m in Abbildung 17.7 stimmen Simulation und Messwerte am Anfang des Experiments überein. Die Wassersättigungen im Zeitraum zwischen  $t = 4$  h und  $t = 6$  h wurden in der Simulation gegenüber dem Experiment unterschätzt, was sich auch im Vergleich der Kapillardrucksättigungsbeziehungen zeigt. Die Hystereseschleife aus den Simulationsdaten zeigt hier ein überraschendes Verhalten. Der Ast, der der letzten Bewässerung entspricht, verläuft zunächst parallel zur Entwässerungskurve und knickt erst für etwas größere Wassersättigungen steil ab. Dies passiert genau zu der Zeit, an der die Wassersättigung in Abbildung 17.5 einen Sprung macht.

## 17.5 Parameterstudie

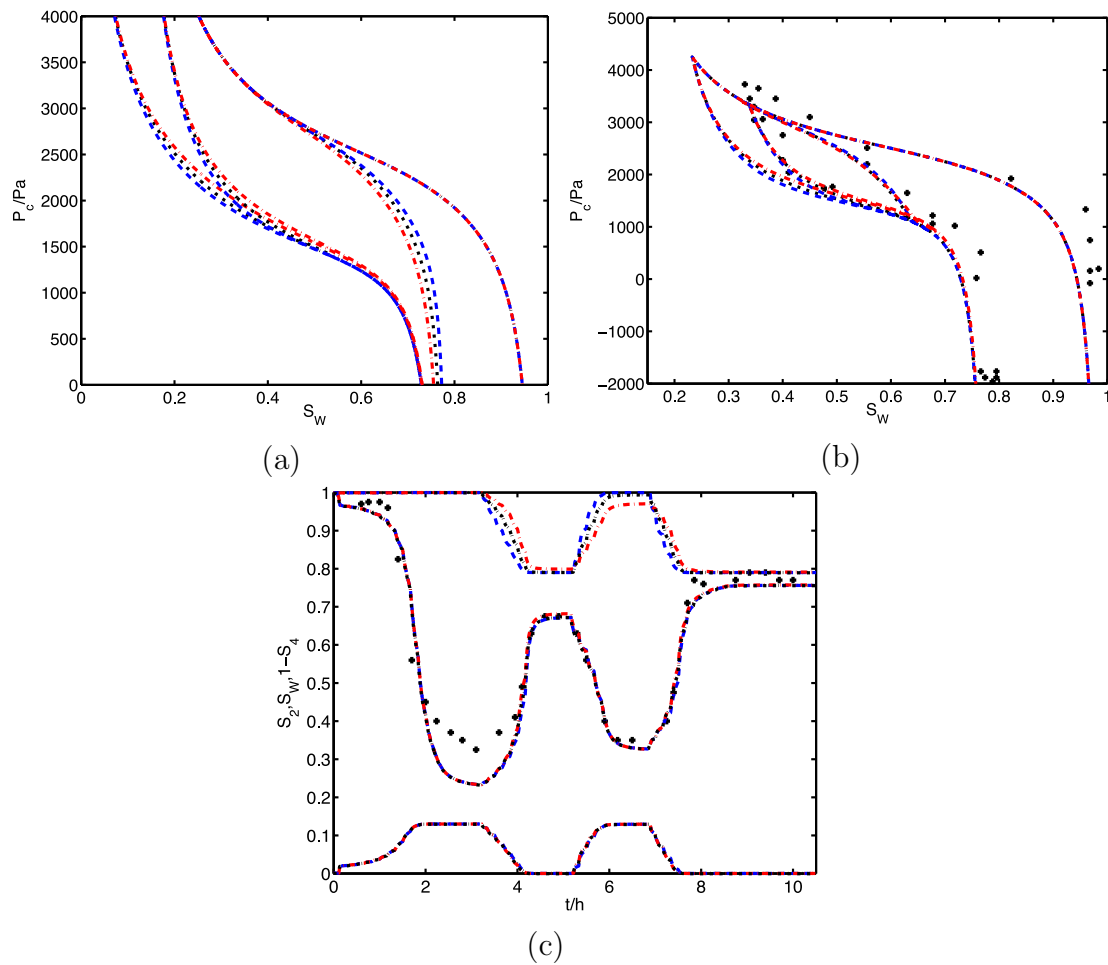
Zum Abschluss dieses Kapitels wird eine Parameterstudie durchgeführt, um zu ermitteln, welchen Einfluss die Parameter auf die Lösungen haben. Dazu wird jeder der Modellparameter jeweils im Vergleich zu den Parameterwerten aus Parametersatz 2, Tabelle 15.5 verdoppelt und halbiert. Dargestellt werden für jeden Parametersatz drei Abbildungen. Zunächst werden die vier Haupthysteresekurven der Kapillardrucksättigungsbeziehung aus der RDA gezeigt. Weiterhin werden die Sättigungsverläufe beispielhaft an der Stelle  $x = 50$  cm in Bezug zueinander gesetzt. Des Weiteren wird an dieser Stelle eine Kapillardrucksättigungsbeziehung bestimmt. Die untersuchten Parameter sind  $\eta_2$  (Abbildung 17.8),  $\eta_4$  (Abbildung 17.9),  $\alpha$  (Abbildung 17.10),  $P_a$  (Abbildung 17.11),  $\beta$  (Abbildung 17.12),  $P_b$  (Abbildung



**Abbildung 17.8:** Illustration des Einflusses des Massenaustauschparameters  $\eta_2$  für Wasser. Abbildung (a) zeigt die vier Haupthysteresekurven von  $P_c(S_w)$  in der RDA, Abbildung (b) zeigt  $P_c(S_w)$  aus Simulation und Experiment und Abbildung (c) den Sättigungsverlauf jeweils an der Stelle  $x = 50$  cm. Die Referenzkurven mit  $\eta_2 = 6$  sind schwarz gepunktet, die Kurven für  $\eta_2 = 12$  blau gestrichelt und die Kurven für  $\eta_2 = 3$  rot gestrichelpunktet dargestellt. Die gemessenen Werte aus dem Labor werden in Form schwarzer Punkte gezeigt.

17.13),  $\gamma$  (Abbildung 17.14),  $P_2^*$  (Abbildung 17.15),  $\delta$  (Abbildung 17.16),  $P_4^*$  (Abbildung 17.17),  $S_{\text{Oim}}$  (Abbildung 17.18),  $S_{w\text{dr}}$  (Abbildung 17.19),  $\lambda_{11}$  (Abbildung 17.20) und  $\lambda_{33}$  (Abbildung 17.21).

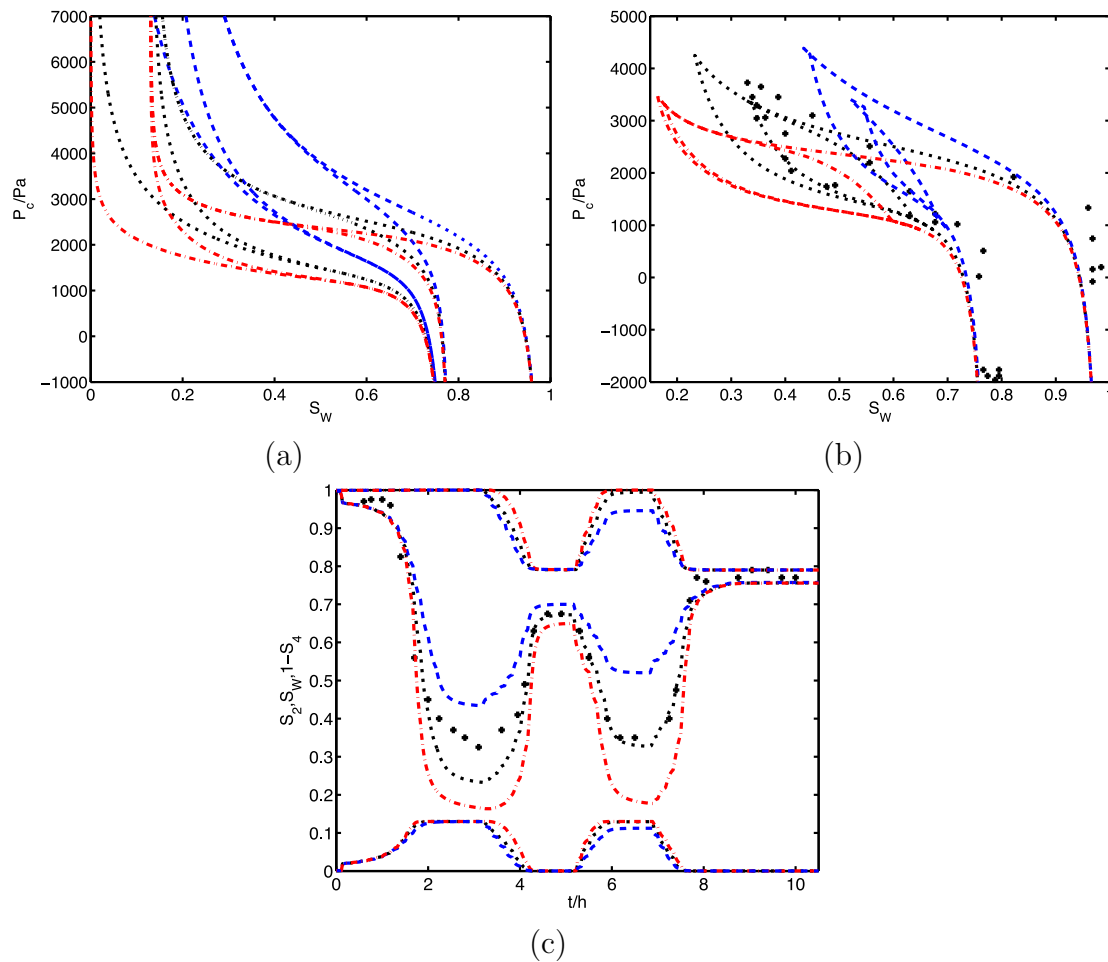
Abbildung 17.8 illustriert den Einfluss des Massenaustauschparameters  $\eta_2$  für Wasser auf die Dynamik der Fluide im Experiment. Die Krümmung des “Knies” in den Kapillardrucksättigungskurven  $P_c(S_w)$  der RDA in Abbildung 17.8a ändert sich jeweils zu Beginn der Hystereseschleife, wenn keine primäre Bewässerung vorliegt. Bei einer primären Bewässerung wird nämlich nichtperkolierendes Wasser weder erzeugt noch vernichtet. Für die Entwässerungskurven ändert sich das “Knie” bei Wassersättigungen von ca. 80% und für die Bewässerungskurve bei Wassersättigungen von ca. 20%. Ein größerer Wert  $\eta_2$  verstärkt die



**Abbildung 17.9:** Illustration des Einflusses des Massenaustauschparameters  $\eta_4$  für Öl. Abbildung (a) zeigt die vier Haupthysteresekurven von  $P_c(S_w)$  in der RDA, Abbildung (b) zeigt  $P_c(S_w)$  aus Simulation und Experiment und Abbildung (c) den Sättigungsverlauf jeweils an der Stelle  $x = 50$  cm. Die Referenzkurven mit  $\eta_4 = 4$  sind schwarz gepunktet, die Kurven für  $\eta_4 = 8$  blau gestrichelt und die Kurven für  $\eta_4 = 2$  rot gestrichelpunktet dargestellt. Die gemessenen Werte aus dem Labor werden in Form schwarzer Punkte gezeigt.

Krümmung. Dies zeigt sich auch in der aus dem Experiment bestimmten Kurve in Abbildung 17.8b. Im Sättigungsverlauf bei  $x = 50$  cm verursacht ein größerer Parameterwert nur eine leichte Verzögerung. Ein Vergleich mit den Profilen aus Abbildung 17.2 erklärt dies. Das ‘Knie’ befindet sich in keinem der quasistationären Profile im Bereich  $x = 50$  cm. Man beachte außerdem, dass der Parameter auch indirekt eine Auswirkung auf die Menge an nichtperkolierendem Öl hat.

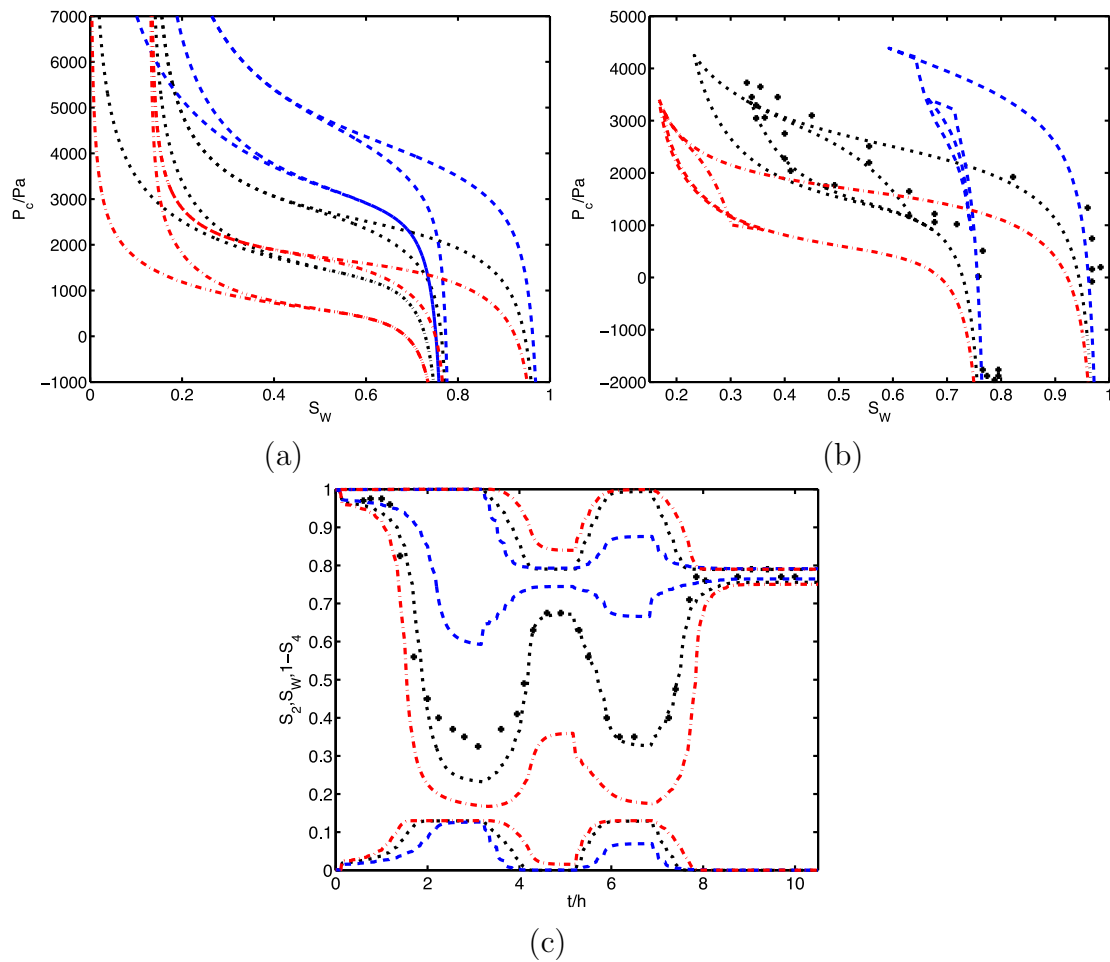
Abbildung 17.9 illustriert den Einfluss des Massenaustauschparameters  $\eta_4$  für Öl auf die Dynamik der Fluide im Experiment. Wie zuvor der Massenaustauschparameter  $\eta_2$  für Wasser verändert der Massenaustauschparameter  $\eta_4$  die Krümmung des ‘Knies’ zu Beginn der Hystereseschleife der Kapillardrucksättigungsbeziehung. Für  $\eta_4$  ist jedoch die primäre Ent-



**Abbildung 17.10:** Illustration des Einflusses des Exponenten der Kapillarkraft  $\alpha$  für Wasser. Abbildung (a) zeigt die vier Haupthysteresekurven von  $P_c(S_w)$  in der RDA, Abbildung (b) zeigt  $P_c(S_w)$  aus Simulation und Experiment und Abbildung (c) den Sättigungsverlauf jeweils an der Stelle  $x = 50$  cm. Die Referenzkurven mit  $\alpha = 0.42$  sind schwarz gepunktet, die Kurven für  $\alpha = 0.82$  blau gestrichelt und die Kurven für  $\alpha = 0.21$  rot gestrichelpunktet dargestellt. Die gemessenen Werte aus dem Labor werden in Form schwarzer Punkte gezeigt.

wässerungskurve nicht betroffen. Die Auswirkung auf die Lösungen ist deutlich geringer, insbesondere hat  $\eta_4$  keinen merklichen Einfluss auf das nichtperkolierende Wasser. Dies liegt daran, dass sich  $\eta_4$  über die Menge an nichtperkolierendem Öl  $S_4$  auf die Lösung auswirkt. Diese geht vor allem in die Mobilität des Öls und in die Grenzflächenkraftsterme für Öl ein. Da in diesem Experiment die Mobilität der Fluide eine untergeordnete Rolle spielt und die Grenzflächenkräfte für Öl im Vergleich zu anderen Kräften gering sind, verändert der Massenaustauschparameter die Lösungen hier nur geringfügig.

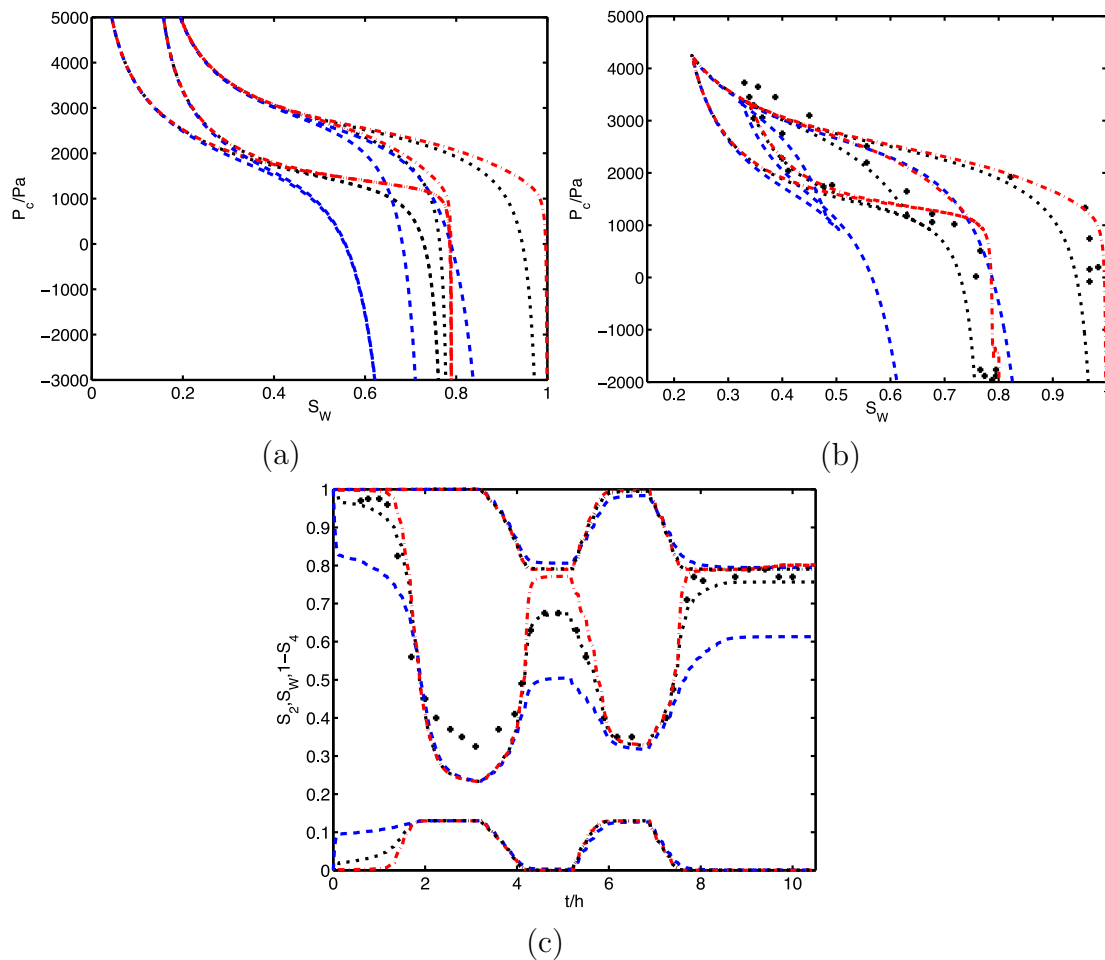
Abbildung 17.10 zeigt den Einfluss des Exponenten der Kapillarkraft  $\alpha$  für Wasser. Der Parameter  $\alpha$  verändert die Krümmung aller vier Haupthysteresekurven für kleine Wassersättigungen, wie Abbildung 17.10a zu entnehmen ist. Ein größerer Wert von  $\alpha$  verringert



**Abbildung 17.11:** Illustration des Einflusses des Kapillarkraftparameters  $P_a$  für Wasser. Abbildung (a) zeigt die vier Haupthysteresekurven von  $P_c(S_w)$  in der RDA, Abbildung (b) zeigt  $P_c(S_w)$  aus Simulation und Experiment und Abbildung (c) den Sättigungsverlauf jeweils an der Stelle  $x = 50$  cm. Die Referenzkurven mit  $P_a = 2700$  Pa sind schwarz gepunktet, die Kurven für  $P_a = 5400$  Pa blau gestrichelt und die Kurven für  $P_a = 1350$  Pa rot gestrichpunktet dargestellt. Die gemessenen Werte aus dem Labor werden in Form schwarzer Punkte gezeigt.

dabei die Krümmung. Da der Kapillarsaum im Experiment die meiste Zeit unterhalb von  $x = 50$  cm liegt, hat dieser Parameter einen starken Einfluss auf die Lösungen bei  $x = 50$  cm. Dies zeigt sich sowohl in der  $P_c(S_w)$  Kurve in Abbildung 17.10b, als auch im Sättigungsverlauf in Abbildung 17.10c. Hervorzuheben ist, dass die im Labor gemessenen Sättigungen - abgesehen von denen am Anfang und am Ende des Experiments - zwischen den Sättigungsverläufen für  $\alpha = 0.82$  und  $\alpha = 0.21$  liegen und die Übereinstimmung der Simulationen mit den experimentellen Werten durch eine Anpassung von  $\alpha$  unter Umständen verbessert werden kann.

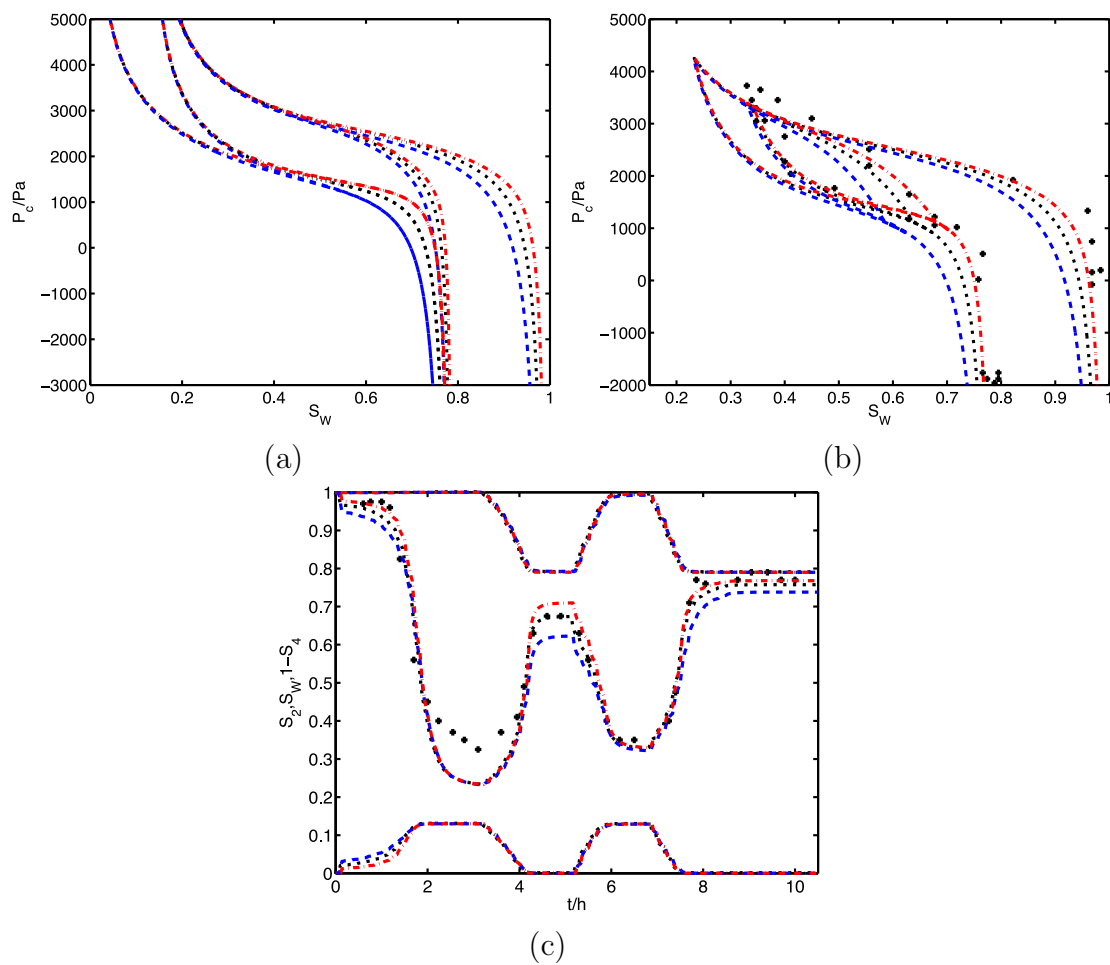
Abbildung 17.11 zeigt den Einfluss des Kapillarkraftparameters  $P_a$  für Wasser. Der Parameter  $P_a$  verschiebt vor allem die  $P_c(S)$  Kurven nach oben (größere Werte) und unten (kleinere



**Abbildung 17.12:** Illustration des Einflusses des Exponenten der Kapillarkraft  $\beta$  für Öl. Abbildung (a) zeigt die vier Haupthysteresekurven von  $P_c(S_w)$  in der RDA, Abbildung (b) zeigt  $P_c(S_w)$  aus Simulation und Experiment und Abbildung (c) den Sättigungsverlauf jeweils an der Stelle  $x = 50$  cm. Die Referenzkurven mit  $\beta = 1.6$  sind schwarz gepunktet, die Kurven für  $\beta = 3.2$  blau gestrichelt und die Kurven für  $\beta = 0.8$  rot gestrichelpunktet dargestellt. Die gemessenen Werte aus dem Labor werden in Form schwarzer Punkte gezeigt.

Werte). Dementsprechend verschiebt sich die Lage des Kapillarsaums in der Simulation des Experiments. Für  $P_a = 5400$  Pa ist der Kapillarsaum die meiste Zeit oberhalb von  $x = 50$  cm und für  $P_a = 1350$  Pa unterhalb davon. Dementsprechend deutlich wirkt sich der Parameter auf die Lösungen an dieser Stelle aus. Für diesen Parameter liegen alle im Labor gemessenen Sättigungen zwischen den Sättigungsverläufen für die beiden untersuchten Parameterwerte, so dass die Übereinstimmung der Simulationen mit den experimentellen Werten durch eine Anpassung von  $P_a$  unter Umständen verbessert werden kann.

Abbildung 17.12 zeigt den Einfluss des Exponenten der Kapillarkraft  $\beta$  für Öl. Der Parameter  $\beta$  verändert die Krümmung aller vier Haupthysteresekurven für große Wassersättigungen, wie Abbildung 17.12a zu entnehmen ist. Ein größerer Wert von  $\beta$  verringert dabei die Krüm-

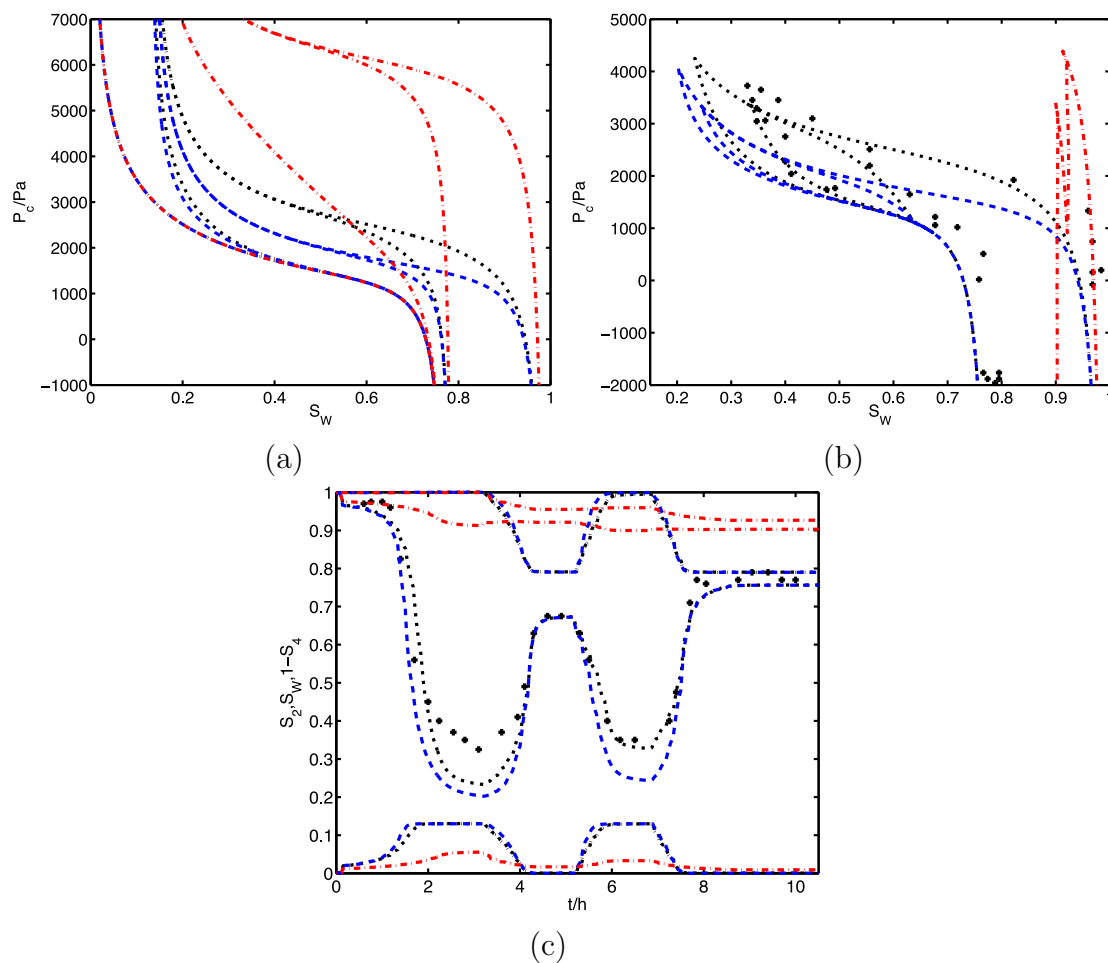


**Abbildung 17.13:** Illustration des Einflusses des Kapillarkraftparameters  $P_b$  für Öl. Abbildung (a) zeigt die vier Haupthysteresekurven von  $P_c(S_W)$  in der RDA, Abbildung (b) zeigt  $P_c(S_W)$  aus Simulation und Experiment und Abbildung (c) den Sättigungsverlauf jeweils an der Stelle  $x = 50$  cm. Die Referenzkurven mit  $P_b = 30$  Pa sind schwarz gepunktet, die Kurven für  $P_b = 60$  Pa blau gestrichelt und die Kurven für  $P_b = 15$  Pa rot gestrichelpunktet dargestellt. Die gemessenen Werte aus dem Labor werden in Form schwarzer Punkte gezeigt.

Der Einfluss des Parameters auf die Lösungen ist groß. Durch entsprechende Wahl des Parameters lassen sich Kurven ähnlich der Parametrierung nach van Genuchten (große Werte) oder Brooks-Corey (kleine Werte) für einzelne Äste der Hystereseschleife, erzielen. Für kleine Wassersättigungen ist der Einfluss des Parameters gering. Daher liegen die Messwerte in den Abbildungen 17.12 für hohe Wassersättigungen zwischen den untersuchten Kurven, geringe Sättigungen können davon jedoch auch abweichen.

Abbildung 17.13 zeigt den Einfluss des Kapillarkraftparameters  $P_b$  für Öl. Eigentlich wirkt der Parameter  $P_b$  spiegelverkehrt zu  $P_a$  und man würde erwarten, dass er den Kapillarsaum entsprechend verschiebt. Da er jedoch vom Betrag deutlich geringer ist, zeigen sich andere Effekte. Die unterschiedlichen Benetzungseigenschaften von Öl und Wasser machen hier den

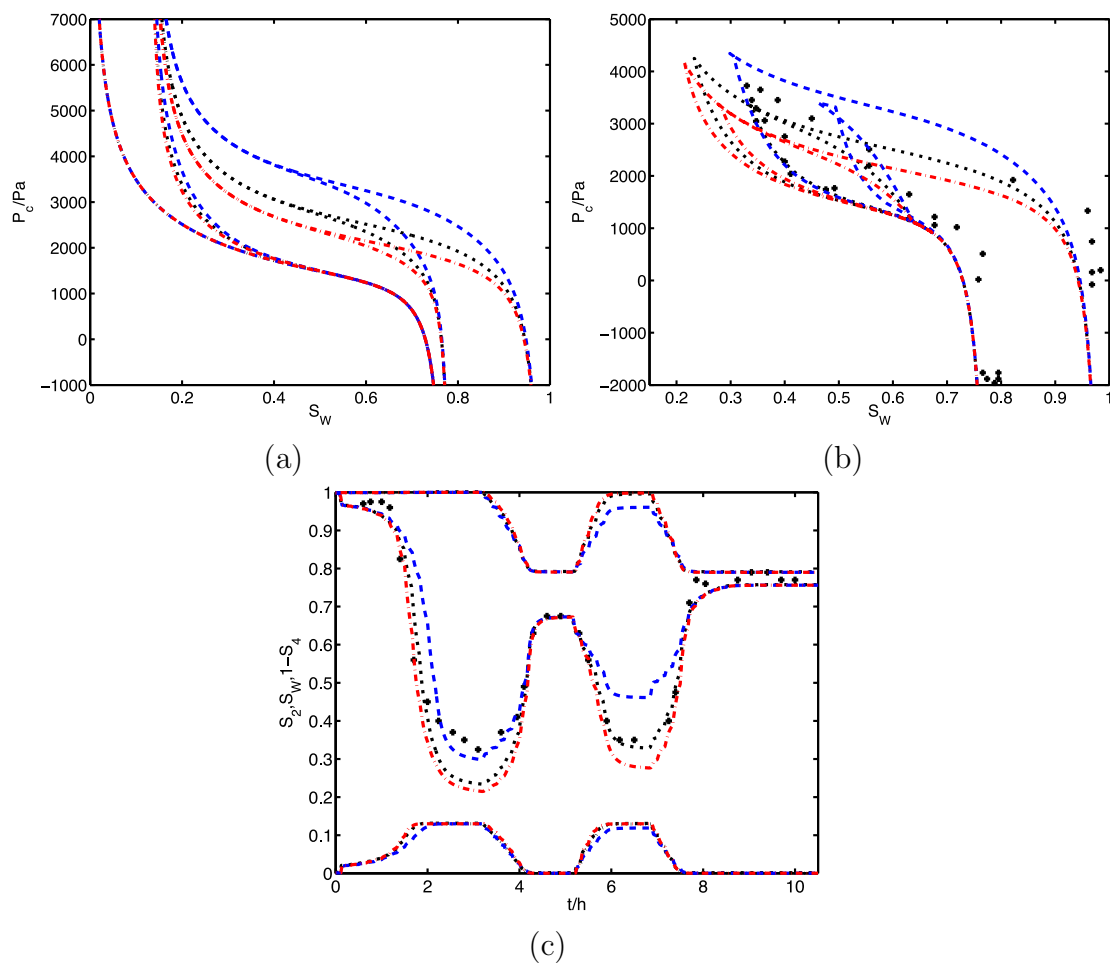




**Abbildung 17.14:** Illustration des Einflusses des Exponenten der Grenzflächenkraft  $\gamma$  für Wasser. Abbildung (a) zeigt die vier Haupthysteresekurven von  $P_c(S_w)$  in der RDA, Abbildung (b) zeigt  $P_c(S_w)$  aus Simulation und Experiment und Abbildung (c) den Sättigungsverlauf jeweils an der Stelle  $x = 50$  cm. Die Referenzkurven mit  $\gamma = 2.4$  sind schwarz gepunktet, die Kurven für  $\gamma = 4.8$  blau gestrichelt und die Kurven für  $\gamma = 1.2$  rot gestrichelpunktet dargestellt. Die gemessenen Werte aus dem Labor werden in Form schwarzer Punkte gezeigt.

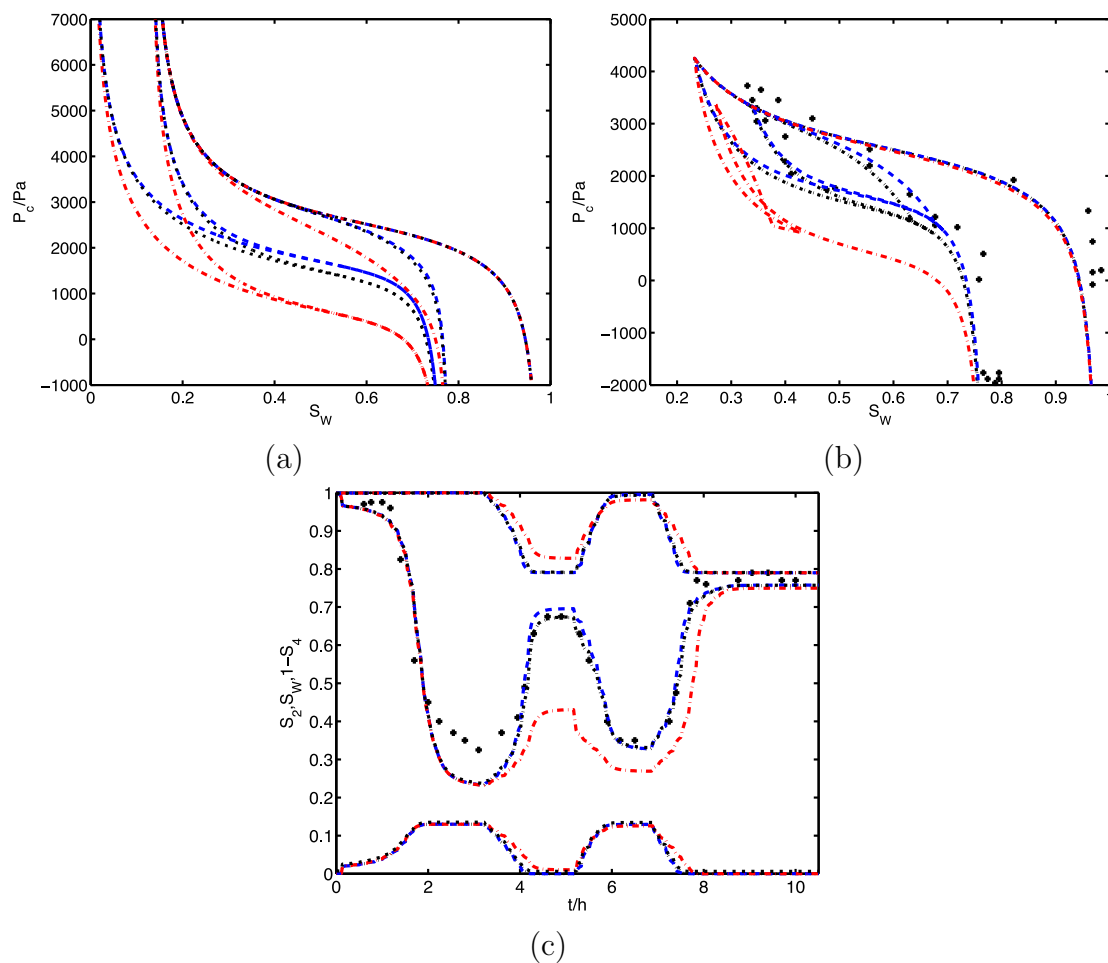
Unterschied aus. Zunächst ist festzuhalten, dass  $P_b$  nur auf Entwässerungskurven und dort nur für große Wassersättigungen einen merklichen Einfluss hat. Bei den Bewässerungskurven ist nämlich für große Wassersättigungen fast kein perkolierendes Öl mehr vorhanden und bei geringen Sättigungen dominieren andere Terme wie z.B. der Kapillarkraftsterm für perkolierendes Wasser. Ein größerer Wert für  $P_b$  verschiebt für große Wassersättigungen die  $P_c(S_w)$  Kurven etwas nach unten bzw. ein kleinerer Wert für  $P_b$  nach oben. Der Parameter kann dafür verwendet werden, die Simulationsergebnisse für große Sättigungen näher an die Messwerte zu bringen.

Abbildung 17.14 zeigt den Einfluss des Exponenten der Grenzflächenkraft  $\gamma$  für Wasser. Die Lösungen für den Exponenten  $\gamma = 1.2$  unterscheiden sich mit Ausnahme der primären Be-



**Abbildung 17.15:** Illustration des Einflusses des Grenzflächenkraftparameters  $P_2^*$  für Wasser. Abbildung (a) zeigt die vier Haupthysteresekurven von  $P_c(S_W)$  in der RDA, Abbildung (b) zeigt  $P_c(S_W)$  aus Simulation und Experiment und Abbildung (c) den Sättigungsverlauf jeweils an der Stelle  $x = 50$  cm. Die Referenzkurven mit  $P_2^* = 11000$  Pa sind schwarz gepunktet, die Kurven für  $P_2^* = 22000$  Pa blau gestrichelt und die Kurven für  $P_2^* = 5500$  Pa rot gestrichelpunktet dargestellt. Die gemessenen Werte aus dem Labor werden in Form schwarzer Punkte gezeigt.

wässerungskurve in Abbildung 17.14c massiv. Die primäre Bewässerungskurve wird nicht beeinflusst, da  $\gamma$  ein Exponent für die Sättigung des nichtperkolierenden Wassers  $S_2$  ist und dieses in einem primären Bewässerungsprozess nicht existiert. Der Exponent  $\gamma$  taucht in den Gleichungen, die die Dynamik beschreiben, in einem nichtlinearen Diffusionskoeffizienten auf. Er steht dabei nicht alleine im Exponenten sondern taucht als  $S_2^{\gamma-2}$  auf. Damit ist der große Unterschied der Profile für  $\gamma = 1.2$  auf der einen Seite und  $\gamma = 2.4$  und  $\gamma = 4.8$  auf der anderen Seite erklärt. Die Diskussion des Einflusses von  $\gamma$  auf die Lösung sei hier auf Werte  $\gamma > 2$  beschränkt. Ein größerer Wert für  $\gamma$  verringert dann die Fläche die von den Hauptkurven der Hystereseschleife eingeschlossen wird. Dabei werden die Entwässerungskurven in Richtung der Bewässerungskurven gestaucht. Die verringerte Bedeutung der Hysterese für größere  $\gamma$

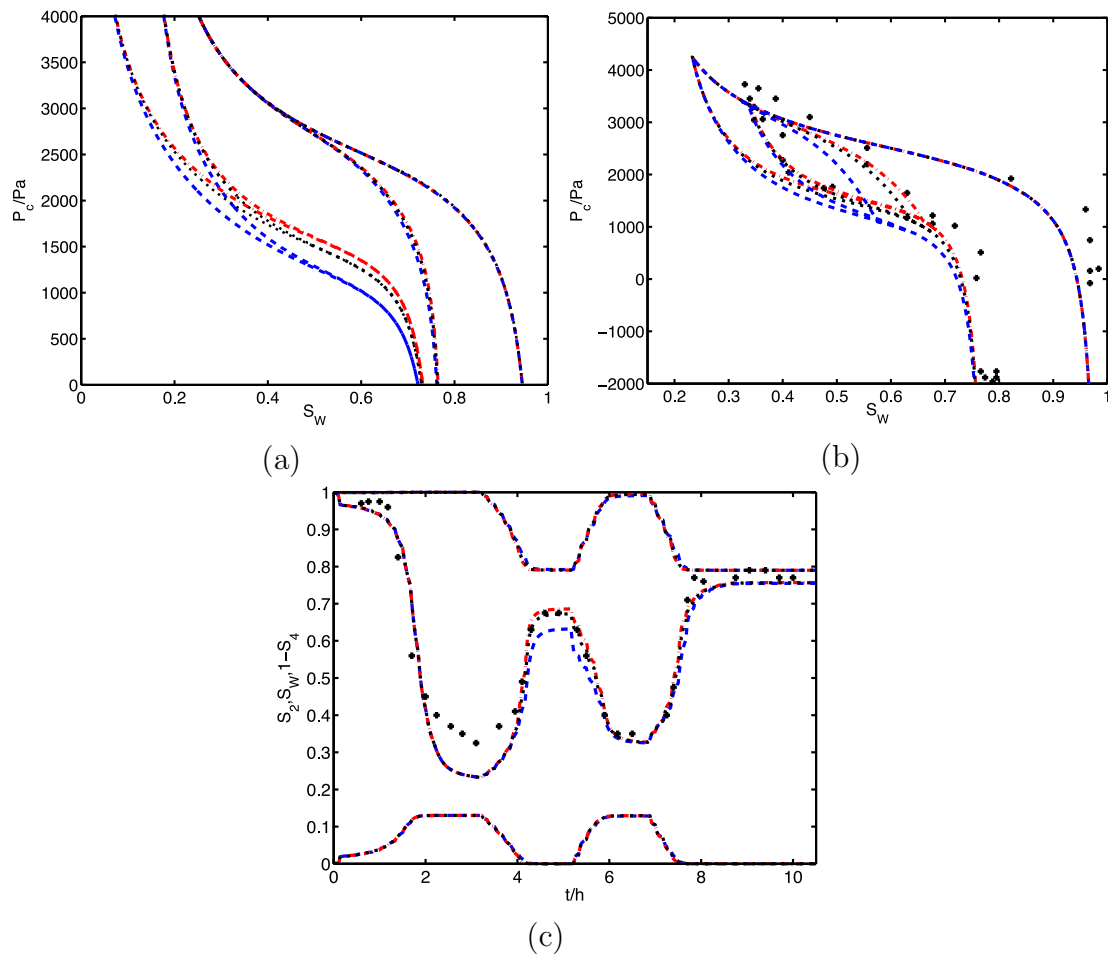


**Abbildung 17.16:** Illustration des Einflusses des Exponenten der Grenzflächenkraft  $\delta$  für Öl. Abbildung (a) zeigt die vier Haupthysteresekurven von  $P_c(S_w)$  in der RDA, Abbildung (b) zeigt  $P_c(S_w)$  aus Simulation und Experiment und Abbildung (c) den Sättigungsverlauf jeweils an der Stelle  $x = 50 \text{ cm}$ . Die Referenzkurven mit  $\delta = 2.9$  sind schwarz gepunktet, die Kurven für  $\delta = 5.8$  blau gestrichelt und die Kurven für  $\delta = 1.45$  rot gestrichelpunktet dargestellt. Die gemessenen Werte aus dem Labor werden in Form schwarzer Punkte gezeigt.

erkennt man auch an den Sättigungsverläufen in Abbildung 17.14c. Der Unterschied der Sättigungsniveaus in den beiden Zeitintervallen mit niedrigen Sättigungen ist geringer.

Abbildung 17.15 zeigt den Einfluss des Grenzflächenkraftparameters  $P_2^*$  für Wasser. Der Parameter  $P_2^*$  verringert für kleine Werte ebenfalls die Fläche, die von den Hauptkurven der Hystereseschleife eingeschlossen wird. Dies geschieht jedoch eher durch ein Verschieben der Entwässerungskurven, als durch eine Stauchung wie bei  $\gamma$ . An Abbildung 17.15 kann direkt abgelesen werden, dass auch eine moderate Veränderung der Fläche, welche von den Haupthysteresekurven umschlossen wird, deutliche Auswirkungen auf den Verlauf der Zwischenkurven hat, da sich die Veränderung direkt auf die Sättigungsverläufe auswirkt.

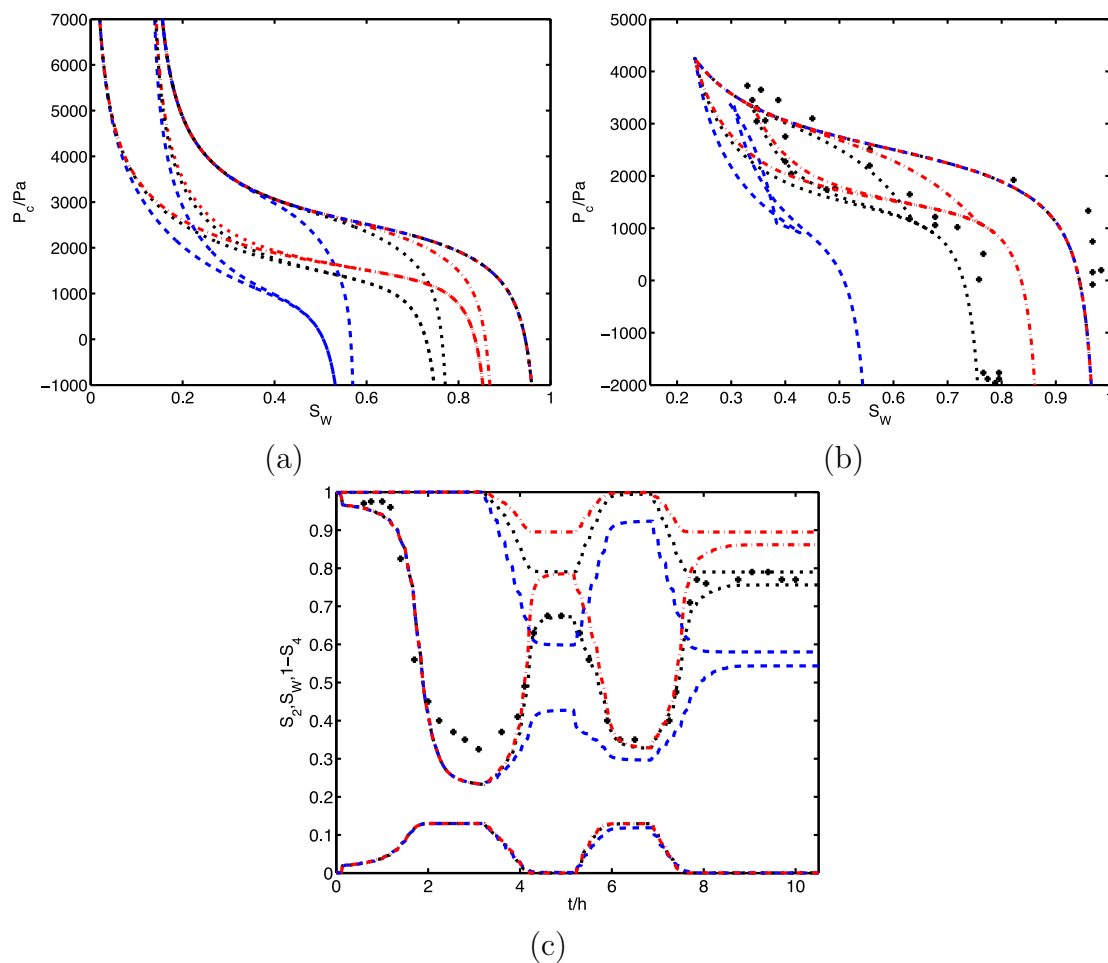
Abbildung 17.16 zeigt den Einfluss des Exponenten der Grenzflächenkraft  $\delta$  für Öl. Der



**Abbildung 17.17:** Illustration des Einflusses des Grenzflächenkraftparameters  $P_4^*$  für Öl. Abbildung (a) zeigt die vier Haupthysteresekurven von  $P_c(S_w)$  in der RDA, Abbildung (b) zeigt  $P_c(S_w)$  aus Simulation und Experiment und Abbildung (c) den Sättigungsverlauf jeweils an der Stelle  $x = 50$  cm. Die Referenzkurven mit  $P_4^* = 3000$  Pa sind schwarz gepunktet, die Kurven für  $P_4^* = 6000$  Pa blau gestrichelt und die Kurven für  $P_4^* = 1500$  Pa rot gestrichpunktet dargestellt. Die gemessenen Werte aus dem Labor werden in Form schwarzer Punkte gezeigt.

Einfluss des Exponenten der Grenzflächenkraft  $\delta$  für Öl auf die Bewässerungsäste in der  $P_c(S)$ -Kurve ist analog zum Einfluss von  $\gamma$  auf die Entwässerungsäste. Allerdings ist der Einfluss auch für  $\delta = 1.45$  noch moderat, so dass er in der Diskussion berücksichtigt wird. Hat sich der Exponent  $\gamma$  vor allem auf die niedrige Sättigungen im Sättigungsverlauf ausgewirkt, ist hier der Einfluss auf den erneuten Bewässerungsprozess nach der ersten Entwässerung am deutlichsten. Der Unterschied in allen Kurven für  $\delta = 2.9$  und  $\delta = 5.8$  ist gering. Man beachte, dass für beide  $\delta > 2$  gilt. Da für die Sättigungen der nichtperkolierenden Ölphase  $S_4 \in [0, S_{O_{im}} = 0.19]$  gilt und der Parameter  $P_4^*$  deutlich kleiner als  $P_2^*$  bzw.  $P_a$  ist, ist dies nicht überraschend.

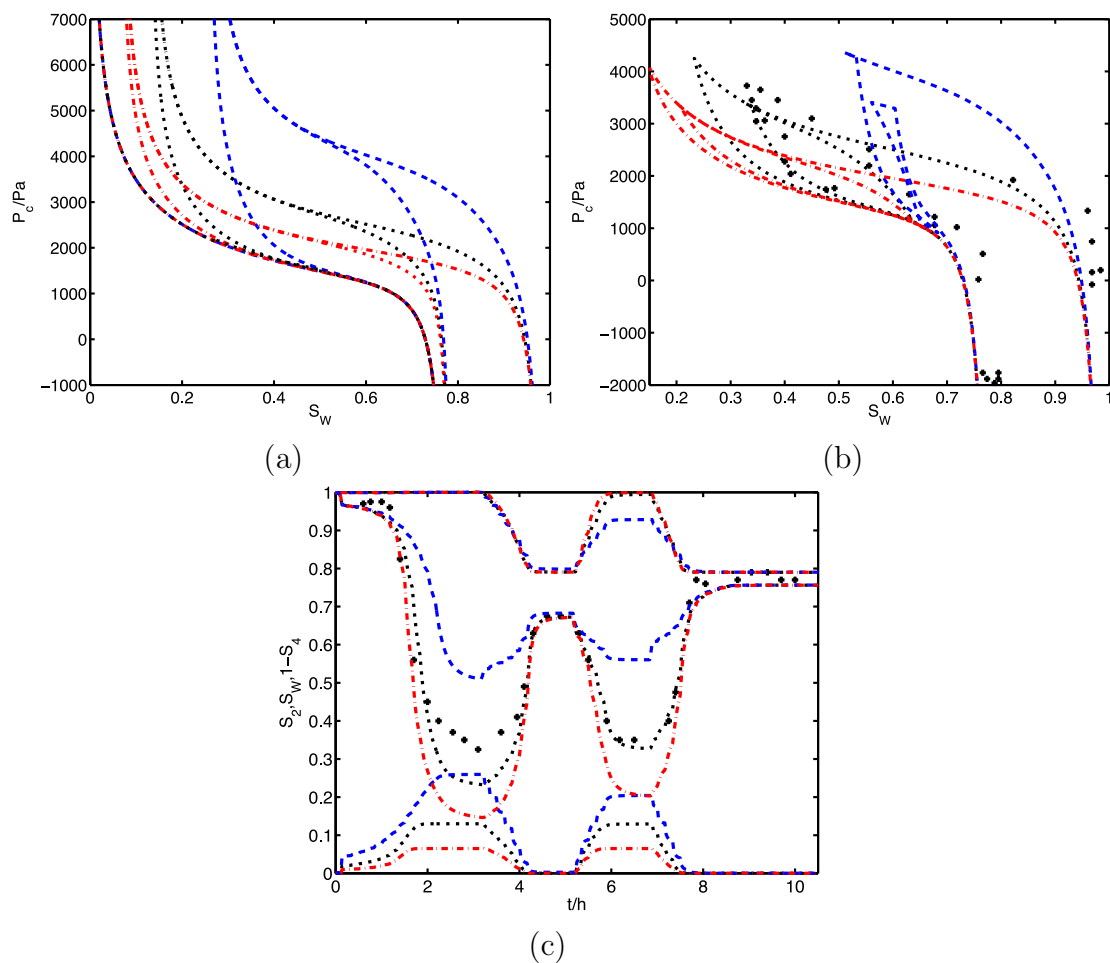
Abbildung 17.17 zeigt den Einfluss des Grenzflächenkraftparameters  $P_4^*$  für Öl. Der Einfluss



**Abbildung 17.18:** Illustration des Einflusses der beschränkenden Sättigung  $S_{Oim}$  für nichtperkolierendes Öl. Abbildung (a) zeigt die vier Haupthysteresekurven von  $P_c(S_w)$  in der RDA, Abbildung (b) zeigt  $P_c(S_w)$  aus Simulation und Experiment und Abbildung (c) den Sättigungsverlauf jeweils an der Stelle  $x = 50$  cm. Die Referenzkurven mit  $S_{Oim} = 0.21$  sind schwarz gepunktet, die Kurven für  $S_{Oim} = 0.42$  blau gestrichelt und die Kurven für  $S_{Oim} = 0.115$  rot gestrichpunktet dargestellt. Die gemessenen Werte aus dem Labor werden in Form schwarzer Punkte gezeigt.

des Parameters  $P_4^*$  auf die Bewässerungsäste der Haupthysteresekurven der  $P_c(S_w)$  Kurve ist erneut analog zum Einfluss von  $P_2^*$  auf deren Entwässerungsäste. Der Einfluss ist wegen des geringeren Wertes von  $P_4^*$  deutlich geringer. Er zieht sich aber durch alle hier diskutierten Kurven. Man vergleiche besonders die Sättigungsverläufe in Abbildung 17.15c und 17.17c.

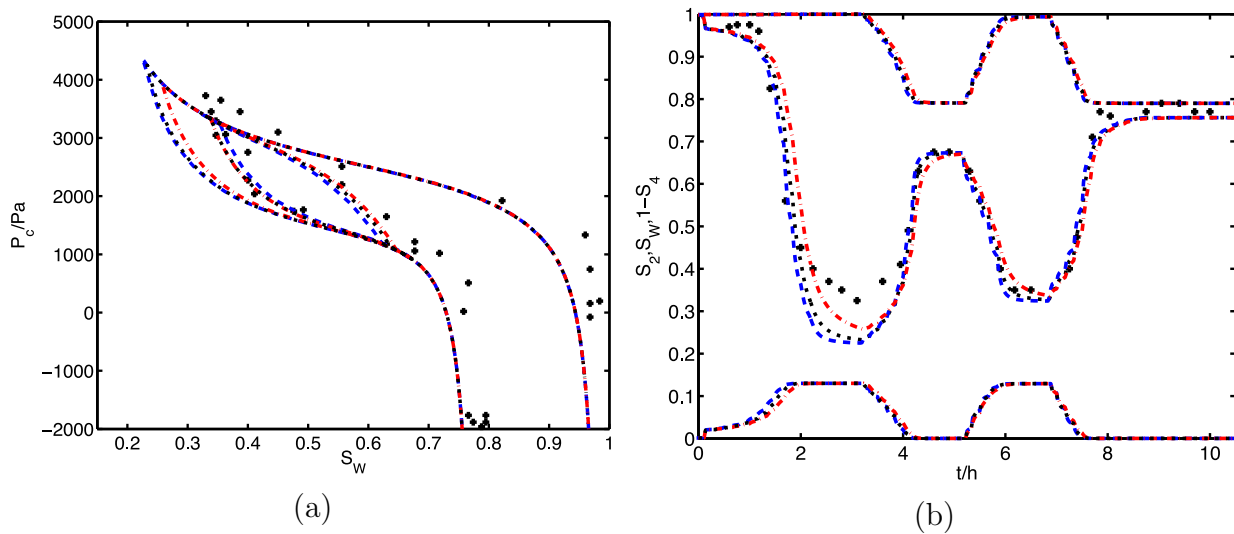
Abbildung 17.18 zeigt den Einfluss der beschränkenden Sättigung  $S_{Oim}$  für nichtperkolierendes Öl. Die Abbildung 17.18a zeigt, wie die Kurven in der Richtung der Sättigungen gestaucht werden. Davon ausgenommen sind die primären Entwässerungskurven, da für diese  $S_{Oim}$  keine Bedeutung hat. Nichtperkolierendes Öl ist bei primären Entwässerungskurven weder vorhanden noch entsteht es. Dementsprechend ist zu Beginn des Experiments auch kein Unterschied in den Sättigungsverläufen zu erkennen. Erst bei der erneuten Bewässerung



**Abbildung 17.19:** Illustration des Einflusses der beschränkenden Sättigung  $S_{Wdr}$  für nichtperkolierendes Wasser. Abbildung (a) zeigt die vier Haupthysteresekurven von  $P_c(S_w)$  in der RDA, Abbildung (b) zeigt  $P_c(S_w)$  aus Simulation und Experiment und Abbildung (c) den Sättigungsverlauf jeweils an der Stelle  $x = 50$  cm. Die Referenzkurven mit  $S_{Wdr} = 0.13$  sind schwarz gepunktet, die Kurven für  $S_{Wdr} = 0.26$  blau gestrichelt und die Kurven für  $S_{Wdr} = 0.065$  rot gestrichpunktet dargestellt. Die gemessenen Werte aus dem Labor werden in Form schwarzer Punkte gezeigt.

unterscheiden sich die Verläufe. Abbildung 17.18c ist zu entnehmen, dass für die Höhe der Sättigung nach einer Bewässerung die Menge an vorhandenem perkolierendem Öl ausschlaggebend ist. Diese ist nämlich für alle drei Parameterwerte  $S_{Oim}$  ungefähr gleich, während sich die Menge an nichtperkolierendem Öl und perkolierendem Wasser deutlich unterscheiden.

Abbildung 17.19 zeigt den Einfluss der beschränkenden Sättigung  $S_{Wdr}$  für nichtperkolierendes Wasser. Die Abbildung 17.19a zeigt wie die Kurven in der Richtung der Sättigungen gestaucht werden. Davon ausgenommen sind die primären Bewässerungskurven, da für diese  $S_{Wdr}$  keine Bedeutung hat. Nichtperkolierendes Wasser ist bei primärer Bewässerung weder vorhanden noch entsteht es. Da das Experiment mit einer Entwässerung beginnt, tritt ein Unterschied im Sättigungsverlauf für unterschiedliche Werte von  $S_{Wdr}$  direkt zu Beginn

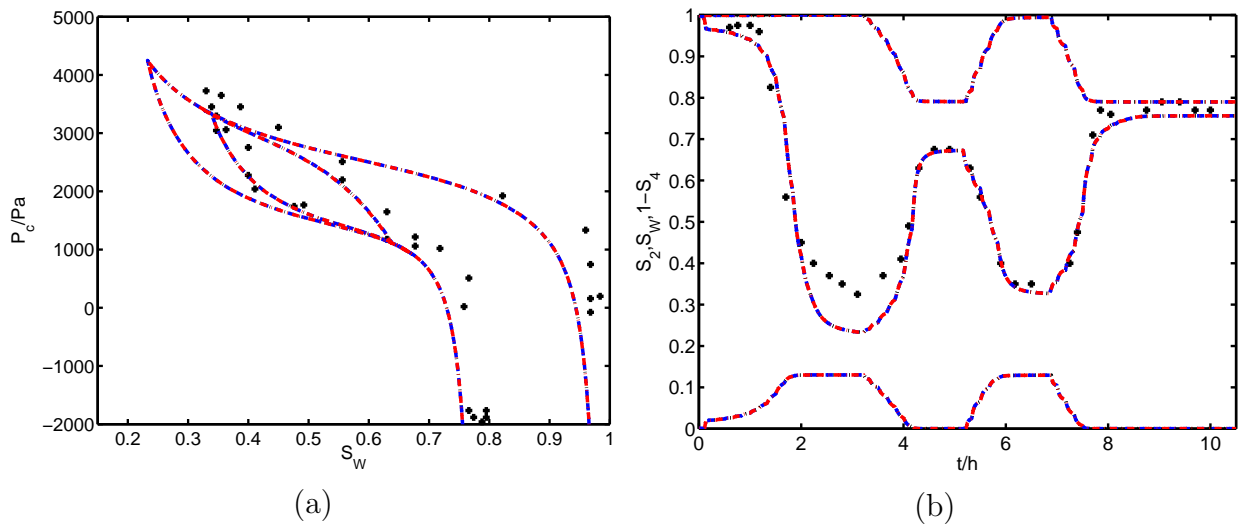


**Abbildung 17.20:** Illustration des Einflusses des verallgemeinerten Mobilitätskoeffizienten  $\Lambda_{11}$  für Wasser. Abbildung (a) zeigt  $P_c(S_w)$  aus Simulation und Experiment und Abbildung (b) den Sättigungsverlauf jeweils an der Stelle  $x = 50 \text{ cm}$ . Die Referenzkurven mit  $\Lambda_{11} = 1.12 \times 10^{-7} \text{ m}^3 \text{ s kg}^{-1}$  sind schwarz gepunktet, die Kurven für  $\Lambda_{11} = 2.24 \times 10^{-7} \text{ m}^3 \text{ s kg}^{-1}$  blau gestrichelt und die Kurven für  $\Lambda_{11} = 0.551 \times 10^{-7} \text{ m}^3 \text{ s kg}^{-1}$  rot gestrichelpunktet dargestellt. Die gemessenen Werte aus dem Labor werden in Form schwarzer Punkte gezeigt.

des Experiments auf. Das Sättigungsprofil stellt sich für kleine Wassersättigungen weitgehend so ein, dass die perkolierenden Wassersättigungen ähnlich groß sind. Allerdings wirkt sich auch die Menge an nichtperkolierendem Wasser auf den Kapillarsaum aus, sodass sich die perkolierenden Wassersättigungen  $S_1$  für die unterschiedlichen Parameterwerte geringfügig unterscheiden. Dasselbe gilt auch für die Konfiguration nach der zweiten Entwässerung. Nach den Bewässerungen unterscheiden sich die Sättigungswerte nur geringfügig. Die Wassersättigungen werden bei  $x = 50 \text{ cm}$  nämlich groß genug, so dass die unterschiedlichen Hysteresepfade keine Rolle mehr spielen. Vergleiche hierzu das Ende der Bewässerungsäste in Abbildung 17.19a.

Abbildung 17.20 zeigt den Einfluss des verallgemeinerten Mobilitätskoeffizienten  $\Lambda_{11}$  für Wasser. Die Darstellung der vier Haupthysteresekurven  $P_c(S_w)$  in der RDA ist überflüssig, da sie nicht von  $\Lambda_{11}$  abhängen. In den gemessenen  $P_c(S_w)$ -Kurven in Abbildung 17.20a ist ein kleiner Effekt zu erkennen. Im Sättigungsverlauf in Abbildung 17.20b ist der Effekt dagegen deutlich sichtbar. Wenig überraschend ändert sich die Wassersättigung bei verringerter Mobilität  $\Lambda_{11}$  verzögert. Für die halbierte Mobilität ist außerdem festzustellen, dass sich die Gleichgewichtssättigungen in den Zeitabschnitten mit konstantem Druck noch nicht eingestellt haben, wenn nach ca. 1 h der Druck wieder verändert wird.

Abbildung 17.21 zeigt den Einfluss des verallgemeinerten Mobilitätskoeffizienten  $\Lambda_{33}$  für Öl.



**Abbildung 17.21:** Illustration des Einflusses des verallgemeinerten Mobilitätskoeffizienten  $\Lambda_{33}$  für Öl. Abbildung (a) zeigt  $P_c(S_w)$  aus Simulation und Experiment und Abbildung (b) den Sättigungsverlauf jeweils an der Stelle  $x = 50 \text{ cm}$ . Die Referenzkurven mit  $\Lambda_{33} = 4.68 \times 10^{-5} \text{ m}^3 \text{ s kg}^{-1}$  sind schwarz gepunktet, die Kurven  $\Lambda_{33} = 9.36 \times 10^{-5} \text{ m}^3 \text{ s kg}^{-1}$  blau gestrichelt und die Kurven für  $\Lambda_{33} = 2.34 \times 10^{-5} \text{ m}^3 \text{ s kg}^{-1}$  rot gestrichpunktet dargestellt. Die gemessenen Werte aus dem Labor werden in Form schwarzer Punkte gezeigt.

Die Darstellung der vier Haupthysteresekurven  $P_c(S_w)$  in der RDA ist überflüssig, da  $\Lambda_{33}$  nicht in die Kurven eingeht. Genauer betrachtet ist auch die Darstellung der gemessenen  $P_c(S_w)$  in Abbildung 17.21a überflüssig, da die Mobilität des Öls (an dieser Stelle sollte man trotz der eingeführten Terminologie eher von Luft sprechen) um zwei Größenordnungen größer ist als die des Wassers und damit in guter Näherung als unendlich mobil angenommen werden kann. Eine Verdopplung oder Halbierung des Wertes wirkt sich daher nicht sichtbar auf die dargestellten Ergebnisse aus.



---

# 18 Synopsis auf Englisch

## 18.1 Introduction

The most commonly used models to simulate multiphase flow systems on laboratory and field scales show several deficiencies when compared with experimental data. A recent macroscopic model of biphasic flow in porous media [Hilf 98, Hilf 00, Hilf 06a, Hilf 06b, Hilf 06c] aims to cope with these deficiencies by taking into account the different hydrodynamic properties of fluid parts that do percolate and fluid parts that do not percolate. Quasi-stationary results in the residual decoupling approximation (RDA) of this model are promising [Hilf 06b]. Further analysis of the model, from a mathematical and technical perspective as well as from the physical and modeling perspective are investigated in this thesis. The addressed mathematical and technical questions are:

- Is the set of equations complete? Do time-dependent problems require further conditions?
- What constraints to initial and boundary value problems are necessary to obtain well-posed problems?
- Are there any mathematical similarities between the traditional approaches and the new one? Do these similarities permit the employment of the existing numerical or analytical methods for the DBRMMWBL-model<sup>1</sup> to the new model?
- Are the constitutive assumptions mathematically sound? Do assumptions lead to mathematical difficulties? Are adaptations necessary?

The addressed physical and modeling questions are:

---

<sup>1</sup>In this thesis, the commonly applied model for multiphase flow phenomena in porous media is named the DBRMMWBL-model after the initials of the important contributors Darcy, Buckingham, Richards, Muskat, Meres, Wyckoff, Botset and Leverett.

- What are the physical similarities and differences between the traditional and the new approach? Which phenomena of multiphase flow in porous media are predicted by both, only one of the two or none of these approaches?
- Are there experiments which illustrate the similarities and differences between the approaches? What are appropriate initial and boundary conditions for the newly introduced unknowns to model laboratory experiments?
- Do the constitutive assumptions yield physically sound results? Are adaptations necessary?
- Are there approximations to and limiting cases of the model which simplify calculations?

These questions are addressed in four different parts of the thesis. They are summarized in individual sections here. The first section considers the modeling aspects. The second section contains a survey of the obtained analytical solutions. In the third section, the developed algorithms are explained. In the fourth section, exemplary results of the simulations are presented. A summary and conclusion are given in the last section.

## 18.2 The model

The mathematical model was originally formulated in [Hilf 06b, Hilf 06a, Hilf 06c]. The key idea of this model is that the percolating and nonpercolating fluid parts have different hydrodynamic properties, which have to be taken into account on the laboratory and field scales. Therefore, they are treated as individual phases and hence, a porous medium which contains two fluids is modeled as a four phase system. However, the model has to take into account that percolating and nonpercolating fluid phases may exchange mass by breakup and coalescence. Originally, the model was formulated for three dimensions. In this work, the discussion of the model is restricted to one dimension, because it is possible to point out many similarities and differences to the standard approaches in one dimension. A one-dimensional porous medium is an appropriate idealization of experiments with columns, whose lengths greatly exceed their diameter and whose walls are impermeable so that they inhibit transversal flow.

### 18.2.1 Balance laws and constitutive assumptions

This work considers immiscible displacement inside a one-dimensional, homogeneous, isotropic and incompressible porous medium without isolated pores. The connected pore space of the medium is filled with two incompressible and immiscible fluids called water  $\mathbb{W}$  and oil  $\mathbb{O}$ . The fluids and the medium are described on length scales much larger than the pore scale. On these length scales a continuum mechanical description in terms of saturation, pressure and velocity fields applies. The key concept of the generalized model is that the percolating (=connected) and the nonpercolating (=not connected) phases have to be treated separately. After the notation of [Hilf 06c] the percolating phase of water is indexed by  $i = 1$  and its nonpercolating phase is indexed by  $i = 2$ . The water saturation is obtained as  $S_{\mathbb{W}} = S_1 + S_2$ . The percolating oil phase is indexed as  $i = 3$  and its nonpercolating phase by  $i = 4$ . The oil saturation is given as  $S_{\mathbb{O}} = S_3 + S_4$ . For incompressible fluids in incompressible porous media, the volume conservation requires

$$S_1 + S_2 + S_3 + S_4 = 1 \quad (18.1)$$

to hold. The differential form of the mass balance of fluid phase  $i$  is

$$\frac{\partial(\phi S_i \varrho_i)}{\partial t} + \frac{\partial(\phi S_i \varrho_i v_i)}{\partial x} = M_i, \quad (18.2)$$

where  $\phi$  denotes the porosity,  $\varrho_i$  the density and  $S_i(x, t)$ ,  $v_i(x, t)$  are saturation and velocity of phase  $i$  as functions of position  $x \in [x_\ell, x_r]$  and time  $t \in \mathbb{R}_+$ . The quantities  $M_i$  denote the mass transfer rates from all other phases into phase  $i$ . The momentum balance is written as ( $i = 1, 2, 3, 4$ )

$$\phi_i \varrho_i \frac{D^i}{Dt} v_i - \phi_i \frac{\partial \Sigma_i}{\partial x} - \phi_i F_i = m_i - v_i M_i, \quad (18.3)$$

where  $\Sigma_i$  is the stress tensor in the  $i$ th phase,  $F_i$  is the body force per unit volume acting on the  $i$ th phase,  $m_i$  is the momentum transfer into phase  $i$  from all other phases, and  $D^i/Dt = \partial/\partial t + v_i \partial/\partial x$  denotes the material derivative of phase  $i$ .

The constitutive assumptions of the model are

$$M_i = -M_j = \eta_j \left( \frac{S_j - S_j^*}{S_{\mathbb{W}}^* - S_{\mathbb{W}}} \right) \frac{\partial S_{\mathbb{W}}}{\partial t} \quad (18.4)$$

for the mass transfer rate with the index pair  $(i, j) \in \{(1, 2), (3, 4)\}$  and the parameters

$\eta_2, \eta_4$ . The limiting saturations  $S_{\text{W}}^*, S_2^*, S_4^*$  were originally defined as

$$S_{\text{W}}^* = (1 - S_{\text{Oim}})\Theta(\partial_t S_{\text{W}}) + S_{\text{Wdr}}[1 - \Theta(\partial_t S_{\text{W}})], \quad (18.5a)$$

$$S_2^* = S_{\text{Wdr}}[1 - \Theta(\partial_t S_{\text{W}})], \quad (18.5b)$$

$$S_4^* = S_{\text{Oim}}[1 - \Theta(\partial_t S_{\text{O}})], \quad (18.5c)$$

where  $S_{\text{Wdr}}, S_{\text{Oim}}$  denote limiting saturations for  $S_2, S_4$  and  $\Theta(x)$  is the Heaviside function. The limiting saturations  $S_{\text{W}}^*, S_2^*, S_4^*$  have been altered to

$$\begin{aligned} S_{\text{W}}^* &= \{1 - \min[S_{\text{Oim}}, (1 - \epsilon_{\text{M}})S_{\text{O}}]\} \Theta(\partial_t S_{\text{W}}) \\ &\quad + \min[S_{\text{Wdr}}, (1 - \epsilon_{\text{M}})S_{\text{W}}][1 - \Theta(\partial_t S_{\text{W}})], \end{aligned} \quad (18.6a)$$

$$S_2^* = \min[S_{\text{Wdr}}, (1 - \epsilon_{\text{M}})S_{\text{W}}][1 - \Theta(\partial_t S_{\text{W}})], \quad (18.6b)$$

$$S_4^* = \min[S_{\text{Oim}}, (1 - \epsilon_{\text{M}})S_{\text{O}}][\Theta(\partial_t S_{\text{O}})] \quad (18.6c)$$

to permit imbibition processes at  $S_{\text{W}} > 1 - S_{\text{Oim}}$  and drainage processes at  $S_{\text{W}} < S_{\text{Wdr}}$ . A new parameter  $\epsilon_{\text{M}} \in [0, 1]$  is introduced, which is a regularisation parameter for  $\epsilon_{\text{M}} \rightarrow 0$  and a modeling parameter for larger values. For  $S_{\text{Wdr}}/(1 - \epsilon_{\text{M}}) < S_{\text{W}} < 1 - S_{\text{Oim}}/(1 - \epsilon_{\text{M}})$ , drainage processes for  $S_{\text{W}} > 1 - S_{\text{Oim}}/(1 - \epsilon_{\text{M}})$ , and imbibition processes for  $S_{\text{W}} < S_{\text{Wdr}}/(1 - \epsilon_{\text{M}})$  the definitions (18.6) and (18.5) are identical. The stress tensors are given by

$$\Sigma_1 = -P_1, \quad \Sigma_2 = -P_3 + \gamma P_2^* S_2^{\gamma-1}, \quad (18.7a)$$

$$\Sigma_3 = -P_3, \quad \Sigma_4 = -P_1 + \delta P_4^* S_4^{\delta-1}, \quad (18.7b)$$

where  $P_1, P_3$  denote the averaged pressures of the percolating phases and the parameters  $\gamma, \delta, P_2^*, P_4^*$  account for the internal energy stored in the common interface between the fluid phases. The body forces are given as

$$F_1 = \sin \vartheta \varrho_{\text{W}} g, \quad F_2 = \sin \vartheta \varrho_{\text{W}} g + P_{\text{a}} \frac{\partial}{\partial x} S_1^{-\alpha}, \quad (18.8a)$$

$$F_3 = \sin \vartheta \varrho_{\text{O}} g, \quad F_4 = \sin \vartheta \varrho_{\text{O}} g + P_{\text{b}} \frac{\partial}{\partial x} S_3^{-\beta}, \quad (18.8b)$$

where  $\vartheta$  denotes the angle of the space-axis towards gravity,  $g$  denotes the gravity acceleration and the parameters  $\alpha, \beta, P_{\text{a}}, P_{\text{b}}$  account for capillary forces. Note that the densities of percolating and nonpercolating phases do not differ and  $\varrho_{\text{W}} = \varrho_1 = \varrho_2$  as well as  $\varrho_{\text{O}} = \varrho_3 = \varrho_4$

hold true. The momentum exchange is given by linear viscous drag as

$$m_i = \sum_{j=1}^5 R_{ij} (v_j - v_i), \quad (18.9)$$

where the parameter matrix  $R$  scales the viscous coupling and the index  $j = 5$  represents the solid matrix.

### 18.2.2 Closure conditions

The balance laws (18.1), (18.2) and (18.3) combined with the constitutive assumptions given above provide 9 equations for the 10 unknowns  $S_i, v_i, P_1, P_3$  with  $i = 1, 2, 3, 4$ . In the stationary case, the momentum balances form constraints to the pressures which close the system. For time-dependent solutions, a closure condition is required. Two closure conditions are proposed and used here.

**Negligible pressure differences:** In many applications like oil recovery, the applied pressures are large enough to neglect differences in the pressures of the two percolating phases. Here we use this observation to assume

$$P = P_1 = P_3. \quad (18.10)$$

**Self-consistent closure condition:** The self-consistent closure condition follows naturally from many limiting cases. One such limit is the RDA. A second, more general limiting case is the limit of vanishing velocities, i.e.  $v_i \rightarrow 0$  for  $i = 1, 2, 3, 4$ . Adding equations (18.3) for  $i = 2$  and  $i = 3$  and subtracting equations (18.3) with  $i = 1$  and  $i = 4$  from the result gives

$$\frac{\partial P_3}{\partial x} = \frac{\partial P_1}{\partial x} + \frac{1}{2} \frac{\partial}{\partial x} \left( P_a S_1^{-\alpha} - P_b S_3^{-\beta} + \gamma P_2^* S_2^{\gamma-1} - \delta P_4^* S_4^{\delta-1} \right) \quad (18.11)$$

for the pressure gradients in the stationary case. This closure condition is used to extend the RDA to dynamic regimes.

### 18.2.3 Approximations

The balance laws (18.1), (18.2) and (18.3) combined with the constitutive assumptions and the closure conditions (18.10) or (18.11) form a system of ten nonlinear coupled partial

differential and algebraic equations. The challenge of finding numerical or analytical solutions for the model may be eased by considering approximations. These approximations have physical interpretations and the restrictions they impose on the validity of the model are understood.

**Negligible inertia:** For typical subsurface flows, the contribution of the inertia to the momentum balance is negligible. Hence, the terms

$$\phi_i \rho_i \frac{D^i}{Dt} v_i = 0 \quad (18.12)$$

with  $i = 1, 2, 3, 4$  may be ignored.

**Viscous domination:** It is assumed that viscous drag dominates the momentum transfer such that

$$R_{15} \gg M_1 \quad \text{and} \quad R_{35} \gg M_3 \quad (18.13)$$

holds true. In this case, the resistance matrix  $\tilde{R}(S_W, S_2, S_4, \partial_t S_W) = \tilde{R}$  becomes a constant matrix.

**Immobile nonpercolating phases:** The nonpercolating phases are almost immobile if the conditions

$$R_{25} \gg R_{ij} \quad \text{and} \quad R_{45} \gg R_{ij} \quad (18.14)$$

hold true for all pairs  $(i, j)$  with  $i, j = 1, 2, 3, 4, 5$  such that  $(i, j) \neq (2, 5)$  and  $(i, j) \neq (4, 5)$ . In the limit  $R_{25} \rightarrow \infty$ ,  $R_{45} \rightarrow \infty$  only the components  $\lambda_{11}, \lambda_{13}, \lambda_{31}, \lambda_{33}$  of the mobility matrix (see equation (18.16) below) differ from zero. The approximation may be justified physically because the motion of contact lines on the internal surface requires the overcoming of capillary forces and this creates an additional resistance which is much higher than the viscous drag.

## 18.2.4 Analytic reformulations

**Mass balance based formulation:** The momentum balances (18.3) may be solved for the velocities if the inertia is neglected. Multiplying the result with the corresponding phase

volume density  $\phi S_i$ ,  $i \in \{1, 2, 3, 4\}$  yields

$$\begin{pmatrix} q_1 \\ q_2 \\ q_3 \\ q_4 \end{pmatrix} := \begin{pmatrix} \phi S_1 v_1 \\ \phi S_2 v_2 \\ \phi S_3 v_3 \\ \phi S_4 v_4 \end{pmatrix} = \Lambda \begin{pmatrix} \partial_x \Sigma_1 + F_1 \\ \partial_x \Sigma_2 + F_2 \\ \partial_x \Sigma_3 + F_3 \\ \partial_x \Sigma_4 + F_4 \end{pmatrix}, \quad (18.15)$$

where volume flux densities  $q_i$  and the mobility matrix  $\Lambda$  have been introduced. The components of  $\Lambda$  are given as

$$\lambda_{ij}(S_{\mathbb{W}}, S_2, S_4, \partial_t S_{\mathbb{W}}) := \phi^2 S_i S_j [\tilde{R}^{-1}]_{ij} \quad (18.16)$$

in terms of the inverse of  $\tilde{R}$ . The volume flux densities are inserted into the mass balances (18.2). Through a linear combination of the resulting equations and the application of volume conservation (18.1) one obtains

$$\phi \frac{\partial S_{\mathbb{W}}}{\partial t} + \frac{\partial q_{\mathbb{W}}}{\partial x} = 0, \quad (18.17a)$$

$$\varrho_{\mathbb{W}} \phi \frac{\partial S_2}{\partial t} + \varrho_{\mathbb{W}} \frac{\partial q_2}{\partial x} = -M_1, \quad (18.17b)$$

$$\varrho_{\mathbb{O}} \phi \frac{\partial S_4}{\partial t} + \varrho_{\mathbb{O}} \frac{\partial q_4}{\partial x} = -M_3, \quad (18.17c)$$

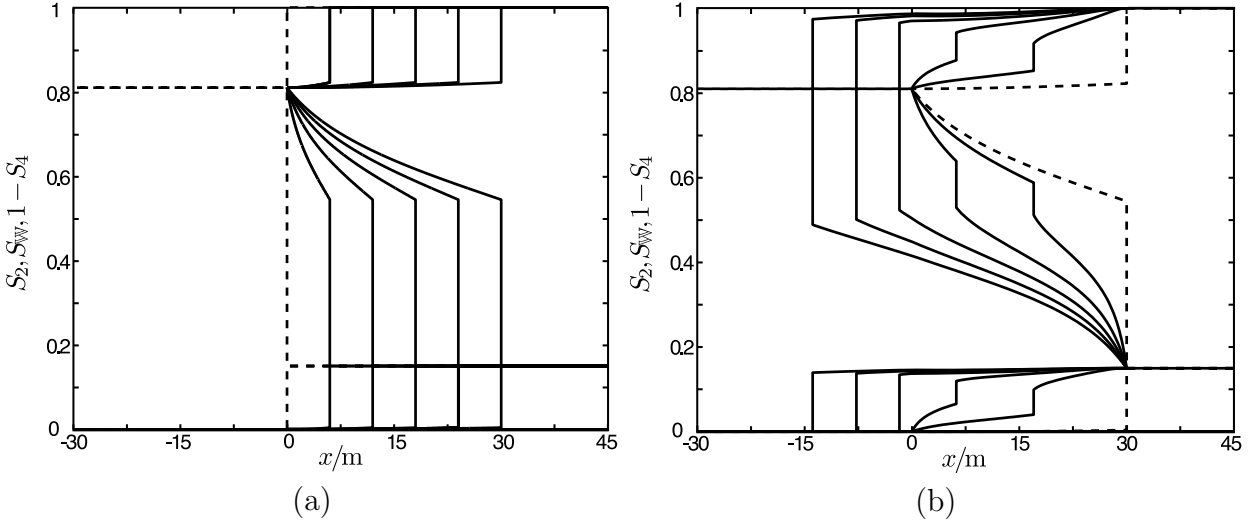
$$\frac{\partial}{\partial x} (q_{\mathbb{W}} + q_{\mathbb{O}}) = 0, \quad (18.17d)$$

where the flux densities of water  $q_{\mathbb{W}} = q_1 + q_2$  and oil  $q_{\mathbb{O}} = q_3 + q_4$  are introduced. Note that equation (18.17a) is identical to the transport equation of the DBRMMWBL-model and equation (18.17d) is like its elliptic pressure equation, as formulated in many textbooks, e.g. [Aziz 79, Helm 97].

**Fractional flow formulation with immobile nonpercolating phases:** Immobile nonpercolating phases permit the introduction of the fractional flow function  $f_{\mathbb{W}}$  and the fractional mobility  $\lambda$  in analogy to the DBRMMWBL-model [Aziz 79, Dull 92] as

$$f_{\mathbb{W}}(S_{\mathbb{W}}, S_2, S_4) = \frac{\lambda_{\mathbb{W}}}{\lambda_{\mathbb{W}} + \lambda_{\mathbb{O}}}, \quad (18.18a)$$

$$\lambda(S_{\mathbb{W}}, S_2, S_4) = \frac{\lambda_{11} \lambda_{33} - \lambda_{13} \lambda_{31}}{\lambda_{\mathbb{W}} + \lambda_{\mathbb{O}}} \quad (18.18b)$$



**Figure 18.1:** Saturation profiles  $S_2(x)$ ,  $S_w(x)$ ,  $1 - S_4(x)$  for the generalized Buckley-Leverett problem with flow reversal. Figure (a) represents the injection of water until  $t = t_r = 15$  d. Figure (b) shows the reversed flow from  $t = 15$  d until  $t = 30$  d. In each graph the corresponding initial profiles are shown as dashed lines. Solid lines represent profiles at equidistant times  $\Delta t = 3$  d.

with  $\lambda_w = \lambda_{11} + \lambda_{13}$  and  $\lambda_\circ = \lambda_{31} + \lambda_{33}$ . By inserting them into equation (18.17a-c), one obtains a set of three coupled nonlinear partial differential equations

$$\phi \frac{\partial S_w}{\partial t} + q_{\text{tot}}(t) \frac{\partial}{\partial x} f_w + \frac{\partial}{\partial x} [\lambda (F_1 - F_3)] + \frac{\partial}{\partial x} \left( \lambda \frac{\partial P_c}{\partial x} \right) = 0, \quad (18.19a)$$

$$\phi \varrho_w \frac{\partial S_2}{\partial t} = -M_1, \quad (18.19b)$$

$$\phi \varrho_\circ \frac{\partial S_4}{\partial t} = -M_3 \quad (18.19c)$$

for the saturations  $S_w, S_2, S_4$ . If the flux density  $q_{\text{tot}} = q_w + q_\circ$  is imposed, it is not necessary to solve the equation (18.17d) because then the equations (18.19) are a closed system of partial differential equations.

## 18.3 Analytical and quasi-analytical solutions

### 18.3.1 Generalized Buckley-Leverett problem

For the generalized Buckley-Leverett problem, the fractional flow formulation (18.19) for immobile nonpercolating phases with imposed flux is considered. When the process, drainage or imbibition, is locally fixed for a given time period, the equations (18.19b) and (18.19c) are integrable and one obtains algebraic equations  $S_2(S_w), S_4(S_w)$  for the nonpercolating

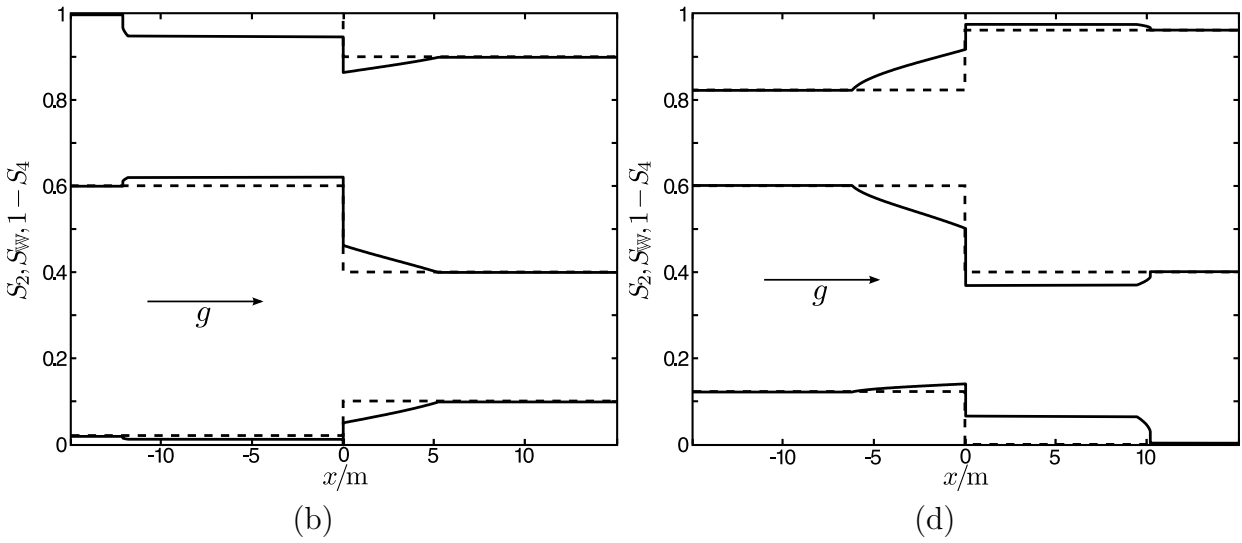


saturations. Using these algebraic equations to eliminate the nonpercolating saturations as unknowns from equation (18.19a), the first-order hyperbolic limit of equation (18.19a) can be solved by the method of characteristics if appropriate initial and boundary conditions are given.

Figure 18.1 gives an example of solutions to initial and boundary value problems that model experiments with a homogeneous, horizontally posed, infinitely long porous column. The initial conditions are homogeneous with one discontinuity (dashed lines in Figure 18.1a) and the initial flux is positive. An imbibition rarefaction-shock wave emanates from the discontinuity into the right half of the column. It reduces the nonpercolating water phase and produces nonpercolating oil (see Figure 18.1a). At  $t = t_r$ , the direction of the flow is reversed and a drainage takes place on the left hand side of the position where the shockfront was at  $t = t_r$ . Now nonpercolating water is produced and nonpercolating oil is reduced (see Figure 18.1b). After the flow reversal, the shock forms in the middle of the drainage wave. The drainage wave turns into a rarefaction-shock wave when its shock has passed the rarefaction fan of the earlier imbibition wave. For  $t \leq t_r$ , the solution is calculated analytically. For  $t > t_r$ , the solution is obtained from numerical solutions of ordinary differential equations (ODE). In comparison with numerical solutions of partial differential equations (PDE), the numerical solutions of ODEs are arbitrarily precise and the term quasi-analytical solutions is used.

### 18.3.2 Generalized gravity-driven redistribution

If the porous column from Section 18.3.1 is oriented parallel to the gravity field, filled with fluids of different densities and the column is closed at its ends, i.e. no external flux is imposed, the waves emanate in both directions of the discontinuity. The initial and boundary value problem is solved by the method of characteristics and two examples are given in Figure 18.2. In these examples, water is the denser fluid and gravity points from left to right. Gravity induces a water flux from the upper to the lower part of the column. This flux must be compensated by a flux of oil from the lower to the upper part of the column. The distinctive feature of these examples is that both initial conditions contain 60% of water in the upper half and 40% of water in the lower half of the column. Thus, the initial conditions are indistinguishable in the traditional approaches. They only differ in how water and oil are distributed over percolating and nonpercolating fluid phases. In Figure 18.2a, water is backing up at the discontinuity and the column is imbibed in the vicinity of the discontinuity. In Figure 18.2b the water flux from the upper half is too small to maintain a constant saturation around the discontinuity and the column is drained there. Note that only



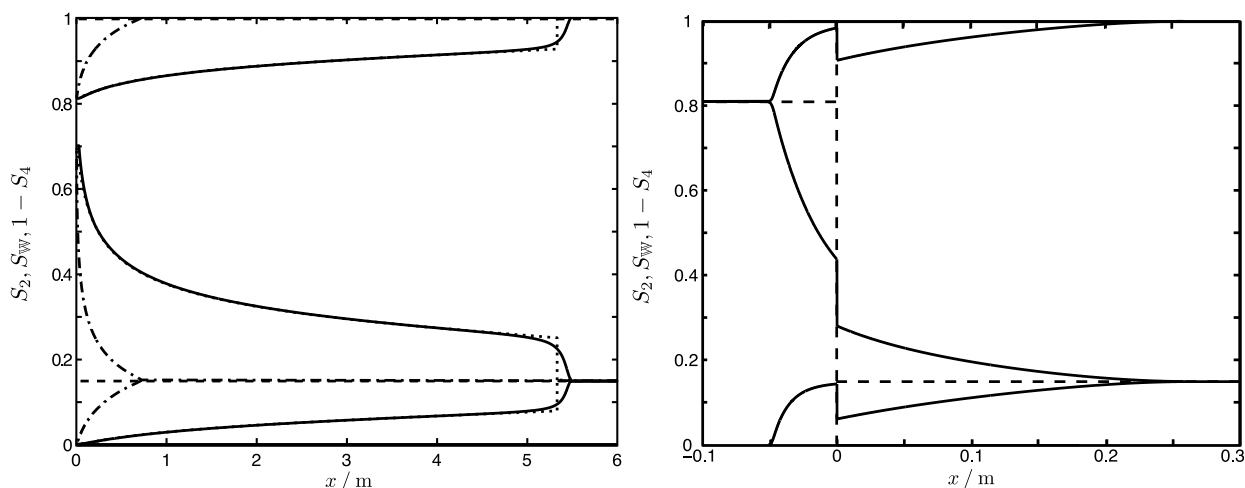
**Figure 18.2:** Saturation profiles  $S_2(x)$ ,  $S_w(x)$ ,  $1 - S_4(x)$  for the gravity-driven vertical redistribution in a closed column. Saturation profiles at  $t = 10$  d are shown as solid curves and the initial conditions as dashed lines.

the vicinity of the discontinuity is shown in these figures. If the whole column was shown, a drainage could be seen at the upper end of the column and an imbibition at the lower end of the column because the amount of water and oil in the column must stay constant. The solutions are calculated analytically.

### 18.3.3 Generalized McWhorter-Sunada problem

Only the hyperbolic limit of equation (18.19a) can be solved with the method of characteristics. McWhorter and Sunada proposed an initial and boundary value problem for the traditional approach, which takes into account the second-order terms coming from capillary forces. It is solved quasi-analytically. In this work, the problem is adapted for the new model. The initial and boundary value problem permits the transformation of the PDE (18.19a) to an ordinary integro-differential equation for the saturation  $S_w(\eta)$  with the similarity variable  $\eta = x/\sqrt{t}$ . The ordinary integro-differential equation is solved numerically. The numerical solutions of ordinary integro-differential equations are arbitrarily precise compared to numerical solutions of PDEs and the term quasi-analytical solutions is used.

The initial and boundary value problem models a semi-infinite, homogeneous, horizontally oriented porous column with initially constant saturations with a discontinuity at the left boundary. At the left side ( $x = 0$ ), water is injected such that the saturations remain constant at the injection point and oil is displaced in the column. The boundary at the right side ( $x = \infty$ ) is modeled by a parameter  $\mathcal{R} \in [0, 1]$ , where  $\mathcal{R} = 1$  corresponds to free outflow



**Figure 18.3:** Exemplary saturation profiles  $S_2(x)$ ,  $S_{\text{w}}(x)$ ,  $1 - S_4(x)$  for the McWhorter-Sunada problem in Figure (a) and the Philip problem in Figure (b). The initial conditions are shown as dashed curves. In Figure (a), solid curves show profiles for  $\mathcal{R} = 1$ , dash-dotted curves for  $\mathcal{R} = 0$  and dotted curves the solution of a purely hyperbolic limit obtained by the method of characteristics at  $t = 1000$  s. In Figure (b), solid curves show saturation profiles also at  $t = 1000$  s.

and  $\mathcal{R} = 0$  to an impermeable wall. For  $\mathcal{R} = 1$ , the flow of oil and water is aligned and for  $\mathcal{R} = 0$ , the flow is countercurrent and the displaced oil leaves the column at  $x = 0$ .

Figure 18.3a shows the solution for one set of initial conditions and two different values of  $\mathcal{R} = 0$  and  $\mathcal{R} = 1$ . The water infiltrates the column much faster when the flux of oil and water is aligned. The process is parabolically dominated for  $\mathcal{R} = 0$  and hyperbolicly dominated for  $\mathcal{R} = 1$ . The corresponding pure hyperbolic problem is solved analytically with the method of characteristics and is shown for comparison.

### 18.3.4 Generalized Philip problem

Philip proposed an initial and boundary value problem which addresses a parabolic limit of the traditional approaches and is solvable quasi-analytically. A homogeneous, horizontally posed, infinite, but closed column is considered with initially homogeneous saturations and a discontinuity at  $x = 0$ . The fluids redistribute because of capillary forces. A drainage occurs in one half of the column and an imbibition occurs in the other half. For the DBRM-MWBL-model, the different processes require different parametrizations of the parameter functions in each half of the porous medium. The method of Philip is adapted to the new model. The initial and boundary value problem is solved by transforming the initial and boundary conditions and the PDE (18.19a) into a boundary value problem for an ODE for

the saturation  $S_w(\eta)$  with the similarity variable  $\eta = x/\sqrt{t}$ . The new model does not require different parametrizations because hysteresis is taken directly into account.

An example of a capillary-driven redistribution is given in Figure 18.3b. The profiles show that water flows into the right half and reduces nonpercolating water through coalescence while nonpercolating oil is produced through break-up during the displacement. The displaced oil infiltrates the left half of the column and nonpercolating oil is reduced while nonpercolating water is produced there. A jump in the saturation is observed at the discontinuity of the initial conditions. In theory, the saturation jump lasts forever.

## 18.4 Algorithms

Four different algorithms, AMG9, AMG3+1, SimBL and FlmPSSS, have been developed and implemented within this thesis. The different algorithms solve different approximations and initial and boundary value problems. They focus on different aspects of the model and have different advantages and disadvantages. Table 18.1 gives an overview on the main features of the algorithms.

## 18.5 Numerical simulations

Three different kinds of experiments have been simulated. In the first section, an example of experiments with a closed porous column is given. In the second section, an example of experiments with a porous column which is flushed with fluids from one side is shown. The last section presents an experiment, where the pressures of the fluids are controlled at the ends of the columns. In laboratories, such experiments are used to determine the capillary pressure saturation relationship and the simulations are compared to experimental data.

### 18.5.1 Experiments with a closed column

Consider a homogeneous closed porous column. One half of the column is filled with water and the other half with oil. Let water be the denser fluid. The column is aligned parallel to the gravity vector and the water is located in the upper half. Gravity induces a flux and the fluids redistribute. The water flows down and the oil flows up. Figure 18.4 illustrates the dynamics of the saturations during this experiment. The upper half of the column is drained and the lower half is imbibed. Hence, nonpercolating water is produced in the upper half

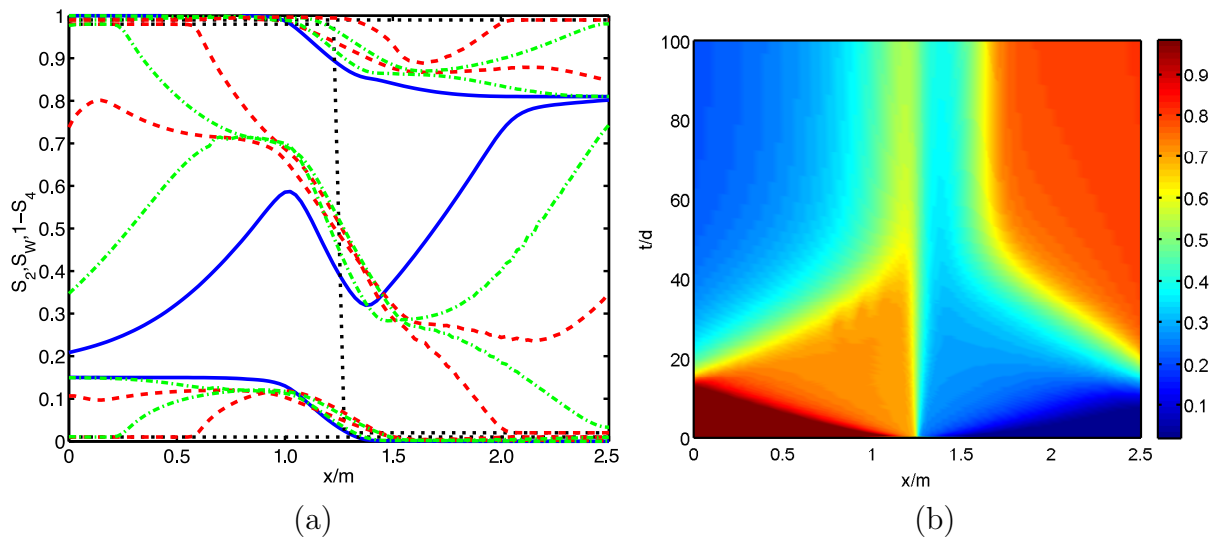
Algorithm	Features	Advantages	Disadvantages
AMG9	<ul style="list-style-type: none"> <li>• 9 PDEs</li> <li>• Full model</li> <li>• No-flux boundary conditions</li> <li>• Homogeneous initial conditions</li> </ul>	<ul style="list-style-type: none"> <li>• Automatic discretization</li> </ul>	<ul style="list-style-type: none"> <li>• Restricted to small subset of parameter space</li> <li>• Only homogeneous initial conditions</li> <li>• Slow</li> <li>• Not extensible</li> </ul>
AMG3+1	<ul style="list-style-type: none"> <li>• 4 PDEs</li> <li>• Immobile nonpercolating phases</li> <li>• Reduced nonlinearity by artificial equation</li> <li>• Advective and diffusive flux</li> <li>• Flux, Dirichlet and Neumann boundary conditions</li> <li>• Arbitrary initial conditions</li> </ul>	<ul style="list-style-type: none"> <li>• Automatic discretization</li> <li>• Accurate</li> </ul>	<ul style="list-style-type: none"> <li>• Not extensible</li> <li>• Requires artificial PDE</li> </ul>
SimBL	<ul style="list-style-type: none"> <li>• 1 PDE, 2 algebraic equations</li> <li>• Immobile nonpercolating phases</li> <li>• Advective flux</li> <li>• No-flux and zero gradient boundary conditions</li> <li>• Arbitrary initial conditions</li> </ul>	<ul style="list-style-type: none"> <li>• Simple</li> <li>• Full control on discretization</li> <li>• Provides basis for more general algorithms</li> </ul>	<ul style="list-style-type: none"> <li>• Extension not possible in CLAWPACK</li> <li>• Capillarity is not taken into account directly</li> </ul>
FImPSSS	<ul style="list-style-type: none"> <li>• 4 PDEs</li> <li>• Full model (without inertia)</li> <li>• Flux and Dirichlet boundary conditions</li> <li>• Advective and diffusive flux</li> <li>• Arbitrary initial conditions</li> </ul>	<ul style="list-style-type: none"> <li>• Stable boundary conditions</li> <li>• Pressure boundary conditions</li> </ul>	<ul style="list-style-type: none"> <li>• Slow</li> <li>• Many regularizations</li> </ul>

**Table 18.1:** Features, advantages and disadvantages of the developed algorithms.

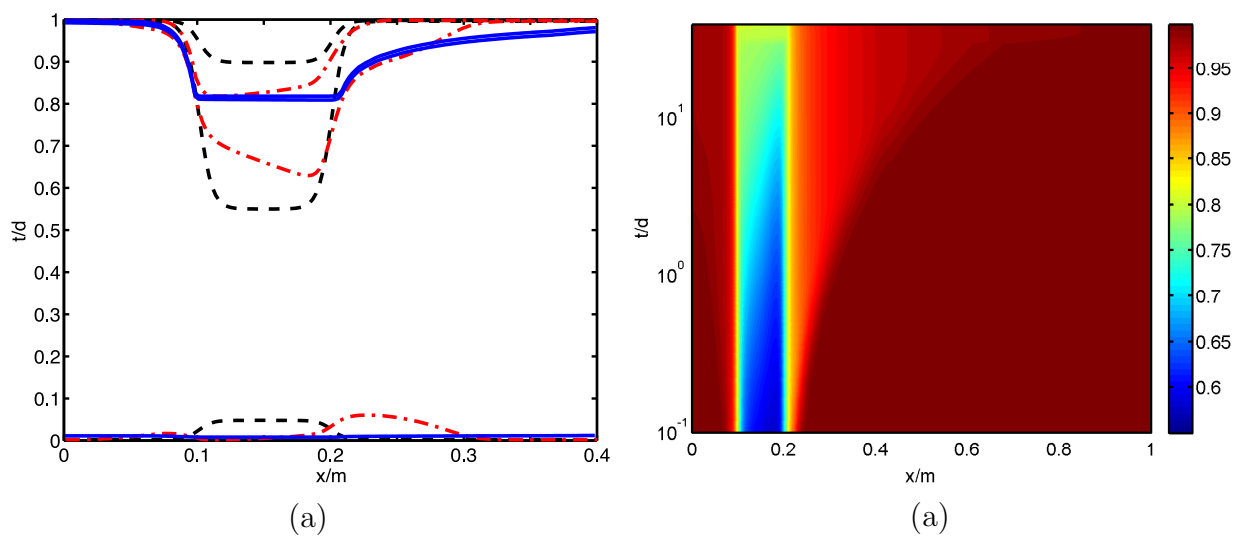
and nonpercolating oil is produced in the lower half. After  $t \approx 10$  d, the fluids come to rest. In the nonmonotonic stationary saturation profile, gravity, capillary and interfacial forces compensate each other.

## 18.5.2 Experiments with flux boundary conditions

A homogeneous porous column which contains an oil spill that is surrounded by 100% water is considered. Water is injected at the left boundary. At the right boundary, the fluids can flow out freely. The water current also moves the oil. However, the oil spill is not just moved to the right but it also spreads due to the nonlinear advection and the capillary forces. The reduction of the oil saturation induces a production of immobile nonpercolating oil. The results of the simulations are illustrated in Figure 18.5. The results show that the oil can not be removed from the porous column. This phenomenon can not be captured with the



**Figure 18.4:** Example for a simulation of an experiment with a closed column. Figure (a) shows saturation profiles  $S_2(x)$ ,  $S_W(x)$ ,  $1 - S_4(x)$  at  $t = 0.5$  d and  $t = 15$  d (red dashed curves) and at  $t = 7.5$  d and  $t = 25$  d (green dash-dotted curves). Black dotted curves depict the initial conditions and blue solid curves the stationary final profiles at  $t = 100$  d. Figure (b) shows the water saturation  $S_W(x, t)$  color coded.



**Figure 18.5:** Example for a simulation with flux boundary conditions. Figure (a) shows saturation profiles  $S_2(x)$ ,  $S_W(x)$ ,  $1 - S_4(x)$  at  $t = 0$  d (black dashed curves),  $t = 0.4$  d (red dash-dotted curves) and at  $t = 40$  d (blue solid curves). Figure (b) shows the water saturation  $S_W(x, t)$  color coded.

DBRMMWBL-model. Note that this initial and boundary value problem requires the use of the altered limiting saturations from equations (18.6).

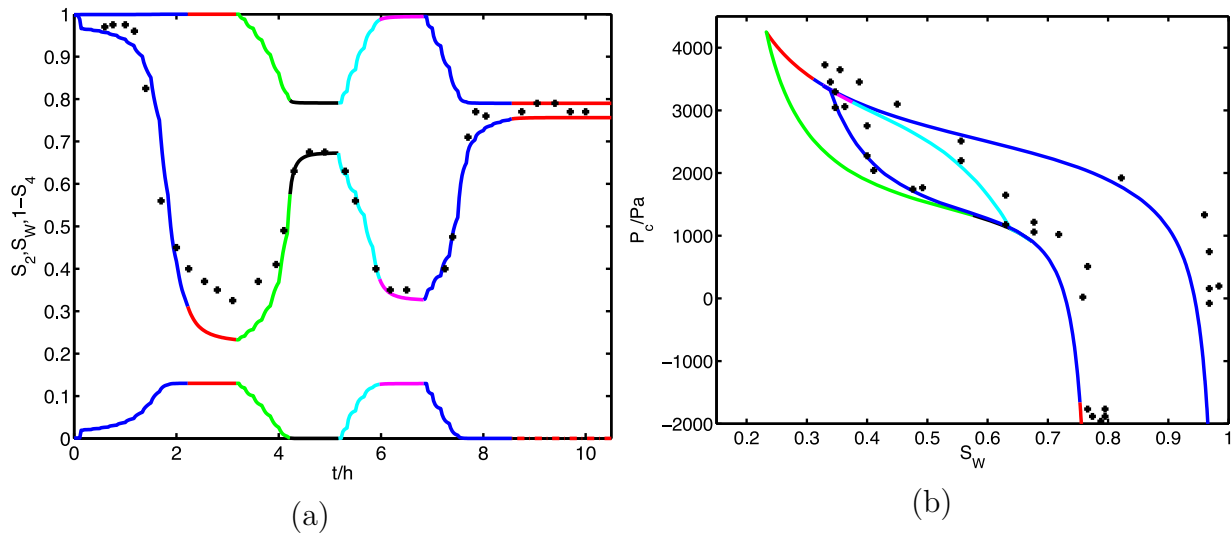
### 18.5.3 Experiments with pressure boundary conditions

A homogeneous porous column aligned parallel to gravity and filled with 100% water is considered. At the bottom, it is connected to a water reservoir. The pressure in the reservoir is adjustable and the water can enter and leave the column freely. The top of the column is open and air can enter and leave the column freely. The atmospheric pressure is constant. Initially, the pressure in the water reservoir is set to a value so that no water leaves the column at the bottom and no air enters at the top. Then the pressure in the water reservoir is lowered stepwise so that air enters the column. The displacement of water leads to a production of nonpercolating water. After several lowerings, the pressure is kept constant and the fluids come to rest. Then the pressure in the reservoir is raised back stepwise. The raising is stopped before reaching the original value and the fluids come to rest again. After that, the pressure is lowered and after reaching a third stationary state, the pressure is raised once more until it reaches the initial value. Experimental data for this experiment are available and Figure 18.6a presents a comparison of the water saturation  $S_w(50 \text{ cm}, t)$  measured in the laboratory (black pluses) and the results of the simulation. The values agree nicely although the saturation in the first stationary state is underestimated in the simulation. Measurements of the difference between water and atmospheric pressure vs. water saturation are also available. A comparison of the data at  $x = 50 \text{ cm}$  is given in Figure 18.6b. The hysteresis cycles of experimental and simulated data are in good agreement. Note that the disagreement between simulation and experiment at low saturation originates from the underestimated saturations at the first stationary state.

## 18.6 Summary

The central questions of this thesis have been posed in Section 18.1. Based on these questions, a summary of the thesis is presented here.

From a mathematical perspective, the model is not complete for time-dependent problems in its most general form. Two alternative additional constraints have been proposed to close the system of partial differential equations. Well-posed initial and boundary value problems have been established. Some examples have been presented in sections 18.3 and 18.5. Mathematical similarities between the DBRMMWBL-model and the new model have been identified.



**Figure 18.6:** Comparison of experimental and simulated data for an experiment with pressure boundary conditions. Figure (a) shows the evolution of the simulated saturations  $S_2(t)$ ,  $S_w(t)$ ,  $1 - S_4(t)$  (curves) and the experimentally measured water saturation (black pluses) at  $x = 50$  cm. Figure (b) shows the difference between water and atmospheric pressure vs. water saturation at  $x = 50$  cm. The curve shows data from simulation and the black pluses show data from experiments. The color and line-style of the curves in both figures indicate the different sections of the experiment.

Thus, existing analytical and numerical methods for the DBRMMWBL-model have been adapted to the new equations. So far, the final question concerning the mathematical behavior of the constitutive terms can not be answered comprehensively. The parameter space is understood for the simplified models but for the complete model it has not been investigated completely. The numerical algorithm for the complete model AMG9 fails to converge for certain parameters. Currently, it is not possible to tell whether this is due to limitations of the algorithm or due to the model. An analysis of traveling wave solutions can shed more light on this issue.

Those questions related to physical aspects are addressed now. As far as the investigated problems go, the DBRMMWBL-model is completely contained in the new model. Hence all phenomena which are modeled by the traditional approach can also be modeled by the new approach. Simulations and analytical solutions show that drainage and imbibition phenomena and dynamics in residual saturations are described by the new model, which is not possible with the old one. As a consequence, all experiments which show hysteresis or residual saturation dynamics are suited to illustrate similarities and differences between the models. A prominent example of such experiments are multistep outflow experiments. A comparison of simulations and experimental data for these shows good agreement of the results. Experiments with a closed porous column in the gravity field are also found to be suitable for comparison. However, they have not been studied extensively in the literature so



far and hence a comparison of simulations and experiments has not been possible. For the new variables, initial and boundary conditions have been established to model laboratory experiments. The investigated problems show that the constitutive assumptions are physically sound. Only a small modification of the limiting saturations was necessary to account for imbibition at  $S_w > 1 - S_{\text{Oim}}$  and drainage at  $S_w < S_{w\text{dr}}$ . Concerning the final question, the model has been simplified substantially by physically motivated limits and approximations. The limit of immobile nonpercolating phases is of particular importance because it permits comprehensive analytical studies.

The results of the thesis show that by taking into account the different hydrodynamic properties of percolating and nonpercolating fluid parts, at least some deficiencies and limitations of the DBRMMWBL-model are solved. Analytic, quasi-analytic and numerical methods and solutions have been developed for the new theory.

# Anhang

---

# A Datei- und Datenstruktur der Simulationsprogramme

## A.1 AMG9

Der Löser AMG9 basiert auf der FORTRAN-Implementierung eines Löasers für partielle Differentialgleichungen mit mobilem adaptivem Gitter [Zege 92, Blom 94]. Die Zeitintegration erfolgt durch den frei verfügbaren DASSL-Algorithmus [Petz 83]. Es werden hier die Dateien angegeben, die für den Algorithmus benötigt werden. Außerdem werden die Unterrouinen des adaptiven Gitterverfahrens aufgelistet. Auf eine Beschreibung des DASSL-Algorithmus wird verzichtet. Abbildung A.1 zeigt schematisch die Programmstruktur. Der Algorithmus besteht aus den Dateien

`driver9PDEs.f`: Enthält

`program driver`: Das Hauptprogramm. Liest die Parameterdatei `PARA`, schreibt die Lösungen in Dateien und ruft für jedem Zeitschritt die Routine `DDASSL` auf.

`subroutine resid`: Berechnet das Residuum für `DDASSL`. Ruft `skmres` auf.

`subroutine out`: Präpariert die Variablen für das Abspeichern in einer Datei.

`prb9PDEs.f`: Enthält

`subroutine iniprb`: Initialisiert das Gerüst für den Algorithmus.

`subroutine uinit`: Initialisiert den Variablenvektor anhand der Anfangsparameter oder aus der Lösung einer Simulation.

`subroutine spdef`: Definiert die Differentialgleichungen.

`subroutine bndr`: Definiert die Randbedingungen.

`spmdif.f`: Enthält

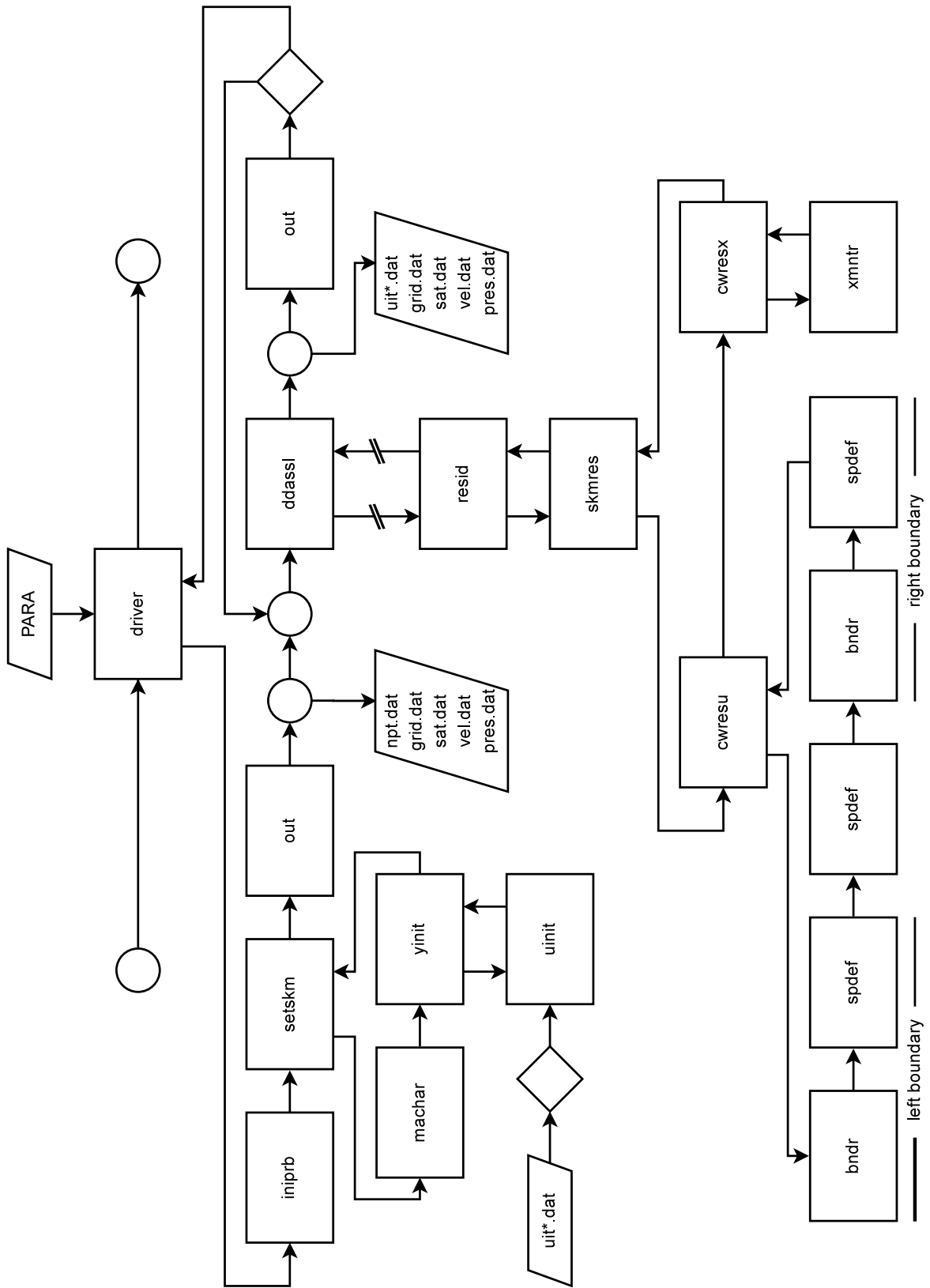


Abbildung A.1: Flussdiagramm zu AMG9

subroutine `setskm`: Initialisiert das Gitter und den Variablenvektor durch Aufruf von `yinit`.

subroutine `yinit`: Initialisiert das Gitter und ruft `uinit` auf zur Initialisierung des Variablenvektors.

subroutine `skmres`: Berechnet die Anteile der partiellen Differentialgleichung und des Gitters am Residuum in weiteren Unterprogrammen.

subroutine `cwresu`: Berechnet den Anteil der partiellen Differentialgleichung am Residuum.

subroutine `cwresx`: Berechnet den Anteil des Gitters am Residuum.

subroutine `xmnr`: Wertet die Monitorfunktion für das adaptive Gitter aus.

subroutine `calcalf`: Berechnet den Wichtungswert  $\alpha$  für Monitorfunktion des adaptiven Gitters. Die Routine wird nicht verwendet.

`lib.f`: Enthält den Zeitintegrator DASSL und seine Unterprogramme.

`PARA`: Die Parameter und Konfigurationsdatei für den Algorithmus.

### Ein Beispiel für `PARA.DAT`:

```

----- Numerical parameters -----
EPS9X  EPSS   TOL
1e-10  1e-5    1e-5
----- Physical and model parameter -----
RHOW   RH00    MAXSINALF  PARASCAL  PCSTAR
1       0.8     1           1e-2      0d0
PIA     ALFPI   PIB        BETPI
1.62    0.52    0.025      0.9
P2STAR  GAMSTAR P4STAR    DELSTAR
2.5     1.5     0.4        3.5
ETAWD   ETAOD   SWDR       SOIM
4.0     3.0     0.15       0.19
... viscous resistance ...
R15    R12    R13    R14
2.0    0.0    0.0    0.0
R21    R25    R23    R24
0.0    1e10   0.0    0.0
R31    R32    R35    R34
0.0    0.0    2.0    0.0
R41    R42    R43    R45

```

```

0.0 0.0 0.0 1e10
----- Control Parameter -----
READINITFLAG 1/TAURAMP
1          0.1d0
----- Initial Conditions -----
S10 S20 S30 S40
0.29 0.01 0.56 0.14
----- AMG Parameters -----
TE  NPTS HULPTAU ALPHA HULPKAP
100 101 5.0      1.0  2.0
-----
--- UNITS ---
t in 10 ^ 3 s
x in m
P in bar (10^5 Pa)
Rho in 10^3 kg /m^3
EPS9X in 10^-8 m^3 s / kg
Parameters PIA, PIB, P2S, P4S, PCSTAR in PARASCAL * bar
R in 10^8 kg /(m^3 s) * POR^-2
G=10 m/s^2

```

## A.2 AMG3+1

Der Löser AMG3+1 basiert ebenso wie AMG9 auf der FORTRAN-Implementierung eines Lölers für partielle Differentialgleichungen mit mobilem adaptivem Gitter [Blom 94, Zege 92]. Die Struktur des Algorithmus AMG3+1 ist vollkommen identisch zu AMG9, sie unterscheiden sich lediglich in den Unterroutinen `uinit`, `spdef` und `bndr`, sowie in der Parameterdatei `PARA`. Die Datei `driver9PDEs.f` heißt hier `driver5PDEs.f` und die Datei `prb9PDEs.f` heißt hier `prbFFandP.f`.

### Ein Beispiel für PARA:

```

--- INITIAL CONDITIONS ---
SW  S2  S4  P  DSDT
0.70 0.03 0.15 0.0 0.00 #ICUL#
0.2  0.13 0.02 0.0 -0.01 #ICUR#
0.2  0.2  0.2  0.5 -0.5  #ICX0#
-1.5 -1.5 -1.5 -1.5 -1.5 #ICX1#
0.5E3 0.5E3 0.5E3 1E2 1E2 #ICK#
--- BOUNDARY CONDITIONS ---

```

```

SW  S2  S4  P   DSDT
0.7  0.03  0.15  0.0  0.0  #BCVAL#
1.0  1.0  1.0  1.0  1.0  #BCDCL#
0.0  0.0  0.0  0.0  0.0  #BCVNL#
0.0  0.0  0.0  0.0  0.0  #BCFLL#
0.0  0.0  0.0  0.0  0.0  #BCVAR#
0.0  0.0  0.0  1.0  0.0  #BCDCR#
1.0  1.0  1.0  0.0  1.0  #BCVNR#
0.0  0.0  0.0  0.0  0.0  #BCFLR#
-----
0.0  0.1  0.1  1.0  0.0  #PDFLAG# #PMAX/FLUX# #SOTPC#BLFLAG#CNTSIM
--- PARAMETERS ---
EPSW  SATREG  XI    EPSU  SOT  EPS24
OE-15 1E-5    1e2  2E-3  0.01 1e-4  #PARANUM#
---
G     RHOW  RHOO  POR
0.0  1.0  0.5  1.0  #PPHYS#
---
ETA2  ETA4
4.0  3.0  #PETA#
---
L11  L13  L31  L33
1.0  0.0  0.0  1.0  #PLDA#
---
PIA     PIB     P2S     P4S
0.16e-3 0.25e-5 0.25e-3 0.04e-3 #PPIS#
---
ALF  BET  GAM  DEL
0.52 0.9  1.5  3.5  #PEXP#
---
SOIM  SWDR
0.19 0.15 #PLIM#
---ALGORITHM PARAMETERS ---
TE  NPTS  HULPTAU  ALPHA  HULPKAP
50  101  1e-0    1.0    2.0
----- UNITS -----
t=10^3 s
x= m
L=10^-7 m^3 s / kg
P=10^4 Pa
G= 10 m/s
RHO=10^3 kg /m^3
QT=10^-3 m/s
EPS=10^-3 m/s^2, XI = 10^-3 1/s

```

### A.3 SimBL

Der Löser SimBL basiert auf der Programmstruktur von CLAWPACK. Abbildung A.2 zeigt sein Flussdiagramm. Es werden hier kurz die Unterprogramme angegeben, die verändert wurden.

**b4step1.f**: Diese Routine ist als Platzhalter vorgesehen, um Aufgaben vor der Berechnung eines neuen Zeitschritts ausführen zu können. Sie wird verwendet, um die Sättigung in eine Hilfsvariable zu kopieren. Damit ist es später möglich, zu überprüfen, ob eine Be- oder Entwässerung stattfindet.

**bc1.f**: Diese Routine berechnet die Werte an den Rändern. Zusätzlich zur üblichen Implementierung werden die beiden Hilfsvariablen  $S_2, S_4$  berücksichtigt.

**qinit.f**: Die Anfangsbedingungen werden aus der Parameterdatei **qinit.data** eingelesen.

**restart.f**: Für zwei und drei Raumdimensionen bietet CLAWPACK eine Routine an, die es ermöglicht, Simulationen fortzusetzen. Diese Routine wurde für eine Raumdimension angepasst, um Parameter bequem im Laufe der Zeit ändern zu können. Dies wird z.B. für die Simulation der Flussumkehr (Kapitel 7.4 und Kapitel 13.7.2) benötigt.

**rp1bl.f**: Der Kern des Algorithmus ist der Riemann-Löser. Er wurde bereits in Kapitel 13.4.2 ausführlich diskutiert.

**setaux.f**: Die Hilfsvariablen werden mit dieser Routine initialisiert. Die verwendeten Hilfsvariablen lauten  $\partial_t S_w, S_2, S_4$ .

**setprob.f**: Mit dieser Routine werden die Parameter aus der Datei **setprob.data** geladen.

**src1.f**: Die Routine ist als Platzhalter vorgesehen, um Aufgaben nach der Berechnung des Riemann-Problems auszuführen. Damit können z.B. Quellterme berücksichtigt werden. Die Routine wird verwendet, um die neuen Werte  $S_2^{k+1}, S_4^{k+1}$  zu berechnen, nachdem  $S_w^{k+1}$  bestimmt wurde.

Anfangs- und Randwerte werden durch drei Spezifikationsdateien dem Programm übergeben.

**claw1ez.data**: In dieser Datei werden allgemeine numerische Parameter für CLAWPACK gesetzt. Dazu gehören räumliche Auflösung, Anzahl der ausgegebenen Zeitschritte, die Courant-Zahl und spezielle Methoden wie adaptive Zeitschritte und Verfahren höherer räumlicher Ordnung, sofern sie implementiert sind. Außerdem werden dort die Randbedingungen festgelegt. Für weitere Informationen sei auf [LeVe 07] verwiesen.





**setprob.data:** In dieser Datei werden die Modellparameter  $\eta_4, \eta_2, S_{\text{Oim}}, S_{\text{Wdr}}$  festgelegt. Außerdem werden die Materialeigenschaften angegeben. Sie können entweder in Form von drei dimensionslosen Zahlen oder in den dimensionsbehafteten Parametern angegeben. Die dimensionslosen Zahlen sind der dimensionslose Fluss, der von außen vorgegeben werden, der dimensionslose Schwerkraftsfluss und das Verhältnis der Viskositäten der perkolierenden Fluide. Die dimensionsbehafteten Parameter sind Viskosität, Dichte, Porosität, angelegter Volumenstrom, Schwerkraftsbeschleunigung, Permeabilität des porösen Mediums, der Winkel der Säule zur Schwerkraft und die elementaren Raum- und Zeiteinheiten. Darüber hinaus werden auch die Parameter  $\epsilon_S, \epsilon_\sigma$  und  $\epsilon_M$  bestimmt.

**qinit.data:** In dieser Datei werden die Anfangsbedingungen festgelegt. Der erste Parameter legt fest, ob eine neue Simulation durchgeführt oder eine bestehende fortgesetzt wird. Die anderen Parameter bestimmen die Anfangsverteilung der Fluide. Die Parameter sind in Kapitel 13.5 definiert.

#### Ein Beispiel für qinit.data:

```
.false. restart a simulation flag cntn
20      iframe, not used if cntn=.false.
0.3d0   ul
0.7d0   ur
0.001d0 s2l
0.001d0 s2r
0.001d0 s4l
0.001d0 s4r
0.50d0  x0
```

#### Ein Beispiel für setprob.data:

```
.true. use dimensionless parameters
---numerical parameters---
1d-10  epsilon for constant saturation in time (dswdt=0)
1d-10  epsilon for for wave velocity = 0
1d-10  regularisation for bounding saturations
0d0    dummy
0d0    dummy
0d0    dummy
---model parameters---
4.0d0  eta2
```

```

4.0d0  eta4
0.2d0  swdr
0.2d0  soim
---dimensionless parameters--- if phys. para. are used, put dummy nbs.
0.0d0  dimensionless total flux
-10.0d0 dimensionless gravity flux
1.d0   viscosity ratio
---physical parameters---
1.0d0  elementary time unit T in sec
1.0d0  elementary space unit L in met

1d-3   viscosity of water in T, L, kg
1d-3   viscosity of oil in T, L, kg
1d3    density of water in L,kg
1d3    density of oil in L,kg
0.3d0  porosity
1d-3   applied total flux in T,L
9.81   gravity acceleration in T,L
1d-12  permeability
0d0    angle of axis towards earthsurface in rad

```

### Ein Beispiel für claw1ez.data:

```

200      mx      = cells in x direction

20       nout     = number of output times to print results
1        outstyle = style of specifying output times
0.2d0    tfinal   = final time

0.0001d0 dtv(1)   = initial dt (used in all steps if method(1)=0)
1.d99    dtv(2)   = max allowable dt
0.5d0    cflv(1)  = max allowable Courant number
0.5d0    cflv(2)  = desired Courant number
50000    nv(1)    = max number of time steps per call to claw1

1        method(1) = 1 for variable dt
1        method(2) = order
0        method(3) = not used in one dimension
0        method(4) = verbosity of output
1        method(5) = source term splitting
0        method(6) = mcapa
4        method(7) = maux (should agree with parameter in driver)

```

```

1      meqn      = number of equations in hyperbolic system
1      mwaves   = number of waves in each Riemann solution
1      mthlim(mw) = limiter for each wave (mw=1,mwaves)

0.0d0    t0      = initial time
-0.5d0   xlower  = left edge of computational domain
1.5d0    xupper  = right edge of computational domain

5        mbc     = number of ghost cells at each boundary
0        mthbc(1) = type of boundary conditions at left
0        mthbc(2) = type of boundary conditions at right

```

## A.4 FlmPSSS

Der Algorithmus FlmPSSS wurde in MATLAB von Grund auf neu entwickelt. Sein Flussdiagramm ist in Abbildung A.3 dargestellt. Die Parameterdaten werden in einer geschachtelten Containervariablen abgelegt. Sie ist in Abbildung A.4 schematisch dargestellt.

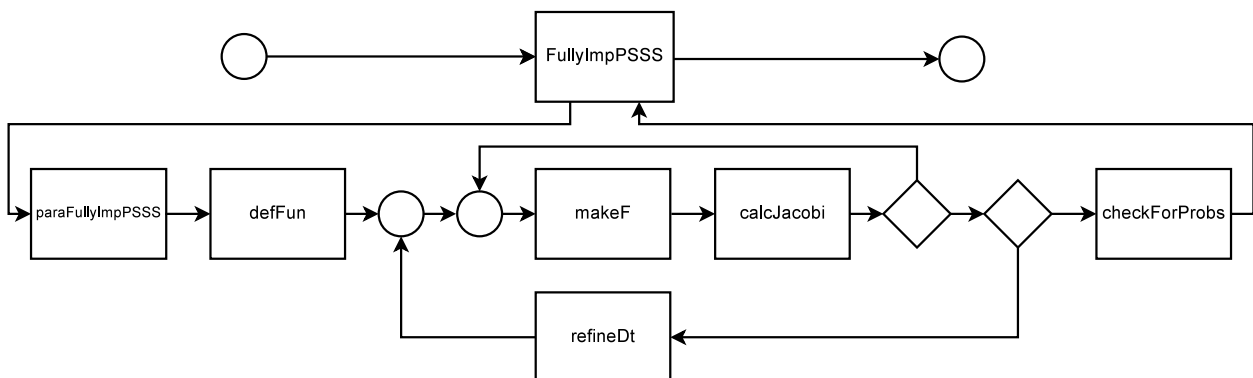


Abbildung A.3: Flussdiagramm von FlmPSSS

### A.4.1 Die Routinen des Algorithmus

`FullImpPSSS.m`: Das Hauptprogramm.

`paraFullyImpPSSS.m`: Liest die Parameter aus `PARAMETERS` ein und setzt die Parameterwerte, die nicht in der Parameterdatei angegeben sind.

`defFun.m`: In dieser Routine werden die diskretisierten Funktionen für das innere Gebiet und für die Ränder definiert.

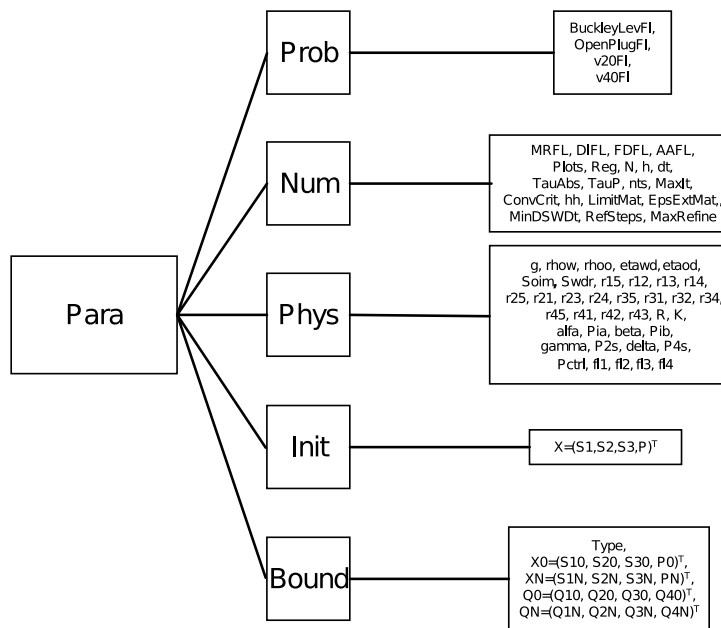


Abbildung A.4: Die Containervariable Para von FlmPSSS

`makeF.m`: In dieser Routine wird das Funktional, dessen Nullstelle bestimmt werden soll, an der geschätzten Nullstelle ausgewertet und in einen Vektor geschrieben.

`calcJacobi.m`: In dieser Routine wird die Jacobi-Matrix des Funktionals an der geschätzten Nullstelle bestimmt.

`refineDt.m`: Diese Routine wird aufgerufen, wenn der Zeitschritt verfeinert werden muss. Ein verschachtelter Aufruf ist möglich.

`checkForProbs.m`: Mit dieser Routine wird überprüft ob Sättigungen  $S_i < 0$  oder  $S_i > 1$  auftreten.

`PARAMETERS`: Spezifiziert das simulierte Problem. Es werden sowohl numerische Parameter, als auch Kontrollparameter, Modellparameter und Anfangsbedingungen angegeben.

## A.4.2 Die Parameter des Algorithmus

Die Parameter des Algorithmus sind in der geschachtelten Containervariablen `Para` abgelegt. Sie besteht aus den fünf Containervariablen `Prob`, `Num`, `Phys`, `Init`, `Bound`, die jeweils Gruppen von Parametern enthalten.

**Prob:** Der Container `Prob` enthält Schalter, die unterschiedliche Sätze von Anfangs- Rand- und Schließbedingungen auswählen. Der Schalter `v20F10` schließt das Gleichungssystem durch  $v_2 = 0$ , der Schalter `v40F1` durch  $v_4 = 0$ . Der Schalter `BuckleyLevF1` wählt Randbedingungen des Buckley-Leverett-Problems. `BuckleyLevF1`  $\neq 0$  wählt Flussrandbedingungen für die perkolierende Wasserphase  $S_1$  auf der linken Seite. Der Fluss wird in `Bound.Q0(1)` festgelegt. Der Schalter `OpenPlugF1` wählt Anfangs- und Randbedingungen entsprechend einer Kapillardruckmessung.

**Num:** Der Container `Num` enthält Schalter, um numerische Hilfsgriffe an- und abzuschalten. Mit `DIFL` kann global Entwässerung (`DIFL` =  $-\infty$ ) oder Bewässerung (`DIFL` =  $\infty$ ) zur Bestimmung der begrenzenden Sättigungen ausgewählt werden. Durch `DIFL` = 0 wird Be- und Entwässerung entsprechend des lokalen Prozesses gewählt. Die Regularisierung der Sättigungen wird in `Reg` festgelegt. Die Anzahl der Volumina ist in `N`, die Seitenlänge der Volumina in `h` und die Zeitschrittgröße in `dt` gespeichert. Der Glättungsparameter für Be- und Entwässerung  $\kappa_{di}$  ist in `TauAbs` und der Glättungsparameter für das CIR-Verfahren  $\kappa_h$  in `TauP` festgelegt. Die Anzahl der Zeitschritte wird in `nts`, die maximale Anzahl der Iterationen des Newton-Raphson-Verfahrens in `MaxIt`, das Konvergenzkriterium des Newton-Raphson-Verfahrens in `ConvCrit`, die endliche Schrittgröße der numerischen Ableitungen für die Jacobi-Matrix  $\epsilon_{der}$  in `hh` bestimmt. Der Regularisierungs- bzw. Modellparameter  $\epsilon_M$  steht in `EpsExtMat`, der Parameter  $\epsilon_{\partial S}$  steht in `MinDSWdt`. Bei schlechter Konditionierung der Matrix wird der Zeitschritt verfeinert. Der Verfeinerungsfaktor steht in `RefSteps` und die maximale Anzahl an Verfeinerungen in `MaxRefine`. Damit ist der minimale Zeitschritt  $\text{RefSteps}^{-\text{MaxRefine}} \times dt$ .

**Phys:** Der Container `Phys` enthält die Modellparameter. Außerdem gibt es die Bitschalter `f11`, `f12`, `f13` und `f14`, die die Mobilitäten der einzelnen Phasen unabhängig von den viskosen Kopplungstermen ausschalten können.

**Init:** Die Anfangsbedingungen sind in dem Container `Init` gespeichert. Sie werden durch einen Vektor

$$X = (S_{1i}, \dots, S_{1N_{cls}}, S_{2i}, \dots, S_{2N_{cls}}, S_{3i}, \dots, S_{3N_{cls}}, P_{1i}, \dots, P_{1N_{cls}})^T \quad (\text{A.1})$$

angegeben.

Die Anfangswerte des Drucks  $P_1$  werden wegen der voll impliziten Formulierung im Algorithmus nicht berücksichtigt und dienen nur als Platzhalter bzw. Schätzwert.

**Bound:** Im Container **Bound** werden die Randbedingungen in vier Vektoren angegeben. Zwei der vier Vektoren geben die Werte der Variablen an den Rändern

$$X_0 = (S_{10}, S_{20}, S_{30}, P_{10})^T, \quad (\text{A.2a})$$

$$X_{N_{\text{cls}}} = (S_{1N_{\text{cls}}}, S_{2N_{\text{cls}}}, S_{3N_{\text{cls}}}, P_{1N_{\text{cls}}})^T \quad (\text{A.2b})$$

für Dirichlet-Randbedingungen vor, die anderen beiden bestimmen die Werte der Flüsse

$$q_0 = (q_{10}, q_{20}, q_{30}, q_{40})^T, \quad (\text{A.3a})$$

$$q_{N_{\text{cls}}} = (q_{1N_{\text{cls}}}, q_{2N_{\text{cls}}}, q_{3N_{\text{cls}}}, q_{4N_{\text{cls}}})^T. \quad (\text{A.3b})$$

Werte, die aufgrund der Wahl der Randbedingungsschalter nicht benötigt werden, werden im Algorithmus ignoriert und dienen als Platzhalter.

#### Ein Beispiel für PARAMETERS:

Value	Description	Para.Prob.Name
1	NewSimulationFlag	NEWSIM
0	SaveSimulationFlag	SAVSIM
100	SpatialPointsPerIm	SPACE
1	TimeStepsPer1s	TIME
6	DurationOfSimInTimesteps	DURATION
0	FlagBuckleyLeverettICBC	BUCKLEYLEVFLAG
1	FlagOpenPlugICBC	OPENPLUGFLAG
1.2	LengthOfSystemInm	LENGTH
1e-2	EpsMETforImOrDrDomains	EPSEXTMAT
1e8	SmoothingOfHeaviside	TAUDI
10	MaxNumberOfIterations	MAXIT
1e-3	ConvergenceCriterion	CONVCRT
1e15	MaxOfAcceptableCondition	CONDCRIT
1e-6	MinValOFDSDTforMET	MINDSWDT
1e3	UpwindingSmoothing	TAUP
1e-5	SaturationRegularization	REG
2	RefinementFactor	RefSteps
10	MaximumRefinementLevels	MaxRefine
1030	DensityWaterIn_kgm <sup>-3</sup>	rho_w
1.2	DensityOilIn_kgm <sup>-3</sup>	rho_o
6	MassexchangeParaWater	eta2
1	MassexchangeParaWater	eta4
0.25	MaximumOilNonperc	Soim
0.17	MaximumWaterNonperc	Swdr

---

4.04e-8	Comp11MobMatrixm <sup>3</sup> kg <sup>-1</sup> s	K(1,1)
3.37e-5	Comp33MobMatrixm <sup>3</sup> kg <sup>-1</sup> s	K(3,3)
0.36	Porosity	Por
0.22	CapillaryExpWater	alfa
4000	CapillaryFactorWaterInPa	Pia
0.8	CapillaryExponentOil	beta
70	CapillaryFactorOilInPa	Pib
1.5	InterfaceExponentWater	gamma
2500	InterfaceFactorWaterInPa	P2s
2	InterfaceExponentOil	delta
2300	InterfaceFactorOilInPa	P4s
0.997	PercWaterInitS1b	S10
0.997	PercWaterInitS1p	S1N
0.001	NonPercWaterInitS2b	S20
0.001	NonPercWaterInitS2p	S2N
0.001	PercOilInitiS3b	S30
0.001	PercOilInitiS3p	S3N
0.0	PressureInitiP1l	P0
7200	PressureInitiP1r	PN
0.0	P00ifOpenPlug orQ10ifBuckleyLeverett	
0.5	PositionDiscontOne	XXX0
0.25	PositionDiscontTwo	XXX1
10	SteepnessOfSmearedTheta	OMEGA



## B Benötigte numerische Verfahren

### B.1 Löser für gewöhnliche Differentialgleichungen

In Kapitel 2.2.6 wurden Felder  $u(x, t)$  und Differentialoperatoren diskretisiert, um partielle Differentialgleichungen für die Felder numerisch zu lösen. Auch gewöhnliche Differentialgleichungen sind im Allgemeinen nicht analytisch lösbar und müssen numerisch gelöst werden.

#### B.1.1 Anfangswertprobleme

Im Rahmen dieser Dissertation treten nur explizite gewöhnliche Differenzialgleichungen auf. Explizite Differentialgleichungen  $n$ -ter Ordnung können immer auf  $n$  Gleichungen erster Ordnung zurückgeführt werden [Bron 91]. Ein explizites Anfangswertproblem lautet damit

$$\frac{dy}{dx} = f(x, y(x)) \quad (\text{B.1a})$$

$$y(x_0) = y_0 \quad (\text{B.1b})$$

mit  $x \in \mathbb{R}$ ,  $y : \mathbb{R} \rightarrow \mathbb{R}^n$  und  $f : \mathbb{R} \times \mathbb{R}^n \rightarrow \mathbb{R}^n$ . Für ein Anfangswertproblem ist die Existenz und Eindeutigkeit der Lösung nach dem Satz von Picard<sup>1</sup> und Lindelöf<sup>2</sup> gegeben. Das Anfangswertproblem kann mit Hilfe einer Taylor-Entwicklung diskretisiert werden. Darauf aufbauend haben Runge<sup>3</sup> und Kutta<sup>4</sup> ein Verfahren [Kutt 01] entwickelt, das einfach zu

---

<sup>1</sup>Charles Émile Picard (1856-1941), französischer Mathematiker

<sup>2</sup>Ernst Leonard Lindelöf (1870-1946), finnischer Mathematiker

<sup>3</sup>Carl David Tolmé Runge (1856-1927), deutscher Mathematiker

<sup>4</sup>Martin Wilhelm Kutta (1867-1944), deutscher Mathematiker

implementieren ist. In 4. Ordnung lautet es

$$y_{i+1} = y_i + \frac{\Delta x}{6} (k_1 + 2(k_2 + k_3) + k_4) \quad (\text{B.2a})$$

$$\begin{aligned} k_1 &= f(x_i, y_i) \\ k_2 &= f\left(x_i + \frac{\Delta x}{2}, y_i + \frac{\Delta x}{2}k_1\right) \\ k_3 &= f\left(x_i + \frac{\Delta x}{2}, y_i + \frac{\Delta x}{2}k_2\right) \\ k_4 &= f(x_i + \Delta x, y_i + \Delta x k_3) \end{aligned} \quad (\text{B.2b})$$

wobei  $\Delta x$  die Schrittweite und der Index  $i$  den  $i$ -ten diskretisierten Wert bezeichnet. Es gibt Runge-Kutta Verfahren von unterschiedlichen Ordnungen. Häufig wird die Schrittgröße adaptiv angepasst, indem man zwei Verfahren unterschiedlicher Ordnung miteinander vergleicht und fordert, dass der Unterschied zwischen beiden Verfahren kleiner einer Schwelle bzgl. einer geeigneten Norm ist. In dieser Dissertation werden Verfahren 4. und 5. Ordnung miteinander verglichen. Eine Routine steht in MATLAB als `ode45` [Dorm 80] zur Verfügung.

### B.1.2 Randwertprobleme

Bei einem Anfangswertproblem sind die Werte an einem Punkt  $x_0$  gegeben und es kann ausgehend von diesem Punkt die Lösung berechnet werden. Dies ist bei Randwerten nicht der Fall. Außerdem können keine allgemeinen Existenz- und Eindeutigkeitsaussagen für die Lösung von Randwertproblemen gemacht werden. In dieser Dissertation ist ein Randwertproblem zweiter Ordnung zu lösen. Dieses lautet allgemein

$$y'' = f(x, y, y') \quad (\text{B.3a})$$

$$y(x_a) = y_a, \quad f_b(x_b, y, y') = 0 \quad (\text{B.3b})$$

mit  $x \in \mathbb{R}$  und  $y : \mathbb{R} \rightarrow \mathbb{R}$ .  $y'$  und  $y''$  bezeichnen die erste und zweite Ableitung von  $y$  nach  $x$ . Die Differentialgleichung  $f : \mathbb{R} \times \mathbb{R} \times \mathbb{R} \rightarrow \mathbb{R}$  sei explizit gegeben und  $f_b$  bezeichnet die Bedingungen bei  $x = x_b$ .

Prinzipiell sind zur Lösung eines Randwertproblems Diskretisierungen wie bei den partiellen Differentialgleichungen nötig. Im Schießverfahren [Munz 05] wird jedoch das Randwertproblem durch iteratives Lösen von Anfangswertproblemen gelöst. Das wirkt zwar zunächst etwas umständlich; allerdings kann für die Lösung des Anfangswertproblems auf schnelle Standardverfahren (siehe Kapitel B.1.1) zurückgegriffen werden.

Für das Verfahren selbst wird die Differentialgleichung (B.3a) zweiter Ordnung in ein System erster Ordnung umgeformt. Dann schätzt man eine zweite Anfangsbedingung  $y'(x_a) = \tilde{\gamma}$  und

löst das Anfangswertproblem mit einem geeigneten Verfahren. Dessen Lösung setzt man in  $f_b(x_b, y_{\tilde{\gamma}}, y'_{\tilde{\gamma}})$  ein. Hat man zwei Anfangsbedingungen  $\tilde{\gamma}_1, \tilde{\gamma}_2$  gefunden, für die  $f_b(x_b, y_{\tilde{\gamma}_1}, y'_{\tilde{\gamma}_1}) \cdot f_b(x_b, y_{\tilde{\gamma}_2}, y'_{\tilde{\gamma}_2}) < 0$  gilt, so kann durch Bisektion (siehe Kapitel B.3.2) das Randwertproblem iterativ gelöst werden.

## B.2 Löser für lineare Gleichungssysteme

In der Numerik werden viele Probleme auf das Lösen von linearen Gleichungssystemen zurückgeführt. Voll implizite Finite-Volumen-Diskretisierungen sind ein Beispiel. Es gibt eine Vielzahl unterschiedlicher Methoden, die jeweils ihre Vor- und Nachteile haben und deren geeignete Wahl eine Wissenschaft für sich ist. In MATLAB gibt es jedoch die Funktion `mldivide` [Matl 08], die die Matrix analysiert, ein geeignetes Verfahren automatisch wählt und dem Nutzer die Analyse erspart. Diese Funktion wurde in dieser Dissertation zur Lösung von linearen Gleichungssystemen verwendet.

## B.3 Verfahren für nichtlineare Gleichungen

Nichtlineare Gleichungen können im Allgemeinen nicht direkt numerisch gelöst werden, sondern erfordern ein iteratives Verfahren. Zwei Verfahren werden in dieser Dissertation verwendet, die hier kurz vorgestellt werden.

### B.3.1 Newton-Raphson-Verfahren:

Das Newton-Raphson-Verfahren löst nichtlineare Gleichungssysteme numerisch iterativ. Dazu wird das nichtlineare Gleichungssystem  $n$ -ter Ordnung

$$f(x) = 0 \tag{B.4}$$

mit  $f : \mathbb{R}^n \rightarrow \mathbb{R}^n$  und  $x \in \mathbb{R}^n$  um einen geeigneten Schätzwert  $x_0$  nach Taylor bis zur ersten Ordnung entwickelt und das linearisierte Gleichungssystem

$$f(x_0 + \Delta x) \approx f(x_0) + J(x_0)\Delta x = 0 \tag{B.5}$$

für  $\Delta x$  gelöst, wobei  $J(x_0)$  die Jacobi-Matrix zu  $f(x_0)$  mit den Komponenten  $J_{ij} = \partial f_i / \partial x_j$  bezeichnet. Der Wert  $x_1 = x_0 + \Delta x$  mit  $\Delta x$  aus (B.5) wird als neuer Schätzwert für die

Nullstelle verwendet und die Funktion  $f$  wird bei  $x = x_1$  linearisiert und das entsprechende Gleichungssystem gelöst. Das Verfahren wird iteriert, bis der Funktionswert des  $i$ -ten Schätzwertes bezüglich einer geeigneten Norm  $\|f(x_i)\| < \epsilon_{\text{tol}}$  ausreichend genau ist. Das Verfahren konvergiert für geeignete Schätzwerte  $x_0$  rasch. Die Untersuchung des Gebiets, aus welchem  $x_0$  gewählt werden kann, ist im Allgemeinen aufwendig. Es ist daher deutlich effizienter, die Iteration abzubrechen, wenn sich die Lösung nicht verbessert und ein neues  $x_0$  zu schätzen. Nichtlineare Gleichungssysteme treten in dieser Dissertation in impliziten Finite-Volumen-Diskretisierungen auf. Ein geeigneter Schätzwert ist die Lösung des Zeitschritts zuvor. Der Schätzwert kann durch die Wahl eines kleineren Zeitschritts verbessert werden, da dadurch das Gleichungssystem verändert wird.

### B.3.2 Bisektionsverfahren

Das Bisektionsverfahren ist die einfachste Intervall-Technik [Herm 06] zur Bestimmung von Nullstellen einer stetigen Funktion  $f : \mathbb{R} \rightarrow \mathbb{R}$ . Es benötigt zwei Anfangswerte  $a_1, b_1 \in \mathbb{R}$ , für die das Vorzeichen des Produkts  $f(a_1)f(b_1) < 0$  negativ ist und ohne Beschränkung der Allgemeinheit  $a_1 < b_1$  gilt. Dann liegt zwischen beiden Grenzen eine Nullstelle. Das Intervall wird durch  $x_1 = \frac{1}{2}(a_1 + b_1)$  in zwei gleich große Teilintervalle unterteilt und anhand des Vorzeichens der Produkte  $f(a_1)f(x_1)$  und  $f(x_1)f(b_1)$  wird der mögliche Bereich der Nullstelle auf eines der Intervalle  $[a_1, x_1]$  und  $[x_1, b_1]$  eingeschränkt. Ist dies  $[a_1, x_1]$  so ist  $a_2 = a_1$  und  $b_2 = x_1$  und andernfalls  $a_2 = x_1$  und  $b_2 = b_1$ . Das Intervall  $[a_2, b_2]$  wird dann wieder in zwei gleich große Teilintervalle geteilt. Das Verfahren konvergiert zwar nur sehr langsam, findet aber auf jeden Fall eine Nullstelle im Intervall  $[a_1, b_1]$  wenn  $f(a_1)f(b_1) < 0$  gilt.

---

## Literaturverzeichnis

- [Abra 75] A. Abrams. “Influence of fluid viscosity, interfacial-tension, and flow velocity on residual oil saturation left by waterflood”. *Society of Petroleum Engineers Journal*, Vol. 15, No. 5, pp. 437–447, 1975.
- [Alte 94] J. Altenbach and H. Altenbach. *Einführung in die Kontinuumsmechanik*. B.G. Teubner, Stuttgart, 1994.
- [Anto 99] L. Anton and R. Hilfer. “Trapping and mobilization of residual fluid during capillary desaturation in porous media”. *Physical Review E*, Vol. 59, pp. 6819–6823, 1999.
- [Auri 02] J. Auriault. “Upscaling heterogeneous media by asymptotic expansions”. *Journal of Engineering Mechanics*, Vol. 128, p. 817, 2002.
- [Avra 95] D. Avraam and A. Payatakes. “Generalized relative permeability coefficients during steady-state two-phase flow in porous media, and correlation with the flow mechanisms”. *Transport in Porous Media*, Vol. 20, pp. 135–168, 1995.
- [Aziz 79] K. Aziz and A. Settari. *Petroleum reservoir simulation*. Applied Science Publishers LTD, London, 1979.
- [Babc 08] A. Babchin, I. Brailovsky, P. Gordon, and G. Sivashinsky. “Fingering instability in immiscible displacement”. *Physical Review E*, Vol. 77, No. 2, p. 26301, 2008.
- [Bark 99] J. W. Barker and P. Dupoy. “An analysis of dynamic pseudo relative permeability methods”. *Petroleum Geoscience*, Vol. 5, pp. 385 – 394, 1999.
- [Bear 72] J. Bear. *Dynamics of Fluids in Porous Media*. Dover Publications, New York, 1972.
- [Bear 90] J. Bear and Y. Bachmat. *Introduction to Modeling of Transport Phenomena in Porous Media*. Kluwer Academic Publishers, Dordrecht, Boston, London, 1990.
- [Beck 75] E. Becker and W. Bürger. *Kontinuumsmechanik*. Teubner Studienbücher, 1975.

- [Beli 03] A. Beliaev. “Homogenization of two phase flows in porous media with hysteresis in the capillary relation”. *Euro.Jnl of Applied Mathematics*, Vol. 14, pp. 61–84, 2003.
- [Blom 94] J. Blom and P. Zegeling. “Algorithm 731: A Moving-Grid Interface for Systems of One-Dimensional Time-Dependent Partial Differential Equation”. *ACM Transactions in Mathematical Software*, Vol. 20, pp. 194–214, 1994.
- [Bogd 03] I. Bogdanov, V. Mourzenko, J. Thovert, and P. Adler. “Effective permeability of fractured porous media in steady state flow”. *Water Resources Research*, Vol. 39, No. 1, p. 1023, 2003.
- [Brin 49] H. Brinkman. “A calculation of the viscous force exerted by a flowing fluid on a dense swarm of particles”. *Applied Scientific Research*, Vol. 1, pp. 27–34, 1949.
- [Bron 91] I. Bronstein and K. Semendjajew, Eds. *Taschenbuch der Mathematik*. B.G. Teubner, Stuttgart, 25 Ed., 1991.
- [Broo 64] R. H. Brooks and A. T. Corey. “Hydraulic Properties of Porous Media”. In: *Hydrol. Pap.*, Colorado State University, Fort Collins, 1964.
- [Buck 07] E. Buckingham. “Studies on the Movement of Soil Moisture”. *U.S. Department of Agriculture, Bureau of Soils—Bulletin No. 38*, pp. 1 – 61, 1907.
- [Calv 91] A. Calvo, I. Paterson, R. Chertcoff, M. Rosen, and J. Hulin. “Dynamic capillary pressure variations in diphasic flows through glass capillaries”. *Journal of Colloid and Interface Science*, Vol. 141, No. 2, pp. 384–394, 1991.
- [Chen 06] Z. Chen, G. Huan, and Y. Ma. *Computational Methods for Multiphase Flows in Porous Media*. SIAM, 2006.
- [Chor 67] A. Chorin. “A Numerical Method for Solving Incompressible Viscous Flow Problems”. *J. Comp. Phys*, Vol. 2, pp. 12–26, 1967.
- [Chri 01] M. A. Christie. “Flow in porous media – scale up of multiphase flow”. *Current Opinion in Colloid & Interface Science*, Vol. 6, No. 3, pp. 236–241, June 2001.
- [Chri 96] M. A. Christie. “Upscaling for reservoir simulation”. *Journal of Petroleum Technology*, Vol. 48, pp. 1004–1008, 1996.
- [Cuet 08] L. Cueto-Felgueroso and R. Juanes. “Nonlocal Interface Dynamics and Pattern Formation in Gravity-Driven Unsaturated Flow through Porous Media”. *Physical Review Letters*, Vol. 101, No. 24, p. 244504, 2008.

- [Dahl 05] H. Dahle, M. Celia, and S. Majid Hassanizadeh. “Bundle-of-Tubes Model for Calculating Dynamic Effects in the Capillary-Pressure-Saturation Relationship”. *Transport in Porous Media*, Vol. 58, No. 1, pp. 5–22, 2005.
- [Dam 06] A. van Dam and P. Zegeling. “A robust moving mesh finite volume method applied to 1D hyperbolic conservation laws from magnetohydrodynamics”. *Journal of Computational Physics*, Vol. 216, pp. 526–546, 2006.
- [Darc 56] H. Darcy. *Les fontaines de la ville Dijon*. Dalmont, Paris, 1856.
- [Dein 08] M. R. Deinert, A. Dathe, J.-Y. Parlange, and K. B. Cady. “Capillary pressure in a porous medium with distinct pore surface and pore volume fractal dimensions”. *Physical Review E*, Vol. 77, No. 2, p. 021203, 2008.
- [Dijk 02] M. van Dijke and K. Sorbie. “Pore-scale network model for three-phase flow in mixed-wet porous media”. *Physical Review E*, Vol. 66, No. 4, p. 46302, 2002.
- [Dona 69] E. Donaldson, R. Thomas, and P. Lorenz. “Wettability determination and its effect on recovery efficiency”. *Soc. Pet. Eng. J*, Vol. 9, p. 13, 1969.
- [Dorm 80] J. R. Dormand and P. J. Prince. “A family of embedded Runge-Kutta formulae”. *J. Comp. Appl. Math.*, Vol. 6, pp. 19–26, 1980.
- [Dost 10a] F. Doster and R. Hilfer. “Generalized Buckley-Leverett theory for two phase flow in porous media”. *in preparation*, 2010.
- [Dost 10b] F. Doster and R. Hilfer. “Gravity driven redistribution for two phase flow in porous media”. *in preparation*, 2010.
- [Dost 10c] F. Doster, O. Höning, and R. Hilfer. “Quasianalytic solutions for two phase flow in porous media including the percolation of the fluids”. *in preparation*, 2010.
- [Dost 10d] F. Doster, P. A. Zegeling, and R. Hilfer. “Numerical solutions of a generalized theory for macroscopic capillarity”. *Phys. Rev. E*, Vol. 81, No. 3, p. 036307, Mar 2010.
- [Dull 92] F. Dullien. *Porous Media - Fluid Transport and Pore Structure*. Academic Press, San Diego, 2 Ed., 1992.
- [Ebig 07] A. Ebigbo, H. Class, and R. Helmig. “CO<sub>2</sub> leakage through an abandoned well: problem-oriented benchmarks”. *Computational Geosciences*, Vol. 11, pp. 103–115, 2007.

- [Efen 02] Y. Efendiev and L. Durlafsky. “Numerical modeling of subgrid heterogeneity in two phase flow simulations”. *Water Resources Research*, Vol. 38, p. 1128, 2002.
- [Engl 87] W. England, A. Mackenzie, D. Mann, and T. Quigley. “The Movement And Entrapment Of Petroleum Fluids In The Subsurface”. *J. Geol. Soc.*, Vol. 144, p. 327, 1987.
- [Fere 04] M. Ferer, C. Ji, G. Bromhal, J. Cook, G. Ahmadi, and D. Smith. “Crossover from capillary fingering to viscous fingering for immiscible unstable flow: Experiment and modeling”. *Physical Review E*, Vol. 70, No. 1, p. 16303, 2004.
- [Forc 01] P. Forchheimer. “Wasserbewegung durch Boden”. *Z. Ver. Deutsch. Ing*, Vol. 45, pp. 1782–1788, 1901.
- [Fuci 07] R. Fucik, J. Mikyska, M. Benes, and T. H. Illangasekare. “An Improved Semi-Analytical Solution for Verification of Numerical Models of Two-Phase Flow in Porous Media”. *Vadose Zone J*, Vol. 6, No. 1, pp. 93–104, 2007.
- [Geel 97] P. J. van Geel and J. F. Sykes. “The importance of fluid entrapment, saturation hysteresis and residual saturations on the distribution of a lighter-than-water non-aqueous phase liquid in a variably saturated sand medium”. *Journal of Contaminant Hydrology*, Vol. 25, No. 3-4, pp. 249–270, March 1997.
- [Genn 88] P. G. de Gennes. “Dynamic capillary pressure in porous media”. *Europhys. Lett.*, Vol. 5, pp. 689 – 691, 1988.
- [Genu 80] M. van Genuchten. “A closed-form equation for predicting the hydraulic conductivity of unsaturated soils”. *Soil Sci. Soc. Am. J*, Vol. 44, No. 5, pp. 892–898, 1980.
- [Hack 86] W. Hackbusch. *Theorie und Numerik elliptischer Differentialgleichungen*. B.G. Teubner, Stuttgart, 1986.
- [Hage 84] W. Hager. “Condition Estimates”. *SIAM J. Sci. Stat. Comput.*, Vol. 5, pp. 311–316, 1984.
- [Hass 02] S. M. Hassanizadeh, M. A. Celia, and H. K. Dahle. “Dynamic Effect in the Capillary Pressure - Saturation Relationship and its Impact on Unsaturated Flow”. *Vadose Zone Hydrology*, Vol. 1, pp. 38–57, 2002.
- [Hass 90] S. M. Hassanizadeh and W. G. Gray. “Mechanics and thermodynamics of multiphase flow in porous media including interphase boundaries”. *Adv. Water Resources*, Vol. 13, p. 169, 1990.



- [Hass 93] S. M. Hassanizadeh and W. G. Gray. “Thermodynamic Basis of Capillary Pressure in Porous Media”. *Water Resources Research*, Vol. 29, No. 10, pp. 3389–3405, 1993.
- [Heim 09] F. Heimann. *Un Unfitted Discontinuous Galerkin Method for Two-Phase Flow*. Master’s thesis, Universität Heidelberg, 2009.
- [Helm 97] R. Helmig. *Multiphase Flow and Transport Processes in the Subsurface*. Springer, 1997.
- [Herm 06] M. Hermann. *Numerische Mathematik*. Oldenbourg, 2006.
- [High 00] N. J. Higham and F. Tisseur. “A Block Algorithm for Matrix 1-Norm Estimation with an Application to 1-Norm Pseudospectra”. *SIAM J. Matrix Anal. Appl.*, Vol. 21, pp. 1185–1201, 2000.
- [Hilf 00] R. Hilfer and H. Besserer. “Macroscopic two-phase flow in porous media”. *Physica B*, Vol. 279, p. 125, 2000.
- [Hilf 06a] R. Hilfer. “Capillary pressure, hysteresis and residual saturation in porous media”. *Physica A*, Vol. 359, p. 119, 2006.
- [Hilf 06b] R. Hilfer. “Macroscopic capillarity and hysteresis for flow in porous media”. *Physical Review E*, Vol. 73, p. 016307, 2006.
- [Hilf 06c] R. Hilfer. “Macroscopic capillarity without a constitutive capillary pressure function”. *Physica A*, Vol. 371, pp. 209–225, 2006.
- [Hilf 09] R. Hilfer. “Modeling and simulation of macrocapillarity”. In: P. Garrido, P. Hurtado, and J. Marro, Eds., *Modeling And Simulation Of New Materials: Proceedings of Modeling and Simulation of New Materials: Tenth Granada Lectures*, pp. 141–150, 2009.
- [Hilf 10] R. Hilfer and F. Doster. “Percolation as a Basic Concept for Macroscopic Capillarity”. *Transport in Porous Media*, Vol. 82, No. 3, pp. 507–519, Apr. 2010.
- [Hilf 96] R. Hilfer and P. E. Øren. “Dimensional Analysis of Pore Scale and Field Scale Immiscible Displacement”. *Transport in Porous Media*, Vol. 22, pp. 53 – 72, 1996.
- [Hilf 98] R. Hilfer. “Macroscopic equations of motion for two-phase flow in porous media”. *Physical Review A*, Vol. 58, p. 2090, 1998.

- [Jami 60] J. Jamin. “Notes about equilibrium and flow of fluids in porous body”. *Acad. Sci.*, Vol. 50, p. 172, 1860.
- [Kaas 99] E. Kaasschieter. “Solving the Buckley-Leverett equation with gravity in a heterogeneous porous medium”. *Computational Geosciences*, Vol. 3, No. 1, pp. 23–48, Sep. 1999.
- [Kata 92] M. Kataja, K. Hiltunen, and J. Timonen. “Flow of water and air in a compressible porous medium. A model of wet pressing of paper”. *Journal of Physics D: Applied Physics*, Vol. 25, No. 7, p. 1053, 1992.
- [Klou 92] J. Kloubek. “Pore-Size Distribution In Separon Using Mercury Contact Angles In Pores And Hysteresis In Porosimetry”. *Journal of Adhesion Science and Technology*, Vol. 6, No. 6, pp. 667–688, 1992.
- [Kutt 01] W. Kutta. “Beitrag zur näherungsweise Integration totaler Differentialgleichungen”. *Z. Math. Phys*, Vol. 46, pp. 435–453, 1901.
- [Lake 89] L. W. Lake. *Enhanced Oil Recovery*. Prentice Hall, New Jersey, 1989.
- [Land 66] L. Landau and E. Lifschitz. *Hydromechanik*. Akademie Verlag, Berlin, 1966.
- [Lass 08] D. Lasseux, A. Ahmadi, and A. Arani. “Two-Phase Inertial Flow in Homogeneous Porous Media: A Theoretical Derivation of a Macroscopic Model”. *Transport in Porous Media*, Vol. 75, No. 3, pp. 371–400, Dec. 2008.
- [Laus 08] A. Lauser. *Implementation and Application of a Hysteresis Model for Multiphase Flow and Transport in Porous Media*. Master’s thesis, Universität Stuttgart, 2008.
- [LeFl 02] P. G. LeFloch. *Hyperbolic Systems of Conservation Laws*. Birkhäuser Verlag, Basel, 2002.
- [Lehm 08] P. Lehmann, S. Assouline, and D. Or. “Characteristic lengths affecting evaporative drying of porous media”. *Physical Review E*, Vol. 77, No. 5, p. 056309, 2008.
- [Lenh 91] R. Lenhard, J. Parker, and J. Kaluarachchi. “Comparing simulated and experimental hysteretic two-phase transient fluid flow phenomena”. *Water Resources Research*, Vol. 27, No. 8, pp. 2113–2124, 1991.
- [LeVe 07] R. LeVeque. *Finite volume methods for hyperbolic problems*. Cambridge Texts in Applied Mathematics, 2007.

- [Leve 41] M. C. Leverett. “Capillary Behaviour in Porous Solids”. *Transaction of the AIME*, Vol. 142, pp. 152–169, 1941.
- [Manw 02] C. Manwart, U. Aaltosalmi, A. Koponen, R. Hilfer, and J. Timonen. “Lattice-Boltzmann and finite-difference simulations for the permeability for three-dimensional porous media”. *Physical Review E*, Vol. 66, No. 1, p. 16702, 2002.
- [Marl 82] C. Marle. “On macroscopic equations governing multiphase flow with diffusion and chemical reactions in porous media”. *International Journal of Engineering Science*, Vol. 20, No. 5, pp. 643–662, 1982.
- [Matl 08] Matlab-Dokumentation. “Version 7.7”. 2008.
- [McWh 90] D. McWhorter and D. Sunada. “Exact Integral Solutions For 2-Phase Flow”. *Water Resources Research*, Vol. 26, No. 3, pp. 399–413, Mar 1990.
- [McWh 92] D. McWhorter and D. Sunada. “Exact Integral Solutions For 2-Phase Flow - Reply”. *Water Resources Research*, Vol. 28, No. 5, p. 1479, May 1992.
- [Mill 98] C. T. Miller, G. Christakos, P.T.Imhoff, J.F.McBride, J.A.Pedit, and J.A.Trangenstein. “Multiphase flow and transport modeling in heterogeneous porous media: challenges and approaches”. *Advances in Water Resources*, Vol. 21, pp. 77–120, 1998.
- [Morr 65] N. R. Morrow and C. C. Harris. “Capillary Equilibrium in Porous Materials”. *Soc. Pet. Eng. Jour.*, pp. 15 – 24, 1965.
- [Morr 88] N. Morrow, I. Chatzis, and J. Taber. “Entrapment and mobilization of residual oil in bead packs”. *SPE Reservoir Engineering*, Vol. 3, No. 3, pp. 927–934, 1988.
- [Morr 91] N. Morrow. *Interfacial phenomena in petroleum recovery*. CRC, 1991.
- [Mual 73] Y. Mualem. “Modified approach to capillary hysteresis based on a similarity hypothesis”. *Water Resources Research*, Vol. 9, No. 5, pp. 1324–1331, 1973.
- [Mual 74] Y. Mualem. “A conceptual model of hysteresis”. *Water Resources Research*, Vol. 10, pp. 514–520, 1974.
- [Munz 05] C. Munz and T. Westermann. *Numerische Behandlung gewöhnlicher und partieller Differenzialgleichungen*. Springer, 2005.
- [Musk 36] M. Muskat and M. Meres. “The flow of heterogeneous fluids through porous media”. *Physics*, Vol. 7, p. 346, 1936.

- [Narv 10] A. Narvaez, T. Zauner, R. Hilfer, and J. Harting. “Quantitative analysis of numerical estimates for the permeability of porous media from lattice-Boltzmann simulations”. *submitted*, 2010.
- [Naum 08] S. Naumov, A. Khokhlov, R. Valiullin, J. Karger, and P. A. Monson. “Understanding capillary condensation and hysteresis in porous silicon: Network effects within independent pores”. *Physical Review E*, Vol. 78, No. 6, p. 060601, 2008.
- [Nies 08] J. Niessner and S. M. Hassanizadeh. “A model for two-phase flow in porous media including fluid-fluid interfacial area”. *Water Resources Research*, Vol. 44, No. 8, p. W08439, AUG 26 2008.
- [Olbr 96] W. Olbricht. “Pore-scale prototypes of multiphase flow in porous media”. *Annual Review of Fluid Mechanics*, Vol. 28, pp. 187–213, 1996.
- [Papa 08] A. Papafotiou. *Numerical Investigations of the Role of Hysteresis in Heterogeneous Two-Phase Flow Systems*. PhD thesis, University of Stuttgart, 2008.
- [Park 89] J. Parker. “Multiphase Flow And Transport In Porous-Media”. *Reviews of Geophysics*, Vol. 27, No. 3, pp. 311–328, AUG 1989.
- [Pasa 04] U. Pasaogullari and C. Wang. “Liquid water transport in gas diffusion layer of polymer electrolyte fuel cells”. *Journal of the Electrochemical Society*, Vol. 151, p. A399, 2004.
- [Petz 83] L. R. Petzold. “A Description of DASSL: A Differential/AlgebraicSystem Solver.”. In: R. S. Stepleman, Ed., *IMACS Transactions on Scientific Computation*, IMACS, Amsterdam, 1983.
- [Phil 91] J. R. Philip. “Horizontal Redistribution With Capillary Hysteresis”. *Water Resources Research*, Vol. 27, No. 7, pp. 1459 – 1469, 1991.
- [Pop 09] I. Pop, C. van Duijn, J. Niessner, and S. Hassanizadeh. “Horizontal redistribution of fluids in a porous medium: The role of interfacial area in modeling hysteresis”. *Advances in Water Resources*, Vol. 32, No. 3, pp. 383–390, March 2009.
- [Rann 06] R. Rannacher. *Einführung in die Numerische Mathematik*. Institut für Angewandte Mathematik, Heidelberg, 2006.
- [Rann 08a] R. Rannacher. *Numerische Mathematik 2 - Numerik Partieller Differentialgleichungen*. Institut für Angewandte Mathematik, Heidelberg, 2008.
- [Rann 08b] R. Rannacher. *Numerische Mathematik 3 - Numerik von Problemen der Kontinuumsmechanik*. Institut für Angewandte Mathematik, Heidelberg, 2008.

- [Rann 09] R. Rannacher. *Numerische Mathematik 1 - Numerik gewöhnlicher Differentialgleichungen*. Institut für Angewandte Mathematik, Heidelberg, 2009.
- [Rann 92] R. Rannacher. “On Chorin’s projection method for the incompressible Navier-Stokes equations”. In: J. Heywood, K. Masuda, R. Rautmann, and V. Solonnikov, Eds., *The Navier-Stokes Equation II: Theory and Numerical Methods*, pp. 167–183, Springer Verlag, 1992.
- [Rich 31] L. A. Richards. “Capillary Conduction of Liquids through Porous Medium”. *Physics*, pp. 318–333, 1931.
- [Rose 00] W. Rose. “Myths about later-day extensions of Darcy’s law”. *Journal of Petroleum Science and Engineering*, Vol. 26, No. 1-4, pp. 187–198, 2000.
- [Roth 07] K. Roth. *Soil Physics. Lecture Notes*. Institute of Environmental Physics, University of Heidelberg, 2007.
- [Roye] P. Royer. *Homogenization of Fluid Flow in Porous Media*. Imperial College, London.
- [Sche 57] A. E. Scheidegger. *The Physics of Flow through Porous Media*. University of Toronto Press, 1957.
- [Shen 92a] J. Shen. “On Pressure Stabilization Method and Projection Method for Unsteady Navier-Stokes Equations”. In: R. Vichnevetsky, D. Knight, and G. Richter, Eds., *Advances in Computer Methods for Partial Differential Equations*, pp. 658–662, IMACS, 1992.
- [Shen 92b] P. Sheng and M. Zhou. “Immiscible-fluid displacement: Contact-line dynamics and the velocity-dependent capillary pressure”. *Physical Review A*, Vol. 45, No. 8, pp. 5694–5708, 1992.
- [Shet 99] H. Sheta. *Simulation von Mehrphasenvorgängen in porösen Medien unter Einbeziehung von Hysterese-Effekten*. PhD thesis, Institut für Wasserbau, Universität Stuttgart, 1999.
- [Tabe 69] J. Taber. “Dynamic and static forces required to remove a discontinuous oil phase from porous media containing both oil and water”. *Society of Petroleum Engineers Journal*, Vol. 9, No. 1, pp. 3–8, 1969.
- [Tsak 07] C. D. Tsakiroglou, D. G. Avraam, and A. C. Payatakes. “Transient and steady-state relative permeabilities from two-phase flow experiments in planar pore

- networks". *Advances In Water Resources*, Vol. 30, No. 9, pp. 1981–1992, SEP 2007.
- [Vach 72] G. Vachaud, M. Vauclin, and M. Wakil. "A Study of the Uniqueness of the Soil Moisture Characteristic during Desorption by Vertical Drainage". *Soil Sci. Soc. Amer. Proc.*, Vol. 36, pp. 531 – 532, 1972.
- [Voge 08] H.-J. Vogel, A. Samouelian, and O. Ippisch. "Reprint of "Multi-step and two-step experiments in heterogeneous porous media to evaluate the relevance of dynamic effects"". *Advances in Water Resources*, Vol. 31, No. 9, pp. I–VIII, Sep. 2008.
- [Whit 86a] S. Whitaker. "Flow in porous media I: A theoretical derivation of Darcy's law". *Transport in Porous Media*, Vol. 1, pp. 3–25, 1986.
- [Whit 86b] S. Whitaker. "Flow in porous media II: The governing equations for immiscible two-phase flow". *Transport in Porous Media*, Vol. 1, pp. 105–125, 1986.
- [Wyck 36] R. D. Wyckoff and H. G. Botset. "The Flow of Gas-Liquid Mixtures Through Unconsolidated Sands". *Physics*, Vol. 7, No. 9, pp. 325–345, 1936.
- [Zege 04] P. Zegeling. "Tensor-Product Adaptive Grids Based on Coordinate Transformations". *J. of Comp. & Appl. Maths.*, Vol. 166, pp. 343–360, 2004.
- [Zege 07] P. Zegeling. "Theory and Application of Adaptive Moving Grid Methods". In: T. Tang and J. Xu, Eds., *Adaptive Computations: Theory and Algorithms*, p. 251, Science, Peking, 2007.
- [Zege 10] P. Zegeling, I. Lagzi, and F. Izsak. "Transition of Liesegang Precipitation Systems: Simulations with an Adaptive Grid PDE Method". *submitted*, 2010.
- [Zege 92] P. A. Zegeling and J. Blom. "An Evaluation of the Gradient-Weighted Moving-Finite-Element Method in One Space Dimension". *Journal of Computational Physics*, Vol. 103, pp. 422–441, 1992.
- [Zhan 02] Z. Zhang and J. Smith. "Visualization of DNAPL Fingering Processes and Mechanisms in Water-Saturated Porous Media". *Transport in Porous Media*, Vol. 48, pp. 41–59, 2002.