

**Heft 100 Simulation von Mehrphasenvor-  
gängen in porösen Medien unter Ein-  
beziehung von Hysterese-Effekten**

**von Dr.-Ing.  
Hussam Sheta**

# Simulation von Mehrphasenvorgängen in porösen Medien unter Einbeziehung von Hysterese-Effekten

Von der Fakultät Bauingenieur- und Vermessungswesen der Universität Stuttgart zur Erlangung der Würde eines Doktor-Ingenieurs (Dr.-Ing.) genehmigte Abhandlung

von Hussam Sheta  
aus Port-Said /Ägypten

Hauptberichter: Prof. Dr. R. Helmig  
Mitberichter: Prof. Dr. h.c. H. Kobus, Ph.D.

Tag der mündlichen Prüfung: 23. Juni 1999

CIP Titelaufnahme der Deutschen Bibliothek

**Sheta, Hussam:**

Simulation von Mehrphasenvorgängen in porösen Medien unter Einbeziehung von Hysterese-Effekten / von Hussam Sheta. [Stuttgart : Institut für Wasserbau]. – Stuttgart : Inst. für Wasserbau, 1999

(Mitteilungen / Institut für Wasserbau, Universität Stuttgart ; H. 100)

Zugl.: Stuttgart, Univ., Diss., 1999

ISBN 3-933761-03-4

Gegen Vervielfältigung und Übersetzung bestehen keine Einwände, es wird lediglich um Quellenangabe gebeten.

Herausgegeben 1999 vom Eigenverlag des Instituts für Wasserbau

Druck: Sprint-Druck, Stuttgart

## VORWORT

Die vorliegende Arbeit entstand im Rahmen des Forschungsprogramms der Versuchseinrichtung zur Grundwasser- und Altlastensanierung VEGAS. Sie befaßt sich mit einem zentralen Thema zur Beschreibung von Schadstoffausbreitung und Transport im natürlichen Untergrund: das ....

## Danksagung

Die vorliegende Arbeit entstand während meiner Tätigkeit als wissenschaftlicher Mitarbeiter am Institut für Wasserbau, Lehrstuhl für Hydraulik und Grundwasser, Universität Stuttgart. Herrn Professor Rainer Helmig danke ich als Hauptberichter für die Förderung dieser Arbeit sowie für die konstruktiven Hinweise und Vorschläge, die zum erfolgreichen Gelingen beigetragen haben. Herrn Professor Kobus danke ich für die Durchsicht der Arbeit und für die Übernahme des Mitberichts. Ausgesprochen wertvoll war mir die Zusammenarbeit mit meinen Kollegen Holger Class, Maren Paul und Ralf Huber, die mich durch ihre anregende Kritik wohlwollend unterstützt haben. Doro Schweizer gebührt mein besonderer Dank für ihr Verständnis und für ihre tatkräftige Hilfsbereitschaft bei der Rechnerbetreuung. Ebenso seien aus dem großen CAB-Kreis der Kolleginnen und Kollegen auch Frau Fraschke, Annette Hemminger, Lina Neunhäuserer, Dr. Phillip Hinkelmann, Thomas Breiting, Hartmut Jakobs, David Werner erwähnt. Für die vielen Anregungen möchte ich mich auch bei allen IWS- Kolleginnen und Kollegen der Universität Stuttgart bedanken, in besonderem Maße bei Christoph Braun, Silke Radmacher, Heike Naß und bei den alten Kollegen Dr. Jean Croisé, Dr. Martin Emmert sowie Dr. Olaf Cirpka. Mein besonderer Dank gilt auch dem VEGAS-Tutorium, Dr. Jürgen Braun, Oliver Trötschler, Dr. Jane Allan, Dr. Torsten Zumühl, Reinhold Josef, Dr. Barczewski, Dr. Koschitzky, Gerhard Schmid und für die Programmmodule Dr. Peter Bastian und Herrn Professor Andras Bárdossy. Diese Arbeit widme ich in großer Dankbarkeit meinen Eltern, die meinen Werdegang geprägt haben und mir diesen ermöglicht haben. Schließlich möchte ich meiner Frau Paola für die Korrekturarbeit danken und ihr bei ihrem Promotionsvorhaben viel Erfolg wünschen.

Braunschweig, September 1999

Hussam Sheta

# Inhaltsverzeichnis

<b>1</b>	<b>Einleitung</b>	<b>1</b>
1.1	Problemstellung und Zielsetzung . . . . .	1
1.2	Gliederung der Arbeit . . . . .	5
1.3	Literaturübersicht . . . . .	7
<b>2</b>	<b>Grundlagen der Mehrphasenströmung</b>	<b>10</b>
2.1	Einleitung . . . . .	10
2.2	Kapillarität . . . . .	11
2.2.1	Kapillarität bei mikroskaliger Betrachtungsweise . . . . .	11
2.2.2	Kapillarität bei mesoskaliger Betrachtungsweise (Zweiphasensystem)	14
2.2.3	Kapillarität bei makroskaliger Betrachtungsweise (Dreiphasensystem)	33
2.3	Relative Permeabilität . . . . .	37
2.3.1	Relative Permeabilität bei mikroskaliger Betrachtungsweise . . . . .	37
2.3.2	Relative Permeabilität bei mesoskaliger Betrachtungsweise (Zweiphasensystem) . . . . .	37
2.3.3	Relative Permeabilität bei makroskaliger Betrachtungsweise (Dreiphasensystem) . . . . .	50
2.4	Mathematisch-numerische Beschreibung der Mehrphasenströmung . . . . .	52
2.4.1	Kontinuitätsgleichung . . . . .	52
2.4.2	Fließgesetz von Darcy . . . . .	54
2.4.3	Erweiterung des Fließgesetzes für Mehrphasenströmungen . . . . .	55
2.4.4	Numerische Diskretisierung . . . . .	56

<b>3</b>	<b>Grundlage der Hysterese</b>	<b>60</b>
3.1	Hysterese auf der Mikroskala . . . . .	60
3.2	Hysterese auf der Mesoskala (Zweiphasensystem) . . . . .	63
3.2.1	Kapillardruck-Sättigungs-Hysterese . . . . .	66
3.2.2	Relative Permeabilität-Sättigungs-Hysterese . . . . .	77
3.3	Hysterese auf der Mesoskala (Dreiphasensystem) . . . . .	78
3.3.1	Kapillardruck-Sättigungs-Hysterese . . . . .	78
3.3.2	Relative Permeabilität-Sättigungs-Hysterese . . . . .	84
3.4	Entwicklung eines Hysterese-Konzeptes für das numerische Modell <i>MUFTE-UG</i> . . . . .	87
3.4.1	Zweiphasen-Modell . . . . .	87
3.4.2	Dreiphasen-Modell . . . . .	89
<b>4</b>	<b>Physikalische Grundlagen zum Eindringverhalten von NAPL in hetero- genen porösen Medien</b>	<b>90</b>
4.1	Eindringbedingungen auf der Mikroskala . . . . .	90
4.2	Eindringbedingungen auf der Mesoskala . . . . .	94
4.3	Eindringbedingungen auf der Makroskala . . . . .	98
<b>5</b>	<b>Verifizierung des numerischen Modells</b>	<b>100</b>
5.1	Einleitung . . . . .	100
5.2	Zweiphasenströmungen mit Gravitationseinfluß . . . . .	100
5.2.1	Analytische Lösung nach Rogers et al. . . . .	100

5.2.2	Vergleich mit numerischer Simulation . . . . .	108
5.3	Zweiphasenströmungen unter Berücksichtigung von Hysterese-Effekten . . .	112
5.3.1	Experiment I (Hauptdrainage- und erste Sekundärimbibitionskurve)	112
5.3.2	Experiment II (Sekundärdrainage- und -imbibitionskurven) . . . . .	116
5.4	Dreiphasenströmungen unter Berücksichtigung von Hysterese-Effekten . . .	120
<b>6</b>	<b>Numerische Simulation eines VEGAS-Experimentes unter Berücksichtigung von Hysterese-Effekten in der gesättigten Zone</b>	<b>127</b>
6.1	Problemstellung und Zielsetzung des Experimentes . . . . .	127
6.2	Numerische Simulation zur Vordimensionierung des Experimentes . . . . .	130
6.3	Experiment und numerische Simulation . . . . .	137
6.3.1	Experimentverlauf und -ergebnisse . . . . .	137
6.3.2	Numerische Simulation . . . . .	148
6.3.3	Effekt der Hysterese . . . . .	163
6.3.4	Zusammenfassung . . . . .	164
<b>7</b>	<b>Numerisches Experiment zu Dreiphasensystemen unter Berücksichtigung von Hysterese-Effekten</b>	<b>165</b>
7.1	Zielsetzung des Experimentes . . . . .	165
7.2	Experiment und numerische Simulation . . . . .	166
7.2.1	Modellaufbau . . . . .	166
7.2.2	Numerisches Experiment . . . . .	167
7.2.3	Numerische Ergebnisse . . . . .	172
<b>8</b>	<b>Zusammenfassung und Ausblick</b>	<b>180</b>

# Abbildungsverzeichnis

1.1	Einfluß von klein- und großskaligen Heterogenitäten auf die DNAPL-Verteilung im Untergrund . . . . .	4
1.2	Einfluß von Hysterese auf die LNAPL-Verteilung im Untergrund . . . . .	4
2.1	Modellskalen in porösen Medien . . . . .	10
2.2	Kohäsionskräfte auf Moleküle in der Fluidphase sowie an der Grenzfläche zweier nichtmischbarer Fluide nach Hillel (1980)[52] . . . . .	12
2.3	Grenzflächenspannung und Kontaktwinkel . . . . .	13
2.4	Grenzflächenelement, Kapillarröhre [47] . . . . .	13
2.5	Poren-Querschnitt mit Variation der Wassersättigung nach Corey (1985)[26] . . . . .	14
2.6	Schematische Skizze des experimentellen Aufbaus der <i>controlled outflow cell</i> -Methode . . . . .	17
2.7	Porengrößenverteilungsindex $\lambda$ in Zusammenhang mit Gleichförmigkeit . . . . .	20
2.8	$S_e$ als Funktion der gemessenen Kapillardruckdaten auf logarithmischer Darstellung . . . . .	21
2.9	Gemessene $p_c - S_w$ Daten und die entsprechend gefitteten <i>BC</i> -Kurven . . . . .	22
2.10	Gemessene $p_c - S_w$ Daten und die entsprechend gefitteten <i>vG</i> -Kurven . . . . .	23
2.11	Gemessene $p_c - S_w$ Daten und die entsprechend gefitteten <i>Brutsaert</i> -Kurven . . . . .	25
2.12	Kapillardruck-Sättigungs-Beziehungen für verschiedene Ansätze . . . . .	26
2.13	Umwandlung der Korngrößensummenkurve in Porengrößensummenkurve nach Arya und Paris . . . . .	28
2.14	Korngrößensummenkurve der in der Rinne verwendeten Sande [60] . . . . .	32



2.15	Berechnete (nach Arya et al.) und gemessene $p_c - S_w$ -Werte für den Grob-, Mittel-, und Feinsand . . . . .	33
2.16	Modell der Phasenverteilung im Dreiphasensystem Wasser–NAPL–Gas nach Leverett . . . . .	35
2.17	Grenzflächenspannung und Kontaktwinkel in Dreiphasensystem Wasser–NAPL–Gas . . . . .	36
2.18	Darstellung eines Dreiphasensystems (benetzende Phase, nichtbenetzende Phase, Korngerüst) auf mikroskaliger Ebene [47] . . . . .	37
2.19	Gerades gleichförmiges paralleles Kapillarmodell . . . . .	38
2.20	Konzeptionelles Modell der Tortuosität $\tau$ . . . . .	41
2.21	Kapillarröhrenmodell gleichbleibender Porengröße . . . . .	42
2.22	Ermittelte $k_r - S_w$ -Beziehungen nach Brooks und Corey . . . . .	45
2.23	Kapillarröhrenmodell mit verschieden großen Radien . . . . .	46
2.24	Ermittelte $k_r - S_w$ -Beziehungen nach van Genuchten . . . . .	49
2.25	Massenbilanz am Kontrollvolumen [48] . . . . .	53
2.26	Box-Diskretisierung . . . . .	57
3.1	Kontaktwinkel bei Drainage und Imbibition . . . . .	61
3.2	Drainage und Imbibition des Porensystems nach Miller (1956)[89] . . . . .	61
3.3	Einfluß der Porengeometrie auf die Fluideinschließung ( <i>snap-off</i> ) nach [22] . . . . .	62
3.4	Einfluß der Porengeometrie auf die Fluideinschließung ( <i>by-passing</i> ) nach [22] . . . . .	63
3.5	Kapillardruck–Sättigungs–Hysterese . . . . .	65
3.6	Relative Permeabilität–Sättigungs–Hysterese . . . . .	65
3.7	<i>Pumping</i> -Effekt bei der Kapillardruck–Sättigungs–Hysterese . . . . .	66

3.8	$p_c - S_w$ -Hysterese unter Berücksichtigung der Phaseneinschließung [80], aufgetragen über $\bar{S}_w$ . . . . .	71
3.9	$p_c - \bar{\bar{S}}_w$ -Hysterese . . . . .	72
3.10	$p_c - \bar{S}_w$ -Hysterese für den Grobsand (aufgetragen über die effektive Sättigung) . . . . .	74
3.11	$p_c - \bar{\bar{S}}_w$ -Hysterese für den Grobsand (aufgetragen über die scheinbare Sättigung) . . . . .	75
3.12	$p_c - \bar{S}_w$ -Hysterese für den Mittelsand (aufgetragen über die effektive Sättigung) . . . . .	75
3.13	$p_c - \bar{\bar{S}}_w$ -Hysterese für den Mittelsand (aufgetragen über die scheinbare Sättigung) . . . . .	76
3.14	$p_c - \bar{S}_w$ -Hysterese für den Feinsand (aufgetragen über die effektive Sättigung) . . . . .	76
3.15	$p_c - \bar{\bar{S}}_w$ -Hysterese für den Feinsand (aufgetragen über die scheinbare Sättigung) . . . . .	77
4.1	Eindringen eines DNAPL-Tropfens in wassergesättigte Poren [24] . . . . .	92
4.2	DNAPL-Ausbreitung bei mikroskaligen Heterogenitäten . . . . .	93
4.3	Mesoskaliges System . . . . .	96
4.4	Infiltration in die gesättigte Zone . . . . .	97
4.5	Druckverteilung der DNAPL-Schicht unterhalb des Wasserspiegels mit $S_n = S_{nr}$ am oberen Rand des DNAPL-Körpers ( $\rightarrow p_c = 0$ ) . . . . .	97
4.6	Druckverteilung der DNAPL-Schicht unterhalb des Wasserspiegels mit $S_n > S_{nr}$ am oberen Rand des DNAPL-Körpers ( $\rightarrow p_c = p_{d_{gro}}$ ) . . . . .	97
4.7	System auf der Makroskala . . . . .	99
4.8	$p_c - S_w$ - Kurven für ein System auf der Makroskala . . . . .	99
5.1	Rogers-Problem . . . . .	101

5.2	Ableitung des Kapillardrucks nach $S_n$ . . . . .	104
5.3	<i>Rogers</i> -Problem: Anfangs- und Randbedingungen . . . . .	108
5.4	<i>Rogers</i> -Problem: Relative Permeabilität-Sättigungs-Beziehung . . . . .	110
5.5	<i>Rogers</i> -Problem: Kapillardruck-Sättigungs-Beziehung . . . . .	110
5.6	<i>Rogers</i> -Problem: Sättigungsprofile zu verschiedenen Zeitpunkten . . . . .	111
5.7	Vergleich zwischen gemessener und berechneter Wassersättigung an den Höhen 67 cm bis 27 cm . . . . .	115
5.8	Vergleich zwischen gemessener und berechneter $p_c - S_w$ -Beziehungen an den Höhen 70 cm bis 40 cm . . . . .	118
5.9	Vergleich zwischen gemessener und berechneter Wassersättigung an den Höhen 70 cm bis 30 cm . . . . .	119
5.10	Vergleich zwischen gemessenen und berechneten Sättigungen an den Höhen 67 cm bis 17 cm . . . . .	124
5.11	$p_c$ - $S_t$ -Beziehungen an den Höhen 67 cm bis 17 cm . . . . .	125
5.12	$p_c$ - $S_w$ -Beziehungen an den Höhen 67 cm bis 17 cm . . . . .	126
6.1	Struktur des DNAPL-Experimentes a): Horizontalschnitt b): Vertikal- schnitt der geplanten Struktur c): Vertikalschnitt der gewählten Struktur .	131
6.2	Finite-Elemente Netz . . . . .	133
6.3	Randbedingung zur Bestimmung der Fließrate . . . . .	134
6.4	Randbedingung für die numerische Simulation . . . . .	134
6.5	Numerische Ergebnisse nach 2.7 h . . . . .	135
6.6	Gewicht der DNAPL-Fässer im Laufe des Versuchs (gem. von Trötschler) .	138
6.7	Infiltrationsrate von DNAPL (gemessen von Trötschler) . . . . .	138

6.8	Zuflußrate von Wasser (gem. von Trötschler)	139
6.9	DNAPL-Sättigungsverlauf an den Meßstellen 101 bis 106	144
6.10	DNAPL-Sättigungsverlauf an den Meßstellen 107 bis 112	145
6.11	DNAPL-Sättigungsverlauf an den Meßstellen 113 bis 115	146
6.12	Experimentelle Ergebnisse	147
6.13	Experimentelle Ergebnisse	147
6.14	Diskretisierung des Modellgebietes (4349 Knoten, 4256 Elemente)	149
6.15	Numerische Ergebnisse nach 240 s	150
6.16	Numerische Ergebnisse nach 780 s	150
6.17	Numerische Ergebnisse nach 1500 s	151
6.18	Numerische Ergebnisse nach 2520 s	151
6.19	Numerische Ergebnisse nach 3600 s	151
6.20	Numerische Ergebnisse nach 5400 s	152
6.21	Numerische Ergebnisse nach 6600 s	152
6.22	Numerische Ergebnisse nach 8100 s	152
6.23	Turningband Methode	153
6.24	Theoretisches Variogramm	154
6.25	Anisotropie der Permeabilität	154
6.26	Parameter der ersten Realisation	156
6.27	Permeabilitätsverteilung für die erste Realisation	156
6.28	Numerische Simulation nach 1.45 h für die erste Realisation	156

6.29	Parameter der zweiten Realisation . . . . .	157
6.30	Permeabilitätsverteilung für die zweite Realisation . . . . .	157
6.31	Numerische Simulation nach 1.88 $h$ für die zweite Realisation . . . . .	157
6.32	Parameter der dritten Realisation . . . . .	158
6.33	Permeabilitätsverteilung für die dritte Realisation . . . . .	158
6.34	Numerische Simulation nach 1.88 $h$ für die dritte Realisation . . . . .	158
6.35	Parameter der vierten Realisation . . . . .	159
6.36	Permeabilitätsverteilung für die vierte Realisation . . . . .	159
6.37	Numerische Simulation nach 1.45 $h$ für die vierte Realisation . . . . .	159
6.38	Parameter der fünften Realisation . . . . .	160
6.39	Permeabilitätsverteilung für die fünfte Realisation . . . . .	160
6.40	Numerische Simulation nach 1.88 $h$ für die fünfte Realisation . . . . .	160
6.41	Parameter der sechsten Realisation . . . . .	161
6.42	Permeabilitätsverteilung für die sechste Realisation . . . . .	161
6.43	Numerische Simulation nach 1,45 $h$ für die sechste Realisation . . . . .	161
6.44	Parameter der siebten Realisation . . . . .	162
6.45	Permeabilitätsverteilung für die siebte Realisation . . . . .	162
6.46	Numerische Simulation nach 1.45 $h$ für die siebte Realisation . . . . .	162
7.1	Versuchaufbau a) Draufsicht, b) Schnitt . . . . .	166
7.2	Zeitlicher Verlauf der Wasserspiegelschwankungen . . . . .	167
7.3	Räumliche Diskretisierung (630 Elemente, 688 Knoten) . . . . .	168

7.4	$p_c - S_w$ -Kurve für das System Wasser-Gas (Grobsand) . . . . .	169
7.5	$p_c - S_w$ -Kurve für das System Wasser-Gas (Mittelsand) . . . . .	170
7.6	$p_c - S_w$ -Kurve im Dreiphasensystem für Wasser-NAPL . . . . .	170
7.7	$p_c - S_t$ -Kurve im Dreiphasensystem für (NAPL+Wasser)-Gas . . . . .	171
7.8	Relative Permeabilität-Sättigungs-Beziehung für Grobsand . . . . .	172
7.9	Relative Permeabilität-Sättigungs-Beziehung für Mittelsand . . . . .	173
7.10	Numerische Ergebnisse . . . . .	175
7.11	Numerische Ergebnisse . . . . .	176
7.12	Numerische Ergebnisse . . . . .	177
7.13	Numerische Ergebnisse . . . . .	178
7.14	Numerische Ergebnisse . . . . .	179

# Nomenklatur

Symbol	Bedeutung	Dimension
$A$	Fläche	$[m^2]$
$d_k$	Korndurchmesser	$[m]$
$d_p$	Porendurchmesser	$[m]$
$g$	Erdbeschleunigung	$[m/s^2]$
$\mathbf{g}$	Vektor $(0, 0, -g)^T$	$[m/s^2]$
$\mathbf{h}$	Standrohrspiegelhöhe = Druckhöhe $(p/\rho g)$ + geodätische Höhe $(z)$	$[m]$
$h_d$	Stauhöhe	$[m]$
$k$	absolute Permeabilität	$[m^2]$
$k_{r\alpha}$	relative Permeabilität der Phase $\alpha$	$[-]$
$\mathbf{K}$	Permeabilitätstensor	$[m^2]$
$\mathbf{K}_0$	Durchlässigkeitstensor	$[m/s]$
$l$	charakteristische Länge des REV	$[m]$
$m$	VAN GENUCHTEN(VG)–Parameter	$[-]$
$\mathbf{n}$	Normalenvektor	$[-]$
$n$	VAN GENUCHTEN(VG)–Parameter	$[-]$
$N$	Ansatzfunktion	$[-]$
$p$	Druck	$[Pa]$
$p_\alpha$	Druck der Phase $\alpha$	$[Pa]$
$p_c$	Kapillardruck	$[Pa]$
$p_{c\alpha\psi}$	Kapillardruck zwischen Phase $\alpha$ und Phase $\psi$	$[Pa]$
$p_d$	BROOKS–COREY(BC)–Parameter, Eindringdruck	$[Pa]$
$q$	bezogener Volumenstrom (Quellen und Senken)	$[m^3/(m^2s)]$
$r$	Radius	$[m]$
$R$	hydraulischer Radius	$[m]$
$S_e$	effektive Sättigung	$[-]$
$S_\alpha$	Sättigungsgrad der Phase $\alpha$	$[-]$
$\bar{S}_\alpha$	effektive Sättigung der Phase $\alpha$	$[-]$
$\bar{\bar{S}}_\alpha$	scheinbare Sättigung der Phase $\alpha$	$[-]$
$S_{\alpha r}$	Residualsättigung der Phase $\alpha$	$[-]$

$t$	Zeit	[s]
$\mathbf{u}$	Lösungsfunktion	[–]
$\tilde{u}$	angenäherte Lösungsfunktion	[–]
$U$	benetzter Umfang	[m]
$v$	Filtergeschwindigkeit	[m/s]
$\mathbf{v}$	Vektor der Filtergeschwindigkeiten	[m/s]
$\mathbf{v}_a$	Abstandsgeschwindigkeit	[m/s]
$V$	Volumen	[m <sup>3</sup> ]
$V_k$	Kornvolumen	[m <sup>3</sup> ]
$W$	Testfunktion	[–]
$x, y, z$	Ortskoordinaten im globalen Koordinatensystem	[m]
$z$	geodätische Höhe	[m]
$\alpha$	Winkel	[°, rad]
$\alpha$	VAN GENUCHTEN(VG)–Parameter	[Pa <sup>-1</sup> ]
$\Theta$	Kontaktwinkel	[°, rad]
$\lambda$	BROOKS–COREY(BC)–Parameter	[–]
$\lambda_\alpha$	Mobilität der Phase $\alpha$	[–]
$\mu$	dynamische Viskosität	[kg/(m·s)]
$\nu$	kinematische Viskosität, $\nu = \mu/\rho$	[m <sup>2</sup> /s]
$\rho$	Dichte	[kg/m <sup>3</sup> ]
$\rho_k$	Korndichte	[kg/m <sup>3</sup> ]
$\sigma$	Oberflächenspannung	[N/m <sup>2</sup> ]
$\tau$	Tortuosität	[–]
$\Phi$	Porosität	[–]
	= durchströmbares Volumen/Gesamtvolumen	

### **Indexerklärung:**

$f$	frei, mobil
$g$	Gas
$n$	nicht–benetzende Phase ( <i>non–wetting phase</i> )
$n$	NAPL
$o$	Öl



$r$	residual
$w$	benetzende Phase ( <i>wetting phase</i> )
$w$	Wasser
$x, y, z$	Koordinatenrichtungen
$\alpha, \psi$	Phase (w, n, g)

**Exponentenerklärung:**

$d$	Drainage
$i$	Imbibition



# 1 Einleitung

## 1.1 Problemstellung und Zielsetzung

Das Phänomen der Kontamination von Grundwasser durch Schadstoffgruppen wie Halogenkohlenwasserstoffe und Mineralölprodukte stellt heutzutage ein Problem von zunehmender Bedeutung dar. Aufgrund des hochgiftigen Anteils, der geringen Löslichkeit sowie der Tendenz dieser Stoffe, sich in der Bodenluft, im Grundwasser oder als getrennte Phase auszubreiten, ist die Gefahr einer Langzeitkontamination sehr groß. Die häufigsten Ursachen hierfür sind Altlasten als Folge von Unfällen wie z.B. ausgelaufene Tankbehälter, undichte Deponien und unkontrollierte Ablagerungen von industriellen Abfallprodukten. Die Ausbreitung dieser Schadstoffe im Untergrund hängt von verschiedenen Faktoren ab, wie beispielsweise Menge des ausgelaufenen Schadstoffes, Beschaffenheit des Schadstoffes, Art des Aquifers, Heterogenitäten im Boden, Grundwasserlage und -gradienten. Die Bewegung wird durch eine komplexe Interaktion verschiedener Kräfte bestimmt. Die Strömungsprozesse werden durch chemische und biologische Reaktionen zwischen den einzelnen Phasen im Untergrund zusätzlich kompliziert. Diese Arbeit beschränkt sich auf Schadstoffe, die mit Wasser nicht mischbar oder nur gering löslich sind. Sie bleiben im Boden als getrennte Phasen vorhanden, und ihr Strömungsverhalten wird als Mehrphasenproblem beschrieben. Diese Schadstoffe werden durch die englische Bezeichnung NAPL (Non-Aqueous-Phase-Liquid) definiert und aufgrund ihrer Eigenschaften als Gruppe klassifiziert. Halogenkohlenwasserstoffe besitzen eine höhere Dichte und weisen oft eine geringere Viskosität auf als Wasser. Man bezeichnet sie als DNAPL (Dense NAPL). Mineralische Brennstoffe, wie z.B. Benzin und Heizöl, werden LNAPL (Light NAPL) genannt, da sie durch eine geringere Dichte im Vergleich zu Wasser charakterisiert sind. Häufig weisen sie zudem eine höhere Viskosität auf.

Die Ausbreitung von NAPL im Untergrund wird vorwiegend durch Gravitations- sowie Kapillar- und Viskositätskräfte beeinflusst. Die Gravitationskraft, die nur in vertikaler Richtung wirksam ist, ist proportional zur Dichte des NAPLs. Demzufolge weisen Stoffe aus der Klasse der DNAPL in der vertikalen Ebene ein schnelleres Fließverhalten auf als LNAPL. Verantwortlich für die laterale Ausbreitung von NAPL im Untergrund sind Kapillarkräfte, welche insbesondere eine Auswirkung auf die Größe der Restsättigung haben und damit verbunden auf die Gefahr einer Langzeitkontamination.

Die Abbildungen 1.1 und 1.2 stellen die Ausbreitung von DNAPL sowie von LNAPL im Untergrund in Abhängigkeit von verschiedenen Einflußgrößen dar. In Abb. 1.1 wird in drei Fällen von der Oberfläche DNAPL infiltriert, welches in vertikaler Richtung abfließt. Bei Fall 1 ist die Menge des infiltrierten DNAPLs noch so gering, daß es den Grundwasserspiegel nicht erreicht. In den Fällen 2 und 3 ist die infiltrierte Menge groß genug, um die ungesättigte Zone zu durchdringen. DNAPL erreicht zum Zeitpunkt  $t_2$  den Grundwasserspiegel und breitet sich lateral aus bis der Druck der aufgestauten Schicht groß genug, um den Eindringdruck der gesättigten Zone zu überwinden. Innerhalb der gesättigten Zone breitet es sich dann sowohl in vertikaler wie auch in horizontaler Richtung aus (Zeitpunkt  $t_3$ ), wobei Heterogenitäten einen entscheidenden Einfluß auf die Fließpfade des DNAPLs haben.

Abbildung 1.2 zeigt zwei Fälle für die Verteilung von LNAPL unter der Einwirkung einer Grundwasser-Variation mit und ohne Betrachtung von Hysterese-Effekten. Zum Zeitpunkt  $t_1$  befindet sich der Wasserspiegel auf einem bestimmten Niveau und wird bis zum Zeitpunkt  $t_2$  stetig angehoben. Ohne Betrachtung der Hysterese folgt die gesamte LNAPL-Menge dem Wasserspiegel nach oben; mit Betrachtung der Hysterese wird ein Anteil des LNAPLs in die Wasserphase eingeschlossen und bleibt als residuale Sättigung zurück (Langzeitkontamination).

Die Heterogenitäten im Boden lassen sich in zwei verschiedene Arten unterteilen. Es gibt großskalige Heterogenitäten in Form von Linsen mit stark abweichenden Permeabilitäten (siehe Abb. 1.1, Fall3) sowie kleinskalige Heterogenitäten innerhalb der homogenen Schicht. Großskalige Heterogenitäten verursachen den sogenannten Schicht-Effekt (*layering*), d.h., DNAPL staut sich aufgrund des zu hohen Eintrittswiderstandes oberhalb einer Linse auf und kann je nach deren Neigung gegebenenfalls sogar gegen die Grundwasserströmung abfließen. Die Fließwege des DNAPLs sind durch die Lage der Linsen nachvollziehbar. Dagegen verursachen kleinskalige Heterogenitäten eine unkontrollierbare Ausbreitung von DNAPL infolge lokal nicht überwundener Eintrittswiderstände. Die Fließpfade sind im Detail schwierig vorherzubestimmen, insbesondere bei Kontaminanten mit geringen Viskositäten. Durch die oben genannten Effekte sowie durch die vorliegende Grundwasserströmung kann das DNAPL in Orte vordringen, die weit vom Infiltrationsbereich entfernt sind.

Ein weiterer wichtiger Aspekt bei der Beschreibung von NAPL-Infiltrations- und -Remobilisierungsvorgängen ist die Hysterese. Hysterese ist ein durch Kapillarkräfte her-

vorgerufenes Phänomen, das ein Zurückhalten des Schadstoffes im Boden verursacht. Dieser Effekt tritt besonders bei Schwankungen des Grundwasserspiegels, z. B. infolge von Niederschlagsereignissen oder bestimmten Sanierungsmaßnahmen (Abpumpen) auf.

Die numerische Simulation von Mehrphasenprozessen in heterogenen porösen Medien stellt einen wichtigen Beitrag zum besseren Verständnis des Ausbreitungsverhaltens von hydrophoben Schadstoffen in Boden und Grundwasser dar. Ferner dient sie zur Folgenabschätzung von Schadensfällen und als entscheidendes Auswahlinstrument für geeignete Sanierungsverfahren und deren optimalen Einsatz.

Ziel dieser Arbeit ist es, ein Methodenkonzept zur Integration von Heterogenitäten auf unterschiedlichen Skalen in die Modellbetrachtung zu entwickeln. Desweiteren wird ein besonderes Augenmerk auf die Berücksichtigung von (nicht-)linearen Hysterese-Effekten in der Problembetrachtung gelegt.

Damit wird die Möglichkeit gegeben, notwendige Sanierungsmaßnahmen numerisch zu begleiten, Meßverfahren zu optimieren und Prognosen zu unterschiedlichen Technologien abzuschätzen.

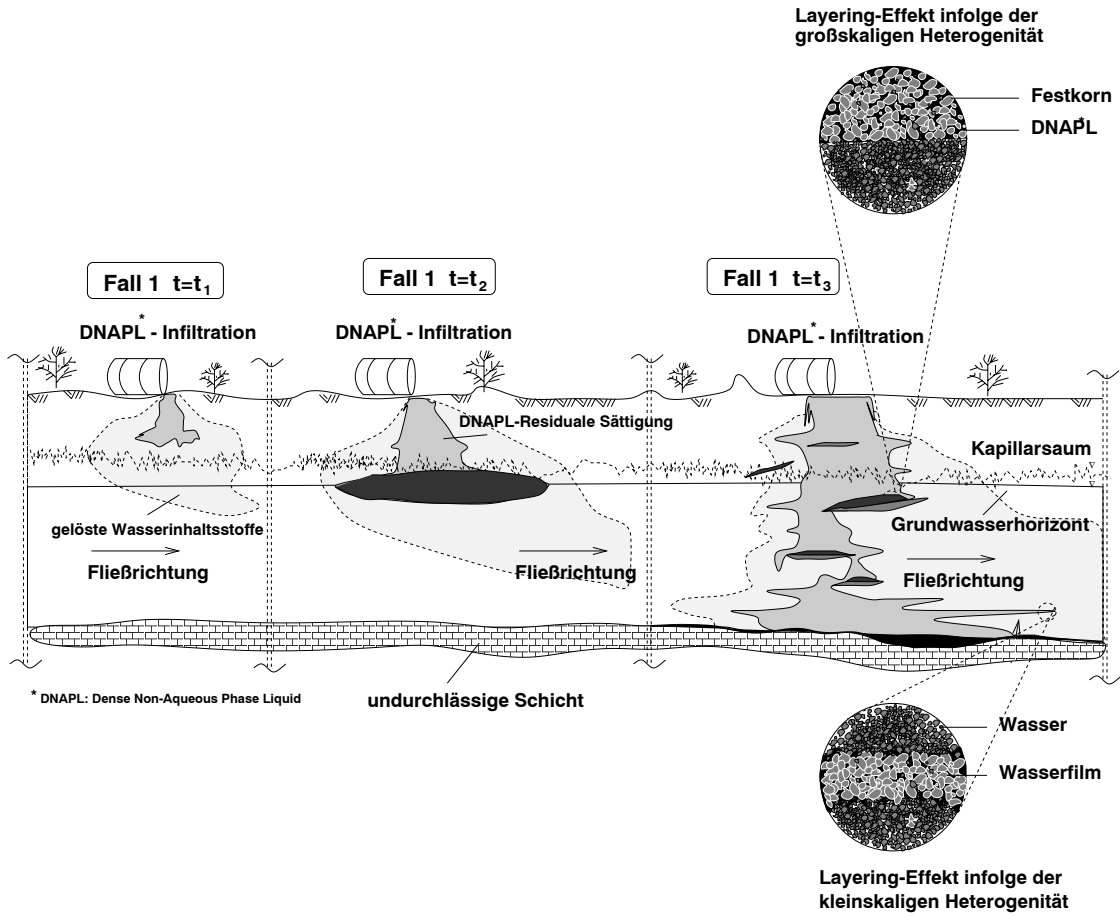


Abbildung 1.1: Einfluß von klein- und großskaligen Heterogenitäten auf die DNAPL-Verteilung im Untergrund

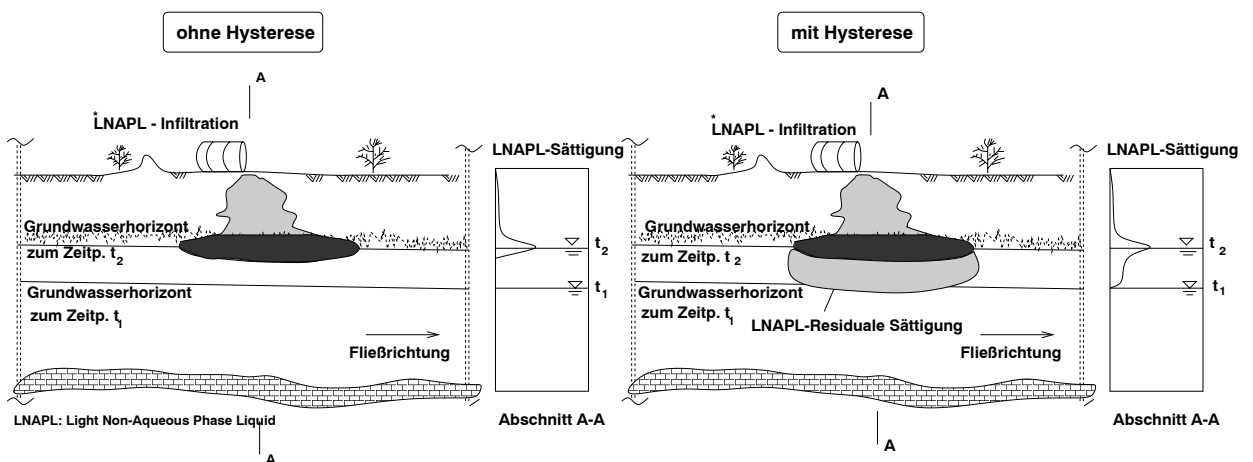


Abbildung 1.2: Einfluß von Hysterese auf die LNAPL-Verteilung im Untergrund

## 1.2 Gliederung der Arbeit

Im Rahmen dieser Arbeit werden die Kapillardruck-Sättigungs- und relative Permeabilität-Sättigungs-Beziehungen, die auf einem (teilweise empirischen) makroskaligen Modell beruhen, von der Mikroskala hergeleitet, auf welcher die physikalischen Gesetze direkt anwendbar sind.

Mit Hilfe der numerischen Simulation werden diese makroskopischen Beziehungen zur Beschreibung der hochkomplexen Fließprozesse der einzelnen Fluidphasen im Porenraum angewendet und im Vergleich mit Experimenten validiert und verifiziert. Dabei wird ein Schwerpunkt auf zwei bedeutende Aspekte bei der Ausbreitung von hydrophoben Stoffen im Boden gelegt:

- Auf das Auftreten der sogenannten “Eindringdruckbedingung” von gering durchlässigen Bodenschichten, die zum Aufstau und zur Umströmung dieser Schichten durch hydrophobe Stoffe führt.
- Auf den Effekt von Grundwasserspiegelschwankungen auf die nicht mit Wasser mischbare Flüssigphase (LNAPL), welcher vom hysteretischen Verhalten der Kapillardruck-Sättigungs- und relative Permeabilität-Sättigungs-Funktion bestimmt wird.

Der erste Punkt ist insbesondere für das Fließverhalten von Fluiden, die schwerer als Wasser sind (DNAPL), in der gesättigten Bodenzone von großer Bedeutung.

Die Arbeit gliedert sich in folgende Kapitel:

In Kapitel 2 werden die physikalisch-mathematischen Grundlagen der Mehrphasenprobleme in porösen Medien dargestellt. Es wird eine Definition für die verschiedenen Größenskalen, auf denen die Prozesse beschrieben werden, gegeben. Es werden desweiteren die konstitutiven Beziehungen für Infiltrationsprozesse in Zwei- bzw. Dreiphasensystemen aufgezeigt und diskutiert.

Die konstitutiven Beziehungen bei Remobilisierungsvorgängen (Hysterese) in Zwei- bzw. Dreiphasensystemen werden in Kapitel 3 aufgezeigt. Es werden verschiedene theoretische

und empirische Ansätze diskutiert. Ferner wird ein Modell zur Beschreibung der Hysterese für die konstitutive Beziehungen in Zwei- und Dreiphasensystemen erläutert und deren numerisch-mathematische Umsetzung und Integration in die numerische Formulierungen des Programmsystems *MUFTE-UG* [9] beschrieben.

In Kapitel 4 werden die physikalische Grundlagen für das Eindringverhalten von NAPL in heterogenen porösen Medien erläutert. Es wird der Einfluß von Heterogenitäten auf die Ausbreitung von NAPL auf der Mikro-, Meso- und Makroskala diskutiert.

In Kapitel 5 wird überprüft, ob die im Programmsystem *MUFTE-UG* implementierten Ansätze die Einzelprozesse der zugrundeliegenden Modelle physikalisch richtig wiedergeben. Eine Verifikation des Modells für Probleme mit Gravitationseinfluß wird anhand der analytischen Lösung von Rogers et al. (1983)[111] vorgenommen. Es werden eindimensionale Experimente von Lenhard et al. ((1987)[80], (1993)[78]) zu Zweiphasen- und Dreiphasensystemen verwendet, um das mathematisch-numerische Modell in Hinblick auf die Beschreibung von Hysterese und Gravitation zu testen.

Kapitel 6 behandelt die numerische Erfassung des Einflusses von meso- und makroskopischen Heterogenitäten auf die Infiltration und Ausbreitung von DNAPL. Mit Hilfe von geostatistischen Verteilungen für die Bodeneigenschaften wird das Fließverhalten in heterogenen porösen Medien, welche in kleinen Bereichen geringe Schwankungen der charakteristischen Größen, z.B. des Eindringdrucks, aufweisen, untersucht. Hierbei wird ein großskaliges Experiment (Versuchseinrichtung zur Grundwasser- und Altlastensanierung, VEGAS) zugrunde gelegt, bei welchem die Effekte aus Heterogenitäten und Hysterese dokumentiert sind.

Kapitel 7 umfaßt die Beschreibung eines numerisches Experimentes, das zur Vordimensionierung eines im Rahmen von VEGAS durchgeführten Experimentes dient. Dabei wird der Einfluß von Fluideinschlüssen infolge von Hysterese-Effekten untersucht.

In Kapitel 8 erfolgt eine Zusammenfassung der Arbeit. Weiterhin wird aufbauend auf den erarbeiteten Erkenntnissen ein Ausblick auf eventuelle zukünftige Forschungsarbeiten gegeben.



## 1.3 Literaturübersicht

In den vierziger Jahren wurde eine Vielzahl von Ansätzen für die konstitutiven Beziehungen der Mehrphasenströmung in porösen Medien basierend auf kleinskaligen Experimenten mit Gesteinsproben aus Erdöllagern entwickelt.

Frühe wichtige Erkenntnisse bezüglich der relative Permeabilität–Sättigungs–Beziehungen, basierend auf der Ähnlichkeit zwischen dem *Darcy*-Gesetz und der *Hagen-Poiseuille*-Gleichung, wurden von Averjanov (1950)[6], Yuster (1951)[131] und Irmay (1954)[57] gewonnen. Weitere Ansätze dieser Beziehungen wurden aus der Kapillardruck–Sättigungs–Beziehungen abgeleitet und können in zwei Gruppen unterteilt werden.

Die erste Gruppe stellt das poröse Medium als Kapillarröhren gleichbleibender Porengröße dar. Zu dieser Gruppe gehören z. B. die Gleichungen nach Gates, Lietz und Templelaar (1950)[44], Fatt und Dykstra (1951)[122], Wyllie und Spangler (1952)[123] und Burdine (1953)[17]. Die am häufigsten verwendete  $k_r - S_w$ -Beziehung stammt von Brooks und Corey (1964)[14], die den Kapillardruck–Sättigungs–Ansatz von Corey (1964)[14] in die *Burdine*-Gleichung einsetzen.

Die zweite Gruppe, die das poröse Medium als Kapillarröhren mit verschiedenen großen Radien annimmt, basiert auf dem Konzept von Childs und Collis-George (1950)[23]. Marshall (1958)[87] entwickelte dieses Konzept weiter und stellte die Grundlage der heute weit verbreiteten Arbeiten von Mualem (1976)[94]. Van Genuchten (1980)[45] hat die *Mualem*-Gleichungen verwendet und einen weiteren relative Permeabilität–Sättigungs–Ansatz entwickelt.

Für die Kapillardruck–Sättigungs–Beziehungen lieferte Leverett (1941)[83] mit der sogenannten *J*-Funktion einen bedeutenden Beitrag zum Verständnis der gegenseitigen Abhängigkeiten. Desweiteren wurde von einer Vielzahl von Autoren empirische Ansätze entwickelt, um diese  $p_c - S_w$ -Beziehung zu beschreiben. Die bekanntesten Ansätze hierbei sind diejenigen nach Brooks und Corey (1964)[14] bzw. nach van Genuchten (1980)[45].

Haines (1930)[46] hat schon früh erkannt, daß der Kapillardruck nicht nur von der Sättigung abhängt, sondern auch von den Verdrängungsprozessen. Durch die Drainage und Imbibition von Fluiden in porösen Medien werden Hysterese-Effekte hervorgerufen. Die bekanntesten theoretischen Ansätze für die Beschreibung der Hysterese, die auf zwei Modellkonzepten beruhen, stammen von Mualem (1974)[93], (1984)[96].

Die ersten, die das unabhängige Gebietskonzept (*independent domain*) entwickelten,

waren Everett und Whitton (1952)[39] und Everett (1954)[38], (1955)[36]. Pouloussis (1962)[105] erweiterte dieses Konzept für die Kapillardruck-Hysterese. Auf diesem Konzept baute Mualem (1973)[92], (1974)[93], (1977)[95] auf und entwickelte eine Reihe von theoretischen Ansätzen.

Das unabhängige Gebietskonzept wurde von Everett (1967)[37] aufgegriffen und auf das abhängige Gebietskonzept (*dependent domain*) ausgedehnt. Topp (1971)[121] verwendete die Theorie von Everett für die Kapillardruck-Sättigungs-Hysterese. Mualem und Dagan (1975)[97] und Mualem (1984)[96] wiederum gründeten sich auf die Arbeit von Topp, um ihre Ansätze der  $p_c - S_w$ -Hysterese herzuleiten. Einen weiteren Beitrag zu diesem Gebiet lieferten Riedi und Stauffer (1982)[109], die die Brooks–Corey-Funktionen zur Beschreibung von Hysterese-Effekten erweiterten.

Im Gegenzug zu diesen theoretischen Gleichungen wurden von Klute und Heerman (1974)[66], Dane und Wierenga (1975)[29], Hoa et al. (1977)[53], Perrens und Watson (1977)[104], Scott et al. (1983)[116] und Jaynes (1984)[58] empirische Ansätze zur Beschreibung der Hysterese ausgearbeitet. Der Ansatz von Scott et al. dient als Fundament für verschiedene Weiterentwicklungen. So integrierten Kool und Parker (1987)[68] die van Genuchten–Parametrisierung in das Modell von Scott et al. und erweiterten dieses noch für die Beschreibung von Einschließungsvorgängen. Im Gegensatz zu Kool und Parker, deren Hysterese-Kurven in der Regel keinen geschlossenen Schleifen entsprechen, modifizierten Parker und Lenhard (1987) [102] das *Scott*-Modell dahingehend, daß geschlossene Hysterese-Schleifen beschrieben werden können.

Die relative Permeabilität-Hysterese wurde analog zur Kapillardruck-Hysterese abgeleitet. Lenhard und Parker (1987)[80] haben unter Erweiterung der *Mualem*-Gleichung Ansätze zur Betrachtung von Phasen-Einschließungen entwickelt. Luckner (1989)[86] verwendete den Ansatz von Scott und entwickelte einen relative Permeabilität-Hysterese-Ansatz unter Verwendung der *Burdine*-Gleichung.

Gleichzeitig zur Entwicklung von theoretischen und empirischen Funktionen zur Beschreibung von Hysterese-Effekten wurde daran gearbeitet, die zur numerischen Berechnung von Mehrphasenströmungen in heterogenen porösen Medien entscheidend wichtigen konstitutiven Beziehungen entsprechend aufzubereiten. Die konstitutiven Beziehungen stellen Projektionsoperatoren für theoretische und Skalierungsoperatoren für praktische Probleme dar [50]. Sie werden dazu verwandt, unnötige Details des Systems zu vernachlässigen und liefern gleichzeitig eine sinnvolle Beschreibung eines Phänomens mit Hilfe von

zugänglichen Parametern. Diese Beziehungen sind empirischen Ursprungs und basieren oft auf unvollständigen Experimentdaten. Desweiteren werden sie normalerweise aus mikroskaligen homogenen Systemen abgeleitet, während die zu berechnenden, interessierenden Systeme mehrere Größenordnungen größer und heterogen sind. Die Form und die Parameter dieser konstitutiven Beziehungen ändern sich, wenn sie auf Bedingungen angewendet werden, die erheblich von denen abweichen, für die sie entwickelt wurden. Dies stellt das sogenannte Skalierungsproblem dar. Eine Lösung dieses Skalierungsproblems kann entweder aus einer deterministischen oder stochastischen Sichtweise her gewonnen werden.

In den achtziger Jahren entstanden eine Reihe von Veröffentlichungen zu diesem Themenbereich.

Experimente im kleinskaligen Maßstab wurden z. B. von Schwille (1988)[115], Kueper und Frind (1989)[70], Catalan und Dullien (1995)[21] und Ilangasekare et al. (1995)[56] durchgeführt.

Theoretische Überlegungen zum Einfluß von Bodenheterogenitäten auf das Fließverhalten von Mehrphasensystemen auf der Mikroskala wurden mit Hilfe von numerischen Simulationen von z.B. Abriola und Pinder (1985)[1], Kuppusamy et al. (1987)[74], Faust et al. (1989)[42], Kueper und Frind (1991a)[71], (1991b)[72], Croisé et al. ((1995a)[28], (1995c)[27]), Lenhard et al. (1995)[79] und Helmig ((1993)[47], (1997)[48]) untersucht.

Hierbei konnte in allen Fällen eine gute Übereinstimmung der Ergebnisse der kleinskaligen Experimente und der numerischen Simulation nachgewiesen werden.

Für Aussagen über den Feldskalbereich wurden von Pruess (1985)[106] bezüglich der Savannah River Site (SRS) und von Osborne und Sykes (1986)[101] bezüglich einer Mülldeponie bei den Niagara Fällen Untersuchungen vorgenommen. Auf der Größenordnung der Feldskala lassen sich jedoch mit dem jetzigen Stand der Forschung keine guten Übereinstimmungen zwischen Messungen und numerischen Ergebnissen erzielen.

Aus dieser Problematik läßt sich der aktuelle Forschungsbedarf ableiten. Erste Ansätze zur Lösung des Problems der Übertragung von kleinskalig gewonnenen Erkenntnissen auf größere Skalen mit Hilfe von *upscaling* sind bei Miller et al. (1998)[88], Allan et al. (1998)[3] und Ewing und Helmig (1998)[40] zu finden.

# 2 Grundlagen der Mehrphasenströmung

## 2.1 Einleitung

Mehrphasenströmungs- und Transportvorgänge in porösen Medien können auf verschiedenen Skalen betrachtet werden. Abb. 2.1 zeigt die Modellskalen (Mikro-, Meso- und Makroskala), die in der Literatur am weitesten verbreitet sind.

Die Größenordnung der **molekularen Skala** liegt im *Ångström*-Bereich. Eine Kontinu-

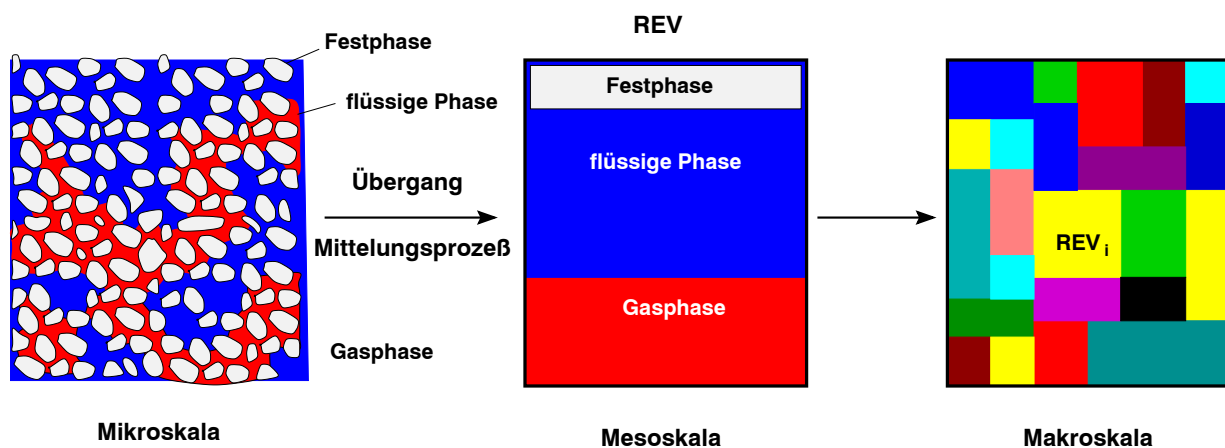


Abbildung 2.1: Modellskalen in porösen Medien

umsbeschreibung wird erst auf den Mikroskala angewendet ( $\geq \mu m$ -Bereich). Auf der **Mesoskala** ( $\geq mm$ -Bereich) werden die mikroskalig verteilten Bodenkenngrößen über ein bestimmtes Volumenelement gemittelt. Dieser Volumenabschnitt wird als **Repräsentatives Elementar Volumen (REV)** bezeichnet [11] (s. Abb. 2.1). Auf der **Makroskala** ( $\geq m$ -Bereich) werden die Bodenkenngrößen nicht mehr über das gesamte Volumen gemittelt, da sonst große Abweichungen von den Mittelwerten auftreten. Mit Hilfe dieser Skala können Heterogenitäten eines porösen Mediums beschrieben werden, indem das betrachtete makroskalige Volumenelement in mehrere REVs (Mesoskala) unterteilt wird. Je nach Größe der Heterogenitäten kann die Makroskala in weitere Bereiche unterteilt

werden, deren Abmessungen Meter oder Kilometer betragen (s. Kobus (1996)[67]).

Zur Beschreibung einer Mehrphasenströmung wird weiterhin der Begriff der Sättigung benötigt. Die Sättigung ist eine Größe der Mesoskala und wird definiert als:

$$S_\alpha = \frac{\text{Volumen des Fluids } \alpha \text{ im REV}}{\text{Volumen des Porenraumes im REV}} \quad (2.1)$$

mit

$$\sum_{\alpha=1}^{n_{phase}} S_\alpha = 1 \quad \text{für } 0 \leq S_\alpha \leq 1 \quad . \quad (2.2)$$

Wenn der Anteil der benetzenden Phase (z. B. Wasser im Zweiphasensystem Wasser-NAPL) sehr klein ist, befindet sich die zugehörige Sättigung  $S_{wr}$  im pendularen Bereich. Das benetzende Fluid liegt nicht als kontinuierliche Phase vor sondern bildet isolierte Ringe in den kleineren Poren und einen sehr dünnen Film um das Korngerüst (inkohärente Sättigung). Sobald die Sättigung der benetzenden Phase zunimmt, verbreitern sich die Ringe und ab einer bestimmten Sättigung (Gleichgewichts-Sättigung) kann das benetzende Fluid strömen. Der Sättigungsbereich oberhalb der Gleichgewichts-Sättigung wird als funikularer Bereich (kohärente Sättigung) bezeichnet. Mit Zunahme der Sättigung der benetzenden Phase verringert sich die Sättigung der nichtbenetzenden Phase (z. B. NAPL im Zweiphasensystem Wasser-NAPL) und die Phase liegt nicht mehr kontinuierlich vor (Sättigung  $S_{nr}$ ). Das Fluid wird als insulare Tropfen in den größeren Porenräumen gesammelt.

## 2.2 Kapillarität

### 2.2.1 Kapillarität bei mikroskaliger Betrachtungsweise

#### Grenzflächenspannung

Zwischen den Molekülen eines homogenen Fluids wirken Kräfte, die als Kohäsionskräfte bezeichnet werden. Bei einem Molekül, das sich an der Grenzfläche zweier nichtmischbarer Fluide befindet, sind die Anziehungskräfte (Kohäsionskräfte) der Moleküle der eigenen Fluidphase viel größer als die des anderen Fluids (s. Abb. 2.2). Dieses Ungleichgewicht der Kräfte verursacht die Tendenz der Grenzfläche, sich zu krümmen. Wenn die Grenzfläche ausgedehnt wird, wirkt sie wie eine elastische Membran. Ein Zunehmen der Grenzfläche erfordert einen Eintrag an Energie, der in der vergrößerten Grenzfläche gespeichert

wird. Die Energie pro Flächeneinheit wird als Grenzflächenspannung  $\sigma$  definiert [52]. Die Grenzflächenspannung zwischen einem bestimmten Fluid und einer Gasphase wird als Oberflächenspannung definiert.

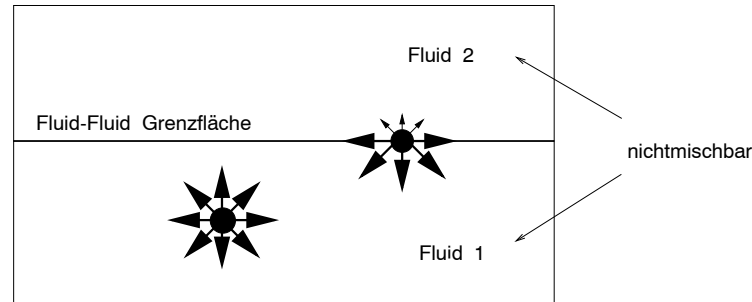


Abbildung 2.2: Kohäsionskräfte auf Moleküle in der Fluidphase sowie an der Grenzfläche zweier nichtmischbarer Fluide nach Hillel (1980)[52]

### Benetzungsfähigkeit

Abb. 2.3 zeigt zwei nichtmischbare Fluide in Kontakt mit einer Kornoberfläche. Der Winkel  $\theta$  zwischen der Grenzfläche (Fluid-Fluid) und dem Korn wird als Kontaktwinkel bezeichnet. Für den Gleichgewichtszustand gilt:

$$\cos\theta = \frac{\sigma_{sn} - \sigma_{sw}}{\sigma_{nw}} . \quad (2.3)$$

Hierbei stehen die Indizes  $s$ ,  $n$  und  $w$  für Körngerüst (*solid phase*), nichtbenetzende (*non-wetting*) und benetzende Phase (*wetting phase*). Gl. (2.3) ist als *Young's-Gleichung* bekannt. Wenn  $\frac{\sigma_{sn} - \sigma_{sw}}{\sigma_{nw}} > 1$  in Gl. (2.3) ist, so kann sich kein Gleichgewicht einstellen. In diesem Fall würde sich Fluid  $w$  (s. Abb. 2.3) auf der Kornoberfläche ausbreiten. Daraus läßt sich die Benetzungsfähigkeit ableiten. Der Kontaktwinkel  $\theta$  für Fluid  $w$  (s. Abb. 2.3) ist kleiner als  $90^\circ$ , deswegen wird Fluid  $w$  als benetzende Phase bezeichnet. Dagegen ist der Kontaktwinkel  $\theta$  für Fluid  $n$  größer als  $90^\circ$ , so daß Fluid  $n$  als nichtbenetzende Phase definiert ist [11].

### Kapillardruck

Auf der Mikroskala läßt sich ein poröses Medium als Ansammlung von Kapillarröhren idealisieren. Wenn zwei nichtmischbare Fluide miteinander in Kontakt sind, ist aus Gleichgewichtsgründen der Druck der nichtbenetzenden Phase  $p_n$  an der Trennfläche zwischen

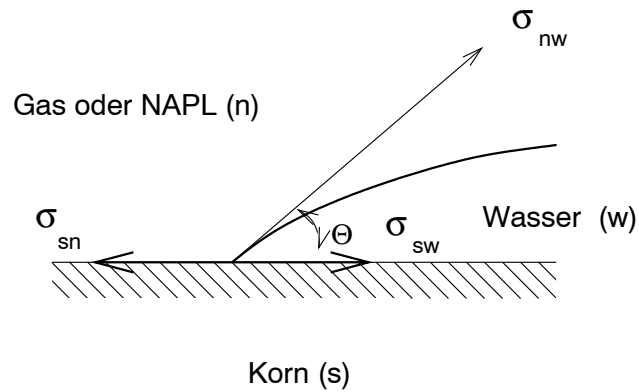


Abbildung 2.3: Grenzflächenspannung und Kontaktwinkel

den beiden Fluiden größer als der Druck der benetzenden Phase  $p_w$  (s. Abb. 2.4). Die Differenz zwischen dem Phasendruck beider Fluide wird als Kapillardruck bezeichnet:

$$p_{cnw} = p_n - p_w \quad . \quad (2.4)$$

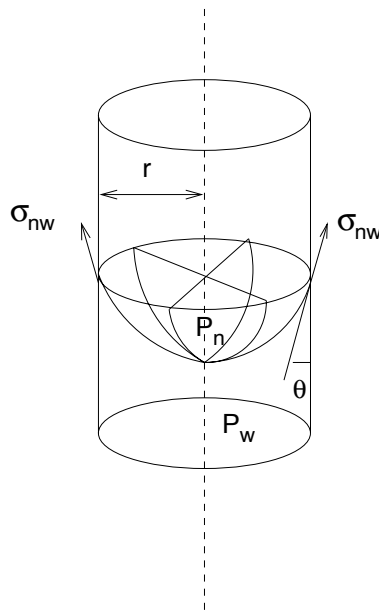


Abbildung 2.4: Grenzflächenelement, Kapillarröhre [47]

Die *Laplace*-Gleichung der Kapillarität formuliert den krümmungsabhängigen Kapillardrucks als

$$p_{cnw} = \frac{2\sigma_{nw} \cos \theta}{r} \quad . \quad (2.5)$$

Dabei entspricht  $\sigma_{nw}$  der Grenzflächenspannung und  $r$  beschreibt den Krümmungsradius des betrachteten Meniskus. Der Kapillardruck ist also einerseits über  $r$  eine Funktion der Geometrie des Porenraumes, andererseits über die Grenz- (Ober-)flächenspannung (Randwinkel  $\theta$ ) abhängig von der chemischen Zusammensetzung der beiden Fluide sowie der Feststoffe. Zur Bestimmung der Grenzflächenspannung für die unterschiedlichen Fluidkombinationen siehe Schiegg (1979)[113]. Des weiteren gibt Schiegg einen ausgezeichneten Überblick über die Kapillarität bei mikroskaliger Betrachtungsweise für Zwei- und Dreiphasensysteme.

### 2.2.2 Kapillarität bei mesoskaliger Betrachtungsweise (Zweiphasensystem)

In einem Mehrphasensystem besteht ein fundamentaler Zusammenhang zwischen den Sättigungsgraden der benetzenden (*wetting*) und der nichtbenetzenden (*nonwetting*) Phase und dem Kapillardruck. Betrachtet man den in Abb. 2.5 gezeigten Porenraum unter einem bestimmten Kapillardruck  $p_{c1}$  und mit einer Sättigung der benetzenden Phase  $S_w = S_{w1}$ , so nimmt die Grenzfläche zwischen der benetzenden und nichtbenetzenden Phase die Krümmung (Radius)  $r_1$  an. Steigt der Kapillardruck  $p_{c1}$  zu  $p_{c2}$  unter Einfluß von äußeren Kräften, so zieht sich ein Teil des Volumens der benetzenden Phase zurück ( $S_w = S_{w2}$ ). Dadurch nimmt die Grenzfläche die neue Krümmung (Radius)  $r_2$  an, die deutlich kleiner als  $r_1$  ist. Wenn in Gleichung (2.5) die Meniskenradien durch den maß-

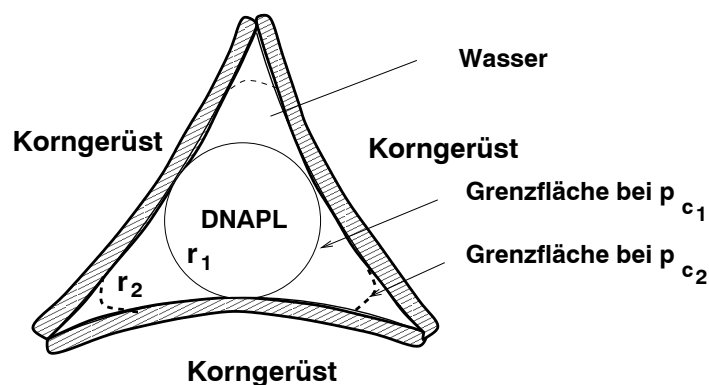


Abbildung 2.5: Poren-Querschnitt mit Variation der Wassersättigung nach Corey (1985)[26]

gebenden Porenradius ersetzt werden, ist unschwer zu erkennen, daß mit Abnahme des



Sättigungsgrades  $S_w$  der benetzenden Phase der Kapillardruck steigen muß, denn mit dem abnehmenden Sättigungsgrad der benetzenden Phase zieht sich das benetzende Fluid in Bereiche mit immer kleineren Porenradien zurück [26].

Die makroskalige Kapillarität ist analog zur mikroskaligen Kapillarität eine Funktion von der Grenzflächenspannung  $\sigma$ , dem Kontaktwinkel  $\theta$  und über den Porenradius  $r$  von der Porenraumgeometrie. Zusätzlich besteht bei der makroskaligen Betrachtung ein Zusammenhang zwischen Kapillardruck und Sättigung (Kapillardruck–Sättigungs–Funktion  $p_c(S_w)$ ):

$$p_c = p_c(S_w) \quad . \quad (2.6)$$

Die experimentelle Ermittlung der Kapillardruck–Sättigungs-Beziehung ist sowohl in zeitlicher wie in materieller Hinsicht sehr aufwendig. Aus diesem Grund haben zahlreiche Autoren schon früh damit begonnen, einen funktionalen Zusammenhang zwischen dem Kapillardruck und der Sättigung herzuleiten. Die bekanntesten sind wohl die Modelle für Luft–Wasser–Systeme von Leverett (1941)[83], Brooks und Corey (1964)[14] und van Genuchten (1980)[45]. Sie werden in der Literatur als empirische Ansätze definiert. Hingegen können semi–empirische Ansätze für die Kapillardruck-Sättigungs-Beziehung auf Grund der Ähnlichkeit der Kurvenverläufe von der Korngrößenverteilung abgeleitet werden. Darunter sind Ansätze nach Arya und Paris (1981)[5] und Jonasson (1989)[59].

Es gibt keine theoretischen (analytischen) Ansätze für die Bestimmung der  $p_c - S_w$ -Beziehung, da die Porengeometrie der porösen Medien bzw. die Interaktion zwischen Fluidphase und Bodenmaterial sehr komplex ist.

In den folgenden Abschnitten werden experimentelle, empirische und semi–empirische Vorgehensweisen zur Ermittlung von Kapillardruck-Sättigungs-Beziehungen vorgestellt.

### 2.2.2.1 Experimentelle Ermittlung der $p_c - S_w$ -Beziehung

In Schiegg (1980)[114] sowie bei vielen weiteren Autoren ist der Versuchsaufbau zur experimentellen Bestimmung der Kapillardruck–Sättigungs–Beziehung im Detail beschrieben. Für die experimentelle Ermittlung der  $p_c - S_w$ -Beziehung in einem porösen Medium gibt es zwei grundsätzliche Vorgehensweisen [11]. Es gibt zum einen Verdrängungsmethoden, bei denen schrittweise statische Zustände von hydraulischem Gleichgewicht eingestellt

werden. Des weiteren gibt es dynamische Methoden, bei denen schrittweise stationäre Strömungsverhältnisse von benetzenden bzw. nichtbenetzenden Fluiden eingerichtet werden. Beispiele für statische Methoden sind:

- *Porous Diaphragm*-Methode (*Welge Restored State Method*): siehe Welge und Bruce (1947) [127]
- Quecksilber-(*Mercury*) Injektionsmethode: siehe Purcell (1949)[107]
- Zentrifugenmethode: siehe Amyx et al. (1960)[4] und Slobod und Chambers (1951)[117]
- Zylindermethode für nichtkonsolidierte Medien: siehe z.B. Kueper und Frind (1991)[71]

Eine dynamische Methode ist z.B.:

- Dynamische Methode unter Verwendung von Hasslers Prinzip: siehe Brown (1951)[15]

Anzumerken ist, daß die in den nachfolgenden Kapiteln zur Anwendung kommenden Kapillardruck–Sättigungs–Beziehungen von Allan experimentell am Institut für Wasserbau im Rahmen von VEGAS (Versuchseinrichtung zur Grundwasser- und Altlastensanierung) für drei unterschiedlich durchlässige Sande (Grob-, Mittel- und Feinsand) bestimmt wurden. Diese Sande wurden für den Einbau des großskaligen 2D-Experiments verwendet (s. Kapitel 6). Allan hat zur Bestimmung der Meßdaten die Zylindermethode eingesetzt.

Für die Zylindermethode werden üblicherweise zwei verschiedene Arten von Verfahren verwendet, zum einen eine *pressure cells/suction cells*-Methode (Druck-/ Saugzellen), und zum anderen eine *back pressure*-Methode (Gegendruck). Bei der *pressure cells/suction cells*-Methode wird die Probe auf eine poröse Membran oder Platte gelegt, die nur für die benetzende Phase durchlässig ist. Mit schrittweisem Anstieg des Drucks der nichtbenetzenden Phase über den atmosphärischen Druck (*pressure cells*) bzw. mit schrittweiser Absenkung des Drucks der benetzenden Phase unterhalb des Atmosphärendrucks (*suction cells*) fließt ein Anteil der benetzenden Phase aus der Probe heraus. Der Druck wird während dieses Vorgangs festgehalten. Anschließend kann nach dem Erreichen des

Gleichgewichtszustands die Sättigung bestimmt werden [65]. Der Nachteil dabei ist, daß der Gleichgewichtszustand erst nach relativ langer Zeit erreicht wird (Klute (1986)[65] gibt einen Zeitraum von 2 bis 3 Tage für jedes Druckniveau an). Es wurde deshalb von Allan eine neue Methode nach Lorentz et al.[85] angewendet. Bei dieser *controlled outflow cell*-Methode (Kontrollierter Ausfluß) wird die Sättigung festgehalten und der Druck wird nach Erreichen eines Gleichgewichtszustands bestimmt. Dieses Verfahren hat den Vorteil, daß der Gleichgewichtszustand im Vergleich zu den üblichen Methoden schneller erreicht wird (für jede Messung zwischen 10 *min* und 36 *h*). Eine schematische Skizze des experimentellen Aufbaus ist in Abb. 2.6 dargestellt. Zur Bestimmung der Kapillardruck-

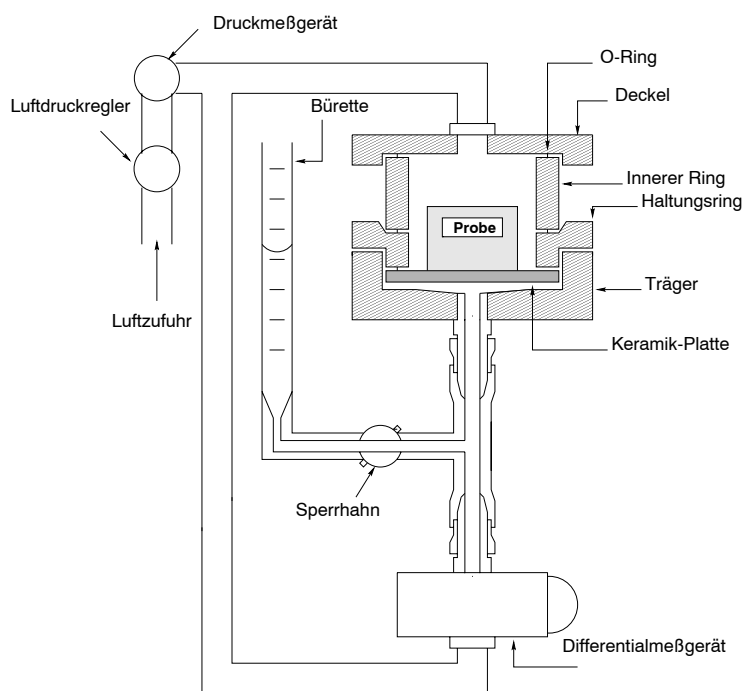


Abbildung 2.6: Schematische Skizze des experimentellen Aufbaus der *controlled outflow cell*-Methode

Sättigungs-Meßdaten wird die voll gesättigte Probe auf die ebenfalls gesättigte und evakuierte Platte gesetzt. Dann wird ein Druck der nichtbenetzenden Phase auf die Zelle aufgebracht. Der Sperrhahn ist dabei geöffnet. Der Druck, bei dem eine Drainage einsetzt, wird registriert. Danach darf ein bestimmtes Volumen der benetzenden Phase aus der Probe in die Bürette fließen. Der Druck der nichtbenetzenden Phase muß ausreichend hoch sein, damit eine zügige Drainage stattfindet. Er darf gleichzeitig aber nicht zu hoch sein, so daß kein zu großer Druckgradient in der benetzenden Phase auftritt. Nach Ausfließen des vorher festgelegten Volumens der benetzenden Phase wird der Vakuumhahn

geschlossen. Der Kapillardruck wird am Differentialmeßgerät gemessen als Druckdifferenz zwischen dem Druck der nichtbenetzenden und der benetzenden Phase nachdem der Gleichgewichtszustand erreicht ist, was man an der Stabilisierung der Umwandleranzeige erkennen kann. Man erhält nun als Meßergebnis den zur vorher bestimmten Sättigung korrespondierenden Kapillardruck. Zur Bestimmung weiterer Meßdaten der Drainagekurve muß die Prozedur entsprechend wiederholt werden. Die Imbibitionskurve wird durch eine Invertierung dieser Methode erhalten. Es wurde eine zylindrische Probe mit 5 cm Durchmesser und einer Höhe von 4 cm verwendet. Am Anfang der Messung ist die Probe vollständig mit 25 ml Wasser gesättigt. Die Meßdaten für Drainage sind z.B. in Abb. 2.9, die Daten für Imbibition sind in Abb. 3.10, 3.12 und 3.14 gezeigt. Die experimentelle Bestimmung dieser Daten erfolgte für ein Wasser–Luft– sowie ein Wasser–DNAPL (TCE)-System in Grobsand, für ein Wasser–Luft–System in Mittel- und Feinsand. Deshalb wird der Skalierungsansatz nach Parker et al. (s. Kap. 2.2.3) verwendet, um damit die gemessenen Daten für das Wasser–Luft–System in das Wasser–DNAPL–System für den Mittel- bzw. Feinsand zu übertragen.

### 2.2.2.2 Empirische Ansätze der $p_c - S_w$ -Beziehung

Unter empirischen Ansätzen sind mathematische Formeln zu verstehen, die den Verlauf gemessener Daten beschreiben. In diesen Modellansätzen treten Parameter auf, die jeweils unterschiedliche Strukturen (Geometrien) des Porenraumes zu erfassen versuchen. Zu diesen Parametern gehören die Porengrößenverteilung und der Eindringdruck. Allgemein existieren Beziehungen, die auf exponentiellen, Cosinus Hyperbolicus- und Error-Funktionen basieren. Im folgenden werden einige empirische Ansätze dargestellt und mit Hilfe experimenteller Meßdaten die Fitting-Parameter aufgezeigt. Diese Meßdaten wurden von Allan, wie im vorherigen Abschnitt erläutert, bestimmt.

Brooks und Corey (BC) (1964)[14] formulierten den empirischen Ansatz der  $p_c - S_w$ -Beziehung wie folgt:

$$p_{cnw} = p_d S_e^{-\frac{1}{\lambda}} \quad \text{für } p_{cnw} \geq p_d, S_w \geq S_{wr} \quad , \quad (2.7)$$

wobei

$$S_e = \frac{S_w - S_{wr}}{1 - S_{wr}} \quad . \quad (2.8)$$

$S_e$  repräsentiert die effektive Wassersättigung. Der Verdrängungsdruck  $p_d$  (*displacement pressure*), der auch als Eindringdruck bezeichnet wird, ist der Kapillardruck der größten auftretenden Pore bei einem Drainageprozeß. Er entspricht dem notwendigen Druck  $p_n$  der nichtbenetzenden Phase, der zu einer Verdrängung des jeweiligen benetzenden Fluides führt.  $p_d$  ergibt sich durch eine Extrapolation der Meßwerte für die  $p_c - S_w$ -Beziehung (Drainage) von dem Punkt  $dS_w/dp_c = \max$  bis  $S_w = 1$ . Der Kapillardruck, bei dem die Abnahme der Wassersättigung auf der Drainagekurve beginnt ( $dS_w/dp_c$  ist maximal), wird in der Literatur als Eintrittsdruck  $p_e$  (*entry pressure*) definiert ( $p_e > p_d$ , s. Abb. 2.9).

Im Laborversuch setzt bei einem Drainagevorgang die Abnahme der Wassersättigung bei  $p_c \geq 0$  ein, deshalb verwendet die Erdölwissenschaft dort den Wert  $p_d$ . Es werden dabei Meßwerte im Bereich von  $S_w \approx 1$  vernachlässigt. In der Bodenkunde wird  $p_e$ , in der Keramikindustrie  $p_b$  (*bubbling pressure = entry pressure*) eingesetzt. Diese entsprechen jeweils dem Wert des Kapillardrucks bei dem die nichtbenetzende Phase gerade mobil wird. Dieser Wert entspricht dem Wendepunkt der Kapillardruck-Sättigungs-Kurve und liegt für gewöhnlich im Bereich von Sättigungen der benetzenden Phase zwischen 0.8 und 0.9 [26]. Im Rahmen dieser Arbeit wird  $p_d$  verwendet.

$\lambda$  in Gl. (2.7) ist ein Formbeiwert, der von der Porengrößenverteilung abhängt. Corey hat verschiedene Bodenmaterialien untersucht und Werte von  $\lambda$  zwischen 0.46 und 7.3 bestimmt. Er fand heraus, daß für poröse Medien der Wert  $\lambda$  in der Größenordnung von etwa 2 liegt. Ein sehr großer  $\lambda$ -Wert bedeutet, daß nur eine Porengröße vorhanden ist (Primärporosität bzw. gleichförmige Porengröße, s. Abb. 2.7). Ein sehr kleiner  $\lambda$ -Wert bedeutet, daß das Bodenmaterial aus sehr ungleichförmigem Material besteht (Sekundärporosität bzw. weiter Bereich der Porengröße, s. Abb. 2.7). Laliberte und Brooks (1967)[75] haben experimentell den Zusammenhang zwischen der Porosität  $\phi$  und  $\lambda$  für verschiedene Sande und Böden untersucht. Sie stellten fest, daß  $\lambda$  mit zunehmendem  $\phi$  abnimmt. Eine Abnahme der Porosität bringt eine Verminderung des möglichen Bereichs der Porengrößenverteilung mit sich [26].

Brooks und Corey verwendeten eine doppelt logarithmische Darstellung von  $S_e$  über  $p_c$ . Unter Vernachlässigung von Werten mit  $p_c < p_e$  lieferte dies eine Gerade. Sie bestimmten  $S_{wr}$  als den Wert, der den linearen Verlauf am besten wiedergibt (s. Abb. (2.8)). Eine Extrapolation dieser Beziehung liefert eine Abschätzung für  $p_d$ . Die Gleichung dieser Gerade ergibt sich aus:

$$\ln(S_e) = -\lambda \ln(p_c) + \lambda \ln(p_d) \quad \text{für } p_{cnw} \geq p_d \quad , \quad (2.9)$$

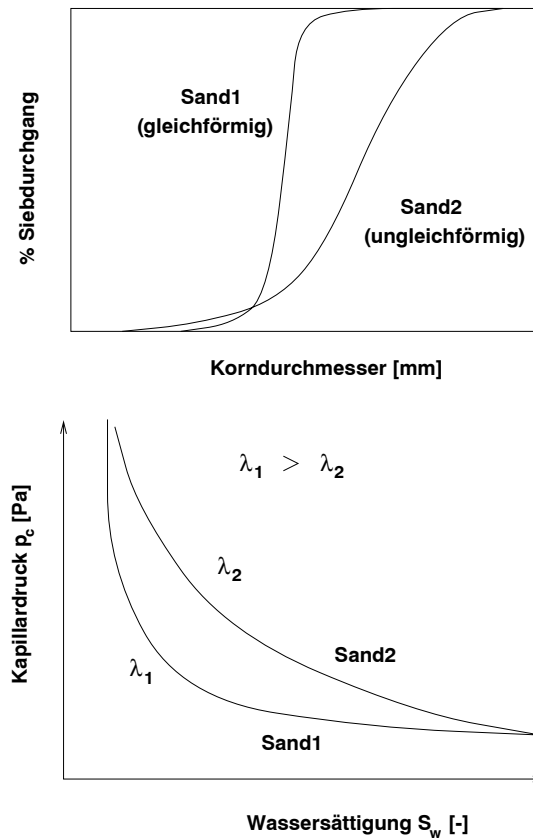


Abbildung 2.7: Porengrößenverteilungsindex  $\lambda$  in Zusammenhang mit Gleichförmigkeit

wobei  $-\lambda$  deren Neigung und  $\lambda n(p_d)$  ihr Schnittpunkt mit der  $p_c$ -Achse ist. Durch Umformulierung der Gl. (2.9) ergibt sich der Ansatz nach Brooks und Corey (s. Gl. (2.7)).

Die nach Brooks und Corey ermittelten Fitting-Parameter für die Meßwerte von Allan sind in Tab. 2.1 gegeben. Die Meßdaten und die entsprechenden  $p_c - S_w$ -Kurven sind in Abb. 2.9 gezeigt.

Tabelle 2.1: Fitting-Parameter nach Brooks und Corey

	$p_d$ [Pa]	$\lambda$ [-]	$S_{wr}$ [-]	$S_{nr}$ [-]
Grobsand	200.0	2.0	0.05	0.0
Mittelsand	700.0	2.3	0.15	0.0
Feinsand	1800.0	3.5	0.18	0.0

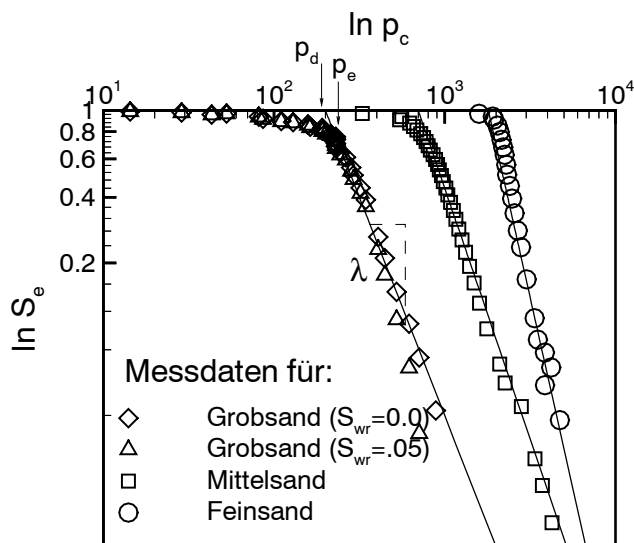


Abbildung 2.8:  $S_e$  als Funktion der gemessenen Kapillardruckdaten auf logarithmischer Darstellung

Die Formulierung nach van Genuchten (vG) (1980)[45] lautet wie folgt:

$$p_c(S_w) = \frac{1}{\alpha} \left( S_e^{-\frac{1}{m}} - 1 \right)^{\frac{1}{n}} ; \quad p_c > 0 . \quad (2.10)$$

Hier werden im Gegensatz zum *Brooks und Corey*-Modell auch die Kapillardrücke berücksichtigt, die gerade größer als Null und kleiner als der Eintrittsdruck  $p_e$  sind. Der Parameter  $\alpha$  entspricht dabei dem Eindringdruck, und der Porenvolumenverteilungsindex  $n$  beschreibt die Neigung der Kurve der  $p_c - S_w$ -Beziehung.  $m$  ist ein Parameter, der von  $n$  abgeleitet wird:

$$m = 1 - \frac{1}{n} \quad (2.11)$$

Lenhard et al. (1989)[82] stellten, wie nachfolgend erläutert, eine Beziehung zwischen den *van Genuchten*- und den *Brooks und Corey*-Parametern her. Die Ableitung der effektiven Sättigung der benetzenden Phase nach dem Kapillardruck lautet für die beiden Modelle nach vG und BC für  $p_c > 0$  bzw.  $p_c > p_d$  wie folgt:

$$\frac{\partial S_e}{\partial p_c} = \alpha m n (S_e^{-\frac{1}{m}} - 1)^m \cdot S_e^{\frac{1}{m} + 1} , \quad (2.12)$$

$$\frac{\partial S_e}{\partial p_c} = \frac{\lambda}{p_d} \cdot S_e^{\frac{\lambda+1}{\lambda}} . \quad (2.13)$$

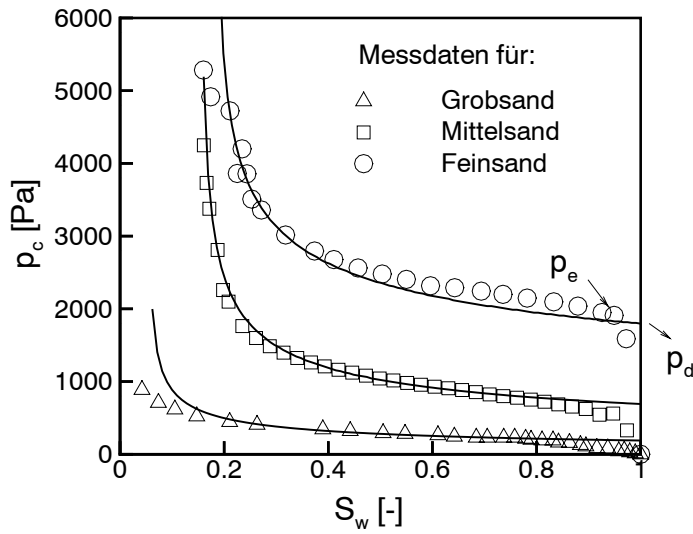


Abbildung 2.9: Gemessene  $p_c - S_w$  Daten und die entsprechend gefitteten  $BC$ -Kurven

Nach Eliminierung von  $p_d$  bzw.  $\alpha$  gemäß Gl. (2.7) bzw. (2.10) und Einsetzen in Gl. (2.12) und (2.13) erhält man:

$$\frac{\partial S_e}{\partial p_c} = \frac{m}{(1-m)p_c} (S_e^{-\frac{1}{m}} - 1) \cdot S_e^{\frac{1}{m}+1}, \quad (2.14)$$

$$\frac{\partial S_e}{\partial p_c} = \frac{\lambda S_e}{p_c}. \quad (2.15)$$

Van Genuchten gibt eine effektive Sättigung der benetzenden Phase von 0.5 als besten Wert an, um  $\frac{\partial S_e}{\partial p_c}$  zu bestimmen.  $\frac{\partial S_e}{\partial p_c}$  ist bei Brooks und Corey und van Genuchten an dieser Stelle gleich. Setzt man Gleichung (2.12) in Gleichung (2.13) ein, so ist

$$\lambda = \frac{m}{1-m} (1 - 0.5^{\frac{1}{m}}). \quad (2.16)$$

Für den Eindringdruck  $p_d$  nach Brooks und Corey und  $\alpha$  nach van Genuchten läßt sich für eine bestimmte effektive Sättigung  $S_{ex}$  ein Zusammenhang herstellen mit Hilfe von Gl. (2.7) und (2.10):

$$p_d = \frac{S_{ex}^{\frac{1}{\lambda}}}{\alpha} (S_{ex}^{-\frac{1}{m}} - 1)^{1-m}. \quad (2.17)$$

Lenhard et al. geben folgenden empirischen Ansatz an, um diese effektive Sättigung zu bestimmen:

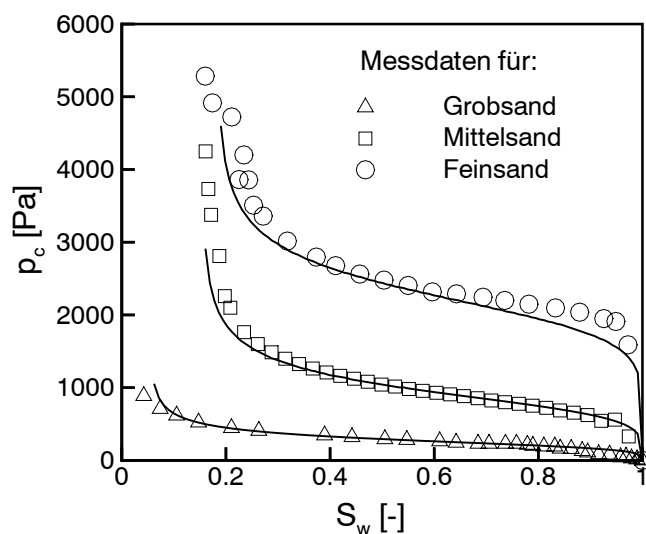
$$S_{ex} = 0.72 - 0.35e^{-n^4}. \quad (2.18)$$



Sie erhielten diesen Ansatz durch eine Untersuchung bestimmter Böden und durch Minimierung der Differenz zwischen  $\ln(S_e)$  und  $\ln(p_c)$  für das BC- bzw. das vG-Modell. Beispiele für Fitting-Parameter nach van Genuchten, die unter Verwendung der o.g. Beziehungen ermittelt wurden, sind in Tabelle 2.2 gezeigt. In Abb. 2.10 sind die entsprechenden Kurven graphisch dargestellt.

Tabelle 2.2: Fitting-Parameter nach van Genuchten

	$\alpha$ [1/Pa]	$n$ [-]	$S_{wr}$ [-]	$S_{nr}$ [-]
Grobsand	.0037	4.70	0.05	0.0
Mittelsand	.0011	5.00	0.15	0.0
Feinsand	.00045	7.34	0.18	0.0

Abbildung 2.10: Gemessene  $p_c - S_w$  Daten und die entsprechend gefitteten vG-Kurven

Campbell (1974)[18] hat folgende Kapillardruck-Sättigungs-Beziehung vorgeschlagen:

$$p_c = p_d S_w^{-b} \quad , \quad (2.19)$$

wobei  $p_d$  der Eindringdruck und  $b$  eine Konstante ist, die mit dem Porenvolumenverteilungsindex  $\lambda$  nach Brooks und Corey über die Beziehung  $b = \frac{1}{\lambda}$  zusammenhängt. Die

Beziehung von Campbell enthält nicht den Parameter  $S_{wr}$ , was zur Folge hat, daß diese Beziehung nur für solches Bodenmaterial verwendet werden kann, das einen kleinen Eindringdruck und eine geringe Residualsättigung aufweist (z.B. sehr grober Sand).

Die Kapillardruck-Sättigungs-Beziehung nach Brutsaert (1967)[16] lautet:

$$p_c = \frac{1}{\alpha} (S_e^{-1} - 1)^{\frac{1}{n}} , \quad (2.20)$$

wobei  $S_e$  die effektive Sättigung der benetzenden Phase,  $n$  der Porenvolumenverteilungsindex und  $\alpha$  der Eindringdruck ist.

Die nach Lenhard et al. entwickelte Theorie, die die Parameter des BC- und des vG-Modells miteinander in Beziehung setzt, kann auch hier verwendet werden, um die Parameter nach BC und Brutsaert zu berechnen:

$$\frac{\partial S_e}{\partial p_c} = \frac{n}{p_c} (1 - S_e) S_e . \quad (2.21)$$

Aus den Gleichungen (2.13) und (2.21) ergibt sich somit

$$\lambda = n(1 - S_e) . \quad (2.22)$$

Setzt man  $S_e = 0.5$ , so erhält man

$$\lambda = \frac{n}{2} . \quad (2.23)$$

Der Eindringdruck  $p_d$  wird durch die Gleichungen (2.7) und (2.20) bestimmt zu

$$p_d = \frac{S_{ex}^{\frac{1}{\lambda}}}{\alpha} (S_{ex}^{-1} - 1)^{\frac{1}{n}} , \quad (2.24)$$

wobei angenommen wird, daß sich  $S_{ex}$  auch hier nach Gl. (2.18) berechnen läßt.

Beispiele für Fitting-Parameter nach Brutsaert sind in Tabelle 2.3 gezeigt. In Abb. 2.11 sind die entsprechenden Kurven graphisch dargestellt.

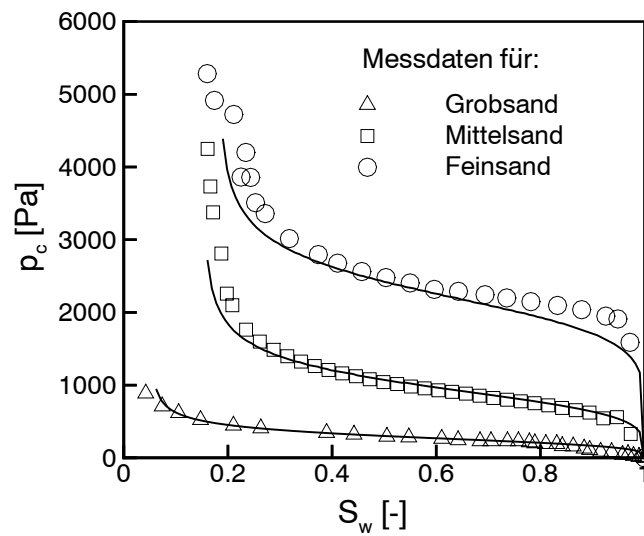
Vauclin (1979)[125] hat folgende exponentielle Kapillardruck-Sättigungs-Beziehung mit den Fitting-Parametern  $\alpha$  und  $n$  vorgeschlagen:

$$p_c = e^{[\alpha(S_e^{-1}-1)]^{\frac{1}{n}}} . \quad (2.25)$$

In Tabelle 2.4 sind Fitting-Parameter nach Vauclin gezeigt.

Tabelle 2.3: Fitting-Parameter nach Brutsaert

	$\alpha$ [1/Pa]	$n$ [-]	$S_{wr}$ [-]	$S_{nr}$ [-]
Grobsand	.0033	4.00	0.05	0.0
Mittelsand	.0010	4.60	0.15	0.0
Feinsand	.00044	7.00	0.18	0.0

Abbildung 2.11: Gemessene  $p_c - S_w$  Daten und die entsprechend gefitteten Brutsaert-Kurven

Eine weitere exponentielle Beziehung ist der folgende Ansatz nach Farrell und Larson (1972)[41]:

$$p_c = p_{min} \cdot e^{[\alpha \cdot (1 - S_w)]} \quad (2.26)$$

Tabelle 2.4: Fitting-Parameter nach Vauclin

	$\alpha$ [1/Pa]	$n$ [-]	$S_{wr}$ [-]	$S_{nr}$ [-]
Grobsand	1.9E+05	7.5	0.0	0.0
Mittelsand	5.0E+05	7.2	0.05	0.0
Feinsand	1.0E+06	7.0	0.0	0.0

mit den Kurvenparametern  $\alpha$  und  $p_{min}$ .

Ein Beispiel für die Cosinus Hyperbolicus-Funktionen ist die Beziehung nach King (1965)[64]:

$$S_w = \frac{\cosh[(p_c/p_d)^b] - 1}{\cosh[(p_c/p_d)^b] + 1}, \quad (2.27)$$

wobei  $p_d$  und  $b$  wieder Fitting-Parameter sind.

Die temperaturabhängige Kapillardruck-Sättigungs-Beziehung nach Leverett (1941)[83] wird wie folgt formuliert:

$$p_c = p_0 \sigma(T) f(S_e) \quad (2.28)$$

mit der Oberflächenspannung  $\sigma(T)$ , dem Faktor  $p_0$ , der die Eintrittsbedingung beschreibt und  $f(S_e) = 1.417(1 - S_e) - 2.120(1 - S_e)^2 + 1.263(1 - S_e)^3$ .

Abb. 2.12 zeigt die zuvor ermittelten  $p_c - S_w$ -Kurven nach BC, vG, Brutsaert und Vauclin in einem Vergleich bezüglich den Grobsand-Meßdaten.

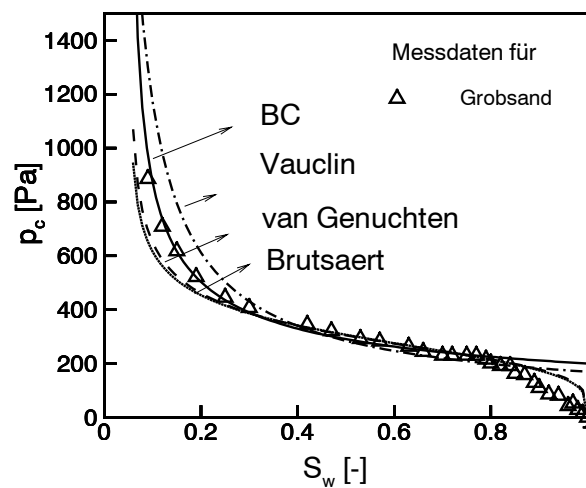


Abbildung 2.12: Kapillardruck-Sättigungs-Beziehungen für verschiedene Ansätze

### 2.2.2.3 Semi-empirische Methoden

Viele Autoren haben die Kapillardruck-Sättigungs-Beziehung aus den Korngrößensummenkurven bestimmt, wie z.B. Campbell und Shiozawa (1989)[19], Arya und Paris (1981)[5] und Jonasson (1989)[59]. Dies basiert auf der Annahme, daß die Korngrößensummenkurve und die entsprechende Kapillardruck-Sättigungs-Kurve von ähnlicher Gestalt sind und somit eine Transformation zwischen den Kurven möglich ist. Im folgenden werden zwei Methoden erläutert, zum einen die Methode nach Arya und Paris (1981)[5] und zum anderen nach Jonasson (1989)[59].

Als ein Rechenbeispiel wird hier die Abschätzung der Fitting-Parameter der Kapillardruck-Sättigungs-Beziehungen der im großskaligen 2D-Experiment (VEGAS, s. Kap. 6) verwendeten Sande (Grob-, Mittel- und Feinsand) vorgestellt. Die zugehörigen Korngrößensummenkurven wurden von Josef et al. (1996)[60] ermittelt (s. Abb. 2.14). Für eine Vordimensionierung des 2D-Experimentes wurde eine numerische Simulation mit dem Modell *MUFTE* [47] durchgeführt. Hierzu war die Bestimmung der Fitting-Parameter des ausgewählten Kapillardruck-Sättigungs- und relative Permeabilität-Sättigungs-Ansatzes nach Brooks und Corey ( $p_d$ ,  $\lambda$  und  $S_{wr}$ , s. Gl. (2.7), (2.87 und (2.88)) für die Sande notwendig. Die Fitting-Parameter waren vor der Simulation noch nicht experimentell ermittelt, lediglich der Eindringdruck  $p_d$  konnte von Braun bestimmt werden. Die Fitting-Parameter wurden anhand der Korngrößensummenkurven abgeschätzt. Die gemessenen Eindringdrücke der Sande wurden dazu mit abgeschätzten Werten verglichen, um mit den jeweiligen Methoden die restlichen Parameter ( $\lambda$  und  $S_{wr}$ ) abzuschätzen.

Das Modell von Arya und Paris (1981)[5] leitet die  $p_c - S_w$ -Kurve eines Materials von den Korngrößensummenkurven, der Trockendichte und der Korndichte ab. Zuerst wandelt das Modell die Korngrößensummenkurven in Porengrößensummenkurven um. Jedem Korndurchmesser wird ein bestimmter Porendurchmesser zugeordnet. Um die Wassersättigung zu berechnen, wird das über alle Korndurchmesser aufsummierte Porenvolumen durch das Trockenvolumen der Probe geteilt. Der Porendurchmesser wird unter Verwendung der Kapillargleichung (s. Gl. (2.5)) zu einem entsprechenden Kapillardruck umgewandelt.

Um das Porenvolumen und den Porendurchmesser zu bestimmen, wird die Korngrößensummenkurve in  $n$  Segmente unterteilt (s. Abb. 2.13). Es wird angenommen, daß die Solidmasse in jedem Segment eine Matrix mit einer Trockendichte gleich der Probentrockendichte bildet.

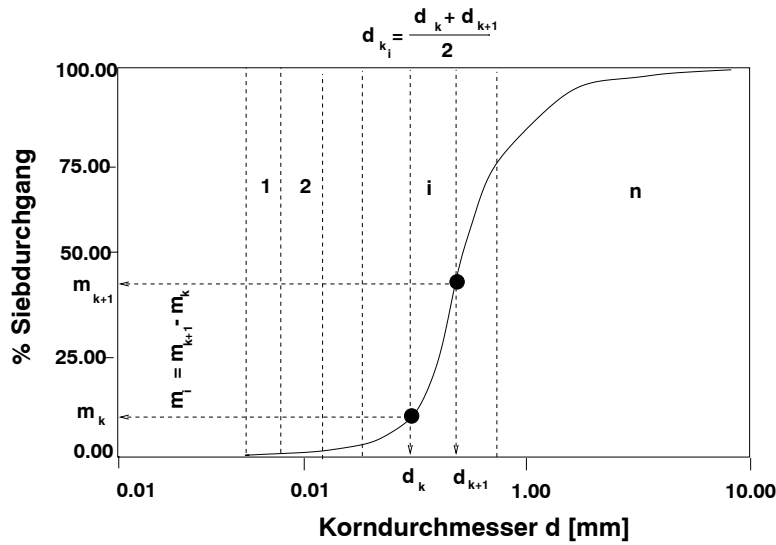


Abbildung 2.13: Umwandlung der Korngrößensummenkurve in Porengrößensummenkurve nach Arya und Paris

### Bestimmung der Wassersättigung

Das Porenvolumen für jedes Segment wird berechnet durch:

$$V_{p_i} = \frac{m_i}{\rho_k} \cdot \frac{\phi}{1 - \phi} \quad \text{für } i = 1, 2, \dots, n \quad (2.29)$$

wobei:

$V_{p_i}$  = Porenvolumen pro Maßeinheit im Segment  $i$

$m_i$  = Solidmasse pro Probenmaßeinheit im Segment  $i$

$\rho_k$  = Korndichte

$\phi$  = Porosität

Die Wassersättigung, die dem größten Korndurchmesser in Segment  $i$  entspricht ( $d_{k+1}$ ) (s. Abb. 2.13), wird definiert als:

$$S_{w_{k+1}} = \frac{\sum_{j=1}^{j=i} V_{p_j}}{V_{ges} \cdot \phi} \quad \text{für } i = 1, 2, \dots, n \quad (2.30)$$

$$V_{ges} = \frac{\sum_{i=1}^{i=n} m_i}{\rho_{ges}} = \frac{1}{\rho_{ges}} \quad \text{für } i = 1, 2, \dots, n \quad (2.31)$$

mit dem Trockenvolumen  $V_{ges}$ . Es wird angenommen, daß die Porenvolumina  $\sum_{j=1}^{j=i} V_{p_j}$  völlig mit Wasser gefüllt sind. Die Wassersättigung wird im Mittelpunkt des Segmentes  $i$

(mittlerer Korndurchmesser  $d_{k_i}$ ) wie folgt berechnet:

$$S_{w_i} = \frac{S_{w_k} + S_{w_{k+1}}}{2} . \quad (2.32)$$

### Bestimmung des Kapillardrucks

Vom mittleren Korndurchmesser  $d_{k_i}$  des Segmentes  $i$  wird der entsprechende Porendurchmesser  $d_{p_i}$  unter folgenden Annahmen berechnet (s. Abb. 2.13):

- Das gesamte Kornvolumen im Segment  $i$  wird als Summe der Volumina von  $a_i$  kugelförmigen Körnern betrachtet, deren Durchmesser  $d_{k_i}$  ist.
- Das Porenvolumen kann durch zylindrisch gleichförmige Kapillarröhren der Länge  $(d_{k_i} \cdot a_i)$  approximiert werden, deren Durchmesser mit  $d_{k_i}$  in Beziehung steht (s. Gl. (2.35)).

Folglich ist das gesamte Kornvolumen im Segmentbereich  $i$ :

$$V_{k_i} = \frac{1}{6} \pi d_{k_i}^3 \cdot a_i = \frac{m_i}{\rho_k} , \quad (2.33)$$

wobei  $a_i$  die Anzahl der Körner im Segment  $i$  und  $V_{k_i}$  das gesamte Kornvolumen im Segment  $i$  ist. Das gesamte Porenvolumen des Segmentes  $i$  ist:

$$V_{p_i} = \frac{\pi}{4} d_{p_i}^2 \cdot (a_i d_{k_i}) = \frac{m_i}{\rho_k} \cdot \frac{\phi}{1 - \phi} , \quad (2.34)$$

wobei  $(a_i d_{k_i})$  der gesamten Porenlänge unter der Annahme kugelförmiger Körner im Segment  $i$  entspricht. Die Porenlänge im natürlichen Bodenmaterial ist abhängig von der geometrischen Form, der Größe und der Orientierung der Körner. Deshalb wird die theoretische Porenlänge zu  $(a_i^{\alpha_a} d_{k_i})$  gesetzt. Arya et al. ermittelten Werte für  $\alpha_a$ , wobei  $\alpha_a$  überwiegend im Bereich  $1.35 \leq \alpha_a \leq 1.4$  liegt. Für einen mittleren Kornradius größer als  $100 \mu m$  fanden Arya et al heraus, daß  $\alpha_a$  sehr stark mit Zunahme der Körngröße bis auf Werte kleiner als 1 abfällt.

Aus den Gleichungen (2.33) und (2.34) folgt der entsprechende Porendurchmesser:

$$d_{p_i} = d_{k_i} \left[ \frac{2\phi}{3(1 - \phi)} \cdot a_i^{(1 - \alpha_a)} \right]^{\frac{1}{2}} . \quad (2.35)$$

Der zugehörige Kapillardruck dieses Porendurchmessers  $d_{p_i}$  ergibt sich zu:

$$p_{c_i} = \frac{4\sigma \cos\theta}{\rho_w g d_{p_i}} \quad (2.36)$$

wobei:

$p_{c_i}$  = Kapillardruck bei  $d_{p_i}$

$\sigma$  = Oberflächenspannung von Wasser

$\theta$  = Kontaktwinkel

$\rho_w$  = Wasserdichte

$g$  = Erdbeschleunigung

Um die Fitting-Parameter der  $p_c - S_w$ -Kurve zur Vordimensionierung für die zuvor erwähnten Sande abzuschätzen, werden die Korngrößensummenkurven (s. Abb. 2.14) in 17 Segmente unterteilt. Der Kapillardruck bzw. die Wassersättigung wird im Mittelpunkt jedes Segments berechnet. Der Wert für  $\alpha_a$  wird so ausgewählt, daß der damit berechnete Eindringdruck mit dem gemessenen übereinstimmt. Somit hat  $\alpha_a$  für den Grob-, Mittel- und Feinsand die Werte 0.7, 0.8 und 0.85. Diese Werte verringern sich mit Zunahme der Korngröße, wie bereits zuvor erklärt. Die für die Berechnung benötigten Parameter sind in Tabelle 2.5 aufgelistet.

Tabelle 2.5: Physikalische Eigenschaften der Sande

	$\rho_k [kg/m^3]$	$\rho_{ges} [kg/m^3]$	$\phi [-]$	$d_{75} [m]$	$d_{25} [m]$
Grobsand	1603.0	2630.0	0.39	3.4E-3	1.2E-3
Mittelsand	1720.0	2630.0	0.34	2.5E-3	0.45E-3
Feinsand	1495.0	2630.0	0.43	0.4E-3	0.18E-3

In Abb. 2.15 werden die berechneten Werte zusammen mit den gemessenen gezeigt. Die abgeschätzten Fitting-Parameter nach Brooks und Corey sind in Tabelle 2.6 dargestellt.

Jonasson [59] hat die vG Parameter für die Kapillardruck-Sättigungs-Beziehung von der Korngrößensummenkurve abgeleitet. Er hat seine Methode auf die Arya und Paris Methode aufgebaut. Die Methode verwendet zwei charakteristische Parameter. Zum einen die



Tabelle 2.6: Ermittelte Fitting-Parameter nach Arya und Paris

	$p_d[Pa]$ (gem.)	$\lambda[-]$ (berechn.)	$S_{wr}[-]$ (angenom.)	$S_{nr}[-]$
Grobsand	200.0	2.0	0.0	0.0
Mittelsand	700.0	2.1	0.10	0.0
Feinsand	1800.0	3.7	0.15	0.0

Trockendichte und zum anderen die Korndurchmesser  $d_{25}$  und  $d_{75}$ . Jonasson hat die Arya und Paris-Gleichung wie folgt geschrieben (s. Gleichungen (2.34), (2.35) und (2.36)):

$$p_{c_i} = \frac{1.2247 \cdot 4\sigma \cos\theta}{\rho_w g \left[\frac{\phi}{(1-\phi)}\right]^{\frac{1}{2}} d_{p_i}^{[1+\beta]}} \left[\frac{6m_i}{\rho_k \pi}\right]^{\left[\frac{\beta}{3}\right]} \quad (2.37)$$

$$\beta = \frac{3(\alpha_a - 1)}{2} \quad (2.38)$$

$\alpha_a$  ist der Faktor, der von Arya und Paris vorgeschlagen wurde (s. Gleichung 2.35). Jonasson hat diesen Faktor mit Hilfe der Korngrößensummenkurve folgendermaßen approximiert:

$$\alpha_a = e^{[0.312 \log(d_{75}/d_{25})]} \quad (2.39)$$

Der Kapillardruck ( $p_{c_{25}}, p_{c_{75}}$ ) bei 25% und 75% Wassersättigung wird in Beziehung gesetzt durch:

$$\frac{p_{c_{25}}}{p_{c_{75}}} = \left(\frac{d_{75}}{d_{25}}\right)^{1+\beta} \quad (2.40)$$

Den van Genuchten Parameter  $n$  erhält man mittels

$$n = -0.0983 + \frac{1}{1.0566L - 0.5487L^2 + 0.1008L^3}, \quad (2.41)$$

wobei

$$L = \log\left(\frac{p_{c_{25}}}{p_{c_{75}}}\right). \quad (2.42)$$

Der van Genuchten Parameter  $\alpha$  wird ermittelt durch (s. Gleichung (2.10)):

$$\alpha = \frac{(S_e^{-\frac{1}{1-1/n}} - 1)^{1/n}}{p_{c_i}}. \quad (2.43)$$

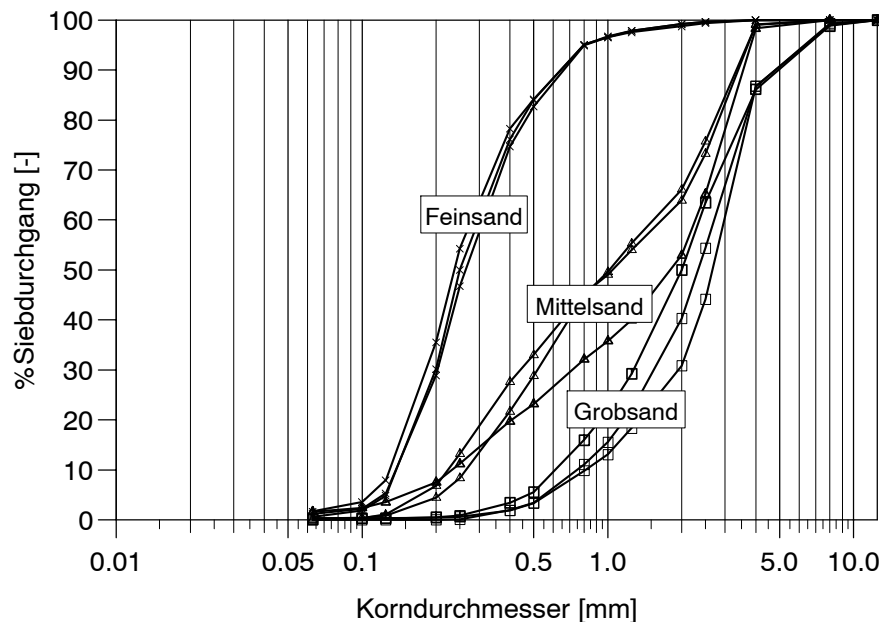


Abbildung 2.14: Korngrößensummenkurve der in der Rinne verwendeten Sande [60]

Nun kann man  $p_{c_{25}}(S_e = 0.25)$  oder  $p_{c_{75}}(S_e = 0.75)$  in Gleichung (2.43) einsetzen, um  $\alpha$  zu berechnen.

Die Fitting-Parameter nach vG wurden mit Verwendung der Jonasson-Methode für die Sande abgeschätzt. Die dafür benötigten Parameter sind in Tabelle 2.5 aufgelistet. In Gleichung (2.37) wurden  $m_i$  zu 0.01 Massenprozent,  $\cos\theta = 1.0$  und  $\sigma = 72.75E - 03 \text{ N/m}$  bei  $20^\circ\text{C}$  gewählt. Die berechneten vG-Parameter und die entsprechenden Brooks und Corey-Parameter (aus Gl. (2.16), (2.17)) sind in Tabelle 2.7 gegeben. Die nach der Jonasson-Methode berechneten Parameter zeigen, daß je gleichförmiger das Bodenmaterial ist (z. B. Feinsand, s. Abb. 2.14), desto dichter liegen die berechneten Parameter bei den gemessenen.

Die nach Arya und Paris berechneten Werte zeigen bessere Übereinstimmung mit den gemessenen Werten. Für die Vordimensionierung des großskaligen Experimentes (VEGAS) wurden die abgeschätzten Parameter nach Arya und Paris angenommen.

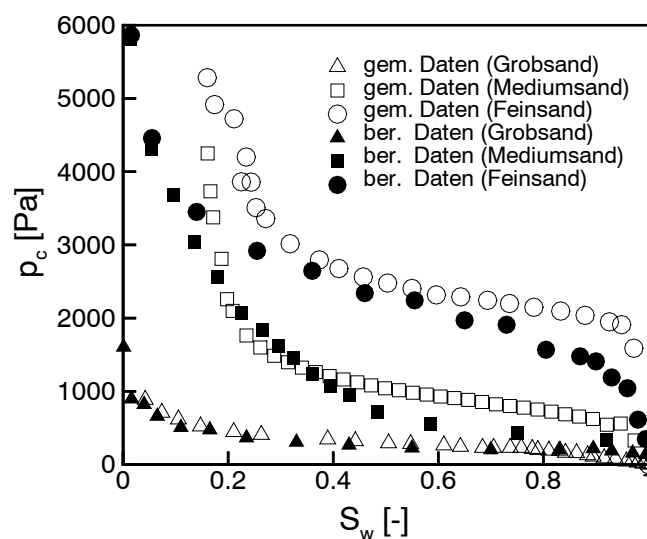


Abbildung 2.15: Berechnete (nach Arya et al.) und gemessene  $p_c - S_w$ -Werte für den Grob-, Mittel-, und Feinsand

Tabelle 2.7: Ermittelte Fitting-Parameter nach Jonasson

	$\alpha_{vG}[1/Pa]$	$n$	$p_d[Pa]$	$\lambda[-]$	$S_{wr}[-]$ [angenom.]	$S_{nr}[-]$
Grobsand	0.004	2.2	165.0	0.87	0.0	0.0
Mittelsand	0.002	1.55	350.0	0.48	0.10	0.0
Feinsand	0.0004	3.1	1720.0	1.35	0.15	0.0

### 2.2.3 Kapillarität bei makroskaliger Betrachtungsweise (Dreiphasensystem)

Zur Beschreibung der Kapillardruck-Sättigungs-Beziehungen in der ungesättigten Bodenzone im Fall von NAPL-Infiltrationsprozessen werden üblicherweise folgende konzeptionelle vereinfachende Annahmen getroffen:

- Hinsichtlich der Benetzungsfähigkeit (*wettability*) im Wasser-NAPL-Gas-System stellt die Wasserphase immer die benetzende und die Gasphase immer die nichtbenetzende Phase dar. Die NAPL-Phase wirkt benetzend bezüglich der Gasphase und nichtbenetzend bezüglich der Wasserphase.

- Die NAPL-Phase ist in Kontakt mit der Gasphase und die Wasserphase in Kontakt mit der NAPL-Phase. Eine Grenzfläche zwischen der Wasser- und der Gasphase existiert nur im Zweiphasensystem (s. Abb. 2.16).
- Die Fluidverteilung im Porenraum ist wie folgt: Die Wasserphase besetzt die kleinsten Poren, während die Gasphase die größten Poren ausfüllt. Die NAPL-Phase befindet sich im Porenraum zwischen diesen beiden Fluidphasen.

Diese Annahmen begründen sich aus der Tatsache, daß unter Bedingungen, wie sie z.B. in Mitteleuropa herrschen, die Wasserphase in der ungesättigten Zone die Porenoberflächen vollständig benetzt, und NAPL in der Regel die weniger benetzende Fluidphase darstellt.

Da sich die Kapillardruck-Sättigungs-Beziehungen äußerst schwierig und aufwendig bestimmen lassen, wird im allgemeinen auf Skalierungsansätze basierend auf Zweiphasenbeziehungen zurückgegriffen. Der bekannteste dieser Ansätze beruht auf dem Modell von Parker et al. (1987)[102].

Leverett und Lewis (1941)[83] erkannten, daß sich im allgemeinen die Kapillardrücke im Dreiphasensystem folgendermaßen formulieren lassen:

$$p_n - p_w = p_{cnw}(S_w) , \quad (2.44)$$

$$p_g - p_n = p_{cgn}(S_t) , \quad (2.45)$$

wobei  $S_t = S_n + S_w$  die Summe der Sättigungen der Flüssigphasen (NAPL und Wasser) repräsentiert. Diese funktionale Darstellung impliziert die obigen Annahmen. Parker et al. (1987)[102] spezifizierten diesen Ansatz aufbauend auf der van Genuchten-Parametrisierung:

### 2.2.3.1 Modell von Parker et al.

Die *van Genuchten*-Fitting-Parameter  $\alpha$  und  $n$  werden vom Zweiphasensystem Gas-Wasser abgeleitet. Durch den Skalierungsfaktor  $\beta_{nw}$  läßt sich die *van Genuchten*-Beziehung des Gas-Wasser-Systems auf das System NAPL-Wasser übertragen. Dieser Faktor ist definiert als das Verhältnis der Oberflächenspannung von Wasser zur Grenzflächenspannung zwischen Wasser und NAPL:

$$\beta_{nw} = \frac{\sigma_{gw}}{\sigma_{nw}} . \quad (2.46)$$

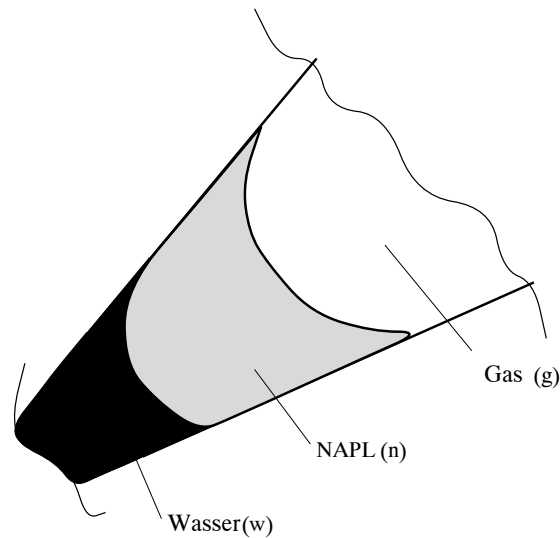


Abbildung 2.16: Modell der Phasenverteilung im Dreiphasensystem Wasser–NAPL–Gas nach Leverett

Damit ergibt sich folgende Gleichung für die Kapillardruck–Sättigungs–Beziehung von NAPL–Wasser:

$$\bar{S}_w = [1 + (\alpha\beta_{nw}p_{cnw})^n]^{-m} , \quad (2.47)$$

wobei  $m = 1 - 1/n$  ist und  $\bar{S}_w$  die effektive Sättigung der Wasserphase mit  $\bar{S}_w = (S_w - S_{wr})/(1 - S_{wr})$ . Dieses Konzept wurde von Parker et al. für das Dreiphasensystem erweitert. Gl. (2.47) läßt sich mit Hilfe von  $\beta_{gn}$ , dem Verhältnis der Oberflächenspannung von Wasser zur Grenzflächenspannung zwischen NAPL und Gas

$$\beta_{gn} = \frac{\sigma_{gw}}{\sigma_{gn}} \quad (2.48)$$

so modifizieren, daß sie den Kapillardruck  $p_{cgn}$  zwischen NAPL und Gas im Dreiphasensystem mit der effektiven Gesamtsättigung  $\bar{S}_t$  der Flüssigphasen (NAPL und Wasser) in Beziehung setzt. Dabei ist  $\bar{S}_t$  folgendermaßen definiert:  $\bar{S}_t = (S_w + S_n - S_{wr})/(1 - S_{wr})$ . Die resultierende Gleichung lautet dann:

$$\bar{S}_t = [1 + (\alpha\beta_{gn}p_{cgn})^n]^{-m} . \quad (2.49)$$

Lenhard (1994)[77] hat folgende Modifikation der Skalierungsfaktoren (Gl. (2.46) und (2.48) ) vorgeschlagen, welche zu einer besseren Übereinstimmung mit experimentellen Werten führt: und

$$\beta_{nw} = \frac{\sigma_{gn} + \sigma_{nw}}{\sigma_{nw}} \quad (2.50)$$

und

$$\beta_{gn} = \frac{\sigma_{gn} + \sigma_{nw}}{\sigma_{gn}} . \quad (2.51)$$

Viele Autoren haben festgestellt, daß der Skalierungsansatz nach Parker et al. auf bestimmte Fluide begrenzt ist, da der Einfluß des Kontaktwinkels  $\theta$  und damit die *Spreitung* nicht berücksichtigt wird. Unter *Spreitung* versteht man die Tendenz der NAPL-Phase sich auf der Wasser–Gas-Grenzfläche auszubreiten. Adamson (1982)[2] hat den *Spreitungskoeffizienten*  $\Sigma$  [ $Nm^{-1}$ ] folgenderweise definiert:

$$\Sigma = \sigma_{gw} - (\sigma_{nw} \cos(\theta_{nw}) + \sigma_{gn} \cos(\theta_{gn})) . \quad (2.52)$$

NAPL mit einem positiven *Spreitungskoeffizienten* bildet einen kontinuierlichen Film auf der Grenzfläche Wasser–Gas. Bei NAPL mit einer hohen inneren Kohäsion (wie z. B. Tetrachlorethen) ist der *Spreitungskoeffizient* negativ und NAPL liegt in diskontinuierlichen Linsen an der Grenzfläche Wasser–Gas vor. Das *Leverett*-Konzept, nach dem es keinen Kontakt zwischen Wasser und Gas in einem Dreiphasensystem gibt, sondern nur Wasser–NAPL- und NAPL–Gas-Grenzflächen vorhanden sind (s. Gl. 2.44, 2.45, Abb. 2.16), ist somit für nichtspreitende Fluide nicht gültig [54], [129].

Für die Beschreibung der  $p_c - S_w$ -Beziehung in Dreiphasensystemen wird das Modell von Parker et al. verwendet, da bislang noch keine anderen Ansätze vorhanden sind.

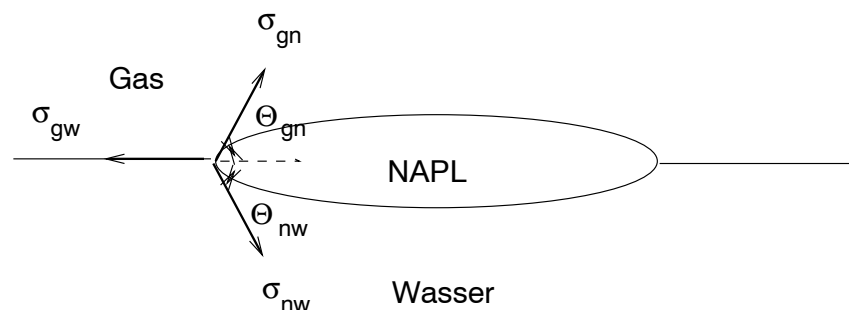


Abbildung 2.17: Grenzflächenspannung und Kontaktwinkel in Dreiphasensystem Wasser-NAPL-Gas

## 2.3 Relative Permeabilität

### 2.3.1 Relative Permeabilität bei mikroskaliger Betrachtungsweise

Durch die Anwesenheit einer Fluidphase im Porenraum wird der Fließquerschnitt, welcher für die anderen Phasen zur Verfügung steht, verringert. Damit beeinträchtigen sich die vorhandenen Phasen gegenseitig in ihrem Fließverhalten (s. Abb. 2.18). Zum Beispiel wird mit zunehmendem Volumenanteil der nichtbenetzenden Phase immer mehr Raum in den größeren Poren von ihr ausgefüllt, und somit wird die benetzende Phase zunehmend gezwungen, auf immer verwundenere und längere Fließkanäle (erhöhte Tortuosität bzw. Verwundenheit) auszuweichen.

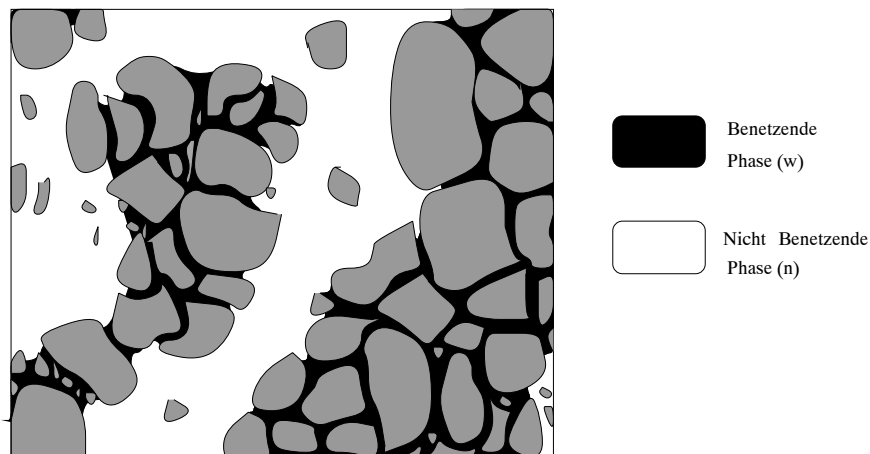


Abbildung 2.18: Darstellung eines Dreiphasensystems (benetzende Phase, nichtbenetzende Phase, Korngerüst) auf mikroskaliger Ebene [47]

### 2.3.2 Relative Permeabilität bei mesoskaliger Betrachtungsweise (Zweiphasensystem)

Der Zusammenhang zwischen Sättigungsgrad und relativer Permeabilität wurde von Boden- (Richards (1931)[108]) und Lagerstättenkundlern (Wyckoff (1936) [130], Muskat (1937) [98], Leverett (1939)[84]) schon früh erkannt.

Die Parametrisierungen der relativen Permeabilität–Sättigungs-Beziehung im Zweiphasensystem lassen sich in der Literatur in zwei verschiedene Vorgehensweisen unterteilen [32].

Zum einen gibt es Ansätze, die aus semi-empirischen Potenzfunktionen der effektiven Wassersättigung bestehen. Diese Ansätze basieren auf dem geraden gleichförmigen parallelen Kapillarmodell. Zum anderen existieren semi-empirische Ansätze, die durch Zugrundelegung der Kapillardruck–Sättigungs–Beziehungen und eines theoretischen Porennetzwerkmodells ableitbar sind. Hier wird zwischen dem parallelen Kapillarmodell gleichbleibender Porengröße und dem parallelen Kapillarmodell veränderlicher Porengröße unterschieden. Klassische Beispiele hierfür sind die Modelle, die mit den Porennetzwerkmodellen von *Burdine* (1953) [17] oder *Mualem* [94] und den Kapillardruck–Sättigungs–Parametrisierungen nach *Brooks und Corey* (1964)[14] oder *van Genuchten* (1980)[45] ermittelt wurden.

### 2.3.2.1 Gerades gleichförmiges paralleles Kapillarmodell

In diesem Modell wird das poröse Medium als Bündel gerader gleichförmiger paralleler Kapillarröhren mit gleicher Permeabilität der Querschnittsflächen betrachtet (s. Abb. 2.19). Hierbei lassen sich zwei Gruppen unterscheiden. Die erste Gruppe verwendet den mittleren Radius und setzt kreisförmige Querschnitte voraus. Die zweite Gruppe bedient sich des Konzeptes des mittleren hydraulischen Radius, womit beliebige Querschnittsflächen berücksichtigt werden können.

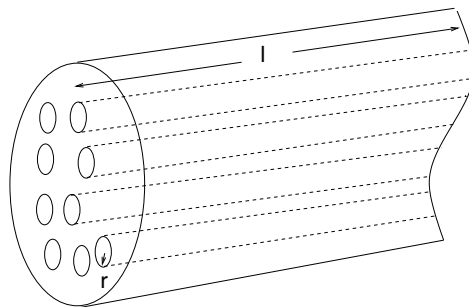


Abbildung 2.19: Gerades gleichförmiges paralleles Kapillarmodell

Infolge der Ähnlichkeit zwischen dem *Darcy*-Gesetz (s. Gl. (2.53)) und der *Hagen–Poiseuille*-Gleichung (s. Gl. (2.54)) sowie unter Verwendung der *Dupuit*-Annahme [35]



(Fluß infolge einer mittleren Geschwindigkeit) wurden mehrere semi-empirische Modelle entwickelt.

Das *Darcy*-Gesetz wird beschrieben durch:

$$\bar{\mathbf{v}} = -\frac{k_0}{\mu} \cdot \mathbf{grad} p , \quad (2.53)$$

wobei  $\bar{\mathbf{v}}$  die makroskopische Filtergeschwindigkeit darstellt und gleichzeitig den Massenfluß pro Flächeneinheit beschreibt.  $\mu$  ist die dynamische Viskosität und  $k_0$  die vom Fluid unabhängige Permeabilität des porösen Mediums.

Die *Hagen-Poiseuille*-Gleichung lautet:

$$\bar{\mathbf{v}} = -\frac{r^2}{8\mu} \cdot \mathbf{grad} p , \quad (2.54)$$

wobei  $r$  der Rohrradius ist. Vergleicht man Gleichung (2.54) mit Gleichung (2.53), erhält man die Durchlässigkeit für eine Kapillarröhre zu:

$$k_0 = \frac{r^2}{8} . \quad (2.55)$$

Für ein Bündel von Kapillarröhren gilt:

$$k_0 = \frac{\phi \cdot \bar{r}^2}{8} , \quad (2.56)$$

wobei  $\phi$  die Porosität und  $\bar{r}$  der mittlere Rohrradius der Kapillarröhren im Bündel ist.

Hieraus wurden die Ansätze der beiden oben genannten Gruppen entwickelt. Beispiele für die **erste Gruppe** sind:

*Averjanov* (1950)[6] hat angenommen, daß die Wasserphase die Wände der Kapillarröhre vollständig benetzt und die Luftphase nur im Zentrum fließt. *Averjanov* hat Gleichung (2.54) für diese Bedingungen analysiert. Die Näherungslösung von *Averjanov* lautet:

$$\bar{\mathbf{v}}(S_e) = -k(S_e) \cdot \mathbf{grad} p , \quad (2.57)$$

$$k(S_e) = k_0 S_e^n , \quad (2.58)$$

$$S_e = 1 - \left(\frac{r_i}{r}\right)^2 . \quad (2.59)$$

$r_i$  ist der Radius des der Luftphase zur Verfügung stehenden Raumes im Rohrzentrum,  $S_e$  die effektive Sättigung der Wasserphase und  $k(S_e)$  die Permeabilität bei der Sättigung  $S_e$ . Die relative Permeabilität der Wasserphase  $k_{rw}$  berechnet sich durch:

$$k_{rw} = \frac{k(S_e)}{k_0} = S_e^n . \quad (2.60)$$

Averjanov hat den Parameter  $n$  experimentell ermittelt zu  $n = 3.5$ .

Yuster (1951) [131] hat den gleichen Fall wie Averjanov gelöst. Yuster hat  $n = 2$  experimentell bestimmt. Die Beziehung nach Yuster ergibt sich zu:

$$k_{rw} = S_e^2 . \quad (2.61)$$

Die **zweite Gruppe** verwendet das Konzept der mittleren hydraulischen Radien  $\bar{R}$ . Somit können beliebige Porengeometrien betrachtet werden und nicht nur kreisförmige Kapillarröhren.

Der hydraulische Radius wird definiert als:

$$R = \frac{A}{U} , \quad (2.62)$$

wobei  $A$  die Querschnittsfläche senkrecht zur Strömungsrichtung und  $U$  der benetzte Umfang ist. Gleichung (2.54) nimmt dann die folgende allgemeine Form an:

$$\bar{\mathbf{v}} = -\frac{\bar{R}^2}{k_{st} \mu} \cdot \mathbf{grad} p . \quad (2.63)$$

$k_{st}$  ist der Formfaktor der durchströmten Querschnittsfläche. Die Durchlässigkeit für eine Kapillarröhre (s. Gl. (2.55)) nimmt dann die Form:

$$k_0 = \frac{R^2}{k_{st}} \quad (2.64)$$

an. Für ein Bündel von Kapillarröhren ergibt sich die Durchlässigkeit zu:

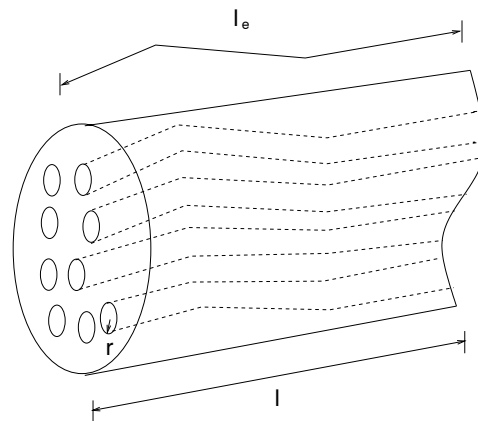
$$k_0 = \frac{\phi \cdot \bar{R}^2}{k_{st}} . \quad (2.65)$$

Ein Beispiel für dieses Konzept ist der Ansatz nach Irmay.

Irmay (1954)[57] hat das Konzept von Kozeny (1927)[69] verwendet, welches ursprünglich für ein gesättigtes Medium gedacht war. Kozeny hat den mittleren hydraulischen Radius  $\bar{R}$  als:

$$\bar{R} = \frac{\phi}{s} \quad (2.66)$$

definiert. Hierbei ist  $s$  die Oberfläche der Körner in einer bestimmten Volumeneinheit. Carman(1937)[20] hat den Effekt der Tortuosität  $\tau$  ( $\tau = (l/l_e)^2$ , s. Abb. 2.20) mit dem

Abbildung 2.20: Konzeptionelles Modell der Tortuosität  $\tau$ 

Formfaktor  $k_{st}$  verbunden. Die gesättigte Permeabilität nach Kozeny–Carman ergibt sich dann zu (vgl. Gleichung (2.65)):

$$k_0 = \frac{\phi^3}{k_{st} \cdot \tau \cdot s^2} \quad (2.67)$$

lrmay hat angenommen, daß  $k_{st}$ ,  $\tau$  und  $s$  in Gleichung (2.67) von der Sättigung unabhängig sind (konstant). Die Porosität für die Wasserphase  $\phi$  (*drainable porosity*) ist jedoch von der Sättigung abhängig ( $\phi(S_w - S_{wr})$ ). Damit ergibt sich die relative Permeabilität aus Gleichung (2.67) nach lrmay zu:

$$k_{rw} = S_e^3 \quad (2.68)$$

Im folgenden werden Ansätze, die auf der Kapillardruck-Sättigungs-Beziehung basieren, gezeigt. Wie oben erläutert werden hierbei zwei Konzeptmodelle unterschieden. Das erste Modell ist:

### 2.3.2.2 Paralleles Kapillarmodell gleichbleibender Porengröße

In diesem Modell wird angenommen, daß das poröse Medium aus einer Anzahl paralleler Kapillarröhren besteht, die senkrecht zu Strömungsrichtung unterschiedliche Querschnitte (Porengröße) aufweisen und in Strömungsrichtung gleichbleibende Querschnitte besitzen (s. Abb. 2.21). Auch hier wird das Konzept der mittleren hydraulischen Radien angewendet. In die *Laplace*-Gleichung (s. Gl. (2.5)) wird der hydraulische Radius  $R = r/2$  eingesetzt (gemäß der Definition von Kapillarröhren auf der Mikroskala). Anschließend führt man zur Bestimmung des mittleren hydraulischen Radius der benetzenden Phase

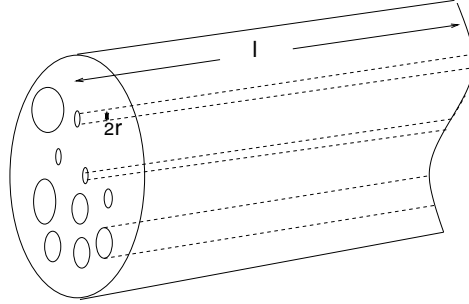


Abbildung 2.21: Kapillarröhrenmodell gleichbleibender Porengröße

$\bar{R}_w$  eine Integration über  $S_w$  durch (gemäß der makroskaligen Definition des Zusammenhangs zwischen  $p_c$  und  $S_w$ ). Die Integrationsgrenzen sind 0 und  $S_w$ , da die benetzende Phase die kleinen Poren besetzt:

$$\bar{R}_w^2 = \frac{\sigma_{nw}^2 \cos^2 \theta}{S_w} \int_0^{S_w} \frac{dS_w}{p_{cnw}^2} . \quad (2.69)$$

Für die nichtbenetzende Phase gilt:

$$\bar{R}_n^2 = \frac{\sigma_{nw}^2 \cos^2 \theta}{1 - S_w} \int_{S_w}^1 \frac{dS_w}{p_{cnw}^2} . \quad (2.70)$$

Die nichtbenetzende Phase besetzt die großen Poren, deshalb wird von  $S_w$  bis 1 integriert. Die Grenzflächenspannung  $\sigma_{nw}$  und der Kontaktwinkel  $\theta$  werden hierbei als konstant angenommen.

Die Durchlässigkeit für die benetzende Phase in Gl. (2.65) nimmt bei einer Teilsättigung  $S_w$  und mit Verwendung des Konzeptes der hydraulischen Radien sowie der Tortuosität  $\tau$  folgende Form an:

$$k_w(S_w) = \frac{\phi S_w \bar{R}_w^2}{k_{st} \cdot \tau} \quad (2.71)$$

bzw.

$$k_n(1 - S_w) = \frac{\phi(1 - S_w) \bar{R}_n^2}{k_{st} \cdot \tau} \quad (2.72)$$

für die nichtbenetzende Phase, wobei  $k_w$  bzw.  $k_n$  die Permeabilität für die benetzende und nichtbenetzende Phase bei der Sättigung  $S_w$  ist.

Einsetzen von Gleichung (2.69) in Gleichung (2.71) liefert  $k_w$  als Funktion der  $p_c - S_w$ -

Beziehung:

$$k_w = \phi \sigma_{nw}^2 \cos^2 \theta \int_0^{S_w} \frac{1}{k_{st} \cdot \tau} \frac{dS_w}{p_{cnw}^2} . \quad (2.73)$$

Für  $k_n$  ergibt sich analog:

$$k_n = \phi \sigma_{nw}^2 \cos^2 \theta \int_{S_w}^1 \frac{1}{k_{st} \cdot \tau} \frac{dS_w}{p_{cnw}^2} . \quad (2.74)$$

Die relative Permeabilität der benetzenden Phase  $k_{rw}$  und der nichtbenetzenden Phase  $k_{rn}$  ergibt sich zu:

$$k_{rw} = \frac{k_w}{k_0} = \frac{\int_0^{S_w} \frac{1}{\tau} \frac{dS_w}{p_{cnw}^2}}{\int_0^1 \frac{1}{\tau} \frac{dS_w}{p_{cnw}^2}} , \quad (2.75)$$

$$k_{rn} = \frac{k_n}{k_0} = \frac{\int_{S_w}^1 \frac{1}{\tau} \frac{dS_w}{p_{cnw}^2}}{\int_0^1 \frac{1}{\tau} \frac{dS_w}{p_{cnw}^2}} . \quad (2.76)$$

$k_{st}$  wird auch hier als konstant betrachtet. Die Tortuosität  $\tau$  wird im Integral behalten, da viele Autoren eine Abhängigkeit der Tortuosität von der Sättigung gefunden haben. Mehrere Autoren haben diese allgemeinen Gleichungen ((2.75) und (2.76)) angenommen und unter Berücksichtigung der Tortuosität neue Formulierungen hergeleitet. Im folgenden werden davon einige erläutert.

Gates, Lietz und Templeaar (1950)[44] haben die relativen Permeabilitäten unter Annahme konstanter Tortuosität wie folgt beschrieben:

$$k_{rw} = \frac{\int_0^{S_w} \frac{dS_w}{p_{cnw}^2}}{\int_0^1 \frac{dS_w}{p_{cnw}^2}} , \quad (2.77)$$

$$k_{rn} = \frac{\int_{S_w}^1 \frac{dS_w}{p_{cnw}^2}}{\int_0^1 \frac{dS_w}{p_{cnw}^2}} . \quad (2.78)$$

Fatt und Dykstra (1951)[122] setzen voraus, daß die Tortuosität  $\tau$  proportional zu  $1/r^b$  ist.  $r$  ist der Radius der größten Pore, die bei  $S_w$  noch mit Wasser gefüllt ist,  $b$  ist eine vom Bodenmaterial abhängige Konstante.  $b = 1$  liefert eine gute Übereinstimmung mit

experimentell gemessenen Daten. Des weiteren ist  $1/r^b$  eine Funktion der Sättigung. Setzt man diese Annahmen in Gleichung (2.75) bzw. (2.76) ein, so ergibt sich zu:

$$k_{rw} = \frac{\int_0^{S_w} \frac{dS_w}{p_{cnw}^{2+b}}}{\int_0^1 \frac{dS_w}{p_{cnw}^{2+b}}} , \quad (2.79)$$

$$k_{rn} = \frac{\int_0^1 \frac{dS_w}{p_{cnw}^{2+b}}}{\int_0^{S_w} \frac{dS_w}{p_{cnw}^{2+b}}} . \quad (2.80)$$

Wyllie und Spangler (1952)[123] betrachten  $\tau$  als eine Funktion von  $S_w$ . Sie haben  $[\tau_{S_w}/\tau_1]$  durch elektrische Widerstandsmessung erhalten. Die Abhängigkeit zwischen  $\tau$  und  $S_w$  variiert von Medium zu Medium. Sie haben folgende Gleichungen für  $k_{rw}$  bzw.  $k_{rn}$  vorgeschlagen:

$$k_{rw} = \left[ \frac{S_w}{1 - S_{wr}} \right]^2 \frac{\int_0^{S_w} \frac{dS_w}{p_{cnw}^2}}{\int_0^1 \frac{dS_w}{p_{cnw}^2}} , \quad (2.81)$$

$$k_{rn} = \left[ 1 - \frac{S_w}{1 - S_{wr}} \right]^2 \frac{\int_0^1 \frac{dS_w}{p_{cnw}^2}}{\int_0^{S_w} \frac{dS_w}{p_{cnw}^2}} . \quad (2.82)$$

Burdine (1953)[17] hat den Ansatz von Wyllie und Gardner erweitert. Er hat den Zusammenhang von  $\tau$  und  $S_w$  experimentell ermittelt. Dabei stellte er fest, daß  $[\tau_1/\tau_{S_w}]^{1/2}$  eine lineare Funktion von  $S_w$  ist. Burdine hat folgende Gleichungen für die relative Permeabilität der benetzenden bzw. nichtbenetzenden Phase angenommen:

$$k_{rw} = \left[ \frac{S_w - S_{wr}}{1 - S_{wr}} \right]^2 \frac{\int_0^{S_w} \frac{dS_w}{p_{cnw}^2}}{\int_0^1 \frac{dS_w}{p_{cnw}^2}} , \quad (2.83)$$

$$k_{rn} = \left[ 1 - \frac{S_w - S_{wr}}{1 - S_{wr}} \right]^2 \frac{\int_0^1 \frac{dS_w}{p_{cnw}^2}}{\int_0^{S_w} \frac{dS_w}{p_{cnw}^2}} . \quad (2.84)$$

Corey (1954)[25] hat in die *Burdine*-Gleichungen für  $1/p_{cnw}^2$  einen linearen Verlauf der effektiven Sättigung der benetzenden Phase  $S_e$  eingesetzt. Corey hat folgende Beziehungen

für  $k_{rw}$  bzw.  $k_{rn}$  angeben:

$$k_{rw} = S_e^4 \quad , \quad (2.85)$$

$$k_{rn} = (1 - S_e)^2 \cdot (1 - S_e^2) \quad . \quad (2.86)$$

Brooks und Corey (1964)[14] haben ihre  $p_c - S_w$ -Beziehung (s. Gleichung (2.7)) in die *Burdine*-Gleichungen (s. Gleichungen (2.83), (2.84)) eingesetzt und haben damit die  $k_{rw}$ - bzw.  $k_{rn}$ -Beziehungen ermittelt:

$$k_{rw} = S_e^{\frac{2+3\lambda}{\lambda}} \quad , \quad (2.87)$$

$$k_{rn} = (1 - S_e)^2 \left( 1 - S_e^{\frac{2+\lambda}{\lambda}} \right) \quad . \quad (2.88)$$

Eine graphische Darstellung der  $k_{rw} - S_w$ - bzw.  $k_{rn} - S_w$ -Beziehungen für die in Tabelle 2.1 angegebenen Parameter sind in Abb. 2.22 gezeigt.

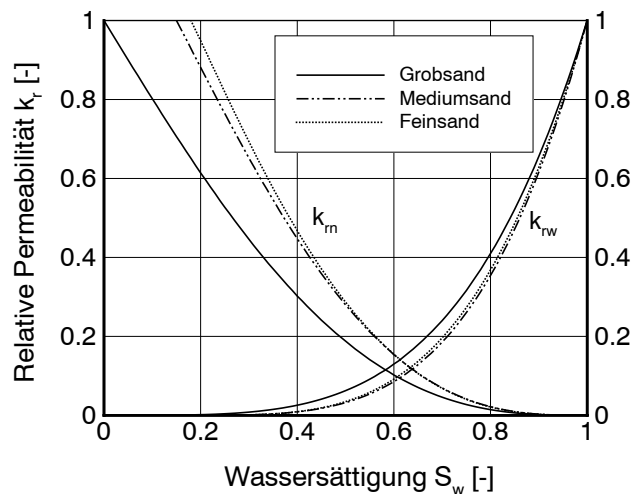


Abbildung 2.22: Ermittelte  $k_r - S_w$ -Beziehungen nach Brooks und Corey

### 2.3.2.3 Paralleles Kapillarmodell veränderlicher Porengröße

Dieses Modell ist eine Modifikation gegenüber dem parallelen Kapillarmodell gleichbleibender Porengröße. Hier wird die zufällige Variation der Porengröße nicht nur in der zur Strömungsrichtung senkrechten Ebene, sondern auch entlang der Strömungsrichtung

berücksichtigt (*cutting and rejoining*, s. Abb. 2.23). Childs und Collis-George (1950)[23] waren die ersten, die sich dieses Konzeptes bedient haben. Die Permeabilität in jeder Kapillarröhre, die aus zwei Abschnitten mit unterschiedlichem Radius besteht ( $r_1, r_2$ , s. Abb. (2.23)), wird ausgehend vom kleineren Radius  $r_1$  berechnet. Childs und Collis-George haben eine Gleichung hergeleitet und mit einem Finite-Differenzen-Verfahren die relative Permeabilität ermittelt. Marshall (1958)[87] hat das Konzept von Childs und Collis-George verwendet, jedoch die relative Permeabilität mit Hilfe der *Hagen-Poiseuille*-Gleichung berechnet. Zudem haben einige weitere Autoren diese Theorie erweitert und mit experimentellen Daten verglichen (Millington and Quirk (1959)[90], Nielsen et al. (1960)[99], Mualem (1976)[94]). Im folgenden wird die Gleichung nach Mualem gezeigt, da sie die Basis für die in der Literatur sehr verbreitete  $k_r - S_w$ -Beziehung nach van Genuchten(1980) [45] darstellt.

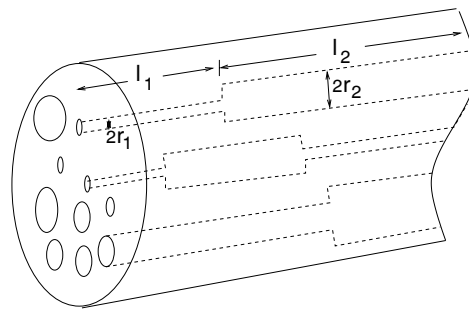


Abbildung 2.23: Kapillarröhrenmodell mit verschieden großen Radien

Mualem (1976)[94] ermöglicht mit seiner Theorie auf analytischem Wege eine Vorhersage der  $k_r - S_w$ - mittels der  $p_c - S_w$ -Beziehung. Er stützt sich dabei auf die Theorie von Childs und Collis-George. Er hat im Gegensatz zu Childs und Collis-George den Effekt des größeren Porenradius  $r_2$  zusätzlich berücksichtigt (s. Abb. 2.23).

Mualem betrachtet eine poröse Platte der Dicke  $\Delta x$ . Auf beiden Seiten der Platte sind die Porengrößen zufällig verteilt. Die Wahrscheinlichkeit, daß Poren der einen Seite ( $x$ ) mit dem Radius  $r_1 \rightarrow r_1 + dr_1$  mit Poren der anderen Seite ( $x + \Delta x$ ) mit dem Radius  $r_2 \rightarrow r_2 + dr_2$  in Verbindung stehen, ist:

$$a(r_1, r_2) = G(R, r_1, r_2) f(r_1) f(r_2) dr_1 dr_2 \quad . \quad (2.89)$$

$f(r_1)$  und  $f(r_2)$  sind Funktionen der Porenverteilung.  $G(R, r_1, r_2)$  ist dabei ein Korrekturfaktor, der die teilweise Korrelation zwischen den Poren  $r_1$  und  $r_2$  bei der Sättigung



$S_w(R)$  beschreibt.

Für eine zu einer Kapillarröhre mit variablen Radius  $(r_1, r_2)$  äquivalente Kapillarröhre mit konstantem Radius  $R$  hat Mualem folgende Beziehung abgeleitet:

$$R^2 = r_1 r_2 \quad . \quad (2.90)$$

Zur Vereinfachung hat Mualem folgende Normalisierungen eingeführt:

$$\bar{r}_1 = \frac{r_1 - R_{min}}{R_{max} - R_{min}} \quad , \quad (2.91)$$

$$\bar{r}_2 = \frac{r_2 - R_{min}}{R_{max} - R_{min}} \quad . \quad (2.92)$$

Die Radien  $\bar{r}_1$  und  $\bar{r}_2$  liegen zwischen 0 und 1. Hierbei wird davon ausgegangen, daß  $r_1$  und  $r_2$  zwischen  $R_{min}$  und  $R_{max}$  variieren. Durch Integration der Porenverteilungsfunktion  $f(\bar{r}_1)$  erhält man die Sättigung  $S_w$  bei  $\bar{R}$  als:

$$\int_0^{\bar{R}} f(\bar{r}_1) d\bar{r}_1 = S_w(\bar{R}) \quad . \quad (2.93)$$

Die Permeabilität der benetzenden bzw. der nichtbenetzenden Phase, die gemäß Gleichung (2.71) bzw. (2.72) von  $\bar{R}^2$  abhängig ist, wird somit vom Produkt  $\bar{r}_1 \cdot \bar{r}_2$  beeinflusst (s. Gl. (2.90)). Mit Berücksichtigung der Tortuosität  $\tau(\bar{R}, \bar{r}_1, \bar{r}_2)$  wird die relative Permeabilität der benetzenden Phase ermittelt durch:

$$k_{rw}(S_w) = \frac{k_w}{k_0} = \frac{\int_0^{\bar{R}} \int_0^{\bar{R}} \tau(\bar{R}, \bar{r}_1, \bar{r}_2) G(\bar{R}, \bar{r}_1, \bar{r}_2) \bar{r}_1 \bar{r}_2 f(\bar{r}_1) f(\bar{r}_2) d\bar{r}_1 d\bar{r}_2}{\int_0^1 \int_0^1 \tau(\bar{R}, \bar{r}_1, \bar{r}_2) G(\bar{R}, \bar{r}_1, \bar{r}_2) \bar{r}_1 \bar{r}_2 f(\bar{r}_1) f(\bar{r}_2) d\bar{r}_1 d\bar{r}_2} \quad . \quad (2.94)$$

Mualem hat die von Burdine empirisch ermittelte Tortuosität und den Korrelationsfaktor als Funktion der Sättigung angenommen ( $S_e^{1/2}$ ):

$$k_{rw}(S_w) = \left[ \frac{S_w - S_{wr}}{1 - S_{wr}} \right]^{\frac{1}{2}} \frac{\int_0^{\bar{R}} \bar{r}_1 f(\bar{r}_1) d\bar{r}_1 \int_0^{\bar{R}} \bar{r}_2 f(\bar{r}_2) d\bar{r}_2}{\int_0^1 \bar{r}_1 f(\bar{r}_1) d\bar{r}_1 \int_0^1 \bar{r}_2 f(\bar{r}_2) d\bar{r}_2} \quad (2.95)$$

$$= \left[ \frac{S_w - S_{wr}}{1 - S_{wr}} \right]^{\frac{1}{2}} \left[ \frac{\int_0^{\bar{R}} \bar{r}_1 f(\bar{r}_1) d\bar{r}_1}{\int_0^1 \bar{r}_1 f(\bar{r}_1) d\bar{r}_1} \right]^2 \quad . \quad (2.96)$$

Ersetzt man  $\bar{r}_1$  durch  $const./p_{cnw}$  (s. Gl. (2.5)) und  $f(\bar{r}_1)d\bar{r}_1$  durch  $dS_w$  (s. Gl. (2.93)), erhält man die Gleichung für die relative Permeabilität nach Mualem:

$$k_{rw}(S_w) = \left[ \frac{S_w - S_{wr}}{1 - S_{wr}} \right]^{\frac{1}{2}} \left[ \frac{\int_0^{S_w} \frac{1}{p_{cnw}} dS_w}{\int_0^1 \frac{1}{p_{cnw}} dS_w} \right]^2. \quad (2.97)$$

Das Vorgehen für die nichtbenetzende Phase gilt analog, und es ergibt sich:

$$k_{rn}(S_w) = \left[ 1 - \frac{S_w - S_{wr}}{1 - S_{wr}} \right]^{\frac{1}{2}} \left[ \frac{\int_{S_w}^1 \frac{1}{p_{cnw}} dS_w}{\int_0^1 \frac{1}{p_{cnw}} dS_w} \right]^2. \quad (2.98)$$

Im folgenden wird der Ansatz von van Genuchten vorgestellt, der auf Mualem zurückzuführen ist.

van Genuchten (1980)[45] hat die *Mualem*-Gleichung (s. Gl. (2.97)) verwendet, um die  $k_{rw} - S_w$ -Beziehung mit Hilfe der  $p_c - S_w$ -Beziehung (s. Gleichung (2.10)) analytisch zu ermitteln:

$$k_{rw}(S_w) = S_e^{\frac{1}{2}} \left[ \frac{\int_0^{S_e} \alpha \left[ \frac{x^{\frac{1}{m}}}{1-x^{\frac{1}{m}}} \right]^{\frac{1}{n}} dx}{\int_0^1 \alpha \left[ \frac{x^{\frac{1}{m}}}{1-x^{\frac{1}{m}}} \right]^{\frac{1}{n}} dx} \right]^2. \quad (2.99)$$

Ersetzt man  $x = y^m$  in Gleichung (2.99), erhält man:

$$k_{rw}(S_w) = S_e^{\frac{1}{2}} \left[ \frac{\int_0^{S_e^{\frac{1}{m}}} y^{(m-1+1/n)} (1-y)^{\frac{-1}{n}} dy}{\int_0^1 y^{(m-1+1/n)} (1-y)^{\frac{-1}{n}} dy} \right]^2. \quad (2.100)$$

Der Parameter  $m$  in der  $p_c - S_w$ -Gleichung (s. Gleichung (2.10)) ist als  $m = 1 - \frac{1}{n}$  definiert. Dadurch die Integration erhält man die  $k_{rw} - S_w$ -Beziehung nach van Genuchten als:

$$k_{rw} = S_e^{\frac{1}{2}} \left[ 1 - \left( 1 - S_e^{\frac{1}{m}} \right)^m \right]^2. \quad (2.101)$$

Mit Durchführung der gleichen Schritte für die nichtbenetzende Phase wird die  $k_{rnw} - S_w$ -Beziehung beschrieben als:

$$k_{rn} = (1 - S_e)^{\frac{1}{2}} \left[ 1 - S_e^{\frac{1}{m}} \right]^{2m}. \quad (2.102)$$

Ostrom und Lenhard (1998)[100] haben durch experimentelle Untersuchungen festgestellt, daß die numerischen Ergebnisse mit Verwendung des  $k_r - S_w$ -Ansatzes nach Brooks und Corey (s. Gl. (2.87), (2.88)) eine deutlich bessere Übereinstimmung mit den gemessenen Daten im Vergleich zu dem Ansatz nach van Genuchten (s. Gl. (2.101), (2.102)) liefern.

In Abbildung 2.24 sind die  $k_r - S_w$ -Beziehungen nach van Genuchten für die im großskaligen 2D-Experiment (VEGAS) verwendeten Sande (Grob-, Mittel- und Feinsand) dargestellt (s. Tab. 2.2).

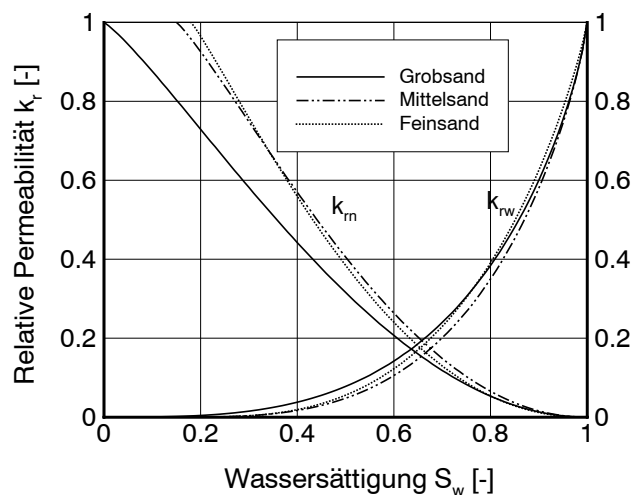


Abbildung 2.24: Ermittelte  $k_r - S_w$ -Beziehungen nach van Genuchten

Für das Zweiphasensystem Wasser-NAPL in porösen Medien hat die Wasserphase als benetzende Phase eine höhere Affinität zum Korngerüst als die NAPL-Phase. Bei niedrigen Sättigungsgraden zeigt die relative Permeabilität-Sättigungs-Kurve der benetzenden Phase einen schwachen Anstieg und einen extrem steilen Anstieg bei höheren Sättigungsgraden. Die Ursache für diesen Verlauf liegt darin, daß die benetzende Phase zuerst die kleineren Poren füllt, in denen infolge der starken molekularen Anziehungskräfte kaum Fließbewegungen möglich sind, während die größeren Poren erst bei fast vollständiger Sättigung gefüllt werden.

Für die nichtbenetzende Phase weist die relative Permeabilität-Sättigungs-Kurve bei kleinen Sättigungsgraden einen schnelleren Anstieg auf. Hier füllt die nichtbenetzende Phase bei geringeren Sättigungen zuerst die größeren Poren.

In dem Bereich von  $1 > S_w > 0$  ist die Summe der relativen Permeabilitäten beider Phasen  $< 1$  (nur bei  $S_w = 0$  oder  $S_w = 1$  ist die Summe = 1). Dies ist darauf zurückzuführen, daß die beiden Phasen sich in ihrem Fließverhalten gegenseitig beeinflussen.

### 2.3.3 Relative Permeabilität bei makroskaliger Betrachtungsweise (Dreiphasensystem)

Für die relativen Permeabilitäten in Dreiphasensystemen haben i.a. folgende funktionalen Abhängigkeiten Gültigkeit:

$$k_{rg} = k_{rg}(S_g) , \quad (2.103)$$

$$k_{rn} = k_{rn}(S_w, S_g) , \quad (2.104)$$

$$k_{rw} = k_{rw}(S_w) . \quad (2.105)$$

Diese Beziehungen werden durch experimentelle Beobachtungen unterstützt [120], [7]. Außerdem folgen diese funktionalen Zusammenhänge aus den in Abschnitt 2.2.3 getroffenen Annahmen über die Verteilung der drei Phasen im Porenraum. In der Literatur werden verschiedene Ansätze diskutiert. Beispielsweise haben Delshad und Pope (1989)[31] sieben unterschiedliche Modelle mit experimentellen Daten verglichen. Zu den verbreitetsten Ansätzen gehören Stone I (1970) [119], Stone II (1973)[120], sowie Parker et al. (1987)[102].

Der Ansatz für die relative Permeabilität der NAPL-Phase in Dreiphasensystemen  $k_{rn}$  nach Stone (1970)[119], der von Aziz und Settari (1979)[7] durch den Faktor  $k_{rncw}$  skaliert wurde, lautet:

$$k_{rn} = \frac{\bar{S}_n \cdot k_{rnw}(S_w) \cdot k_{rng}(S_g)}{k_{rncw} \cdot (1 - \bar{S}_w) \cdot (1 - \bar{S}_g)} \quad (2.106)$$

mit:

$$\bar{S}_n = \frac{S_n - S_{nr}}{(1 - S_{wr} - S_{nr})} \quad (2.107)$$

$$\bar{S}_w = \frac{S_w - S_{wr}}{(1 - S_{wr} - S_{nr})} \quad (2.108)$$

$$\bar{S}_g = \frac{S_g}{(1 - S_{wr} - S_{nr})} \quad (2.109)$$

$$k_{rnw}(S_{wr}) = k_{rng}(S_w + S_n = 1) = k_{rncw} \quad (2.110)$$

$k_{rnw}$  ist die relative Permeabilität der NAPL-Phase im Zweiphasensystem NAPL-Wasser,  $k_{rng}$  die relative Permeabilität der NAPL-Phase in Zweiphasensystem Gas-(NAPL+Wasser). Unter Verwendung des *van Genuchten*-Ansatzes erhält man:

$$k_{rnw}(S_w) = (1 - \bar{S}_w)^{1/2} [1 - \bar{S}_w^{1/m}]^{2m} \quad , \quad (2.111)$$

$$k_{rng}(S_w) = (\bar{S}_n + \bar{S}_w)^{1/2} [1 - (1 - (\bar{S}_n + \bar{S}_w)^{1/m})^m]^2 \quad , \quad (2.112)$$

mit  $m = 1 - 1/n$ . Die relative Permeabilität-Sättigungs-Beziehung für die Wasserphase  $k_{rw}$  sowie für die Gasphase  $k_{rg}$  erhält man aus dem Zweiphasensystem:

$$k_{rw}(S_w) = (\bar{S}_w)^{1/2} [1 - (1 - (\bar{S}_w)^{1/m})^m]^2 \quad , \quad (2.113)$$

$$k_{rg}(S_g) = [1 - (\bar{S}_n + \bar{S}_w)]^{1/2} [1 - (\bar{S}_n + \bar{S}_w)^{1/m}]^{2m} \quad , \quad (2.114)$$

Der zweite nach **Aziz und Setarri** skalierte Ansatz von **Stone** (1973)[120] lautet:

$$k_{rn} = k_{rncw} \left[ \left( \frac{k_{rnw}}{k_{rncw}} + k_{rw} \right) \left( \frac{k_{rng}}{k_{rncw}} + k_{rg} \right) - (k_{rw} + k_{rg}) \right] \quad (2.115)$$

Negative Werte von  $k_{rn}$  bedeuten, daß NAPL nichtmobil vorliegt ( $k_{rn} = 0$ ). Das zweite Modell von **Stone** bietet die Möglichkeit, die residuale Sättigung der NAPL-Phase im Dreiphasensystem vorherzusagen.

**Parker et al.** (1987) [102] haben die Zweiphasen-relative Permeabilität-Sättigungsausdrücke von **van Genuchten** für die Dreiphasenströmung von Wasser-NAPL-Gas erweitert, wobei sie skalierte Variablen verwenden:

$$k_{rw} = \bar{S}_w^{\frac{1}{2}} \left[ 1 - \left( 1 - \bar{S}_w^{\frac{1}{m}} \right)^m \right]^2 \quad , \quad (2.116)$$

$$k_{rg} = (\bar{S}_g)^{\frac{1}{2}} \left[ 1 - \bar{S}_t^{\frac{1}{m}} \right]^{2m} \quad , \quad (2.117)$$

$$k_{rn} = (\bar{S}_t - \bar{S}_w)^{\frac{1}{2}} \left[ \left( 1 - \bar{S}_w^{\frac{1}{m}} \right)^m - \left( 1 - \bar{S}_t^{\frac{1}{m}} \right)^m \right]^2 \quad (2.118)$$

mit:

$$\bar{S}_w = \frac{S_w - S_{wr}}{1 - S_{wr}} \quad , \quad (2.119)$$

$$\bar{S}_t = \frac{S_t - S_{wr}}{1 - S_{wr}} \quad , \quad (2.120)$$

$$\bar{S}_g = \frac{S_g}{1 - S_{wr}} \quad . \quad (2.121)$$

Die residuale Sättigung der NAPL-Phase wird bei der Betrachtung der Hysterese berücksichtigt (s. Kap. 3).

## 2.4 Mathematisch-numerische Beschreibung der Mehrphasenströmung

### 2.4.1 Kontinuitätsgleichung

Die Kontinuitätsgleichung der Mehrphasenströmung in porösen Medien läßt sich aus der Massenerhaltung der einzelnen Fluidphasen über ein passend gewähltes Kontrollvolumen herleiten. Bei den hier betrachteten Strömungsprozessen treten nur geringe Veränderungen des porösen Mediums auf, so daß die Euler-Betrachtungsweise zur Beschreibung herangezogen wird. Hierbei wird die Massenbilanzgleichung für Phase  $\alpha$  bezüglich eines (zeitlich und räumlich konstanten) Volumenelementes  $V$  ausgedrückt:

$$\frac{\partial}{\partial t} \int_V \Phi_\alpha \varrho_\alpha dV = - \int_V [\operatorname{div}(\Phi_\alpha \varrho_\alpha \mathbf{v}_{a\alpha}) - q_\alpha] dV, \quad (2.122)$$

wobei  $\Phi_\alpha$  der Volumenanteil,  $\varrho_\alpha$  die Dichte und  $\mathbf{v}_{a\alpha}$  die Abstandsgeschwindigkeit von Phase  $\alpha$  ist.  $q_\alpha$  repräsentiert die Massenrate pro Volumen für Quellen innerhalb von  $V$ . In Abbildung 2.25 ist ein quaderförmiges Kontrollelement aufgezeigt.

Die makroskopische Kontinuitätsgleichung wird bei Bear (1972) [11] über eine Mittelung der strömungsrelevanten Größen aus der mikroskopischen Betrachtungsebene abgeleitet. Sie enthält dabei auch Diffusion-Dispersions-Terme. Diese werden aber unter der Annahme, daß der mittlere Fluidmassenstrom sehr viel größer ist als die Abweichung von diesem Mittel, vernachlässigt. Daher wird der dispersiv wirkende Massenstrom bei der Bilanzierung nicht weiter untersucht.

Da die Bilanzgleichung mit Hilfe von physikalischen Größen, welche auf der Makroebene definiert sind, ausgedrückt werden soll, muß das Euler-Kontrollvolumen  $V$  so gewählt werden, daß bezüglich  $V$  diese Größen Gültigkeit besitzen. Aus diesem Grund wird im folgenden das Integral bezüglich eines repräsentativen Elementarvolumens (REV)  $V^*$  definiert.

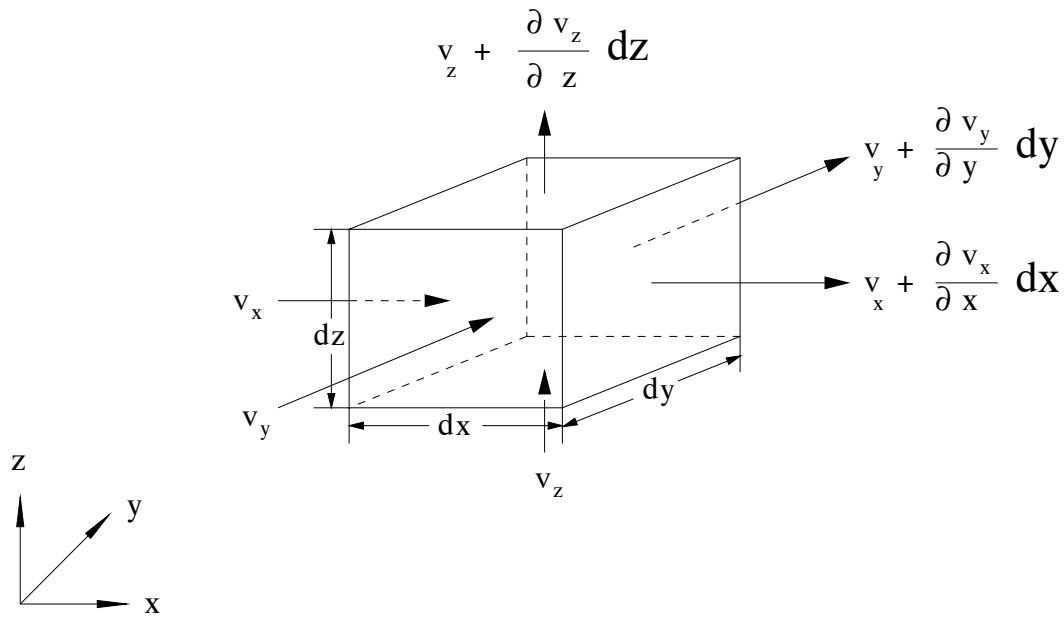


Abbildung 2.25: Massenbilanz am Kontrollvolumen [48]

Durch Einführen der Porosität  $\Phi$  des porösen Mediums und der Phasensättigung  $S_\alpha$  lässt sich der Volumenanteil  $\Phi_\alpha$  einer Phase  $\alpha$  ausdrücken als:

$$\Phi_\alpha = \Phi S_\alpha \quad . \quad (2.123)$$

Mit Hilfe des Volumenanteils  $\Phi_\alpha$  und der Abstandsgeschwindigkeit  $v_{a\alpha}$  lässt sich eine volumengemittelte Fluidgeschwindigkeit (Darcy-Geschwindigkeit)  $v_\alpha$  einführen, welche für eine Phase  $\alpha$  wie folgt definiert ist:

$$v_\alpha = \Phi_\alpha v_{a\alpha} \quad . \quad (2.124)$$

Setzt man die beiden Gleichungen (2.123) und (2.124) in die Massenbilanzgleichung (2.122) mit  $V = V^*$  ein, so ergibt sich:

$$\frac{\partial}{\partial t} \int_{V^*} \Phi S_\alpha \varrho_\alpha dV^* = - \int_{V^*} [\text{div}(\varrho_\alpha v_\alpha) - q_\alpha] dV^* \quad . \quad (2.125)$$

Gleichung (2.125) stellt eine Form der Kontinuitätsgleichung (für Phase  $\alpha$ ) dar, welche bezüglich eines REV's gültig ist. Für weitere Ausführungen zu diesem Thema siehe z. B. Helmig (1997)[48].

## 2.4.2 Fließgesetz von Darcy

Fluidströmung in porösen Medien findet in der Regel mit sehr geringer Geschwindigkeit statt (laminare Strömung). Zur Beschreibung dieser Strömung wird das *Darcy*-Gesetz verwendet. Im Fall von dreidimensionaler Strömung wird die allgemeine Form des *Darcy*-Gesetzes wie folgt geschrieben:

$$\mathbf{v} = \mathbf{K}_0 \cdot \mathbf{grad} h \quad (2.126)$$

mit dem Vektor der Filtergeschwindigkeit

$$\mathbf{v} = \begin{bmatrix} v_x \\ v_y \\ v_z \end{bmatrix}, \quad (2.127)$$

dem Gradienten der Standrohrspiegelhöhe

$$\mathbf{grad} h = \begin{bmatrix} \frac{\partial h}{\partial x} \\ \frac{\partial h}{\partial y} \\ \frac{\partial h}{\partial z} \end{bmatrix} \quad (2.128)$$

und dem symmetrischen Durchlässigkeitstensor

$$\mathbf{K}_0 = \begin{bmatrix} k_{xx} & k_{xy} & k_{xz} \\ k_{xy} & k_{yy} & k_{yz} \\ k_{xz} & k_{yz} & k_{zz} \end{bmatrix}. \quad (2.129)$$

Die Standrohrspiegelhöhe  $h$  wird von einem beliebig festzulegenden Bezugshorizont aus gemessen und setzt sich aus der Summe von Druckhöhe  $\frac{p}{\rho g}$  und geodätischer Höhe  $z$  zusammen:

$$h = \frac{p}{\rho g} + z. \quad (2.130)$$

Wählt man ein  $x$ - $y$ - $z$ -Koordinatensystem, das mit den Hauptrichtungen der Durchlässigkeit übereinstimmt, so wird

$$\mathbf{K}_0 = \begin{bmatrix} k_1 & 0 & 0 \\ 0 & k_2 & 0 \\ 0 & 0 & k_3 \end{bmatrix} \quad (2.131)$$



für ein anisotropes Medium. Für ein isotropes Medium ist jede Richtung Hauptrichtung der Durchlässigkeit und der Durchlässigkeitstensor nimmt folgende Form an:

$$\mathbf{K}_0 = \begin{bmatrix} k & 0 & 0 \\ 0 & k & 0 \\ 0 & 0 & k \end{bmatrix}. \quad (2.132)$$

Die mittlere effektive Fließgeschwindigkeit (Abstandsgeschwindigkeit)  $\mathbf{v}_a$  ergibt sich in Abhängigkeit von der Filtergeschwindigkeit  $\mathbf{v}$  und der effektiven Porosität  $\Phi$  zu:

$$\mathbf{v}_a = \frac{\mathbf{v}}{\Phi}. \quad (2.133)$$

Der Durchlässigkeitstensor  $\mathbf{K}_0$  (*Darcy*-Permeabilität) läßt sich aufteilen in:

$$\mathbf{K}_0 = \mathbf{K} \cdot \frac{\varrho \mathbf{g}}{\mu} = \mathbf{K} \cdot \frac{\mathbf{g}}{\nu}. \quad (2.134)$$

Hierbei stellt  $\mathbf{K}$  den Permeabilitätstensor als reine Kenngröße des Grundwasserleiters dar.

### 2.4.3 Erweiterung des Fließgesetzes für Mehrphasenströmungen

Eine große Anzahl Versuche zu Mehrphasenvorgängen, zusammengefaßt von Scheidegger (1974) [112], hat gezeigt, daß die Filtergeschwindigkeit für jede Phase in porösen Medien mit dem erweiterten *Darcy*-Gesetz beschrieben werden kann:

$$\mathbf{v}_\alpha = -\frac{1}{\mu_\alpha} \mathbf{K}_\alpha \cdot (\mathbf{grad} p_\alpha - \varrho_\alpha \mathbf{g}) \quad (2.135)$$

mit

$$\mathbf{g} = \begin{bmatrix} 0 \\ 0 \\ -g \end{bmatrix}. \quad (2.136)$$

Durch Definition der relativen Permeabilität  $k_{r\alpha}$  wird die Permeabilität für die Phase  $\alpha$

$$\mathbf{K}_{0\alpha} = k_{r\alpha} \mathbf{K} \quad (2.137)$$

mit der fluidunabhängigen Permeabilität in Beziehung gesetzt. Die relative Permeabilität ergibt sich dabei in Abhängigkeit von den Sättigungsgraden der einzelnen Phasen mit:

$$0 \leq \sum_{\alpha=1}^{n_{phas}} k_{r\alpha}(S_\alpha) \leq 1. \quad (2.138)$$

Das erweiterte Mehrphasen–*Darcy*–Gesetz kann damit formuliert werden zu:

$$\mathbf{v}_\alpha = -\frac{k_{r\alpha}}{\mu_\alpha} \mathbf{K} \cdot (\mathbf{grad} p_\alpha - \varrho_\alpha \mathbf{g}), \quad (2.139)$$

wobei  $\frac{k_{r\alpha}}{\mu_\alpha} = \lambda_\alpha$  als Mobilität bezeichnet wird.

Nach Einsetzen des Fließgesetzes (2.139) in die Kontinuitäts-Gleichung (2.125) erhält man das Mehrphasenströmungsdifferentialgleichungssystem

$$\frac{\partial}{\partial t}(\Phi \varrho_\alpha S_\alpha) = \operatorname{div} \left\{ k_{r\alpha} \frac{\varrho_\alpha}{\mu_\alpha} \mathbf{K} \cdot (\mathbf{grad} p_\alpha - \varrho_\alpha \mathbf{g}) \right\} + \varrho_\alpha q_\alpha, \quad (2.140)$$

das durch die Nebenbedingungen

$$\sum_{\alpha=1}^{n_{phas}} S_\alpha = 1 \quad (2.141)$$

und

$$p_{c\psi\alpha} = p_\psi - p_\alpha = f(S_1, \dots, S_n); \quad \psi = 1, 2, \dots, n_{phas}; \quad \psi \neq \alpha \quad (2.142)$$

ergänzt wird.

Der Kapillardruck  $p_{c\psi\alpha}$  zwischen den einzelnen Phasen kann dabei in Abhängigkeit von den Sättigungsgraden  $(S_1, \dots, S_n)$  ermittelt werden (s. Kap. 2.2).

Die Gleichung (2.140) stellt in Zusammenhang mit den Nebenbedingungen (2.141) und (2.142) ein gekoppeltes dynamisches Differentialgleichungssystem dar, das die simultane Bewegung zweier oder mehrerer nichtmischbarer Fluide in einem ungesättigten oder gesättigten porösen Medium beschreibt. Das Gleichungssystem zeigt durch die nichtlineare Abhängigkeit der Sättigungsgrade von den jeweiligen Kapillardrücken sowie der relativen Permeabilitäten von den Sättigungsgraden ein stark nichtlineares Verhalten.

#### 2.4.4 Numerische Diskretisierung

Die integrale Form der Mehrphasendifferentialgleichung (2.140) ist

$$\int_{\Omega} \frac{\partial(\phi \varrho_\alpha S_\alpha)}{\partial t} dx = \int_{\Omega} \operatorname{div} [\varrho_\alpha \lambda_\alpha \mathbf{K} (\mathbf{grad} p_\alpha - \varrho_\alpha \mathbf{g})] dx + \int_{\Omega} q_\alpha dx, \quad \alpha \in \{w, n, g\}. \quad (2.143)$$

Bei Anwendung der Methode der gewichteten Residuen erhält man die allgemeine schwache Formulierung:

$$\int_{\Omega} W_i \frac{\partial(\phi \varrho_{\alpha} \tilde{S}_{\alpha})}{\partial t} dx = \int_{\Omega} W_i \operatorname{div} [\varrho_{\alpha} \lambda_{\alpha} \mathbf{K} (\mathbf{grad} \tilde{p}_{\alpha} - \varrho_{\alpha} g)] dx + \int_{\Omega} W_i q_{\alpha} dx \quad ,$$

$$\alpha \in \{w, n, g\} \quad , \quad (2.144)$$

wobei  $\tilde{p}_{\alpha} = \sum_i p_{\alpha i} N_i$  und  $\tilde{S}_{\alpha} = \sum_i S_{\alpha i} N_i$  die stückweise (bi-)linearen Approximationen für die Phasendrucke  $p_{\alpha}$  und die Phasensättigungen  $S_{\alpha}$  sind.

Bei dieser Methode stellen die Ansatzfunktionen  $N_i$  die Wichtungsfunktionen  $W_i$  dar. Für die numerische Simulation wird die Finite-Volumen-Methode (Box-Schema) verwendet. Die entsprechenden Wichtungsfunktionen werden wie folgt definiert:

$$W_i = \begin{cases} 1 & \text{in Box (Kontrollvolumen) } B_i \\ 0 & \text{sonst} \end{cases} \quad (2.145)$$

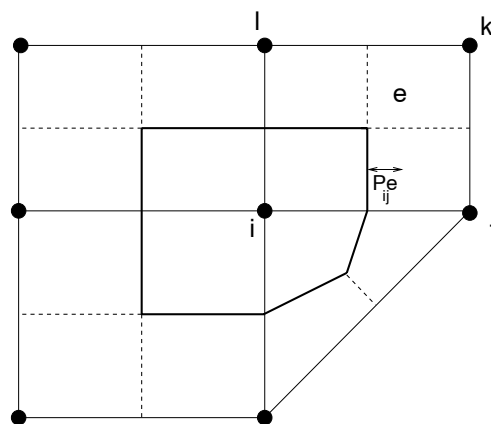


Abbildung 2.26: Box-Diskretisierung

Die Boxen bzw. Kontrollvolumina werden folgendermaßen konstruiert: Ihre Berandungen ergeben sich durch die Verbindungslinien zwischen Elementschwerpunkten und Seitenmittelpunkten (s. Abb. 2.26).

Die  $n_{kno}$  linear unabhängigen Ansatzfunktionen  $N_i$  werden so gewählt, daß die zu bestimmenden Knotenfreiwerte gerade den jeweiligen Werten der Näherungslösung an den Knoten entsprechen und gleichzeitig die Randbedingungen einhalten.

Die Ansatzfunktionen  $N_i$  und die Wichtungsfunktion  $W_i$  genügen der *Lagrangeschen* Interpolationsbedingung

$$N_i(x_j) = W_i(x_j) = \begin{cases} 1 & \text{für } i = j \\ 0 & \text{für } i \neq j \end{cases} \quad i, j = 1, \dots, n_{kno} \quad . \quad (2.146)$$

Hierbei ist  $x_j$  die räumliche Koordinate des Knotens  $j$ .

Bei Anwendung des *Green-Gaußschen* Integralsatzes auf den zweiten Term in Gleichung (2.144) und der Definition (2.145) der Wichtungsfunktionen erhält man

$$\int_{B_i} \frac{\partial(\phi \varrho_\alpha \tilde{S}_\alpha)}{\partial t} dx = \int_{\partial B_i} [\varrho_\alpha \lambda_\alpha \mathbf{K}(\mathbf{grad} \tilde{p}_\alpha - \varrho_\alpha g)] \cdot \vec{n} ds + \int_{B_i} q_\alpha dx \quad , \quad (2.147)$$

$$\alpha \in \{w, n, g\} \quad ,$$

wobei  $\vec{n}$  der nach außen gerichtete Einheitsnormalenvektor ist.

Die diskreten Flüsse zwischen den Boxen werden durch die Randintegrale ausgedrückt. Diese stellen die Grundlage zur konservativen Diskretisierung dar.

Verwendet man die implizite *Euler-Zeitdiskretisierung* und *mass lumping* des Speicherterms (erster Term in Gleichung (2.147)), so wird die diskrete Formulierung wie im folgenden geschrieben:

$$\frac{|B_i|}{\Delta t} \{ [\phi \varrho_\alpha S_\alpha]_i^{t+\Delta t} - [\phi \varrho_\alpha S_\alpha]_i^t \} - \sum_{j \in \eta_i} (\varrho_\alpha \lambda_\alpha)_{ups(i,j)} \gamma_{\alpha ij} - |B_i| q_{\alpha i} = 0 \quad , \quad (2.148)$$

$$\alpha \in \{w, n, g\}$$

wobei  $\eta_i$  die Menge aller Nachbarknoten zu Knoten  $i$  ist, d.h. alle Knoten mit einer Randfläche zu Box  $B_i$ . Die Randintegrale in Gleichung (2.147) werden mit Hilfe der Mittelpunkregel auf den einzelnen linearen Randsegmenten für die einzelnen Elemente numerisch berechnet. Aus Stabilitätsgründen werden Dichte und Mobilität am Oberstromknoten ausgewertet. Somit ergibt sich eine diskretisierte Form der Randintegrale als ein Produkt der Oberstromwerte und des Transmissivitätsterms:

$$\gamma_{\alpha ij} = - \sum_{e: i, j \in e} [\mathbf{K}(\mathbf{grad} \tilde{p}_\alpha - \varrho_\alpha^{mass} g)]_{|x=P_{ij}^e} \cdot \vec{n}(l_{ij}^e) A(l_{ij}^e) \quad , \quad (2.149)$$

$$ups(i, j) = \begin{cases} i & \text{für } \gamma_{\alpha ij} \geq 0 \\ j & \text{für } \gamma_{\alpha ij} < 0 \end{cases} \quad . \quad (2.150)$$

$\vec{n}(l_{ij}^e)$  ist der bezüglich Box  $i$  nach außen (und bzgl. Box  $j$  nach innen) gerichtete Einheitsnormalvektor in Element  $e$  (Element  $e$  hat die Knoten  $i, j, k, l$  und besetzt vier Sub-Kontrollvolumina, s. Abb. 2.26).  $P_{ij}^e$  stellt den räumlichen Mittelpunkt des Randsegmentes zwischen den Boxen  $i$  und  $j$  innerhalb von Element  $e$  dar.  $A(l_{ij}^e)$  ist die Fläche des Randsegmentes. Die Oberstromwichten (*upwinding*) des Sättigungsbedingungsterms sind erforderlich, um eine stabile Lösung zu erhalten, insbesondere im Fall konvektions-dominiertes Prozesse.

Wegen der stark nichtlinearen Terme ( $k_r - S_w$ -Beziehung,  $p_c - S_w$ -Beziehung) in der Differentialgleichung wird zur Linearisierung das *Newton-Raphson*-Verfahren verwendet (s. Helmig (1994) [49], (1997)[48], Bastian et al. (1996)[10]).

# 3 Grundlage der Hysterese

Bei der Remobilisierung eines Schadstoffes (NAPL) im Untergrund durch z.B. Einwirkung eines Wassergradienten oder Änderung der Grundwasserspiegellage treten zwei unterschiedliche Verdrängungsprozesse auf: Drainage (nichtbenetzende Phase verdrängt benetzende Phase) und Imbibition (benetzende Phase verdrängt nichtbenetzende Phase). Die Verläufe der Kurven der konstitutiven Beziehungen bei Drainage unterscheiden sich von den Verläufen bei Imbibition. Dieses Phänomen wird Hysterese genannt.

Für die Vorhersage einer Schadstoff-Verteilung im Untergrund wird die numerische Modellierung verwendet, anhand deren Ergebnisse verschiedene Maßnahmen für die Sanierung des Bodens beurteilt werden können. Ein Fehler bei der Vorhersage stellt eine Gefährdung des Grundwassers dar, da z. B. die residuale Sättigung oder die Verteilung des Schadstoffes falsch angenommen werden und somit die Gefahr der Langzeitkontamination besteht. In verschiedenen wissenschaftlichen Arbeiten wurde festgestellt, daß die Nichtberücksichtigung der Hysterese in den konstitutiven Beziehungen bei der numerischen Simulation der Mehrphasenströmung einen Fehler in der Phasenverteilung zur Folge hat [62], [81].

In diesem Kapitel werden die physikalischen Ursachen der Hysterese gezeigt sowie verschiedene theoretische und empirische Ansätze diskutiert.

Ein Ziel dieser Arbeit ist es, Hysterese-Effekte numerisch erfassen zu können. Deshalb wurde der Ansatz nach Parker und Lenhard (1987)[102] gewählt und in das Modell *MUFTE-UG* implementiert.

## 3.1 Hysterese auf der Mikroskala

Es gibt drei verschiedene Phänomene als Ursache für Kapillardruck-Hysterese bei Mehrphasenströmungen. Der Kapillardruck ist vom Porenradius  $r$ , dem Kontaktwinkel  $\theta$  und der Grenzflächenspannung  $\sigma$  abhängig (s. Gl. (2.5)). Bezüglich dieser Abhängigkeit kann man die drei Phänomene wie folgt unterteilen:

### Kontaktwinkel

Abb. 3.1 zeigt, daß der Kontaktwinkel  $\theta$  eines bestimmten Systems von der Art des Verdrängungsprozesses abhängig ist. Wenn die benetzende Phase die nichtbenetzende Phase verdrängt (Imbibition), ist  $\theta$  größer im Vergleich zum umgekehrten Fall (Drainage). Ein Beispiel dafür ist der sogenannte *Regentropfeneffekt* (s. Abb. 3.1).

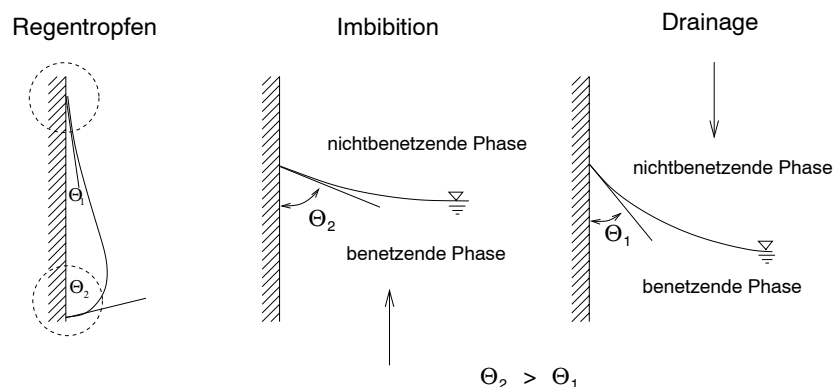


Abbildung 3.1: Kontaktwinkel bei Drainage und Imbibition

### Inkottle-Effekt

Je nach Porengeometrie kann bei gleichem Kapillardruck der Volumenanteil der benetzenden Phase (makroskalig: Sättigung) vom Strömungsvorgang – Drainage oder Imbibition – abhängig sein (s. Abb. 3.2).

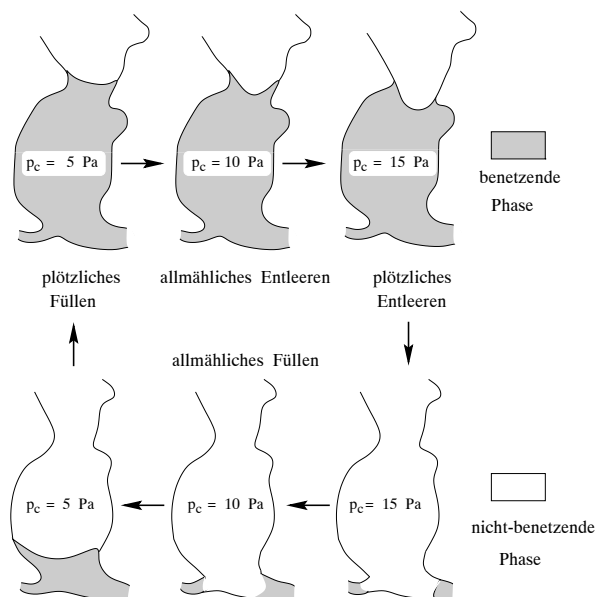


Abbildung 3.2: Drainage und Imbibition des Porensystems nach Miller (1956)[89]

### Fluideinschließung

Wenn die benetzende Phase die nichtbenetzende Phase verdrängt, wird ein Anteil der nichtbenetzenden Phase durch Einwirkung von Kapillarkräften in der benetzenden Phase eingeschlossen. Diese Fluideinschließung wird durch zwei Mechanismen verursacht, die in der Literatur als *snap-off* und *by-passing* bezeichnet werden [22].

Wenn die nichtbenetzende Phase von der benetzenden Phase verdrängt wird, tritt der *snap-off*-Effekt ein, der einen Tropfen in dem Porenraum zurückläßt. Dieser Effekt hängt von der Benetzungsfähigkeit und dem Verhältnis von Porenraum- zu Porenöffnungsdurchmesser ab [126] (s. Abb. 3.3).

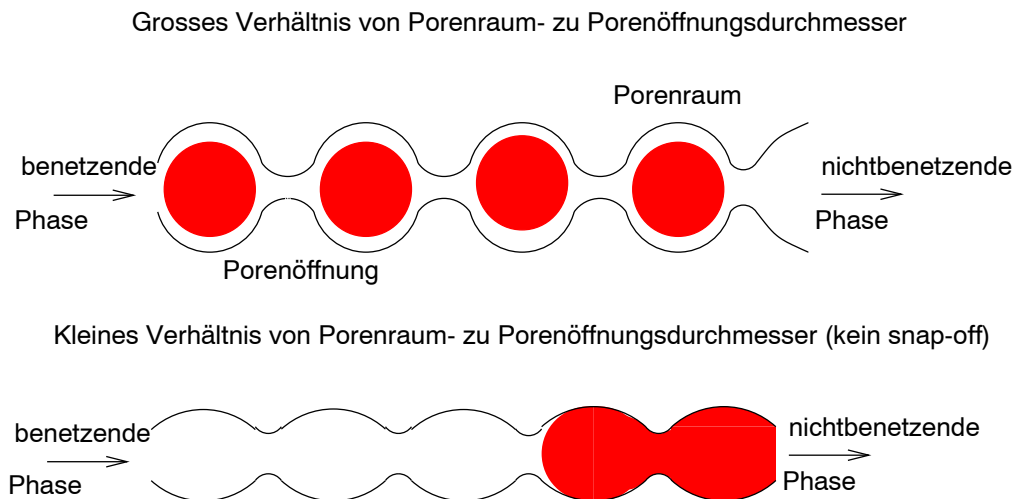


Abbildung 3.3: Einfluß der Porengeometrie auf die Fluideinschließung (*snap-off*) nach [22]

Um diesen Mechanismus mikroskalig zu beschreiben, wird das Doppelporen-Modell (*Pore double*) von Moore und Slobod [91] (s. Abb. 3.4) verwendet. Das Doppelporen-Modell besteht aus einem Rohr, das sich in zwei Röhre unterschiedlich großer Durchmesser verzweigt und anschließend wieder vereinigt. Moore et al. haben gezeigt, daß die Fluideinschließung bei diesem Modell hauptsächlich von der Kapillarzahl  $N_c$  (Verhältnis der Druckgradienten zu den Kapillarkräften) und dem Heterogenitätsfaktor  $\beta$  ( $\beta = R_1/R_2$ ) abhängig ist. Bei dominierenden Kapillarkräften erreicht die Grenzfläche zwischen benetzender und nichtbenetzender Phase den Austritt des Rohres in der kleineren Röhre schneller als in der größeren Röhre, so daß die nichtbenetzende Phase in der größeren Röhre eingeschlossen wird.



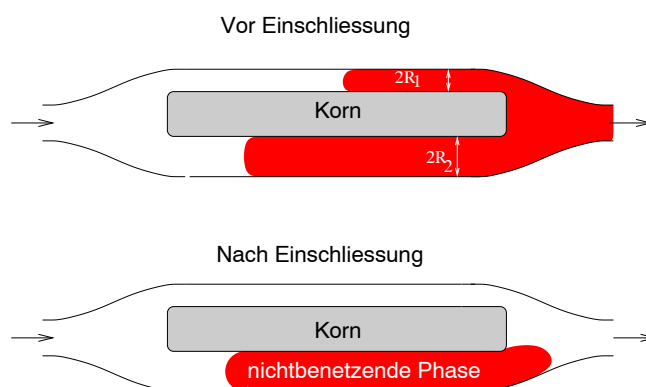


Abbildung 3.4: Einfluß der Porengeometrie auf die Fluideinschließung (*by-passing*) nach [22]

## 3.2 Hysterese auf der Mesoskala (Zweiphasensystem)

Im folgenden werden anhand Abbildung 3.5 einige Begriffe erläutert, um die Hysterese in der Kapillardruck–Sättigungs-Beziehung zu erklären. Die Hysterese der relative Permeabilität–Sättigungs-Beziehung wird aus der Kapillardruck–Sättigungs-Beziehung abgeleitet und ist in Abb. 3.6 dargestellt.

- *Hauptdrainagekurve (Main Drainage Curve MDC)*

Das REV ist zuerst vollständig mit der benetzenden Phase gefüllt, wobei  $p_c = 0$  ist. Die nichtbenetzende Phase verdrängt die benetzende Phase aus dem REV, die Kapillardruck–Sättigungs-Funktion geht gegen unendlich. Die MDC ist in Abb. 3.5 durch die Kurve 1  $\rightarrow$  2 dargestellt.

- *Hauptimbibitionskurve (Main Imbibition Curve MIC)*

Das REV ist nach einem Drainageprozeß vollständig mit der nichtbenetzenden Phase gefüllt. Die benetzende Phase ist in residualer Sättigung und der Kapillardruck ist gemäß  $p_c - S_w$  - Beziehung unendlich groß. Die benetzende Phase verdrängt die nichtbenetzende Phase aus dem REV, und der Kapillardruck nimmt wieder bis  $p_c = 0$  ab. Die Sättigung der benetzenden Phase nach einer Imbibition entspricht nicht der Sättigung am Anfang der MDC. Der Unterschied entspricht der residualen Sättigung der nichtbenetzenden Phase, die in der benetzenden Phase eingeschlossen wird (*fluid entrapment*). Die Kurve 2  $\rightarrow$  3 in Abb. 3.5 repräsentiert die MIC.

- *Erste Sekundärimbibitionskurve (Primary Imbibition Scanning Curve PISC)*

Die Kurve beginnt bei einer Sättigung der benetzenden Phase auf der MDC, bei der ein Umkehrvorgang von Drainage zu Imbibition stattfindet. Die Kurve endet bei  $p_c = 0$ , wobei die Sättigung der benetzenden Phase zwischen den Sättigungen am Anfang der MDC und am Ende der MIC liegt. Kurve 4  $\rightarrow$  5 in Abb. 3.5 zeigt die PISC.

- *Erste Sekundärdrainagekurve (Primary Drainage Scanning Curve PDSC)*

Die Kurve beginnt am Ende der PISC (Punkt 5, s. Abb. 3.5) und endet beim Anfang der PISC auf der MDC (Punkt 4, s. Abb. 3.5). Daraus wird ersichtlich, daß PISC und PDSC eine geschlossene Schleife bilden. Kurve 5  $\rightarrow$  4 in Abb. 3.5 stellt die PDSC dar.

- *Zweite Sekundärimbibitionskurve (First Scanning Imbibition Curve FSIC)*

Die Kurve beginnt bei einem Umkehrvorgang von Drainage zu Imbibition bei einer bestimmten Sättigung auf PDSC (Punkt 6, s. Abb. 3.5) und endet am Anfang der PDSC (Punkt 5, s. Abb. 3.5). Kurve 6  $\rightarrow$  5 in Abb. 3.5 zeigt die FSIC.

- *Zweite Sekundärdrainagekurve (First Scanning Drainage Curve FSDC)*

Die Kurve beginnt bei einer Umkehrung von Imbibition zu Drainage bei einer bestimmten Sättigung auf der FSIC (Punkt 7, s. Abb. 3.5) und endet am Anfang der FSIC (Punkt 6, s. Abb. 3.5). Kurve 7  $\rightarrow$  6 in Abb. 3.5 stellt die FSDC dar.

Jede weitere Umkehrung von Drainage zu Imbibition bzw. von Imbibition zu Drainage erzeugt weitere Sekundärkurven.

- *Pumping-Effekt*

Alle zuvor beschriebenen Sekundärkurven bilden geschlossene Schleifen (s. Abb. 3.5). Abb. 3.7 zeigt dagegen den Verlauf einer Hystereseschleife, die aus PISC und FSDC besteht, wobei die beiden Kurven keine geschlossene Schleife bilden. Die FSDC geht nicht durch den Anfangspunkt der PISC.

Dieses Verhalten wird durch Meßfehler in den  $p_c - S_w$ -Daten hervorgerufen und als *Pumping-Effekt* bezeichnet [58]. Auch bei der Verwendung bestimmter Hysterese-Ansätze, z. B. von Scott (1983) [116], tritt dieser Fehler auf.

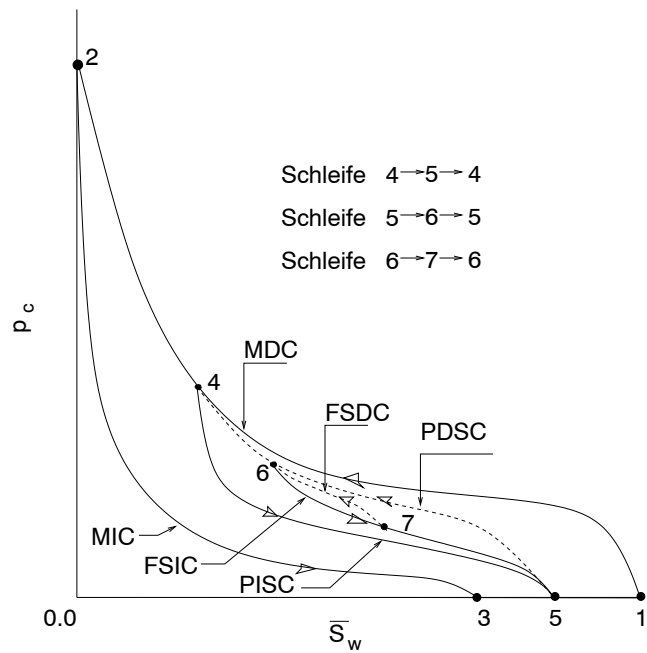


Abbildung 3.5: Kapillardruck-Sättigungs-Hysterese

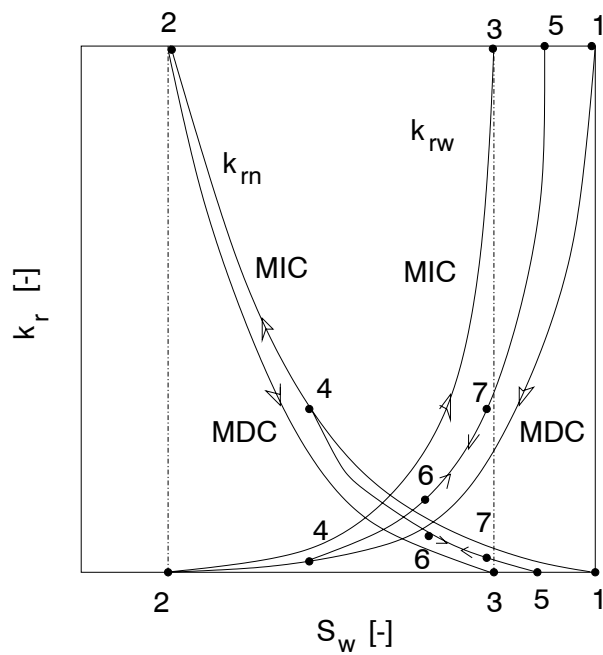


Abbildung 3.6: Relative Permeabilität-Sättigungs-Hysterese

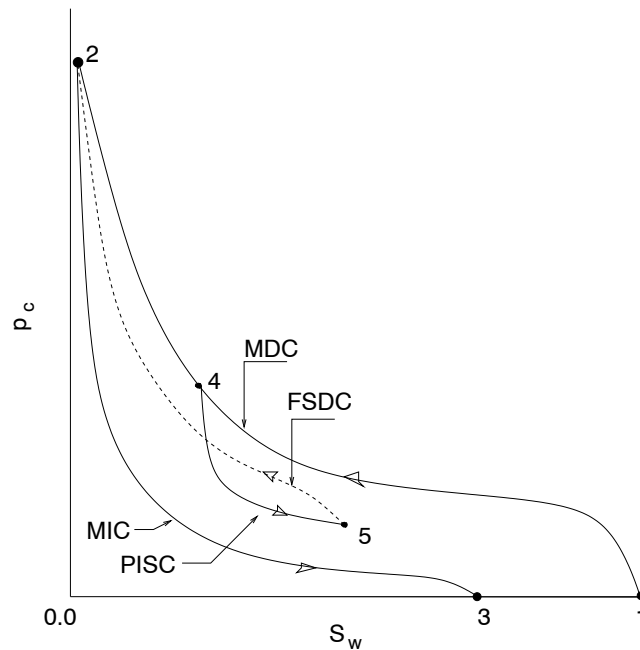


Abbildung 3.7: *Pumping*-Effekt bei der Kapillardruck-Sättigungs-Hysterese

### 3.2.1 Kapillardruck-Sättigungs-Hysterese

Viele theoretische sowie empirische Ansätze wurden entwickelt, um die Zweiphasenhysterese zwischen der Hauptdrainage- und Hauptimbibitionskurve zu beschreiben [93], [96], [116], [68], [102], [118].

Im folgenden wird als Beispiel für die theoretischen Ansätze die Vorgehensweise von Mualem (1984) [96] gezeigt. Als Beispiel für die empirischen Ansätze wird auf die Methode von Scott et al. (1983) sowie auf die darauf aufbauenden Ansätze von Kool und Parker (1987)[68] sowie von Parker und Lenhard (1987)[102] eingegangen.

#### 3.2.1.1 Modelle von Mualem

Ausgehend von zwei Modellkonzepten hat Mualem verschiedene Ansätze entwickelt, um die Kapillardruckhysterese analytisch zu beschreiben (1974) [93], (1984) [96]. Zu den beiden Konzepten gehört zum einen das unabhängige und zum anderen das abhängige Gebietskonzept (*dependent and independent domain*). Bei beiden Konzepten erhält man die

Sekundärdrainagekurven durch eine Skalierung der Hauptdrainagekurve. Das Vorgehen bei Imbibition ergibt sich analog.

Im **unabhängigen** Gebietskonzept wird angenommen, daß das poröse Medium aus Poren besteht, deren Drainage oder Imbibition unabhängig von dem Zustand der Nachbarporen ist. Beispiele für dieses Konzept sind in den Modellen I, II und III von Mualem (1973 [92], 1974 [93] und 1976 [94]) zu finden.

Bei dem **abhängigen** Gebietskonzept wird das Verhalten jeder Pore bei Drainage oder Imbibition von ihren Nachbarporen beeinflusst (Blockierungseffekt). Diese Sichtweise entspricht eher der Realität als das unabhängige Gebietskonzept. Der Einfluß der Nachbarporen wird durch den *domain-dependent*-Faktor  $P_d$  erfaßt.  $P_d$  ist eine makroskalige Variable, die von der Sättigung abhängig ist. Mualem hat folgenden Skalierungsansatz für die sekundären Imbibitionskurven entwickelt:

$$S_w(p_c) = {}^{di}\Delta S_w + P_d({}^{di}\Delta S_w)[S_{w_{max}} - {}^i S_w({}^{di}\Delta p_c)] \cdot [{}^i S_w(p_c) - {}^i S_w({}^{di}\Delta p_c)] \quad (3.1)$$

${}^{di}\Delta S_w$  bzw.  ${}^{di}\Delta p_c$  entspricht der Sättigung der benetzenden Phase bzw. dem Kapillardruck bei der vorangehenden Umkehrung von Drainage zu Imbibition.  ${}^i S_w(p_c)$  ist die Sättigung der benetzenden Phase auf der Hauptimbibitionskurve und  $S_{w_{max}}$  die maximale Sättigung der benetzenden Phase. Für  $P_d({}^{di}\Delta S_w)$  gilt:

$$P_d({}^{di}\Delta S_w) = S_{w_{max}} \frac{[S_{w_{max}} - {}^{di}\Delta S_w(p_c)]}{[S_{w_{max}} - {}^i S_w(p_c)]^2} \quad (3.2)$$

Der Skalierungsansatz für die sekundären Drainagekurven lautet:

$$S_w(p_c) = {}^{id}\Delta S_w - P_d(S_w)[S_{w_{max}} - {}^i S_w(p_c)] \cdot [{}^{id}\Delta S_w - {}^i S_w(p_c)] \quad (3.3)$$

mit:

$$P_d(S_w) = S_{w_{max}} \frac{[S_{w_{max}} - {}^d S_w(p_c)]}{[S_{w_{max}} - {}^i S_w(p_c)]^2} \quad (3.4)$$

${}^{id}\Delta S_w$  ist die Sättigung der benetzenden Phase bei der vorangehenden Umkehrung von Imbibition zu Drainage. Bei Drainage ist  $P_d$  von der unbekanntenen Sättigung  $S_w$  abhängig, bei Imbibition ist  $P_d$  von der bekannten Sättigung  ${}^{di}\Delta S_w$  abhängig.

### 3.2.1.2 Modell von Scott et al.

Das Modell von Scott et al. (1983)[116] stellt die Basis für viele weitere empirische Ansätze dar. Bei diesem Modell erhält man die Sekundärdrainagekurve durch eine Skalierung der Hauptdrainagekurve (MDC) und entsprechend die Sekundärimbibitionskurve aus der Hauptimbibitionskurve (MIC). Die Skalierung wird mit Hilfe der effektiven Sättigung der benetzenden Phase  $\bar{S}_w$  durchgeführt. Die effektive Sättigung wird definiert als:

$$\bar{S}_w = \frac{S_w - S_{wr}}{S_{w_{max}} - S_{wr}} \quad . \quad (3.5)$$

Hierbei ist  $S_{wr}$  die residuale Sättigung der benetzenden Phase und  $S_{w_{max}}$  die maximale Sättigung der benetzenden Phase.

Die Sekundärdrainagekurven erhält man, indem  $S_{w_{max}}$  in Gl. (3.5) durch  $S_{w_{max}}^*$  ersetzt wird.  $S_{w_{max}}^*$  berechnet sich durch:

$$S_{w_{max}}^* = \frac{{}^{id}\Delta S_w - S_{wr}[1 - {}^d\bar{S}_w({}^{id}\Delta p_c)]}{{}^d\bar{S}_w({}^{id}\Delta p_c)} \quad . \quad (3.6)$$

${}^{id}\Delta S_w$  und  ${}^{id}\Delta p_c$  sind die Sättigung und der Kapillardruck bei dem Umkehrpunkt von Imbibition zu Drainage.  ${}^d\bar{S}_w({}^{id}\Delta p_c)$  ist die Sättigung auf der MDC bei  ${}^{id}\Delta p_c$ .

Die Sekundärimbibitionskurven werden in ähnlicher Weise erhalten, indem  $S_{wr}$  in Gl. (3.5) durch  $S_{wr}^*$  ersetzt wird.  $S_{wr}^*$  ergibt sich durch:

$$S_{wr}^* = \frac{{}^{di}\Delta S_w - S_{w_{max}} {}^i\bar{S}_w({}^{di}\Delta p_c)}{1 - {}^i\bar{S}_w({}^{di}\Delta p_c)} \quad . \quad (3.7)$$

$d$  bzw.  $i$  beschreibt den Fall Drainage bzw. Imbibition.

### 3.2.1.3 Modell von Kool und Parker

Um die sekundären Kurven der Drainage bzw. Imbibition zu erhalten, verwenden Kool und Parker (1987)[68] das Modell von Scott et al. (s. Gl. (3.6) bzw. (3.7)). Für die Beschreibung der MDC bzw. MIC haben Kool und Parker das *van Genuchten*-Modell verwendet. Die MDC wird beschrieben durch:

$${}^d\bar{S}_w = \frac{S_w - S_{wr}}{S_{w_{max}} - S_{wr}} = \left[1 + ({}^d\alpha p_c)^{dn}\right]^{-dm} \quad . \quad (3.8)$$

Für die MIC gilt:

$${}^i\bar{S}_w = \frac{S_w - S_{wr}}{S_{w_{max}} - S_{wr}} = [1 + (i\alpha p_c)^n]^{-im} . \quad (3.9)$$

$\alpha$  und  $n$  sind die *van Genuchten*-Parameter mit  $m = 1 - 1/n$ .

Sie haben als Erweiterung des Modells von Scott et al. die Phaseneinschließung mitberücksichtigt, wobei sie die Theorie von Land (1968)[76] ansetzten. Eine Beschreibung dieser Theorie wird im folgenden bei dem Modell von Parker und Lenhard (1987)[102] gegeben. Kool und Parker haben das Modell von Scott et al. diskutiert und fanden heraus, daß dieser Ansatz zu einem *Pumping*-Effekt führt.

### 3.2.1.4 Modell von Parker und Lenhard

Parker und Lenhard (1987)[102] haben einen empirischen Skalierungsansatz entwickelt, um die Kapillardruck-Sättigungs-Hysterese mit Berücksichtigung der Phaseneinschließung zu beschreiben. Der Ansatz ähnelt der Methode von Kool und Parker (1987)[68], jedoch bilden die  $p_c - S_w$ -Kurven bei Parker und Lenhard geschlossene Schleifen (kein *Pumping*-Effekt).

#### Einschließung der nichtbenetzenden Phase (*Fluid entrapment*)

Bei dem Ansatz von Parker und Lenhard ist zwischen der effektiven (*effective*) und der scheinbaren (*apparent*) Sättigung der benetzenden Phase zu unterscheiden. Die effektive Sättigung der benetzenden Phase  $\bar{S}_w$  beschreibt den mobilen kontinuierlichen Anteil dieser Phase. Die scheinbare Sättigung  $\bar{\bar{S}}_w$  ist die Summe aus  $\bar{S}_w$  und effektiver nichtmobiler Sättigung der nichtbenetzenden Phase  $\bar{S}_{nt}$ , die von der benetzenden Phase eingeschlossen ist:

$$\bar{\bar{S}}_w = \bar{S}_w + \bar{S}_{nt} , \quad (3.10)$$

wobei

$$\bar{S}_w = \frac{S_w - S_{wr}}{1 - S_{wr}} , \quad (3.11)$$

$$\bar{S}_{nt} = \frac{S_{nt}}{1 - S_{wr}} . \quad (3.12)$$

$S_w$  ist die Sättigung der benetzenden Phase,  $S_{nt}$  die Sättigung der eingeschlossenen nichtbenetzenden Phase und  $S_{wr}$  die residuale Sättigung der benetzenden Phase. Land

(1968)[76] hat eine empirische Funktion zur Ermittlung von  $\bar{S}_{nt}$  während eines Imbibitionsvorganges entwickelt. Durch die experimentell ermittelten Daten wurde festgestellt, daß die effektive residuale Sättigung der nichtbenetzenden Phase  $\bar{S}_{nr(i)}$  nach einem Imbibitionsvorgang (z.B. Kurve  $i \rightarrow i^*$  in Abb. 3.8) mit der effektiven Sättigung der nichtbenetzenden Phase zu Beginn des betrachteten Imbibitionsvorganges (z.B.  $(1 - \bar{S}_{w(i)})$  bei Punkt  $i$ , s. Abb. 3.8) zunimmt. Für eine effektive Sättigung der nichtbenetzenden Phase von  $1 - \bar{S}_{wr}$  (Punkt 2, Beginn der Hauptimbibitionskurve  $2 \rightarrow 3$ ) erreicht deren effektive residuale Sättigung den maximalen Wert  $\bar{S}_{nr}$  (s. Abb. 3.8). Land hat folgende Gleichung vorgeschlagen, um  $\bar{S}_{nr(i)}$  nach einem Imbibitionsvorgang (bis  $p_c = 0$ ), der bei einer effektiven Sättigung der nichtbenetzenden Phase von  $1 - \bar{S}_{w(i)}$  beginnt (s. Abb. 3.8), zu berechnen:

$$\bar{S}_{nr(i)} = \frac{1 - \bar{S}_{w(i)}}{1 + R(1 - \bar{S}_{w(i)})} , \quad (3.13)$$

$$R = \frac{1}{\bar{S}_{nr}} - 1 , \quad (3.14)$$

$$\bar{S}_{nr} = \frac{S_{nr}}{1 - S_{wr}} . \quad (3.15)$$

Die effektive eingeschlossene Sättigung der nichtbenetzenden Phase  $\bar{S}_{nt(ij)}$  während eines Imbibitionsvorganges von  $i$  nach  $j$  ( $p_c > 0$ ) auf der Imbibitionskurve  $i \rightarrow i^*$  (s. Abb. 3.8) ergibt sich durch lineare Interpolation zu [102]:

$$\bar{S}_{nt(ij)} = \bar{S}_{nr(i)} \left[ \frac{\bar{S}_{w(j)} - \bar{S}_{w(i)}}{1 - \bar{S}_{w(i)}} \right] ; \quad \bar{S}_{w(j)} > \bar{S}_{w(i)} . \quad (3.16)$$

Diese Interpolation führt zu numerischen Problemen für Kapillardrücke nahe Null, außerdem wird dies dem nichtlinearen Verlauf von Gleichung (3.13) nicht konsequent gerecht [63]. Kaluarachchi und Parker (1992)[63] haben diese Nichtlinearität mitbetrachtet und entwickelten eine Gleichung zur Ermittlung von  $\bar{S}_{nt(ij)}$ .  $\bar{S}_{nt(ij)}$  wird als Differenz zwischen der residualen Sättigung der nichtbenetzenden Phase auf den Imbibitionskurven  $i \rightarrow i^*$  ( $\bar{S}_{nr(i)}$ ) und  $4 \rightarrow 5$  ( $\bar{S}_{nr(4)}$ ) ermittelt. Dabei entspricht Punkt 4 der scheinbaren Sättigung der benetzenden Phase ( $\bar{S}_{w(j)}$ ) bei der effektiven Sättigung am Punkt  $j$ :

$$\bar{S}_{nt(ij)} = \frac{1 - \bar{S}_{w(i)}}{1 + R(1 - \bar{S}_{w(i)})} - \frac{1 - \bar{S}_{w(j)}}{1 + R(1 - \bar{S}_{w(j)})} ; \quad \bar{S}_{w(j)} > \bar{S}_{w(i)} . \quad (3.17)$$



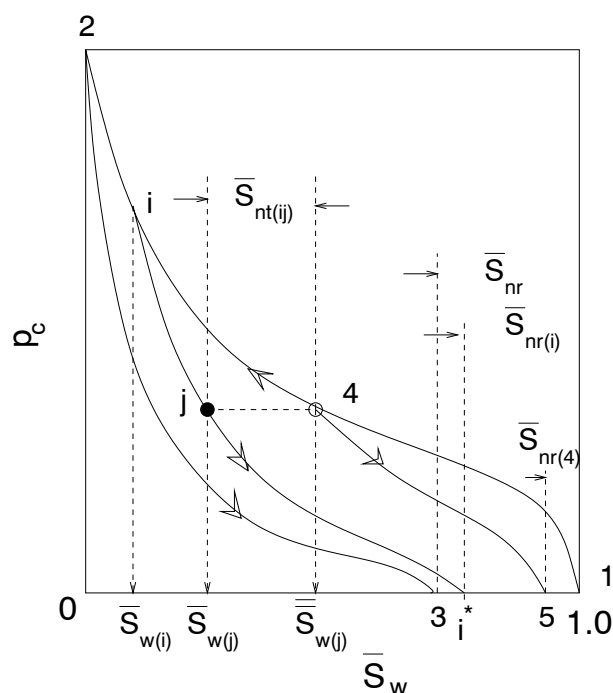
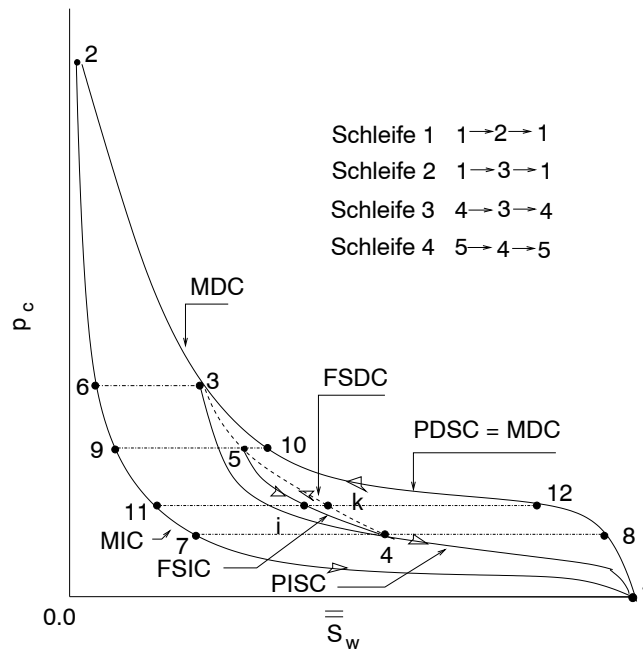


Abbildung 3.8:  $p_c - S_w$ -Hysterese unter Berücksichtigung der Phaseneinschließung [80], aufgetragen über  $\bar{S}_w$

### Kapillardruck-Sättigungs-Hysterese

Aufgrund der residualen Sättigung der nichtbenetzenden Phase  $S_{nr}$  bilden die Hauptdrainagekurve *MDC* und die Hauptimbibitionskurve *MIC* bezüglich der effektiven Sättigung keine geschlossene Schleife (s. Abb. 3.5), wohl aber in Bezug auf die scheinbare Sättigung (s. Abb. 3.9). Unter der Annahme, daß es keinen *Pumping*-Effekt gibt [58], bildet die  $p_c - \bar{S}_w$ -Hysterese geschlossene Schleifen (s. Abb. 3.9), wobei jede Schleife durch zwei Punkte beschrieben wird. Diese Punkte charakterisieren den Umkehrvorgang (Drainage-Imbibition oder Imbibition-Drainage). Z.B. wird Schleife 1 in Abb. 3.9 durch Punkt 1 und Punkt 2 beschrieben. Punkt 1 beschreibt die Umkehr von Imbibition zu Drainage und Punkt 2 entsprechend von Drainage zu Imbibition. Die Schleifen werden in der Weise durchgezählt, daß die Schleife, die aus *MDC* und *MIC* besteht, die Nummer 1 trägt, die Schleife aus *PSDC* und *PSIC* die Nummer 2, *FSDC* und *PSIC* die Nummer 3 und *FSDC* und *FSIC* die Nummer 4 usw. (s. Abb. 3.9). In der von Parker und Lenhard verwendeten *van Genuchten*-Kapillardruck-Sättigungs-Beziehung (s. Gl. 2.10) werden *MDC* und *MIC* durch die Parameter  $d_\alpha$ ,  $d_n$ ,  $dS_{wr}$  und  $dS_{nr}$  bzw.  $i_\alpha$ ,  $i_n$ ,  $iS_{wr}$  und  $iS_{nr}$  charakterisiert, wobei *d* bzw. *i* für Drainage bzw. Imbibition steht. Parker und Lenhard haben angenom-

Abbildung 3.9:  $p_c - \bar{S}_w$ -Hysterese

men, daß  $n$  und  $S_{wr}$  für Drainage- und Imbibitionsvorgang nicht variieren, jedoch  $\alpha$  für die Imbibitionskurve doppelt so groß wie für die Drainagekurve ist ( ${}^d\alpha = {}^i\alpha/2$ ).

Unter Verwendung der vorherigen Annahme und mit Verwendung der scheinbaren Sättigung der benetzenden Phase anstelle der effektiven Sättigung (so wird nur die *inkbottle*- sowie Kontaktwinkel-Hysterese nur berücksichtigt) kann man die Kapillardruck-Sättigungs-Beziehungen für die MDC und MIC nach van Genuchten, die in diesem Fall eine geschlossene Schleife bilden, angeben als:

$${}^d\bar{S}_w(p_c) = \left[ 1 + ({}^d\alpha p_c)^n \right]^{-m}, \quad (3.18)$$

$${}^i\bar{S}_w(p_c) = \left[ 1 + ({}^i\alpha p_c)^n \right]^{-m}, \quad (3.19)$$

wobei  $m = 1 - 1/n$  ist.

Parker und Lenhard haben unter Betrachtung der Hauptkurven und derjenigen Sättigung, bei der sich der Verdrängungsvorgang umkehrt (z.B. Punkt 3 in Abb. 3.9), die scheinbare Sättigung für beliebige Imbibitions- (z.B. Punkt  $i$ , s. Abb. 3.9) bzw. Drainagekurven (z.B. Punkt  $k$ , s. Abb. 3.9) bestimmt. Der skalierte Ansatz der Kapillardruck-Sättigungs-

Hysterese für die Imbibitionskurven lautet:

$$\bar{\bar{S}}_{w(i)}(p_c) = \frac{[{}^i\bar{\bar{S}}_w(p_c) - {}^i\bar{\bar{S}}_w({}^{id}p_c)]}{[{}^i\bar{\bar{S}}_w({}^{di}p_c) - {}^i\bar{\bar{S}}_w({}^{id}p_c)]} \cdot [{}^{di}\bar{\bar{S}}_w - {}^{id}\bar{\bar{S}}_w] + {}^{id}\bar{\bar{S}}_w \quad . \quad (3.20)$$

$\bar{\bar{S}}_{w(i)}(p_c)$  ist die scheinbare Sättigung der benetzenden Phase beispielsweise auf der FSIC  $5 \rightarrow 4$  am Punkt  $i$  (s. Abb. 3.9).  ${}^i\bar{\bar{S}}_w(p_c)$  entspricht der scheinbaren Sättigung für den zum Punkt  $i$  auf der MIC korrespondierenden Punkt 11 (s. Abb. 3.9).  ${}^{di}\bar{\bar{S}}_w$  bzw.  ${}^{id}\bar{\bar{S}}_w$  sind die scheinbaren Sättigungen der benetzenden Phase an den Wendepunkten der betrachteten Kurve (für Punkt  $i$  entspricht dies den Punkten 5 bzw. 4). Die zugehörigen scheinbaren Sättigungen auf der MIC sind  ${}^{di}\bar{\bar{S}}_w({}^{di}p_c)$  und  ${}^{id}\bar{\bar{S}}_w({}^{id}p_c)$  (Punkte 9 und 7, s. Abb. 3.9).

Der skalierte Ansatz für die Kapillardruck-Sättigungs-Hysterese der Drainagekurven wird bezüglich der scheinbaren Sättigung folgendermaßen formuliert (z.B. Punkt  $k$  in Abb. 3.9):

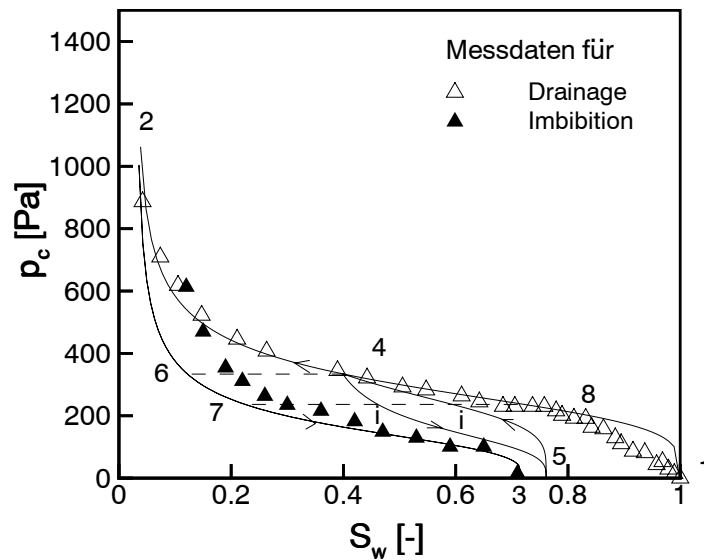
$$\bar{\bar{S}}_{w(k)}(p_c) = \frac{[{}^d\bar{\bar{S}}_w(p_c) - {}^d\bar{\bar{S}}_w({}^{di}p_c)]}{[{}^d\bar{\bar{S}}_w({}^{id}p_c) - {}^d\bar{\bar{S}}_w({}^{di}p_c)]} \cdot [{}^{id}\bar{\bar{S}}_w - {}^{di}\bar{\bar{S}}_w] + {}^{di}\bar{\bar{S}}_w \quad (3.21)$$

Die zu den scheinbaren Sättigungen an den Wendepunkten 4 und 5 (Schleife  $4 \rightarrow 5 \rightarrow 4$ , s. Abb. 3.9) bei gleichen  $p_c$  gehörenden scheinbaren Sättigungen auf der MDC sind  ${}^{id}\bar{\bar{S}}_w({}^{id}p_c)$  und  ${}^{di}\bar{\bar{S}}_w({}^{di}p_c)$  (Punkte 8 und 10, s. Abb. 3.9).

Abb. 3.10 und 3.11 zeigen die gemessenen Kapillardruck-Sättigungs-Daten des Hauptdrainage- und Hauptimbibitionsvorganges für den im großskaligen 2D-Experiment (VEGAS) verwendeten Grobsand. Beide Kurven bilden eine Schleife, die bezüglich der effektiven Sättigung nicht geschlossen ist (s. Abb. 3.10). Betrachtet man dagegen die scheinbare Sättigung anstelle der effektiven Sättigung, so bilden beide Kurven eine geschlossene Schleife (s. Abb. 3.11). Tabelle 3.1 zeigt die Fitting-Parameter nach van Genuchten für beide Kurven. In dieser Tabelle sind auch die Fitting-Parameter für den verwendeten Mittel- und Feinsand gegeben. In den Abb. 3.12, 3.13, 3.14 und 3.15 sind die entsprechenden Kurven dargestellt.

Tabelle 3.1: Fitting-Parameter nach van Genuchten für die verwendete Sande

Drainage (d)	$^d\alpha$ [1/Pa]	$^dn$ [-]	$^dS_{wr}$ [-]	$^dS_{nr}$ [-]
Grobsand	.0037	4.70	0.03	0.0
Mittelsand	.0011	5.00	0.15	0.0
Feinsand	.00045	7.34	0.18	0.0
Imbibition (i)	$^i\alpha$ [1/Pa]	$^in$ [-]	$^iS_{wr}$ [-]	$^iS_{nr}$ [-]
Grobsand	.0068	3.50	0.03	0.28
Mittelsand	.0015	4.50	0.15	0.21
Feinsand	.00069	4.96	0.18	0.13

Abbildung 3.10:  $p_c - \bar{S}_w$ -Hysterese für den Grobsand (aufgetragen über die effektive Sättigung)

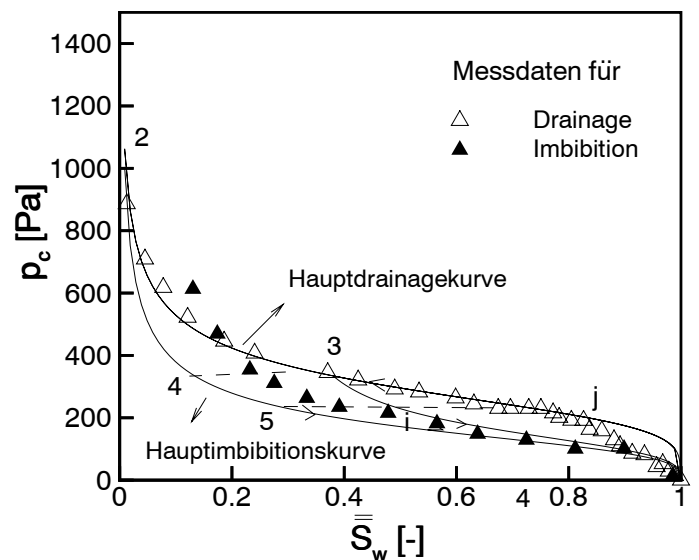


Abbildung 3.11:  $p_c - \bar{S}_w$ -Hysterese für den Grobsand (aufgetragen über die scheinbare Sättigung)

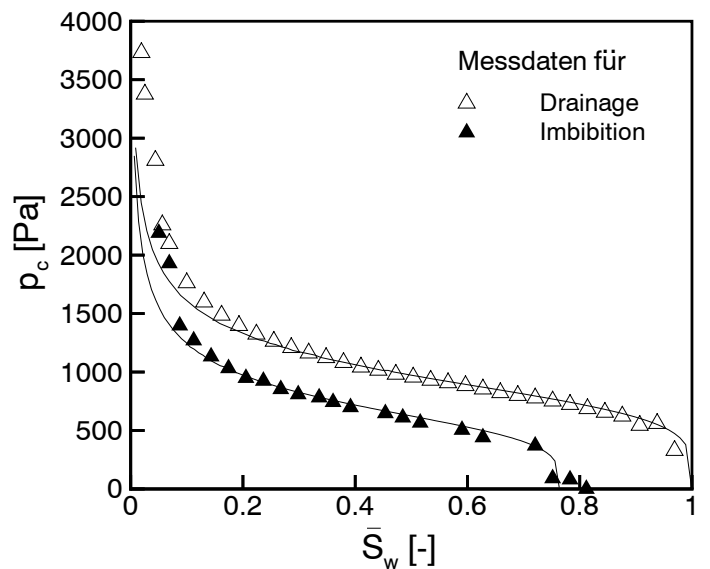


Abbildung 3.12:  $p_c - \bar{S}_w$ -Hysterese für den Mittelsand (aufgetragen über die effektive Sättigung)

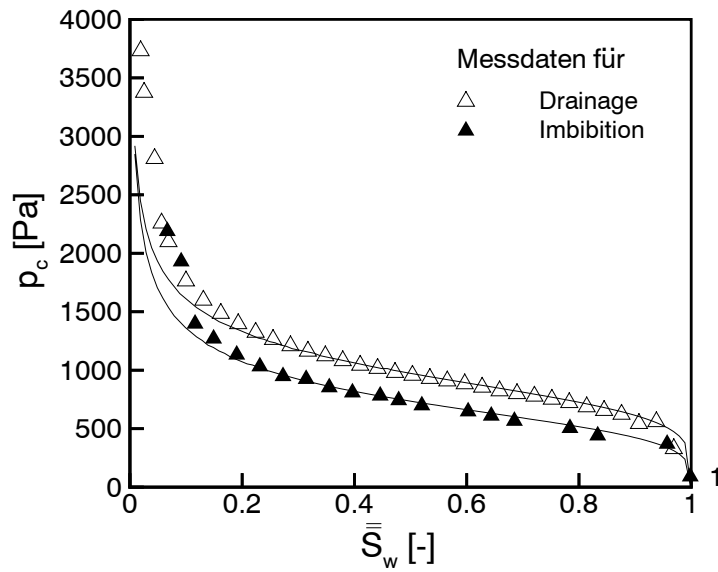


Abbildung 3.13:  $p_c - \bar{S}_w$ -Hysterese für den Mittelsand (aufgetragen über die scheinbare Sättigung)

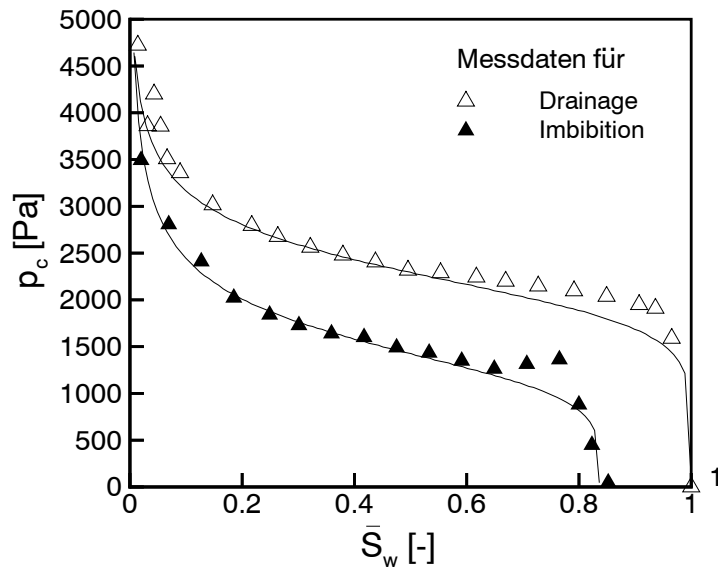


Abbildung 3.14:  $p_c - \bar{S}_w$ -Hysterese für den Feinsand (aufgetragen über die effektive Sättigung)

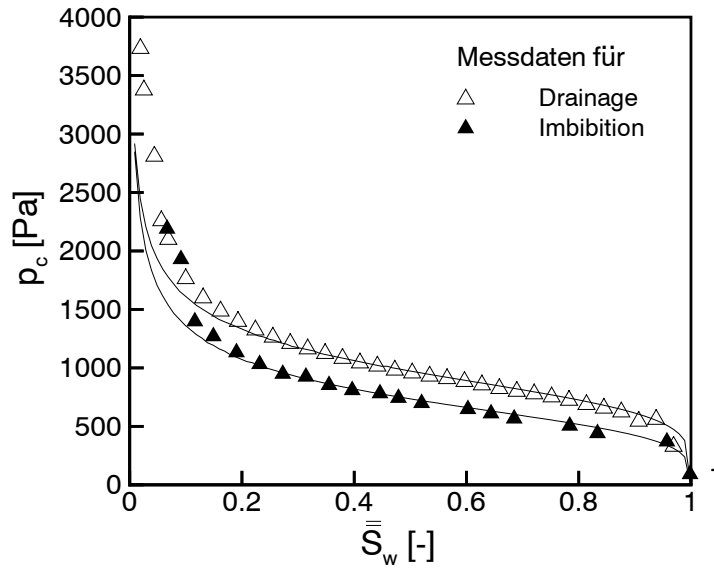


Abbildung 3.15:  $p_c - \bar{S}_w$ -Hysterese für den Feinsand (aufgetragen über die scheinbare Sättigung)

### 3.2.2 Relative Permeabilität-Sättigungs-Hysterese

Die Einschließung der nichtbenetzenden Phase in der benetzenden Phase verursacht Hysterese auch im Fall der relativen Permeabilitäten. Als Beispiel: In einem Zweiphasensystem NAPL-Wasser wird NAPL in der Wasserphase als diskontinuierliche Tropfen eingeschlossen. Kommt es nun zu einem Imbibitionsvorgang, so füllt die einfließende Wasserphase aufgrund der Kapillarkräfte zunächst die kleineren Poren aus. Wenn diese aber mit residualen NAPL-Tropfen gefüllt sind, so wird das Wasser gezwungen, diese in den größeren Poren zu umfließen. Dort trifft es auf einen geringeren Fließwiderstand [81]. Corey (1985)[26] und Dullien (1979)[34] haben experimentell festgestellt, daß die relative Permeabilität der benetzenden Phase während des Imbibitionsvorganges größer ist als beim Drainagevorgang. Dabei haben die Hystereseeffekte auf die relative Permeabilität-Sättigungs-Beziehung der nichtbenetzenden Phase einen deutlich größeren Einfluß als bei der benetzenden Phase ([7] und [26]). Lenhard et al. (1991)[81] haben das Modell von Mualem (1976)[94] modifiziert, um den Einfluß der Phaseneinschließung zu berücksichtigen. Die modifizierte  $k_r - S_w$ -Beziehung für die benetzende Phase lautet:

$$k_{rw} = \sqrt{\bar{S}_w} \left[ \frac{\int_0^{\bar{S}_w} \frac{d\bar{S}_w}{p_c(\bar{S}_w)} - \int_0^{\bar{S}_{nt}} \frac{d\bar{S}_{nt}}{p_c(\bar{S}_w)}}{\int_0^1 \frac{d\bar{S}_w}{p_c(\bar{S}_w)}} \right]^2 \quad (3.22)$$

Setzt man  $\bar{\bar{S}}_w = \bar{S}_w$  in Gl. (3.16) ein und differenziert sie in Bezug auf  $\bar{S}_w$  (s. Gl. (3.23)), kann der zweite Integralterm in Gleichung (3.22) als Funktion von  $\bar{S}_w$  geschrieben werden [102]:

$$d\bar{S}_{nt} = \frac{\bar{S}_{nt(i)}}{1 - \bar{S}_{w(i)}} d\bar{S}_w \quad . \quad (3.23)$$

Damit ergibt sich Gl. (3.22) zu:

$$k_{rw} = \sqrt{\bar{S}_w} \left[ \frac{\int_0^{\bar{S}_w} \frac{d\bar{S}_w}{p_c(\bar{S}_w)} - \frac{\bar{S}_{nt(i)}}{1 - \bar{S}_{w(i)}} \frac{\bar{S}_w}{\bar{S}_{w(i)}} \int_0^{\bar{S}_w} \frac{d\bar{S}_w}{p_c(\bar{S}_w)}}{\int_0^1 \frac{d\bar{S}_w}{p_c(\bar{S}_w)}} \right]^2 \quad . \quad (3.24)$$

Setzt man die Kapillardruck-Sättigungs-Gleichung nach van Genuchten (s. Gl. (2.10)) in Gl. (3.24) ein, erhält man den  $k_{rw} - S_w$ -Hysterese-Ansatz als:

$$k_{rw} = \sqrt{\bar{S}_w} \left[ 1 - \left( 1 - \frac{\bar{S}_{nt(i)}}{1 - \bar{S}_{w(i)}} \right) \left[ 1 - \bar{S}_w^{\frac{1}{m}} \right] - \left( \frac{\bar{S}_{nt(i)}}{1 - \bar{S}_{w(i)}} \right) \left[ 1 - \bar{S}_{w(i)}^{\frac{1}{m}} \right]^m \right]^2 \quad . \quad (3.25)$$

Für die nichtbenetzende Phase gilt:

$$k_{rn} = \sqrt{\bar{S}_{nf}} \left[ \frac{\int_0^1 \frac{d\bar{S}_w}{p_c(\bar{S}_w)}}{\int_0^{\bar{S}_w} \frac{d\bar{S}_w}{p_c(\bar{S}_w)}} \right]^2 \quad . \quad (3.26)$$

$\bar{S}_{nf}$  ist die effektive mobile Sättigung der nichtbenetzenden Phase:

$$\bar{S}_{nf} = 1 - \bar{S}_w \quad (3.27)$$

Die Integration von Gl. (3.26) führt zum Ansatz der  $k_{rn} - S_w$ -Hysterese:

$$k_{rn} = \sqrt{\bar{S}_{nf}} \left[ 1 - \bar{S}_w^{\frac{1}{m}} \right]^{2m} \quad . \quad (3.28)$$

## 3.3 Hysterese auf der Mesoskala (Dreiphasensystem)

### 3.3.1 Kapillardruck–Sättigungs–Hysterese

Die Dreiphasen–Kapillardruck–Sättigungs–Hysterese kann analog zur Zweiphasen–Hysterese mit dem Modell von Parker et al. (1987)[102] nachvollzogen werden. Parker et al. gehen dabei in ihrem Modell von folgenden Annahmen aus:



- Hinsichtlich der Benetzungsfähigkeit (*wettability*) in einem Dreiphasensystem Wasser-NAPL-Gas stellt die Wasserphase immer die benetzende und die Gasphase immer die nichtbenetzende Phase dar. Die NAPL-Phase wirkt benetzend bezüglich der Gasphase und nichtbenetzend bezüglich der Wasserphase.
- Infolge der vorherigen Annahme kann NAPL in der Wasserphase eingeschlossen werden, aber nicht umgekehrt. Dagegen kann Gas in beiden anderen Phasen eingeschlossen werden.
- Im Dreiphasensystem ist die NAPL-Phase in Kontakt mit der Gasphase und die Wasserphase in Kontakt mit der NAPL-Phase. Eine Grenzfläche zwischen der Wasser- und der Gasphase existiert nur im Zweiphasensystem, d.h. vor einer Imbibition von NAPL in das System.

Da im Dreiphasensystem wie oben beschrieben kein Kontakt zwischen Gas und Wasser angenommen wird, wird die Grenzfläche NAPL-Gas demzufolge durch die scheinbare Sättigung der beiden Flüssigphasen  $\bar{\bar{S}}_t$  beschrieben. Die Grenzfläche Wasser-NAPL wird beschrieben durch die scheinbare Wassersättigung ( $\bar{\bar{S}}_w$ ).  $\bar{\bar{S}}_w$  bzw. die scheinbare Sättigung der gesamten Flüssigphase  $\bar{\bar{S}}_t$  ist:

$$\bar{\bar{S}}_w = \bar{S}_w + \bar{S}_{nt} + \bar{S}_{gtw} \quad , \quad (3.29)$$

$$\bar{\bar{S}}_t = \bar{S}_w + \bar{S}_n + \bar{S}_{gt} \quad . \quad (3.30)$$

$\bar{S}_w$  ist die effektive Wassersättigung,  $\bar{S}_{nt}$  die effektive in der Wasserphase eingeschlossene NAPL-Sättigung und  $\bar{S}_{gtw}$  die effektive nichtmobile in der Wasserphase eingeschlossene Gassättigung.  $\bar{S}_n$  ist die effektive NAPL-Sättigung und  $\bar{S}_{gt}$  die gesamte effektive Gassättigung, die in der Wasserphase und in der NAPL-Phase eingeschlossen ist. Die skalierte Kapillardruck-Sättigungs-Beziehung für die Grenzfläche NAPL-Gas lautet:

$$\bar{\bar{S}}_t(\beta_{gn}p_{cgn}) = [1 + (\alpha\beta_{gn}p_{cgn})^n]^{-m} \quad (3.31)$$

und für NAPL-Wasser:

$$\bar{\bar{S}}_w(\beta_{nw}p_{cnw}) = [1 + (\alpha\beta_{nw}p_{cnw})^n]^{-m} \quad , \quad (3.32)$$

mit  $m = 1 - 1/n$ .

$\beta_{gn}$  und  $\beta_{nw}$  sind skalierte Faktoren (s. Abschnitt 2.2.3). Der skalierte empirische Ansatz

nach Parker et al. für Zweiphasen-Hysterese (s. Gl. (3.20) und (3.21)) wird nun auch für das Dreiphasensystem angewendet. Unter Verwendung der scheinbaren Sättigungen  $\bar{S}_t$  und  $\bar{S}_w$  bilden die  $p_{cng}-\bar{S}_t$ - und  $p_{cnw}-\bar{S}_w$ -Kurven jeweils eine geschlossene Schleife. Im folgenden Abschnitt wird kurz auf die Phaseneinschließung von NAPL im NAPL-Wasser-System und von Gas im Flüssig (NAPL+Wasser)-Gas-System eingegangen.

Da NAPL in Kontakt mit der Wasserphase ist und ausschließlich in der Wasserphase eingeschlossen werden kann, werden für einen Umkehrvorgang die Wendepunkte wie bei einem Zweiphasensystem bestimmt. Während einer Verdrängung der Wasserphase durch die NAPL-Phase (z. B. NAPL-Infiltration) steigt der Kapillardruck stetig. Während einer Imbibition der Wasserphase (Verdrängung der NAPL-Phase durch die Wasserphase, z.B. Anhebung des Grundwasserspiegels), wird ein Teil der NAPL-Phase in der Wasserphase eingeschlossen. Dieser Anteil ist abhängig von der Größe der NAPL-Sättigung ( $1 - \bar{S}_w^{min}$ ) zu Beginn des Imbibitionsvorganges, wobei  $\bar{S}_w^{min}$  die scheinbare Sättigung der Wasserphase im Dreiphasensystem an dieser Stelle ist. Der Ansatz nach Land berechnet die eingeschlossene NAPL-Sättigung nach einem Imbibitionsvorgang von  $1 - \bar{S}_w^{min}$  ( $p_{cng} > 0$ ) bis  $p_{cng} = 0$  beim Einsetzen von  $\bar{S}_w^{min}$  anstelle von  $\bar{S}_{w(i)}$  in Gl. (3.13). Um die NAPL-Einschließung zwischen den Punkten  $i$  zu  $j$  ( $p_{cnw} > 0$ , s. Abb. 3.8) zu berechnen, wird Gl. (3.16) verwendet. Da nicht mehr NAPL eingeschlossen werden kann, als im System existiert, wird Gl. (3.16) wie folgt modifiziert [102]:

$$\bar{S}_{nt} = \min \left[ \bar{S}_{nr} \left( \frac{\bar{S}_w - \bar{S}_w^{min}}{1 - \bar{S}_w^{min}} \right), \bar{S}_n \right], \quad (3.33)$$

wobei  $\bar{S}_n$  die effektive Sättigung der NAPL-Phase ist.

Etwas komplexer werden die Verhältnisse im Fall von Gaseinschließung, da die Gasphase sowohl in der NAPL wie auch in der Wasserphase eingeschlossen werden kann. Parker et al. unterscheiden drei Fälle, um die Gaseinschließung in Wasser- und NAPL-Phase zu beschreiben. Um diese Fälle zu erklären, müssen zunächst drei verschiedene Sättigungen definiert werden:

$$\underline{\Delta \bar{S}_w^{gw}}$$

In Abwesenheit von NAPL spricht man von einem Zweiphasensystem Wasser-Gas. Nach einer Verdrängung der Wasserphase durch die Gasphase (Drainage, z.B. Absenkung des Grundwasserspiegels) wird genau dann, wenn der Wasserspiegel wieder ansteigt (Imbibition, Umkehrvorgang), ein minimaler Wert der Wassersättigung erreicht. Diese Sättigung

ist  $\Delta \bar{S}_w^{gw}$ .

$\bar{S}_w^{2 \rightarrow 3}$

Hiermit wird die scheinbare Sättigung der Wasserphase an der Stelle, an der das System vom Zweiphasensystem Wasser-Gas in ein Dreiphasensystem Wasser-NAPL-Gas übergeht, bezeichnet.

$\bar{S}_t^{min}$

$\bar{S}_t^{min}$  ist die scheinbare Sättigung der gesamten Flüssigphase (Wasser+NAPL) bei der der Vorgang von Drainage zu Imbibition umkehrt. Während der Absenkung des Wasserspiegels sinkt  $\bar{S}_t$ . Wenn nun NAPL anfängt zu infiltrieren, nimmt die scheinbare Sättigung der gesamten Flüssigphase  $\bar{S}_t$  wieder zu. Dabei sinkt der Kapillardruck ab (Imbibitionskurve).

Mit Verwendung der Gleichung nach Land (s. Gl. (3.13)) wird die Gaseinschließung in der Wasserphase in Abwesenheit von NAPL beschrieben durch:

$$\bar{S}_{grw} = \frac{1 - \Delta \bar{S}_w^{gw}}{1 + R_{gw}(1 - \Delta \bar{S}_w^{gw})} \quad , \quad (3.34)$$

wobei  $\bar{S}_{grw}$  die effektive eingeschlossene Sättigung der Gasphase in der Wasserphase während einer Imbibition von  $1 - \Delta \bar{S}_w^{gw}$  zu  $p_{cgw} = 0$  ist.  $R_{gw}$  ist durch Gl. (3.14) gegeben.

Im Fall des Vorhandenseins von NAPL wird die Einschließung der Gasphase in die NAPL-Phase wie im Zweiphasensystem NAPL-Gas berechnet durch:

$$\bar{S}_{grn} = \frac{1 - \bar{S}_t^{min}}{1 + R_{gn}(1 - \bar{S}_t^{min})} \quad . \quad (3.35)$$

Die von Parker et al. unterschiedenen drei Fälle ergeben sich zu:

Fall 1  $\bar{S}_t^{min} \geq \bar{S}_w^{2 \rightarrow 3}$

Dies bedeutet, daß die NAPL-Gas-Grenzflächen nicht in die Poren eintreten können, die kleiner als die Poren sind, die vor dem Vorhandensein von NAPL mit Wasser gefüllt waren. Die Gasmenge, die in der Wasserphase eingeschlossen ist, wird im wesentlichen von zwei Faktoren bestimmt. Zum einen von den im zuvor vorhandenen Zweiphasensystem Wasser-Gas vorliegenden Verhältnissen (Term I) und zum anderen vom Transport der

NAPL-Phase (NAPL-Wasser-Grenzfläche) in das System (Term II).

Die eingeschlossene Gassättigung in der Wasserphase ergibt sich zu:

$$\bar{S}_{gtw} = \underbrace{\bar{S}_{grw} \left( \frac{\bar{S}_w^{2 \rightarrow 3} - \Delta \bar{S}_w^{gw}}{1 - \Delta \bar{S}_w^{gw}} \right)}_{Term I} + \underbrace{\bar{S}_{grn} \left( \frac{\bar{S}_w - \bar{S}_w^{2 \rightarrow 3}}{1 - \bar{S}_w^{2 \rightarrow 3}} \right)}_{Term II} \quad (3.36)$$

$$\text{für } \bar{S}_w > \bar{S}_w^{2 \rightarrow 3} > \Delta \bar{S}_w^{gw} ,$$

$$\bar{S}_{gtw} = \underbrace{\bar{S}_{grw} \left( \frac{\bar{S}_w^{2 \rightarrow 3} - \Delta \bar{S}_w^{gw}}{1 - \Delta \bar{S}_w^{gw}} \right)}_{Term I} \quad (3.37)$$

$$\text{für } \bar{S}_w^{2 \rightarrow 3} > \bar{S}_w > \Delta \bar{S}_w^{gw} ,$$

$$\bar{S}_{gtw} = 0 \quad (3.38)$$

$$\text{für } \bar{S}_w \leq \Delta \bar{S}_w^{gw} .$$

Die gesamte eingeschlossene Gassättigung in der Wasser- sowie NAPL-Phase wird beschrieben durch:

$$\bar{S}_{gt} = \bar{S}_{grw} \left( \frac{\bar{S}_w^{2 \rightarrow 3} - \Delta \bar{S}_w^{gw}}{1 - \Delta \bar{S}_w^{gw}} \right) + \bar{S}_{grn} \left( \frac{\bar{S}_t - \bar{S}_w^{2 \rightarrow 3}}{1 - \bar{S}_w^{2 \rightarrow 3}} \right) \quad (3.39)$$

$$\text{für } \bar{S}_t > \bar{S}_w^{2 \rightarrow 3} > \Delta \bar{S}_w^{gw} .$$

Die eingeschlossene Gassättigung in der NAPL-Phase wird berechnet als Differenz zwischen Gl. (3.39) und (3.36):

$$\bar{S}_{gtn} = \bar{S}_{gt} - \bar{S}_{gtw} . \quad (3.40)$$

Fall 2  $\Delta \bar{S}_w^{gw} < \bar{S}_t^{min} < \bar{S}_w^{2 \rightarrow 3}$

Dies bedeutet, daß die Grenzfläche NAPL-Gas zu einem bestimmten Zeitpunkt (nach dem Erscheinen der NAPL-Phase) in diejenigen Poren eintritt, die kleiner als die zu  $\bar{S}_w^{2 \rightarrow 3}$  gehörende Porengröße, jedoch größer als die zu  $\Delta \bar{S}_w^{gw}$  gehörende Porengröße sind. Die eingeschlossene Gassättigung in der Wasserphase ist:

$$\bar{S}_{gtw} = \underbrace{\bar{S}_{grw} \left( \frac{\bar{S}_t^{min} - \Delta \bar{S}_w^{gw}}{1 - \Delta \bar{S}_w^{gw}} \right)}_{Term I} + \underbrace{\bar{S}_{grn} \left( \frac{\bar{S}_w - \bar{S}_t^{min}}{1 - \bar{S}_t^{min}} \right)}_{Term II} \quad (3.41)$$

für  $\bar{S}_w > \bar{S}_t^{min} >^{\Delta} \bar{S}_w^{gw}$  ,

$$\bar{S}_{gtw} = \underbrace{\bar{S}_{grw} \left( \frac{\bar{S}_w - \Delta \bar{S}_w^{gw}}{1 - \Delta \bar{S}_w^{gw}} \right)}_{Term I} \quad (3.42)$$

für  $\bar{S}_t^{min} \geq \bar{S}_w \geq^{\Delta} \bar{S}_w^{gw}$  ,

$$\bar{S}_{gtw} = 0 \quad (3.43)$$

für  $\bar{S}_w \leq^{\Delta} \bar{S}_w^{gw}$  .

Für die gesamte eingeschlossene Gassättigung in der Wasser- sowie in der NAPL-Phase ergibt sich:

$$\bar{S}_{gt} = \bar{S}_{grw} \left( \frac{\bar{S}_t^{min} - \bar{S}_{w_{gw}}^{min}}{1 - \bar{S}_{w_{gw}}^{min}} \right) + \bar{S}_{grn} \left( \frac{\bar{S}_t - \bar{S}_t^{min}}{1 - \bar{S}_t^{min}} \right) \quad (3.44)$$

für  $\bar{S}_t > \bar{S}_t^{min} >^{\Delta} \bar{S}_w^{gw}$  . (3.45)

Die eingeschlossene Gassättigung in der NAPL-Phase entspricht wieder der Differenz zwischen  $\bar{S}_{gt}$  und  $\bar{S}_{gtw}$ .

Fall 3  $\bar{S}_t^{min} \leq^{\Delta} \bar{S}_w^{gw}$

Dieser Fall bedeutet, daß die Grenzflächen Gas-NAPL nicht in diejenigen Poren eintreten können, die kleiner als die der Sättigung  $^{\Delta} \bar{S}_w^{gw}$  entsprechende Porengröße sind. Der Anteil der eingeschlossenen Gassättigung in der Wasserphase ist:

$$\bar{S}_{gtw} = \underbrace{\bar{S}_{grn} \left( \frac{\bar{S}_w - \bar{S}_t^{min}}{1 - \bar{S}_t^{min}} \right)}_{Term II} \quad (3.46)$$

für  $\bar{S}_w \geq \bar{S}_t^{min}$  , (3.47)

$$\bar{S}_{gtw} = 0 \quad (3.48)$$

für  $\bar{S}_w < \bar{S}_t^{min}$  .

Die gesamte eingeschlossene Gassättigung in der Wasser- sowie NAPL-Phase ergibt sich zu:

$$\bar{S}_{gt} = \bar{S}_{grn} \left( \frac{\bar{S}_t - \bar{S}_t^{min}}{1 - \bar{S}_t^{min}} \right) \quad (3.49)$$

für  $\bar{S}_t \geq \bar{S}_t^{min}$  .

Der Anteil in der NAPL-Phase kann wieder analog als Differenz ermittelt werden.

### 3.3.2 Relative Permeabilität–Sättigungs–Hysterese

Lenhard und Parker (1987)[102] haben das Modell von Mualem (1976)[94] modifiziert, um die  $k_r - S_w$ -Hysterese in einem Dreiphasensystem zu entwickeln. Sie haben die  $p_c - S_w$ -Beziehung nach van Genuchten verwendet. Lenhard und Parker haben bestimmte Annahmen getroffen (s. Abschnitt 3.3.1), so daß z.B. der *van Genuchten*-Parameter  $n$  während Drainage- und Imbibitionsvorgang konstant bleibt. Diese Annahme macht deutlich, daß nur die  $k_r - S_w$ -Hysterese infolge der Phaseneinschließung in ihrem Modell betrachtet wird.

#### Relative Permeabilität der Wasserphase

Die modifizierte Gleichung von Mualem, um den Effekt der Phaseneinschließung von NAPL und Gas in der Wasserphase zu berechnen, ist:

$$k_{rw} = \sqrt{\bar{S}_w} \left[ \frac{\int_0^{\bar{S}_w} \frac{d\bar{S}_w}{p_c(\bar{S}_w)} - \int_0^{\bar{S}_{nt}} \frac{d\bar{S}_{nt}}{p_c(\bar{S}_w)} - \int_0^{\bar{S}_{gtw}} \frac{d\bar{S}_{gtw}}{p_c(\bar{S}_w)}}{\int_0^1 \frac{d\bar{S}_w}{p_c(\bar{S}_w)}} \right]^2 . \quad (3.50)$$

Beim Einsetzen von  $\bar{S}_w = \bar{S}_w$  in Gl. (3.33) (NAPL-Einschließung) bzw. in Gl. (3.41) und (3.46) (Gaseinschließung) gilt:

#### NAPL-Einschließung

$$\int_0^{\bar{S}_{nt}} \frac{d\bar{S}_{nt}}{p_c(\bar{S}_w)} = \frac{\bar{S}_{nt}}{1 - \bar{S}_w^{min}} \int_{\bar{S}_w^{min}}^{\bar{S}_w} \frac{d\bar{S}_w}{p_c(\bar{S}_w)} \quad (3.51)$$

Gaseinschließung (drei Fälle)

Wenn  $\bar{S}_t^{\min} \geq \Delta \bar{S}_w^{gw}$  und  $\bar{S}_w \geq \Delta \bar{S}_w^{gw}$

$$\int_0^{\bar{S}_{gtw}} \frac{d\bar{S}_{gtw}}{p_c(\bar{S}_w)} = \frac{\bar{S}_{grw}}{1 - \Delta \bar{S}_w^{gw}} \int_{\Delta \bar{S}_w^{gw}}^{II} \frac{d\bar{S}_w}{p_c(\bar{S}_w)} + \frac{\bar{S}_{grn}}{1 - \bar{S}_t^{\min}} \int_{II}^{\bar{S}_w} \frac{d\bar{S}_w}{p_c(\bar{S}_w)} \quad (3.52)$$

wobei

$$II = \min \left[ \bar{S}_w, \bar{S}_t^{\min} \right] \quad . \quad (3.53)$$

Wenn  $\bar{S}_t^{\min} < \Delta \bar{S}_w^{gw}$  und  $\bar{S}_w \geq \bar{S}_t^{\min}$

$$\int_0^{\bar{S}_{gtw}} \frac{d\bar{S}_{gtw}}{p_c(\bar{S}_w)} = \frac{\bar{S}_{grn}}{1 - \bar{S}_t^{\min}} \int_{\bar{S}_t^{\min}}^{\bar{S}_w} \frac{d\bar{S}_w}{p_c(\bar{S}_w)} \quad . \quad (3.54)$$

Wenn  $\bar{S}_w < \bar{S}_t^{\min}$  und  $\bar{S}_w < \Delta \bar{S}_w^{gw}$

$$\int_0^{\bar{S}_{gtw}} \frac{d\bar{S}_{gtw}}{p_c(\bar{S}_w)} = 0 \quad . \quad (3.55)$$

Hiermit ergibt sich die relative Permeabilität der Wasserphase zu (entsprechend wie oben drei Fälle):

$$\begin{aligned} k_{rw} &= \sqrt{\bar{S}_w} \left[ 1 - (1 - \bar{S}_w^{\frac{1}{m}})^m \left( 1 - \frac{\bar{S}_{nr}}{1 - \bar{S}_w^{\min}} - \frac{\bar{S}_{grn}}{1 - \bar{S}_t^{\min}} \right) \right. \\ &+ (1 - II^{\frac{1}{m}})^m \left( \frac{\bar{S}_{grw}}{1 - \Delta \bar{S}_w^{gw}} - \frac{\bar{S}_{grn}}{1 - \bar{S}_t^{\min}} \right) \\ &\left. - \frac{\bar{S}_{grw}}{1 - \Delta \bar{S}_w^{gw}} (1 - \Delta \bar{S}_w^{gw})^m - \frac{\bar{S}_{grn}}{1 - \bar{S}_t^{\min}} (1 - \bar{S}_t^{\min})^m \right]^2, \quad (3.56) \end{aligned}$$

$$\begin{aligned} k_{rw} &= \sqrt{\bar{S}_w} \left[ 1 - (1 - \bar{S}_w^{\frac{1}{m}})^m \left( 1 - \frac{\bar{S}_{nr}}{1 - \bar{S}_w^{\min}} - \frac{\bar{S}_{grn}}{1 - \bar{S}_t^{\min}} \right) \right. \\ &\left. - \frac{\bar{S}_{nr}}{1 - \bar{S}_w^{\min}} (1 - (\bar{S}_w^{\min})^{1/m})^m - \frac{\bar{S}_{grn}}{1 - \bar{S}_t^{\min}} (1 - \bar{S}_t^{\min})^m \right]^2, \quad (3.57) \end{aligned}$$

$$\begin{aligned} k_{rw} &= \sqrt{\bar{S}_w} \left[ 1 - (1 - \bar{S}_w^{\frac{1}{m}})^m \left( 1 - \frac{\bar{S}_{nr}}{1 - \bar{S}_w^{\min}} \right) \right. \\ &\left. - \frac{\bar{S}_{nr}}{1 - \bar{S}_w^{\min}} (1 - (\bar{S}_w^{\min})^{1/m})^m \right]^2. \quad (3.58) \end{aligned}$$

### Relative Permeabilität der NAPL-Phase

Der modifizierte *Mualem*-Ansatz, um die Gaseinschließung zu berücksichtigen, lautet:

$$k_{rn} = \sqrt{\bar{S}_{nf}} \left[ \frac{\int_{\bar{S}_w}^{\bar{S}_t} \frac{d\bar{S}_w}{p_c(\bar{S}_w)} - \int_0^{\bar{S}_{gtn}} \frac{d\bar{S}_{gtn}}{p_c(\bar{S}_w)}}{\int_0^1 \frac{d\bar{S}_w}{p_c(\bar{S}_w)}} \right]^2, \quad (3.59)$$

wobei

$$\bar{S}_{nf} = \bar{S}_n - \bar{S}_{nt} \quad . \quad (3.60)$$

Analog zur Wasserphase wird die Gaseinschließung in die NAPL-Phase wie folgt berechnet (drei Fälle):

Wenn  $\bar{S}_t^{\min} \geq \Delta \bar{S}_w^{gw}$  und  $\bar{S}_w < \bar{S}_t^{\min}$

$$\int_0^{\bar{S}_{gtn}} \frac{d\bar{S}_{gtn}}{p_c(\bar{S}_w)} = \frac{\bar{S}_{grw}}{1 - \Delta \bar{S}_w^{gw}} \int_{\psi}^{\bar{S}_t^{\min}} \frac{d\bar{S}_w}{p_c(\bar{S}_w)} + \frac{\bar{S}_{grn}}{1 - \bar{S}_t^{\min}} \int_{\bar{S}_t^{\min}}^{\bar{S}_t} \frac{d\bar{S}_w}{p_c(\bar{S}_w)} \quad , \quad (3.61)$$

wobei

$$\psi = \max [\bar{S}_w, \Delta \bar{S}_w^{gw}] \quad . \quad (3.62)$$

Wenn  $\bar{S}_t^{\min} < \Delta \bar{S}_w^{gw}$

$$\int_0^{\bar{S}_{gtn}} \frac{d\bar{S}_{gtn}}{p_c(\bar{S}_w)} = \frac{\bar{S}_{grn}}{1 - \bar{S}_t^{\min}} \int_{\omega}^{\bar{S}_t} \frac{d\bar{S}_w}{p_c(\bar{S}_w)} \quad , \quad (3.63)$$

wobei

$$\omega = \max [\bar{S}_w, \bar{S}_t^{\min}] \quad . \quad (3.64)$$

Wenn  $\bar{S}_w \geq \bar{S}_t^{\min}$

$$\int_0^{\bar{S}_{gtn}} \frac{d\bar{S}_{gtn}}{p_c(\bar{S}_w)} = \frac{\bar{S}_{grn}}{1 - \bar{S}_t^{\min}} \int_{\bar{S}_w}^{\bar{S}_t} \frac{d\bar{S}_w}{p_c(\bar{S}_w)} \quad . \quad (3.65)$$

Einsetzen von Gl. (3.61), (3.63) und (3.65) in Gl. (3.59) liefert jeweils:

$$k_{rn} = \sqrt{\bar{S}_{nf}} \left[ (1 - \bar{S}_w^{\frac{1}{m}})^m \left( 1 - \frac{\bar{S}_{grn}}{1 - \bar{S}_t^{\min}} \right) - (1 - \bar{S}_t^{1/m})^m \left( 1 - \frac{\bar{S}_{grn}}{1 - \bar{S}_t^{\min}} \right) \right]^2 \quad (3.66)$$



$$\begin{aligned}
 k_{rn} &= \sqrt{\bar{S}_{nf}} \left[ (1 - \bar{S}_w^{\frac{1}{m}})^m - (1 - \bar{S}_t^{1/m})^m \left( 1 - \frac{\bar{S}_{grn}}{1 - \bar{S}_t^{\min}} \right) \right. \\
 &\quad \left. - \frac{\bar{S}_{grw}}{1 - \Delta \bar{S}_w^{gw}} (1 - \psi^{1/m})^m - \left( \frac{\bar{S}_{grn}}{1 - \bar{S}_t^{\min}} - \frac{\bar{S}_{grw}}{1 - \Delta \bar{S}_w^{gw}} \right) (1 - \bar{S}_t^{\min})^m \right]^2, \quad (3.67)
 \end{aligned}$$

$$\begin{aligned}
 k_{rn} &= \sqrt{\bar{S}_{nf}} \left[ (1 - \bar{S}_w^{\frac{1}{m}})^m - (1 - \bar{S}_t^{1/m})^m \left( 1 - \frac{\bar{S}_{grn}}{1 - \bar{S}_t^{\min}} \right) \right. \\
 &\quad \left. - \left( \frac{\bar{S}_{grn}}{1 - \bar{S}_t^{\min}} \right) (1 - \omega^{1/m})^m \right]^2. \quad (3.68)
 \end{aligned}$$

### Relative Permeabilität der Gasphase

Der Integralansatz für die relative Permeabilität–Sättigungs–Beziehung der Gasphase ist:

$$k_{rg} = \sqrt{\bar{S}_{gf}} \frac{\bar{S}_t \int_0^1 \frac{d\bar{S}_w}{p_c(\bar{S}_w)}}{\int_0^1 \frac{d\bar{S}_w}{p_c(\bar{S}_w)}}, \quad (3.69)$$

wobei

$$\bar{S}_{gf} = \bar{S}_g - \bar{S}_{gt} \quad . \quad (3.70)$$

Die relative Permeabilität–Sättigungs–Beziehung lautet:

$$k_{rg} = \sqrt{\bar{S}_{nf}} (1 - \bar{S}_t^{\frac{1}{m}})^{2m} \quad . \quad (3.71)$$

## 3.4 Entwicklung eines Hysterese-Konzeptes für das numerische Modell *MUFTE-UG*

### 3.4.1 Zweiphasen-Modell

Für die Implementierung können Gl. (3.20) und (3.21) in allgemeiner Form folgendermaßen geschrieben werden [102]:

$$\bar{S}_{w(i)}(p_c) = \frac{[p \bar{S}_w(p_c) - p \bar{S}_{w_2}]}{[p \bar{S}_{w_1} - p \bar{S}_{w_2}]} \cdot [\bar{S}_{w_2} - \bar{S}_{w_1}] + \bar{S}_{w_2} \quad . \quad (3.72)$$

Der Index  $p$  ist im Fall einer Drainage gleich  $d$  und im Fall einer Imbibition gleich  $i$ .  ${}^p\bar{\bar{S}}_{w_2}$  ist die zugehörige scheinbare Sättigung der benetzenden Phase am Endpunkt des momentanen Vorgangs auf der Hauptkurve,  ${}^p\bar{\bar{S}}_{w_1}$  die zugehörige scheinbare Sättigung auf der Hauptkurve beim letzten Umkehrpunkt,  $\bar{\bar{S}}_{w_2}$  die scheinbare Sättigung am Endpunkt des momentanen Vorgangs und  $\bar{\bar{S}}_{w_1}$  die scheinbare Sättigung beim letzten Umkehrpunkt.

Im Code wird nach Gleichung (3.72) die scheinbare Sättigung  ${}^p\bar{\bar{S}}_w(p_c)$  auf der jeweiligen Hauptkurve bestimmt. Nun kann unter Berücksichtigung der Phaseneinschließung (s. Gl. 3.17) auf die effektive Sättigung geschlossen werden und anschließend damit der Kapillardruck in herkömmlicher Weise berechnet werden.

Eine Umkehrung des momentanen Vorgangs erkennt das Programm auf folgende Weise: Nach jedem Zeitschritt wird überprüft, ob der Kapillardruck  $p_{c_i}$  an einem Knoten  $i$  und der Zeitschritt  $\Delta t$  die Bedingung

$$\frac{p_{c_i}^{t+\Delta t} - p_{c_i}^t}{\Delta t} \geq \tau \quad (3.73)$$

einhalten, wobei  $\tau$  z.B. den Wert  $1.E-3$  aufweist, um das Auftreten numerischer Oszillationen zu berücksichtigen. Ist dies der Fall, so wird dem Hysterese-Index  $Ih$  der Wert  $+1$  zugewiesen. Wenn  $[p_{c_i}^{t+\Delta t} - p_{c_i}^t]/\Delta t$  kleiner als  $-\tau$  ist, erhält  $Ih$  den Wert  $-1$ , ansonsten bleibt  $Ih$  unverändert. Durch Vergleich des alten und neuen  $Ih$  wird ersichtlich, ob ein Umkehrvorgang vorliegt.

Für die  $p_c - S_w$ - und  $k_{rw} - S_w$ -Hysterese wird ein dynamischer Speicherplan verwendet. Dies hat den großen Vorteil, daß für jede Simulation nur der explizit benötigte Speicherplatz (für 6 Daten pro Knoten und  $p_c - S_w$ -Schleife) zur Verfügung gestellt wird.

Zu Beginn jeder Simulation wird für jeden Netzknoten ein Datensatz mit 6 Werten gespeichert. Sobald im Lauf der Berechnung an einem Knoten ein Umkehrvorgang stattfindet, d.h. die  $p_c - S_w$ -Schleifennummer sich um eins erhöht, kommt für diesen Knoten ein Datensatz hinzu. Ein Datensatz zu einem Knoten beinhaltet:

- $p_c - S_w$ -Schleifennummer  $Ln$
- Hysterese-Index  $Ih$   
Dieser Index gibt den Vorgang am Knoten  $i(S_{w_i}, p_{c_i})$  an. Bei Drainage ist  $Ih = +1$  und bei Imbibition  $Ih = -1$

- Sättigung beim letzten Umkehrpunkt  $S_{w_1}$
- Kapillardruck beim letzten Umkehrpunkt  $p_{c_1}$   
Aus dem Kapillardruck beim letzten Umkehrpunkt und dem Hysterese-Index werden unter Verwendung von Gl. (3.18) oder (3.19) die zugehörigen Sättigungen auf den jeweiligen Hauptkurven berechnet.
- Sättigung am Endpunkt des momentanen Vorgangs  $S_{w_2}$   
Dieser Endpunkt wird erreicht, falls der momentane Vorgang (Drainage oder Imbibition) ohne Umkehrung vollständig abläuft.
- Kapillardruck am Endpunkt des momentanen Vorgangs  $p_{c_2}$

### 3.4.2 Dreiphasen-Modell

Zur Untersuchung der Hysterese in Dreiphasensystemen und zur numerischen Simulation von Dreiphasen-Hystereseprozessen wurde die von Huber und Helmig (1997)[55] entwickelte Dreiphasenformulierung zugrunde gelegt und erweitert. Im Gegensatz zum Zweiphasensystem treten beim Dreiphasensystem zwei Grenzflächen (Luft-NAPL und NAPL-Wasser) auf, an welchen jeweils eine Kapillardruck-Sättigungs-Beziehung Gültigkeit besitzt und Hysterese beinhalten kann. Pro Knoten wird für jede der beiden Grenzflächen ein Datensatz von 6 Werten – analog zur Hysterese im Zweiphasensystem – benötigt.

Um die drei Fälle der  $k_r - S_w$ -Beziehungen nach Parker et al. bei der Hysterese in Dreiphasensystemen zu berücksichtigen, werden zwei Sättigungen –  $\Delta \bar{S}_w^{gw}$  und  $\bar{S}_w^{2 \rightarrow 3}$  – gespeichert.

Als Kriterium für einen Übergang vom Zweiphasensystem Luft-Wasser zum Dreiphasensystem Luft-NAPL-Wasser wird folgende Bedingung verwendet [128]:

$$p_n > \frac{\beta_{gn} * p_g + \beta_{nw} p_w}{\beta_{nw} + \beta_{gn}} \quad . \quad (3.74)$$

Damit steht, aufbauend auf dem Programmsystem *MUFTE-UG* ein leistungsfähiger Algorithmus zur Simulation von Zwei- und Dreiphasen-Hysterese-Vorgängen zur Verfügung.





# 4 Physikalische Grundlagen zum Eindringverhalten von NAPL in heterogenen porösen Medien

Heterogenitäten in natürlichen Aquifern, die z.B. durch Einlagerungen, Schichtungen etc. hervorgerufen werden, haben einen sehr großen Einfluß auf das Eindringen und die Ausbreitung von NAPL im Untergrund.

Die heterogenen Strukturen weisen Bereiche mit verschiedenen physikalischen Eigenschaften, wie z. B. Permeabilität, Porosität, konstitutive Beziehungen, auf. Von diesen physikalischen Parametern haben besonders die Kapillardruck-Sättigungs-Beziehung und die relative Permeabilität-Sättigungs-Beziehung einen großen Einfluß auf die NAPL-Verteilung.

In diesem Kapitel wird der Einfluß von Heterogenitäten auf die NAPL-Verteilung für die Mikroskala, Mesoskala (REV-Skala) und Makroskala gezeigt.

Heterogenitäten auf der Mikroskala werden hauptsächlich durch den Porenradius bestimmt.

Die Mesoskala wird durch Mittelung über verschiedene Poren erhalten. Verschiedene Bodenarten werden auf dieser Skala in jeweils einem repräsentativen Elementarvolumen (REV) zusammengefaßt [11]. In diesen Bereichen sind die physikalischen Eigenschaften konstant.

Die Makroskala besteht aus mehreren REVs. Für jede vorliegende Bodenart wird hierbei angenommen, daß sie nicht homogen vorliegt und deshalb in mehrere REVs unterteilt wird.

## 4.1 Eindringbedingungen auf der Mikroskala

Die Ausbreitung von NAPL in porösen Medien wird von Gravitations- und Kapillarkräften sowie vom Wassergradienten dominiert.

Der Druck  $p_g$  infolge der Gravitationskraft ergibt sich zu:

$$p_g = h_n g (\rho_n - \rho_\alpha) \quad , \quad (4.1)$$

wobei  $h_n$  die Höhe des NAPL-Tropfens ist.  $\rho_n$  ist die Dichte der NAPL-Phase,  $\rho_\alpha$  die Dichte der Gasphase (ungesättigte Zone) bzw. der Wasserphase (gesättigte Zone).

Der Kapillardruck wird auf der Mikroskala durch die *Laplace*-Gleichung definiert, indem man eine Pore als ein Kapillarrohr betrachtet, wobei der Porenradius  $r$  dem Rohrradius entspricht (s. Gl. (2.5)).

In der ungesättigten Zone ist die NAPL-Phase benetzend in Bezug auf die Gasphase, so daß die Kapillarkraft in Richtung der Gravitation wirkt. In der gesättigten Zone ist die NAPL-Phase nichtbenetzend in Bezug auf die Wasserphase, so daß die Kapillarkraft entgegen der Gravitationskraft wirkt. Infolge der geringeren Dichte als Wasser kann LNAPL nicht in die gesättigte Zone eindringen. DNAPL kann erst in eine wassergesättigte Pore eindringen, wenn der Gravitationsdruck des DNAPLs größer als der Eindringdruck (Kapillardruck) der Pore ist.

Die horizontale Ausbreitung von DNAPL in der gesättigten Zone wird hauptsächlich durch den Wassergradienten bestimmt.

Cohen und Mercer (1993)[24] haben die Bewegung der DNAPL-Phase in einem mit Wasser gesättigten porösen Medium infolge des Kapillar- und Gravitationsdrucks mikroskalig diskutiert. Sie haben ein hydrostatisches System angenommen (s. Abb. 4.1), bei dem sich ein kugelförmiger DNAPL-Tropfen in einem mit Wasser gesättigten Porenraum befindet und der Kapillardruck gleichmäßig in jeder Richtung wirkt. Der Eindringverlauf des DNAPL-Tropfens wird aus Abbildung 4.1 deutlich. Abb. 4.1b zeigt den Moment, in dem DNAPL infolge der Gravitation durch die Porenöffnung in den nächsten Porenraum eintritt. Dabei ist der Kapillardruck ( $p_{ct}$ ) am unteren Rand des DNAPL-Tropfens (Porenöffnung) größer als am oberen Rand ( $p_{cp}$ , Porenraum) ( $r_t \ll r_p$ , s. Gl. (5.2))

$$p_{ct} = \frac{2\sigma \cos\theta}{r_t} \quad (4.2)$$

$$p_{cp} = \frac{2\sigma \cos\theta}{r_p} \quad (4.3)$$

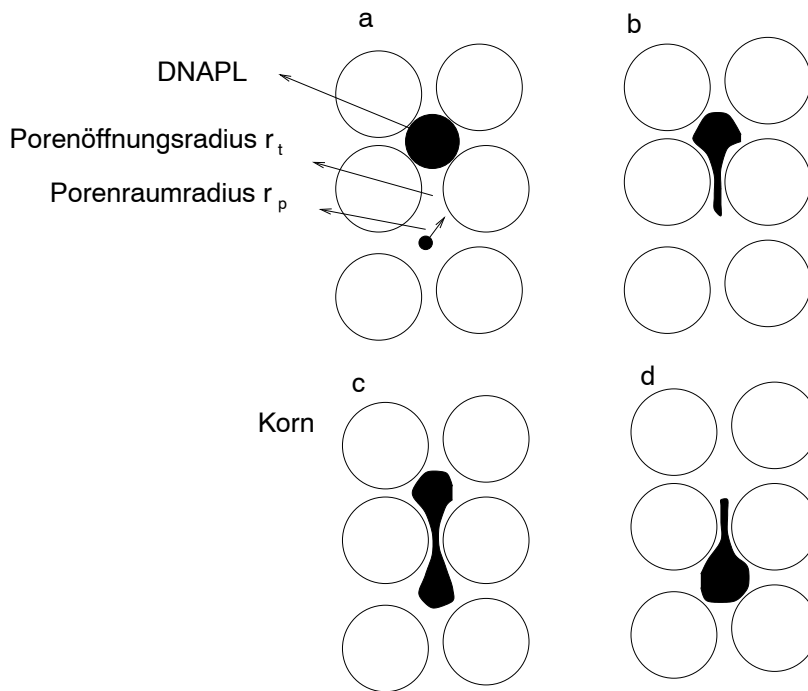


Abbildung 4.1: Eindringen eines DNAPL–Tropfens in wassergesättigte Poren [24]

Die Bedingung, unter der DNAPL die Porenöffnung durchdringen kann, ist, daß der Gravitationsdruck größer als der entgegenwirkende Kapillardruck sein muß:

$$h_n g (\rho_n - \rho_w) > \left[ \frac{2\sigma \cos\theta}{r_t} - \frac{2\sigma \cos\theta}{r_p} \right] \quad (4.4)$$

In Abb. 4.1c bzw. 4.1d ist diese Bedingung erfüllt, deswegen kann DNAPL in die tiefer liegenden Poren eintreten.

Abb. 4.2 zeigt das Fließverhalten von DNAPL auf der Mikroskala in einem porösen Medium, das aus zwei Sandarten (Grob- und Feinsand) besteht. Der Wassergradient wirkt von links nach rechts. Die Abbildung zeigt, daß der Porenradius das Fließverhalten bestimmt. DNAPL kann nicht in den Feinsand (kleine Poren) eintreten und breitet sich an der Grenzfläche im Grobsand aus. Es ist zu erkennen, daß es auch im Grobsand Bereiche mit kleinen Poren gibt, in die DNAPL nicht eindringen kann.



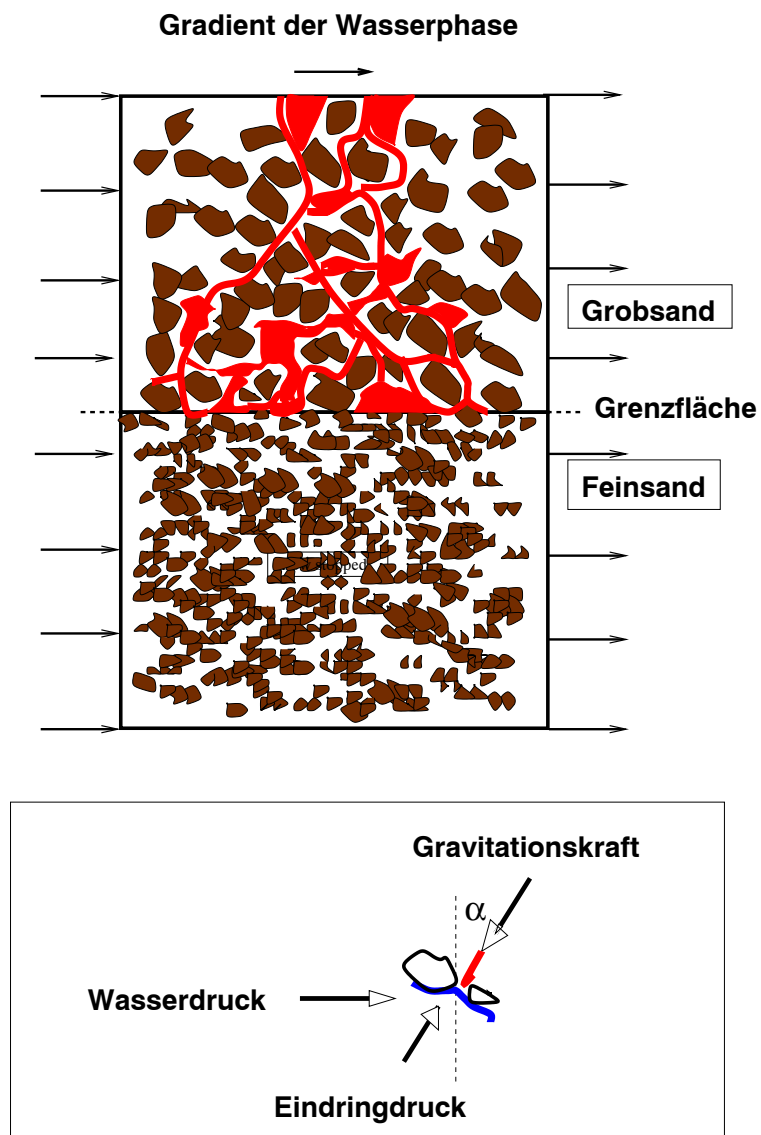


Abbildung 4.2: DNAPL-Ausbreitung bei mikroskaligen Heterogenitäten

## 4.2 Eindringbedingungen auf der Mesoskala

Die mesoskalige Betrachtungsweise nimmt eine Mittelung der physikalischen Eigenschaften verschiedener Poren über ein repräsentatives Elementarvolumen (REV) [11] vor (siehe Abb. 2.1). Auf dieser Skala wird jeder auftretenden Bodenart ein REV mit konstanten Eigenschaften zugeordnet, so daß Gebiete mit unterschiedlichen Permeabilitäten (Linsen) auf dieser Skala berücksichtigt werden. Somit ist es möglich, Stauungen von DNAPL oberhalb einer Linse (*Pooling*-Effekte) nachzubilden. Der Einfluß der Heterogenitäten auf Eindringen und Ausbreitung von NAPL im Untergrund auf der Mesoskala wird durch die Diskontinuität der Sättigungen an der Grenzfläche zweier Schichten beschrieben. Diese Diskontinuität wird durch die Kapillardruck-Sättigungs-Beziehung beider Schichten an der Grenzfläche hervorgerufen. Der Druck der benetzenden Phase sowie der nichtbenetzenden Phase ist an dieser Stelle für beide Schichten gleich ( $p_{n1} = p_{n2}$  und  $p_{w1} = p_{w2}$ ), deswegen ist der Kapillardruck ( $p_c = p_n - p_w$ ) an der Grenzfläche kontinuierlich [11]. Abb. 4.3 zeigt eine Anordnung von REV's mit zwei unterschiedlichen Permeabilitäten, wobei der Feinsand eine Linse mit kleinerer Permeabilität bildet. Die Kapillardruck-Sättigungskurven der beiden Sande sind nach Brooks und Corey (s. Gl. (2.7)) dargestellt. Beim Eindringen von DNAPL in REV II muß der Kapillardruck in REV I an der Ebene I (Grenzfläche I) gleich dem Eindringdruck in REV II sein. An der Grenzfläche II dringt DNAPL sofort in REV I ein, da der Kapillardruck in REV II größer ist als in REV I. Da die Kontinuität des Kapillardrucks gewährleistet sein muß, entsteht dabei eine Diskontinuität der Sättigung.

Anhand der Bedingung, daß der Kapillardruck an der Grenzfläche kontinuierlich sein muß, kann die kritische Stauhöhe von DNAPL (Stauung bis zur Erfüllung der Eindringbedingung) ermittelt werden. Für das Erreichen der Eindringbedingung von DNAPL in eine mit Wasser gesättigte Schicht haben Kueper und McWhorter [73] drei Fälle unterschieden, die in den Abbildungen 4.4, 4.5 und 4.6 dargestellt sind. Die Druckverteilung in der Wasser- und DNAPL-Phase unter hydrostatischen Verhältnissen ist in diesen Abbildungen gezeigt. Die Differenz zwischen Wasser- und DNAPL-Druck ist der Kapillardruck.

### Fall 1 (DNAPL-Körper oberhalb der gesättigten Zone)

Die zum Eindringen des DNAPLs erforderliche Stauhöhe auf Höhe des Wasserspiegels ist:

$$h_d = \frac{p_d}{\rho_n \cdot g} \quad (4.5)$$

**Fall 2 (DNAPL-Körper in der gesättigten Zone mit  $p_c = 0$  am oberen Rand)**

DNAPL liegt am oberen Rand des DNAPL-Körpers in residualer Sättigung vor (diskontinuierlich). Deshalb ist dort der Kapillardruck gleich null. Das bedeutet, daß an dieser Stelle eine Imbibitionsbedingung vorherrscht. Dieser Fall tritt z.B. ein, wenn der DNAPL-Körper die gesättigten Zone in vertikaler Richtung durchströmt. Die für das Eindringen erforderliche DNAPL-Stauhöhe ist:

$$h_d = \frac{p_d}{(\rho_n - \rho_w) \cdot g} \quad (4.6)$$

**Fall 3 (DNAPL-Körper in der gesättigten Zone mit  $p_c > 0$  am oberen Rand)**

Der Kapillardruck an der oberen Schicht des DNAPLs ist ungleich null. DNAPL liegt am oberen Rand des DNAPL-Körpers in kontinuierlicher Phase vor ( $S_n > S_{nr}$ ) und der Kapillardruck ist größer als null. Dies ist z.B. nach einer lateralen Ausbreitung des DNAPLs auf einer Heterogenität der Fall. Die kritische DNAPL-Höhe, die für das Erfüllen der Eindringbedingung erforderlich ist, lautet:

$$h_d = \frac{p_d(fein) - p_d(grob)}{(\rho_n - \rho_w) \cdot g} \quad (4.7)$$

Die kritische Stauhöhe der drei Fälle ist in Tab. 4.1 zusammengefasst.

Tabelle 4.1: Eintrittsbedingung bei hydrostatischen Bedingungen nach [73]

Fall	Abb.	$h_d$
1	4.4	$p_d/[g \cdot \rho_n]$
2	4.5	$p_d(fein)/[g \cdot (\rho_n - \rho_w)]$
3	4.6	$[p_d(fein) - p_d(grob)]/[g \cdot (\rho_n - \rho_w)]$

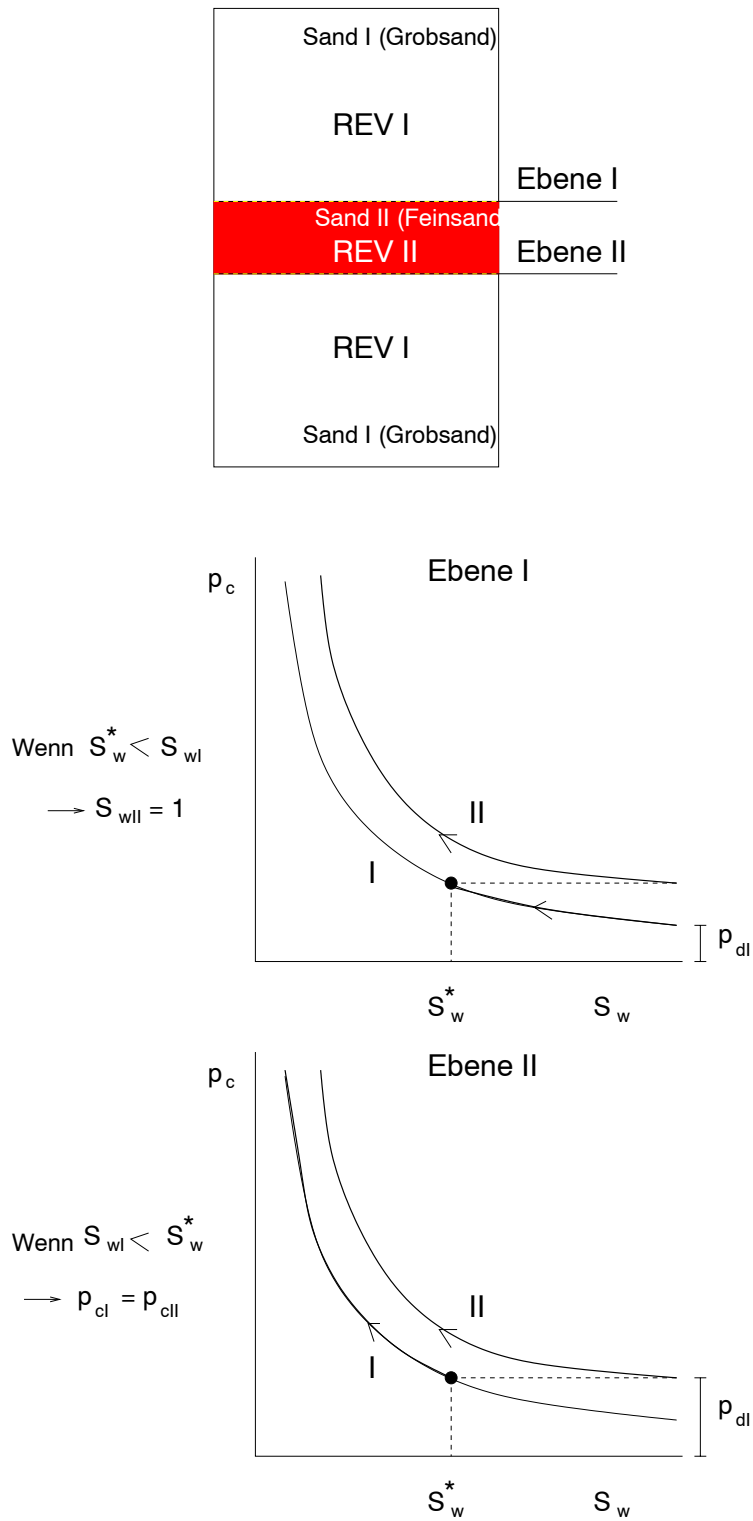


Abbildung 4.3: Mesoskaliges System

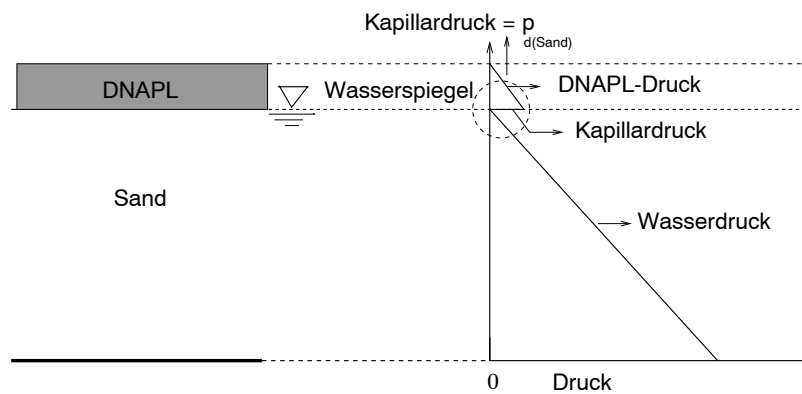
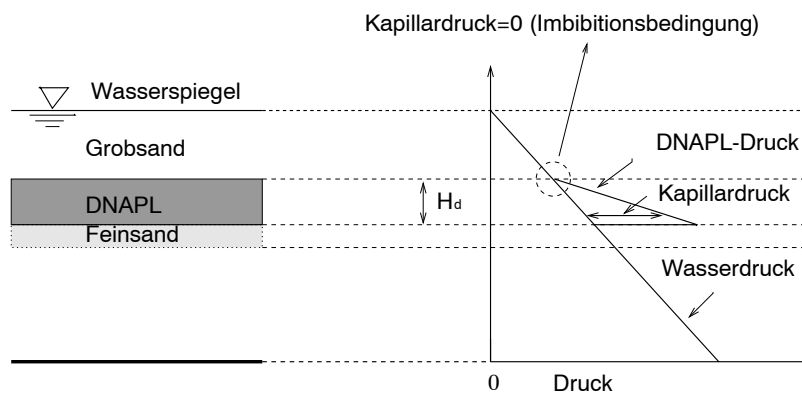
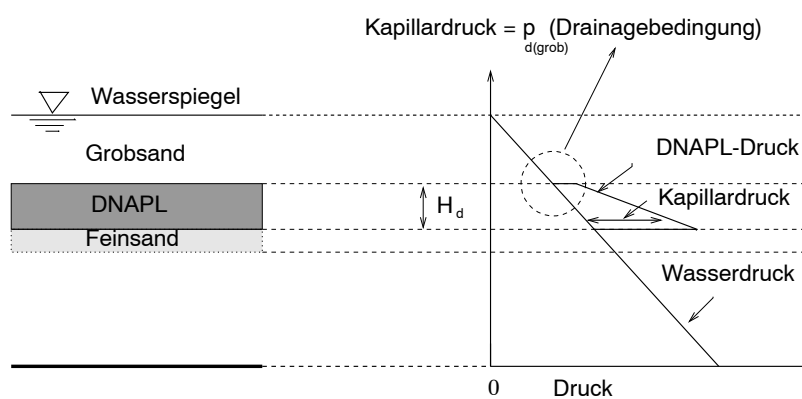


Abbildung 4.4: Infiltration in die gesättigte Zone

Abbildung 4.5: Druckverteilung der DNAPL-Schicht unterhalb des Wasserspiegels mit  $S_n = S_{nr}$  am oberen Rand des DNAPL-Körpers ( $\rightarrow p_c = 0$ )Abbildung 4.6: Druckverteilung der DNAPL-Schicht unterhalb des Wasserspiegels mit  $S_n > S_{nr}$  am oberen Rand des DNAPL-Körpers ( $\rightarrow p_c = p_{d_{grob}}$ )

### 4.3 Eindringbedingungen auf der Makroskala

Bei der Betrachtung der Ausbreitung von DNAPL in heterogenen porösen Medien stellt man sowohl *Pooling*- als auch *Layering*-Effekte fest (s. Abb. 6.12, 6.13). Die *Pooling*-Effekte lassen sich dadurch erklären, daß große Heterogenitäten (Linsen) im Boden vorhanden sind. Dies kann mit dem mesoskaligen Konzept erfaßt werden. Die *Layering*-Effekte (horizontale Ausbreitung von DNAPL im Boden) sind darauf zurückzuführen, daß der Boden nicht homogen verteilt ist, sondern kleine Heterogenitäten vorliegen. Diese Tatsache wird dadurch erfaßt, daß ein homogenes REV in mehrere kleine REVs (Netz-Elemente) aufgeteilt wird, denen jeweils konstante physikalische Parameter zugeordnet werden (s. Abb. 4.7).

Im Rahmen dieser Arbeit wurde hierfür ein Konzept entwickelt, das auf dem Einfluß der Kapillardruck-Sättigungs-Beziehungen basiert.

In diesem Konzept wird für jedes kleine REV ein Eindringdruck  $p_d$  ermittelt, der mit dem mittleren Eindringdruck des homogenen REV  $p_{d_{mittel}}$  gemäß Gl. (4.9) in Beziehung gesetzt wird. Dadurch erhält man für jedes Element eine  $p_c - S_w$ -Beziehung. Mit Hilfe der *Leverett*-J-Funktion lassen sich die Permeabilität und die Porosität in Beziehung zum Kapillardruck setzen:

$$J(S_w) = \frac{p_c}{\sigma \cdot \cos\theta} \cdot \sqrt{\frac{k}{\phi}} \quad (4.8)$$

wobei  $\sigma$  die Grenzflächenspannung,  $\theta$  der Kontaktwinkel,  $\phi$  die Porosität und  $k$  die Permeabilität ist. Unter der Annahme, daß  $\sigma$ ,  $\theta$  und  $\phi$  im System konstant sind, ergibt sich ein Zusammenhang zwischen dem mittleren Eindringdruck (homogenes großes REV) und dem Eindringdruck pro Element (kleines REV) zu:

$$p_{d_i} = p_{d_{mittel}} \sqrt{\frac{k_{mittel}}{k_i}} \quad (4.9)$$

Nach dem Ansatz von Brooks und Corey lautet die  $p_c - S_w$ -Beziehung für jedes Element:

$$p_{c_i}(S_w) = p_{d_i} S_e^{-\frac{1}{\lambda}} \quad (4.10)$$

Es ist anzumerken, daß  $\lambda$  sowie  $S_{wr}$  hier als konstant angenommen werden. Dadurch gilt die relative Permeabilität-Sättigungs-Kurve des großen REVs auch für alle zugehörigen kleinen REVs (s. Gl. (2.87) und (2.88)).

Aus Gl.4.9 ist zu erkennen, daß die Permeabilität jedes kleinen REV's aus dem Eindringdruck des jeweiligen Elementes errechnet werden kann und umgekehrt. Im Rahmen dieser Arbeit wurde die Möglichkeit verwendet, aus einem für das große REV generierten Permeabilitätsfeld die jeweiligen Eindringdrücke der kleinen REV's zu berechnen. Die Generierung basiert auf dem geostatistischen Konzept. Eine Anwendung dieses Konzeptes ist in Kap. 6 beschrieben.

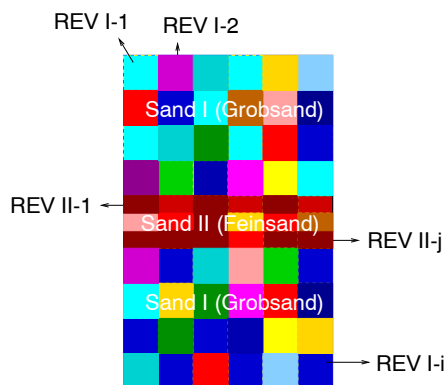


Abbildung 4.7: System auf der Makroskala

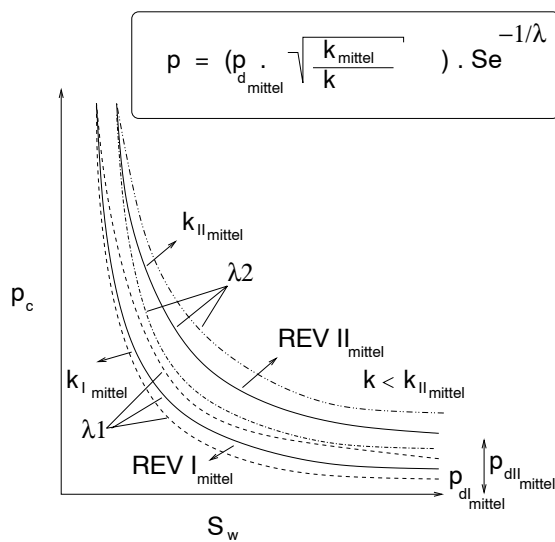


Abbildung 4.8:  $p_c - S_w$  - Kurven für ein System auf der Makroskala

Aus diesen Ausführungen wird deutlich, daß sowohl kleinskalige als auch großskalige Heterogenitäten einen großen Einfluß auf die Ausbreitung von Schadstoffen im Boden haben und es daher wichtig ist, im numerischen Modell eine Möglichkeit zur Berücksichtigung der Verteilung von Bodenkenngrößen vorzuhalten.

# 5 Verifizierung des numerischen Modells

## 5.1 Einleitung

Das für die nachfolgenden Simulationen verwendete Modell *MUFTE-UG* wurde für Probleme ohne Gravitationseinfluß anhand des *Buckley-Leverett*-Problems (ohne Kapillardruckeinfluß) und *McWhorter*-Problems (mit Kapillardruckeinfluß) verifiziert [48].

Die Grundlage bei der Berücksichtigung von Mehrphasenvorgängen mit Hysterese ist die modelltechnische Erfassung des Zweiphasen. Daher wird im Rahmen dieser Arbeit der Algorithmus für Probleme mit Gravitationseinfluß anhand der analytischen Lösung von Rogers et al. [111] überprüft. Des Weiteren wurde *MUFTE-UG* um Aspekte der nichtlinearen Verläufe der  $p_c - S_w$ - und  $k_r - S_w$ -Beziehungen (Hysterese, s. Kap. 3) erweitert. Für die Verifizierung dieser Erweiterung wurde das 1D-Zweiphasensystem- sowie das 1D-Dreiphasensystem-Experiment von Lenhard et al. [80], [78] verwendet.

Die analytische Lösung von Rogers et al. beschreibt eine eindimensionale Zweiphasenströmung in homogenen, porösen Medien unter Einfluß der Gravitation und des Kapillardrucks. Hierbei infiltriert die Wasserphase konstant über den Rand.

Das 1D-Zweiphasensystem- (Wasser-Luft) und das 1D-Dreiphasensystem-Experiment (Wasser-NAPL-Luft) von Lenhard et al. zeigen durch die Variation des Wasserspiegelniveaus den Einfluß der entstehenden Hysterese in der  $p_c - S_w$ - sowie  $k_r - S_w$ -Beziehung auf die Sättigungsverteilung. Die gemessenen Daten wurden mit der numerischen Simulation von *MUFTE-UG* verglichen.

## 5.2 Zweiphasenströmungen mit Gravitationseinfluß

### 5.2.1 Analytische Lösung nach Rogers et al.

Rogers et al. [111] haben eine analytische Lösung für die eindimensionale Zweiphasen-



strömung in porösen Medien unter Berücksichtigung von Gravitation und Kapillardruck für konstante Infiltration von Wasser entwickelt (siehe Abb. 5.1). Das Problem stellt eine Erweiterung der analytische Lösung von Fokas und Yortos [43], die den Effekt der Gravitation nicht berücksichtigt haben, dar.

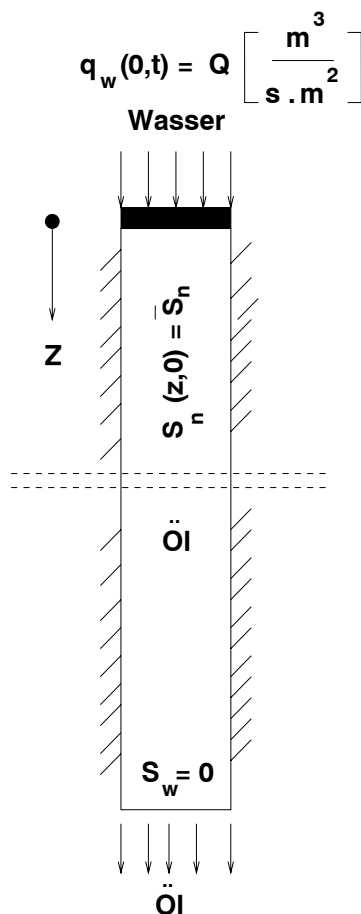


Abbildung 5.1: *Rogers-Problem*

Rogers et al. haben die nichtlineare Mehrphasen-Differentialgleichung (MFDG) nach der Sättigung der nichtbenetzenden Phase  $S_n$  umformuliert. Die konstitutiven Beziehungen werden durch eine lineare relative Permeabilität und eine nichtlineare Kapillardruck-Sättigungs-Beziehung beschrieben. Dadurch wird die nichtlineare MFDG zu einer Gleichung reduziert, die durch zwei sukzessive *Bäcklund-Transformationen* [110] und einer *Hopf-Cole-Transformation* in eine lineare Gleichung umgewandelt werden kann. Diese lineare Gleichung wird unter Verwendung einer *Laplace-Transformation* nach den transformierten Variablen  $(S_n^*, z^*)$  gelöst. Die Lösung der Ausgangsvariablen  $(S_n, z)$  wird von den transformierte Variablen erhalten.

**Formulierung der Mehrphasen-Differentialgleichung nach  $S_n$** 

Die MFDG für die benetzende und die nichtbenetzende Phase sind

$$\phi \frac{\partial S_w}{\partial t} + \frac{\partial q_w}{\partial z} = 0 \quad , \quad (5.1)$$

$$\phi \frac{\partial S_n}{\partial t} + \frac{\partial q_n}{\partial z} = 0 \quad . \quad (5.2)$$

Nun wird der Term  $\frac{\partial q_n}{\partial z}$  in Gleichung (5.2) unter Berücksichtigung der Anfangs- und der Randbedingungen und unter Verwendung des *Darcy*-Gesetzes ersetzt.

Die Anfangsbedingung für  $t = 0$  lautet:

$$S_n(z, 0) = \bar{S}_n \quad \text{für } z > 0 \quad . \quad (5.3)$$

Für einen konstanten Wasserfluß läßt sich die Randbedingung an der Stelle  $z = 0$  wie folgt formulieren:

$$\left. \begin{aligned} q_w(0, t) &= Q \\ q_n(0, t) &= 0 \end{aligned} \right\} t > 0 \quad . \quad (5.4)$$

Mit  $S_w + S_n = 1$  wird Gleichung (5.1) und Gleichung (5.2) unter Verwendung von Gleichung (5.4) addiert. Daraus ergibt sich folgende Beziehung

$$q_n = Q - q_w \quad . \quad (5.5)$$

Das *Darcy*-Gesetz wird auf die beiden Phasen angewendet:

$$q_w = -\lambda_w \left[ \frac{\partial p_w}{\partial z} + \rho_w g \right] \quad , \quad (5.6)$$

$$q_n = -\lambda_n \left[ \frac{\partial p_n}{\partial z} + \rho_n g \right] \quad . \quad (5.7)$$

Die Mobilität ( $\lambda_w, \lambda_n$ ) der beiden Phasen wird durch Gleichung (5.8) und (5.9) beschrieben:

$$\lambda_w = \frac{k k_{rw}}{\mu_w} \quad , \quad (5.8)$$

$$\lambda_n = \frac{k k_{rn}}{\mu_n} \quad . \quad (5.9)$$

Wird die Beziehung in Gleichung (5.5) mit dem *Darcy*-Gesetz für beide Phasen (Gleichungen (5.6) und (5.7)) verwendet, kann  $q_n$  mit Betrachtung der Kapillardruck-Definition  $p_c(S_n) = p_n - p_w$  wie folgt beschrieben werden:

$$q_w = \left( \frac{\lambda_n \lambda_w}{\lambda_n + \lambda_w} \right) \left[ \frac{\partial p_c}{\partial z} + \frac{Q}{\lambda_n} + (\rho_n - \rho_w)g \right] = Q - q_n \quad . \quad (5.10)$$

Setzt man Gleichung (5.10) in Gleichung (5.2) ein, so erhält man die nichtlineare MFDG

$$\frac{\partial S_n}{\partial t} = \frac{1}{\phi} \frac{\partial}{\partial z} \left[ \left( \frac{\lambda_n \lambda_w}{\lambda_n + \lambda_w} \right) \left\{ \frac{\partial p_c}{\partial z} + \frac{Q}{\lambda_n} + (\rho_n - \rho_w)g \right\} \right] \quad \text{für } z > 0, t > 0 \quad (5.11)$$

$S_n$  beschränkt falls  $z \rightarrow \infty, t > 0$  .

### Reduzierung der nichtlinearen MFDG

Die MFDG (5.11) kann formuliert werden als:

$$\frac{\partial S_n}{\partial t} = \frac{\partial}{\partial z} \left[ g(S_n) \frac{\partial S_n}{\partial z} + f(S_n) \right] , \quad (5.12)$$

wobei

$$g(S_n) \equiv \frac{1}{\phi} \left( \frac{\lambda_n \lambda_w}{\lambda_n + \lambda_w} \right) \frac{\partial p_c(S_n)}{\partial S_n} \quad (5.13)$$

und

$$f(S_n) \equiv \frac{Q \lambda_w}{\phi(\lambda_n + \lambda_w)} + \frac{\lambda_n \lambda_w (\rho_n - \rho_w) g}{\phi(\lambda_n + \lambda_w)} . \quad (5.14)$$

Unter Verwendung einer linearen relativen Permeabilität-Sättigungs-Beziehung

$$k_{rw} = 1 - S_n - S_{wr} \quad \text{für } 1 - S_n \geq S_{wr} \quad (5.15)$$

$$k_{rn} = S_n - S_{nr} \quad \text{für } S_n \geq S_{nr} \quad (5.16)$$

kann der Term  $\frac{\lambda_n \lambda_w}{\lambda_n + \lambda_w}$  in Gleichung (5.13) und (5.14) durch

$$\frac{\lambda_n \lambda_w}{\lambda_n + \lambda_w} = \frac{k k_{rn} k_{rw}}{(\mu_w k_{rn} + \mu_n k_{rw})} = \frac{k(S_n - S_{nr})(1 - S_{wr} - S_n)}{[\mu_w(S_n - S_{nr}) + \mu_n(1 - S_{wr} - S_n)]} \quad (5.17)$$

beschrieben werden. Für den Term  $\frac{Q \lambda_w}{\phi(\lambda_n + \lambda_w)}$  in Gleichung (5.14) ergibt sich

$$\frac{Q \lambda_w}{\phi(\lambda_n + \lambda_w)} = \frac{-\alpha}{\beta(\beta S_n + \gamma)} + \delta , \quad (5.18)$$

wobei  $\alpha, \beta, \gamma$  und  $\delta$  sättigungsunabhängige Parameter sind:

$$\delta = \frac{Q \mu_n}{\phi(\mu_n - \mu_w)} , \quad (5.19)$$

$$\frac{\alpha}{\beta^2} = \frac{-Q \mu_n \mu_w (1 - S_{nr} - S_{wr})}{\phi(\mu_n - \mu_w)^2} , \quad (5.20)$$

$$\frac{\gamma}{\beta} = \frac{\mu_w S_{nr} - \mu_n (1 - S_{wr})}{\mu_n - \mu_w} . \quad (5.21)$$

Folgende Bedingungen müssen für den Term  $\frac{\partial p_c(S_n)}{\partial S_n}$  in Gleichung (5.13) immer erfüllt sein:

$$\frac{\partial p_c(S_n)}{\partial S_n} > 0 \quad \text{für} \quad 1 - S_{wr} > S_n > S_{nr} \quad (5.22)$$

$$\frac{\partial p_c(S_n)}{\partial S_n} \rightarrow +\infty \quad \text{für} \quad S_n = S_{nr} \quad \text{bzw.} \quad S_n = 1 - S_{wr} \quad . \quad (5.23)$$

Die Ableitung  $\frac{\partial p_c(S_n)}{\partial S_n}$  des Kapillardrucks  $p_c$  nach der Sättigung der nichtbenetzenden Phase  $S_n$  erhält man, indem man die Funktion  $g(S_n)$  in Gleichung (5.13) durch die Funktion  $\frac{1}{(\beta S_n + \gamma)^2}$  ersetzt und mit Verwendung von Gl. (5.17) ergibt sich:

$$\frac{\partial p_c(S_n)}{\partial S_n} = \frac{\phi(\mu_n - \mu_w)}{\beta^2 k (S - S_{nr})(S_n - (1 - S_{wr}))(S_n + \frac{\gamma}{\beta})} > 0 \quad . \quad (5.24)$$

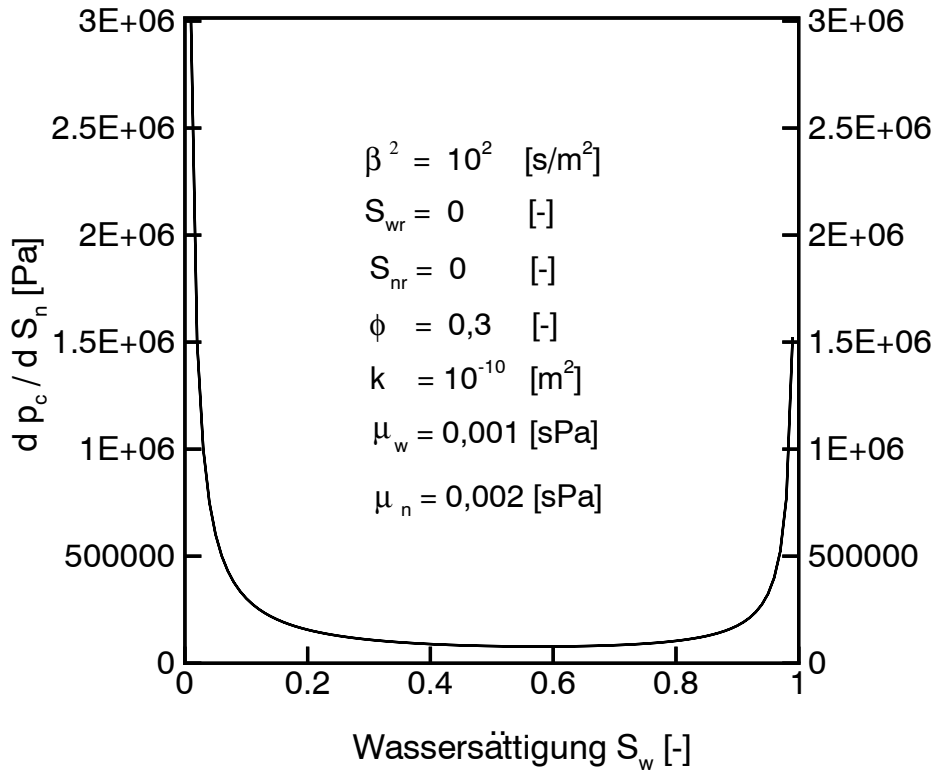


Abbildung 5.2: Ableitung des Kapillardrucks nach  $S_n$

Für ausgewählte Parameter ist Gleichung (5.24) graphisch in Abbildung 5.2 dargestellt. Die Kapillardruck-Sättigungs-Beziehung erhält man durch Integration von Gleichung (5.24):

$$p_c(S_n) = \frac{\phi(\mu_n - \mu_w)}{\beta^2 k} \ln \left\{ (S_n - S_{nr})^a (S_n - (1 - S_{wr}))^b (S_n + \frac{\gamma}{\beta})^c \right\} + d \quad , \quad (5.25)$$

wobei

$$a = \left[ (S_{nr} - (1 - S_{wr}))(S_{nr} + \frac{\gamma}{\beta}) \right]^{-1}, \quad (5.26)$$

$$b = \left[ (1 - S_{wr} - S_{nr})(1 - S_{wr} + \frac{\gamma}{\beta}) \right]^{-1}, \quad (5.27)$$

$$c = \left[ (\frac{\gamma}{\beta} + S_{nr})(\frac{\gamma}{\beta} + (1 - S_{wr})) \right]^{-1}. \quad (5.28)$$

Der Term  $d$  in Gleichung (5.25) ist eine beliebige Integrationskonstante.  $\frac{\gamma}{\beta}$  stellt eine dimensionslose Größe dar, welche von den Residualsättigungen  $S_{wr}$  und  $S_{nr}$  sowie von den dynamischen Viskositäten  $\mu_w$  und  $\mu_n$  abhängig ist (siehe Gleichung (5.21)). Um den Kapillardruck bestimmen zu können, muß  $\beta^2$  bekannt sein.  $\beta^2$  besitzt die inverse Dimension der kinematischen Viskosität. Die Terme  $(S_n - (1 - S_{wr}))$  und  $(S_n + \frac{\gamma}{\beta})$  sind negativ.  $S_{nr}$ ,  $S_{wr}$ ,  $\mu_n$  und  $\mu_w$  müssen so gewählt werden, daß  $b$  bzw.  $c$  eine gerade Zahl ist. Da die Kapillardruck-Sättigungs-Beziehung in der analytischen Lösung von Rogers et al. enthalten ist, gilt diese Bedingung nur für Beispiele, die mit einem numerischen Modell gerechnet werden sollen. Um diese Einschränkung zu vermeiden, wird der Kapillardruck durch numerische Integration von Gl. (5.24) berechnet.

Werden die Gleichungen (5.17), (5.18) und (5.24) in Gleichung (5.12) eingesetzt, reduziert sich die nichtlineare MFDG (5.11) zu folgender Gleichung:

$$\frac{\partial S_n}{\partial t} = \frac{\partial}{\partial z} \left[ \frac{1}{(\beta S_n + \gamma)^2} \frac{\partial S_n}{\partial z} + \left\{ \frac{-\alpha}{\beta(\beta S_n + \gamma)} + \delta \right\} \left\{ 1 + \frac{k(S_n - S_{nr})(\rho_n - \rho_w)g}{Q\mu_n} \right\} \right]. \quad (5.29)$$

### Lösung des Problems

Durch zwei sukzessive *Bäcklund*-Transformationen [110] und eine *Hopf-Cole*-Transformation wird die nichtlineare MFDG (5.29) in eine lineare Gleichung umgewandelt

$$\frac{\partial S_n^*}{\partial t} = \frac{\partial^2 S_n^*}{\partial z^{*2}} + \delta^* \frac{\partial S_n^*}{\partial z^*} \quad \text{für } t > 0 \quad (5.30)$$

$S_n^*$  beschränkt falls  $z^* \rightarrow \infty$ ,  $t > 0$ .

Durch Anwendung einer *Laplace*-Transformation auf Gleichung (5.30) ergibt sich die Lösung

$$S_n^*(z^*, t) = \frac{1}{2} e^{\frac{\delta^* z^*}{2} - \varepsilon^* t} \left[ e^{z^* \sqrt{\frac{\delta^{*2}}{4} - \varepsilon^*}} \operatorname{Erfc} \left( \frac{z^*}{2t^{1/2}} + t^{1/2} \sqrt{\frac{\delta^{*2}}{4} - \varepsilon^*} \right) \right]$$

$$\begin{aligned}
& + e^{-z^* \sqrt{\frac{\delta^{*2}}{4} - \varepsilon^*}} \operatorname{Erfc} \left( \frac{z^*}{2t^{1/2}} - t^{1/2} \sqrt{\frac{\delta^{*2}}{4} - \varepsilon^*} \right) \\
& - \frac{1}{2} e^{(\beta^* - \delta^*)z^*} \left[ e^{-\beta^* z^*} \operatorname{Erfc} \left( \frac{z^*}{2t^{1/2}} + \left( \frac{\delta^*}{2} - \beta^* \right) t^{1/2} \right) \right. \\
& + e^{(\beta^* - \delta^*)z^*} \operatorname{Erfc} \left( \frac{z^*}{2t^{1/2}} - \left( \frac{\delta^*}{2} - \beta^* \right) t^{1/2} \right) \left. \right] \\
& + e^{-\beta^* z^* + [\beta^* - \delta^*]t} \equiv \Phi(z^*, t)
\end{aligned} \tag{5.31}$$

für  $t > 0$  .

$z^*$  und  $S_n^*$  sind transformierte Variablen. Die Ausgangsvariablen  $z$  und  $S_n$  werden erhalten durch

$$S_n = \frac{\alpha}{\beta} \frac{\Phi(z^*, t)}{\frac{\partial \Phi(z^*, t)}{\partial z^*}} - \frac{\gamma}{\beta} , \tag{5.32}$$

$$z = \int_0^{z^*} \frac{\frac{\partial \Phi(\sigma, t)}{\partial \sigma}}{\alpha \Phi(\sigma, t)} d\sigma , \tag{5.33}$$

wobei

$$\begin{aligned}
\frac{\partial S_n^*(z^*, t)}{\partial z^*} & = -\frac{1}{4} \delta^* e^{-\frac{\delta^* z^*}{2} - \varepsilon^* t} \left[ e^{z^* \sqrt{\frac{\delta^{*2}}{4} - \varepsilon^*}} \operatorname{Erfc} \left( \frac{z^*}{2t^{1/2}} + t^{1/2} \sqrt{\frac{\delta^{*2}}{4} - \varepsilon^*} \right) \right. \\
& + e^{-z^* \sqrt{\frac{\delta^{*2}}{4} - \varepsilon^*}} \operatorname{Erfc} \left( \frac{z^*}{2t^{1/2}} - t^{1/2} \sqrt{\frac{\delta^{*2}}{4} - \varepsilon^*} \right) \left. \right] \\
& + \frac{1}{2} e^{-\frac{\delta^* z^*}{2} - \varepsilon^* t} \left[ \sqrt{\frac{\delta^{*2}}{4} - \varepsilon^*} e^{z^* \sqrt{\frac{\delta^{*2}}{4} - \varepsilon^*}} \operatorname{Erfc} \left( \frac{z^*}{2t^{1/2}} + t^{1/2} \sqrt{\frac{\delta^{*2}}{4} - \varepsilon^*} \right) \right. \\
& - \frac{e^{z^* \sqrt{\frac{\delta^{*2}}{4} - \varepsilon^*}} e^{-\left( \frac{z^*}{2t^{1/2}} + t^{1/2} \sqrt{\frac{\delta^{*2}}{4} - \varepsilon^*} \right)^2}}{\sqrt{\pi} t^{1/2}} \\
& - \sqrt{\frac{\delta^{*2}}{4} - \varepsilon^*} e^{-z^* \sqrt{\frac{\delta^{*2}}{4} - \varepsilon^*}} \operatorname{Erfc} \left( \frac{z^*}{2t^{1/2}} - t^{1/2} \sqrt{\frac{\delta^{*2}}{4} - \varepsilon^*} \right) \\
& - \left. \frac{e^{-z^* \sqrt{\frac{\delta^{*2}}{4} - \varepsilon^*}} e^{-\left( \frac{z^*}{2t^{1/2}} - t^{1/2} \sqrt{\frac{\delta^{*2}}{4} - \varepsilon^*} \right)^2}}{\sqrt{\pi} t^{1/2}} \right] \\
& - \frac{1}{2} e^{(\beta^* - \delta^*)z^*} \left[ -\beta e^{-\beta^* z^*} \operatorname{Erfc} \left( \frac{z^*}{2t^{1/2}} + \left( \frac{\delta^*}{2} - \beta^* \right) t^{1/2} \right) \right. \\
& + (\beta^* - \delta^*) e^{(\beta^* - \delta^*)z^*} \operatorname{Erfc} \left( \frac{z^*}{2t^{1/2}} - \left( \frac{\delta^*}{2} - \beta^* \right) t^{1/2} \right) \left. \right]
\end{aligned}$$

$$\begin{aligned}
& - \frac{e^{-\beta^* z^*} e^{-\left(\frac{z^*}{2t^{1/2}} + \left(\frac{\delta^*}{2} - \beta^*\right)t^{1/2}\right)^2}}{\sqrt{\pi} t^{1/2}} \\
& - \frac{e^{(\beta^* - \delta^*) z^*} e^{-\left(\frac{z^*}{2t^{1/2}} - \left(\frac{\delta^*}{2} - \beta^*\right)t^{1/2}\right)^2}}{\sqrt{\pi} t^{1/2}} \Bigg] \\
& - \beta e^{-\beta^* z^* + [\beta^* - \delta^*] t} \equiv \frac{\partial \Phi(z^*, t)}{\partial z^*} \tag{5.34}
\end{aligned}$$

für  $t > 0$

mit

$$\varepsilon = \frac{k(\rho_n - \rho_w)g}{Q\mu_n} \tag{5.35}$$

$$\acute{\alpha} = \alpha \left[ 1 - \varepsilon \left( \frac{\gamma}{\beta} + S_{nr} \right) \right] \tag{5.36}$$

$$\acute{\beta} = \beta \left[ \varepsilon \left\{ \frac{\alpha}{\beta^2} + \delta \left( \frac{\gamma}{\beta} + S_{nr} \right) \right\} - \delta \right] \tag{5.37}$$

$$\acute{\gamma} = -\delta\varepsilon \tag{5.38}$$

$$\delta^* = \frac{\beta}{\phi(\mu_n - \mu_w)} \left[ \frac{k(1 - S_{wr} - S_{nr})(\rho_w - \rho_n)g(\mu_n + \mu_w)}{(\mu_n - \mu_w)} - Q\mu_w \right] \tag{5.39}$$

$$\varepsilon^* = \frac{\acute{\alpha}k(\rho_w\rho_n)g}{\phi(\mu_n - \mu_w)} \tag{5.40}$$

$$\beta^* = -\frac{\acute{\alpha}}{\beta(\bar{S}_n + \frac{\gamma}{\beta})} . \tag{5.41}$$

Folgende Bedingungen müssen immer erfüllt sein:

$$\beta < 0 \quad , \quad \left( S_n + \frac{\gamma}{\beta} \right) < 0 \quad , \quad \mu_n > \mu_w \quad , \quad \delta^* > 0 \quad , \quad \beta^* > 0$$

$$\text{Falls } \rho_w > \rho_n \rightarrow Q > \frac{K(\rho_w - \rho_n)g}{\mu_n - \mu_w} [1 - S_{wr} - S_{nr}] .$$

### 5.2.2 Vergleich mit numerischer Simulation

Um die Ergebnisse der numerischen Simulation mit der analytischen Lösung nach Rogers et al. vergleichen zu können, wird das in Abb. 5.3 dargestellte 2D-Modellgebiet gewählt. Die gewählten Simulationsparameter sind:

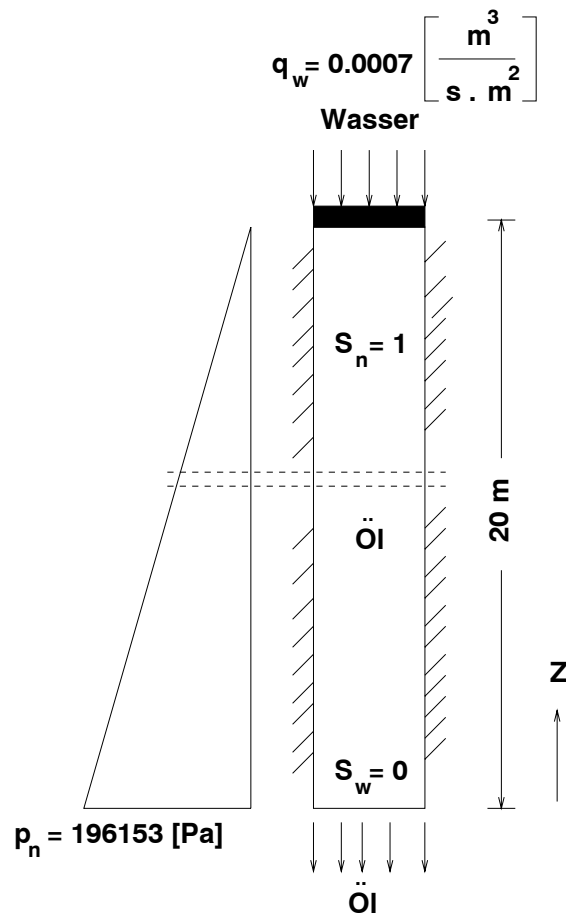


Abbildung 5.3: Rogers-Problem: Anfangs- und Randbedingungen

Gesteinseigenschaften:

Permeabilität  $k = 10^{-10} \text{ [m}^2\text{]}$

Porosität  $\phi = 0.3 \text{ [-]}$

Die lineare relative Permeabilität-Sättigungs-Beziehung ist in Abbildung 5.4 dargestellt. Abbildung 5.5 zeigt die Kapillardruck-Sättigungs-Beziehung nach Rogers et al..



Fluideigenschaften:

Dichte Wasser	$\rho_w = 1000$	$[\frac{kg}{m^3}]$
Dichte Öl	$\rho_n = 900$	$[\frac{kg}{m^3}]$
Dynamische Viskosität Wasser	$\mu_w = 10^{-3}$	$[Pa \cdot s]$
Dynamische Viskosität Öl	$\mu_n = 2 \cdot 10^{-3}$	$[Pa \cdot s]$

Raumdiskretisierung:

$$\Delta x = 0.125 \quad [m] \quad \text{Breite } (8\Delta x) = 1 \quad [m]$$

$$\Delta z = 0.125 \quad [m] \quad \text{Länge } (160\Delta z) = 20 \quad [m]$$

Zeitdiskretisierung:

$$\Delta t = 10 \quad [s]$$

$$t_{max} = 1000 \quad [s]$$

Anfangsbedingung:

$$\text{Sättigung Öl } S_n = 1.0 \quad [-]$$

Randbedingung:

bei $z = 20$	$[m]$	bei $z = 0$	$[m]$
Fluß Wasser $q_w = 0.0007$	$[m^3/(s \cdot m^2)]$	Sättigung Wasser = 0	$[-]$
		Druck Öl = 196153	$[Pa]$

Der Formbeiwert  $\beta$  ist zu  $\beta = -10$  und die transformierte Variable  $z^*$  zu  $z^* = 150$  gewählt worden. Mit den zuvor gewählten Simulationsparametern sind alle erforderlichen Bedingungen für die analytische Lösung vollständig gegeben. Abbildung 5.6 zeigt die berechneten Sättigungsprofile für verschiedene Zeitschritte im Vergleich zur analytischen Lösung. Es ist eine sehr gute Übereinstimmung der beiden Lösungen zu erkennen.

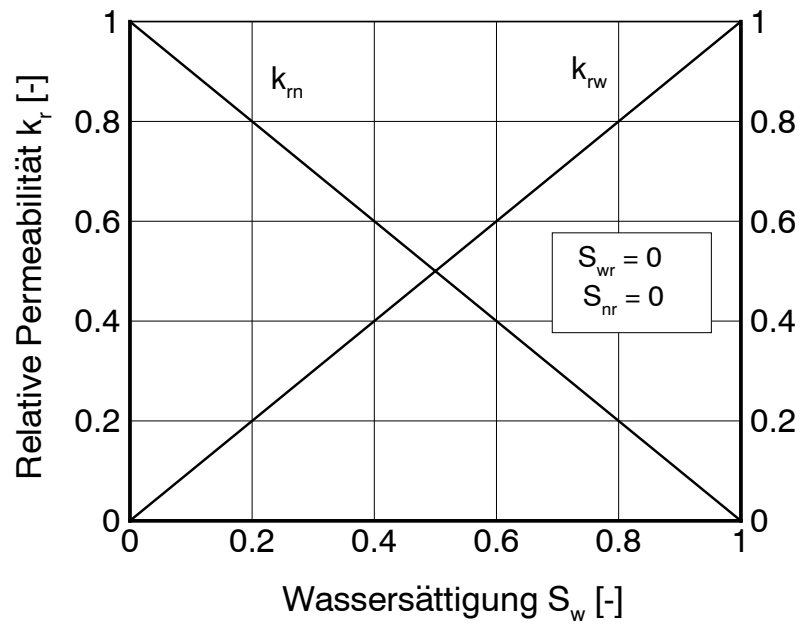


Abbildung 5.4: Rogers-Problem: Relative Permeabilität-Sättigungs-Beziehung

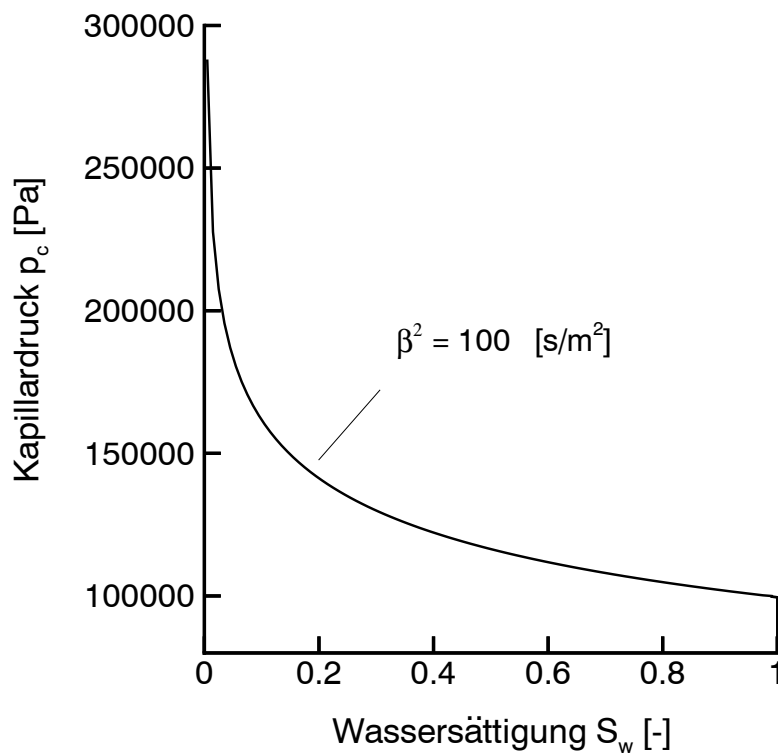
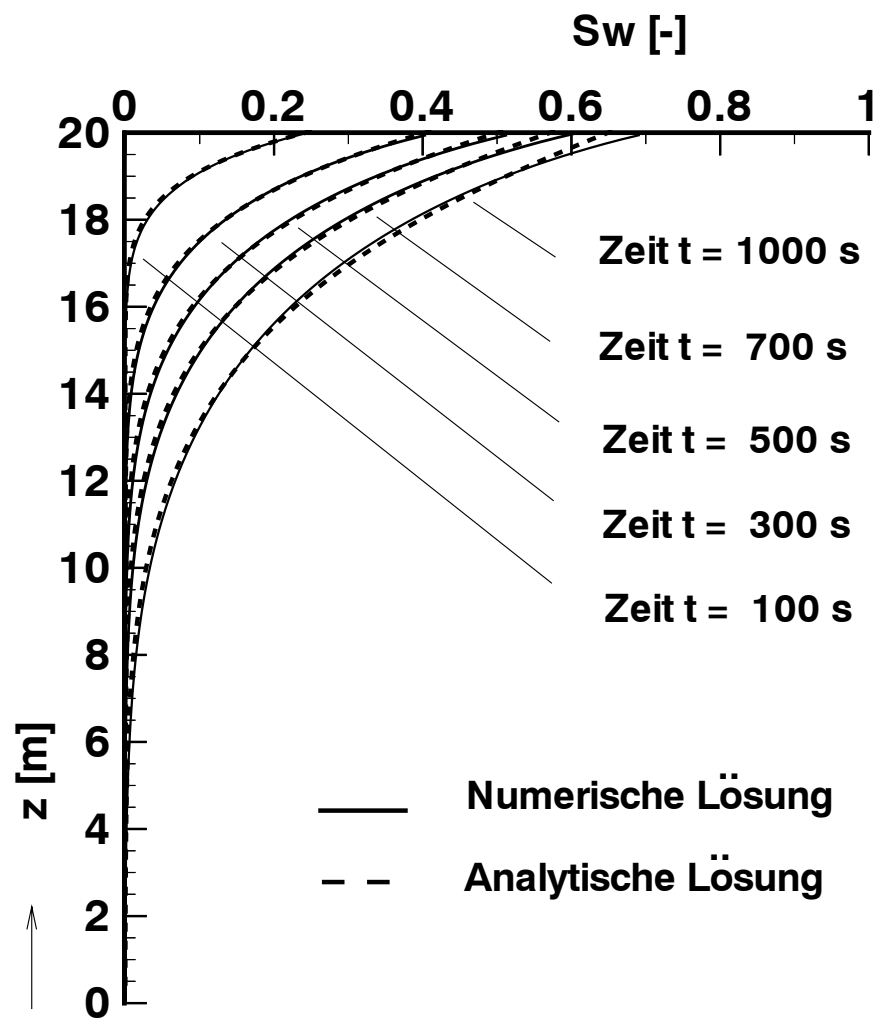


Abbildung 5.5: Rogers-Problem: Kapillardruck-Sättigungs-Beziehung

Abbildung 5.6: *Rogers*-Problem: Sättigungsprofile zu verschiedenen Zeitpunkten

## 5.3 Zweiphasenströmungen unter Berücksichtigung von Hysterese-Effekten

Zur Identifikation der Hysterese-Effekte in Zweiphasensystemen haben Lenhard et al. (1987)[80] in ihrem 1D-Wasser-Luft-Experiment den Einfluß einer Variierung des Wasserspiegelniveaus auf die Sättigungsverteilung untersucht. Durch diese veränderlichen Niveaus des Wasserspiegels entsteht Hysterese in der  $p_c - S_w$ - und der  $k_r - S_w$ -Beziehung. Die von Lenhard gemessenen Daten wurden zum Vergleich mit den mit Hilfe des Simulators *MUFTE-UG* erzielten numerischen Ergebnissen herangezogen. Damit dient das Experiment zur Verifikation des in *MUFTE-UG* implementierten Hysterese-Konzeptes nach der Theorie von Kool und Parker (s. Kap. 3).

Für das Laborexperiment wurde eine Glassäule mit Sand gefüllt. Die entstehende Sandsäule (poröses Medium) hat die Dimensionen von 6.0 cm Länge x 72.0 cm Höhe x 6.5 cm Dicke. Die Kapillardrücke bzw. die Wassersättigungen wurden in den Höhen 67, 57, 47, 37 und 27 cm gemessen. Eine ausführliche Beschreibung der dabei zum Einsatz gekommenen Meßverfahren zeigt Lenhard et al. [80].

Es wurden zwei Experimente mit variierenden Wasserspiegelniveaus durchgeführt. Dazu diente eines zur Bestimmung der Hauptdrainagekurve und der sich an eine vollständige Hauptdrainage anschließende erste Sekundärimbibitionskurve. Im zweiten Experiment wurden verschiedene Sekundärkurven für Drainage und Imbibition ermittelt.

### 5.3.1 Experiment I (Hauptdrainage- und erste Sekundärimbibitionskurve)

Zu Beginn des Experimentes ist das Wasserspiegelniveau auf eine Höhe von 67 cm eingestellt. Zum Zeitpunkt  $t = 0$  wurde der Wasserspiegel  $H$  durch den regulierbaren unteren Rand um 5 cm abgesenkt. Dann wurde der Wasserspiegel alle 10 Minuten in Schritten von  $\Delta H = 5$  cm bis zu einer Höhe von 7 cm zum Zeitpunkt  $t = 2$  h reduziert und anschließend bis  $t = 53$  h auf diesem Niveau konstant gehalten. Die Meßdaten in diesem Abschnitt des Experimentverlaufs liefern die Hauptdrainagekurve. Um nun die Primärimbibitionskurve zu beschreiben, wurde das Wasserspiegelniveau wieder im Abstand von 10 Minuten um jeweils 5 cm bis zum Anfangsniveau angehoben.

Tabelle 5.1: Physikalische Eigenschaften des Sandes

$d\alpha[1/Pa]$	$n[-]$	$S_{wr}[-]$	$S_{nr}$	$k[m^2]$	$\phi[-]$
0.00052	4.63	0.0	0.25	3.54E-11	0.36

Mit Hilfe des Verlaufs der Hauptdrainagekurve wurden die van Genuchten Fitting Parameter  $d\alpha$ ,  $n$  und  $S_{wr}$  bestimmt (s. Tab. 5.1). Die residuale Sättigung der Luftphase für die Hauptimbibitionskurve wurde von Parker und Lenhard (1987)[102] zu 0.25 ermittelt. Es wird dabei angenommen, daß  $\alpha$ ,  $n$  und  $S_{wr}$  für die Hauptdrainage- bzw. Hauptimbibitionskurven gleich sind. Somit läßt sich die im Verlauf des Experiments zu beobachtende Hysterese auf den Einfluß der Phaseneinschließung ( $S_{nr}$ ) beschränken.

Die physikalischen Eigenschaften des Sandes sind in Tabelle 5.1 angegeben. Die nicht experimentell ermittelte relative Permeabilität-Sättigungs-Beziehung beider Phasen wurde nach dem Ansatz von Lenhard et al. angenommen.

## Numerische Simulation

### Räumliche Diskretisierung

Das Modellgebiet (6.0 cm (Breite) x 6.5 cm (Dicke) x 72.0 cm (Höhe)) wurde mit Hilfe eines regelmäßigen 2D-Netzes diskretisiert. Die Elementabmessungen betragen 3.0 cm in horizontaler und 2.5 cm in vertikaler Richtung mit Ausnahme der Elemente unterhalb der Höhe 7 cm. Hier werden Elemente mit einer vertikalen Ausdehnung von 3.5 cm verwendet. Die Elementdicke beträgt jeweils 6.5 cm. Daraus resultiert dann ein Netz bestehend aus 60 Elementen und 93 Knoten. Als maximale Zeitschrittlänge wurden 200 Sekunden gewählt.

### Anfangs- und Randbedingungen

Die Säule ist vor Beginn der Wasserdrainage bis zur Höhe 67 cm vollständig mit Wasser gesättigt. Am oberen Rand wurde eine *Dirichlet*-Randbedingung für die Luftsättigung von 100 % ( $S_n = 1.0$ ) und für den Wasserdruck von -19048.8 Pa angegeben. Dieser Wasserdruck läßt sich mit der Definition des Kapillardrucks ( $p_{cnw} = p_n - p_w$ ) berechnen, wobei  $p_n$  dem atmosphärischen Luftdruck ( $p_n = 0.0$ ) entspricht. Am unteren Rand wurde eine *Dirichlet*-Randbedingung für die Luftphase ( $S_n = 0$ ) und der Wasserdruck als Funktion von der Zeit  $t$  vorgegeben ( $p_w = 72 \cdot 19.08 - 490 \cdot t$ ). Der linke und rechte Modellrand wurde jeweils als undurchlässig betrachtet (*Neumann*-Randbedingungen  $q_n = q_w = 0$ ).

### Diskussion der numerischen Simulation im Vergleich zum Experiment

Abb. 5.7 stellt die gemessenen bzw. numerisch berechneten zeitlichen Sättigungsverteilungen der Wasserphase in den Höhen  $67\text{ cm}$ ,  $57\text{ cm}$ ,  $47\text{ cm}$ ,  $37\text{ cm}$  und  $27\text{ cm}$  dar. Die Übereinstimmung der experimentellen mit den numerischen Ergebnissen ist qualitativ sehr gut mit Ausnahme der Meßstelle in Höhe von  $57\text{ cm}$ . Dort wurde im Experiment eine Schicht mit feinem Material beobachtet [80]. Leichte Abweichungen zwischen den berechneten und gemessenen Sättigungen bei der Meßhöhe  $27\text{ cm}$  während des Drainagezyklusses können teilweise darauf zurückgeführt werden, daß für diese Meßhöhe aufgrund der Randbedingungen Druck-Sättigungs-Verhältnisse erreicht werden, die in einem relativ flachen Bereich der Kapillardruck-Sättigungs-Kurve liegen. Dadurch führen bereits geringe Unterschiede des Drucks zu starken Veränderungen der Sättigung [80]. Nach Anhebung des Wasserspiegels auf die Höhe  $72\text{ cm}$  (nach  $55\text{ h}$ ) bleibt die Wassersättigung bei allen Meßstellen in Experiment und numerischer Simulation konstant bei einem Wert  $< 1$ . Dies ist darauf zurückzuführen, daß das poröse Medium dabei mit Wasser und den eingeschlossenen immobilen Luftbläschen gesättigt ist.

### Zusammenfassung

Wie die aufgelisteten Ergebnisse gezeigt haben, erweist sich beim Vergleich der räumlichen Ausbreitung von NAPL die Übereinstimmung der numerischen Ergebnisse mit den experimentellen als sehr gut. Hiermit wurde der entwickelte Algorithmus zur Betrachtung einer Hysterese-Schleife validiert. Um die Gültigkeit der Anwendung dieses Modells bei Berücksichtigung mehrerer Hysterese-Schleifen sicherzustellen, ist der Vergleich mit einem weiteren Experiment notwendig.

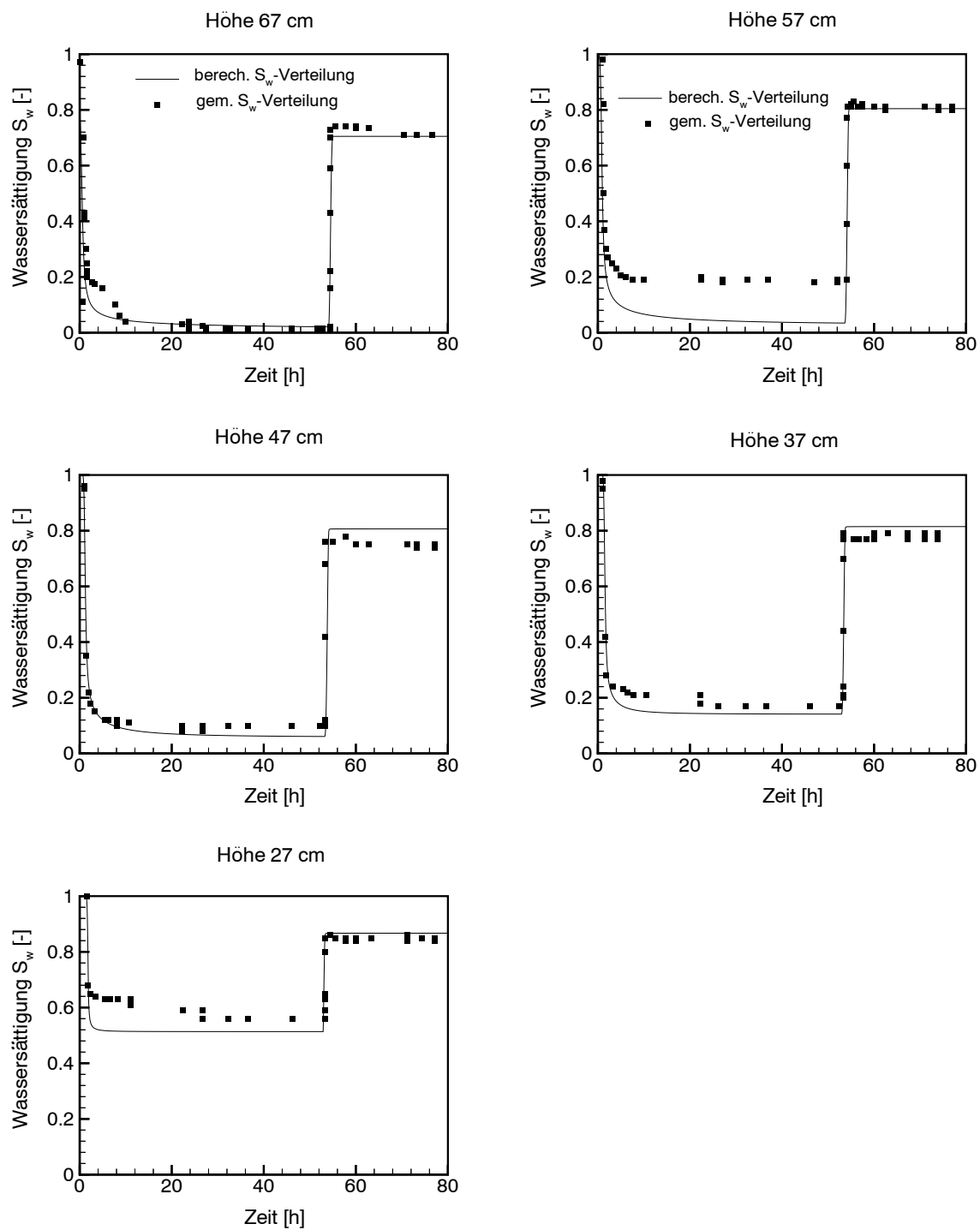


Abbildung 5.7: Vergleich zwischen gemessener und berechneter Wassersättigung an den Höhen 67 cm bis 27 cm

### 5.3.2 Experiment II (Sekundärdrainage- und -imbibitionskurven)

Die Variation des Wasserspiegels in Experiment II wurde so eingestellt, daß sich geschlossene Schleifen in den  $p_c - S_w$ -Kurven ergeben. Vor Beginn des Experimentverlaufes wurde der Wasserspiegel auf einer Höhe von 72 cm gehalten. Bei  $t = 0$  wurde er um 5 cm gesenkt. Mit gleicher Rate wie in Experiment I (5 cm je 10 min) fand eine Absenkung des Wasserspiegels statt, so daß die Höhe 7 cm bei  $t = 2$  h erreicht wurde. Der Wasserspiegel wurde dort eine Stunde konstant gehalten (bis  $t = 3$  h). Dieser Vorgang beschreibt die Hauptdrainagekurve. Der Wasserspiegel wurde anschließend bis zur Höhe 42 cm bei  $t = 4$  h angehoben und bis  $t = 5$  h stationär gehalten. Hier wurde die Primärimbibitionskurve nachgebildet. Die Erstsekundärdrainagekurve wurde durch die Absenkung des Wasserspiegels von 42 cm bis  $H = 17$  cm bei  $t = 5.67$  h erzeugt. Der Wasserspiegel wurde bis  $t = 6.67$  h stationär gehalten. Die Erstsekundärimbibitionskurve wurde durch die Anhebung des Wasserspiegels von 17 cm bis  $H = 72$  cm bei  $t = 8.33$  h erzeugt. Hier wurde eine geschlossene Schleife der  $p_c - S_w$ -Kurve gebildet. Die Messungen des Kapillardrucks bzw. der Wassersättigung wurden bis  $t = 10$  h durchgeführt. Alle Bewegungen des Wasserspiegels wurden mit der gleichen Rate wie im Experiment I (5 cm je 10 min) ausgeführt.

Die physikalischen Eigenschaften des Sandes sind in Tabelle 5.2 gezeigt.

#### Numerische Simulation

##### Räumliche Diskretisierung

Wie in Experiment I.

##### Anfangs- und Randbedingungen

Die Säule ist vor Beginn der Wasserdrainage bis zur Höhe 72 cm vollständig mit Wasser gesättigt. Am oberen Rand wurde eine *Dirichlet*-Randbedingung für die Luftsättigung von 100 % ( $S_n = 1.0$ ) und für den Wasserdruck von -17849.95 Pa angegeben. Am unteren Rand wurde eine *Dirichlet*-Randbedingung für die Luftphase ( $S_n = 0$ ) und der Wasserdruck als Funktion von der Zeit vorgegeben. Der linke und rechte Modellrand wurden jeweils als undurchlässig betrachtet (*Neumann*-Randbedingungen  $q_n = q_w = 0$ ).

##### **Diskussion der numerischen Simulation im Vergleich zum Experiment**

Für die numerische Simulation wurden die Parameter in Tab. 5.2 verwendet, wobei  $d\alpha = \alpha/2$  ist. In Abb. 5.8 sind die gemessenen und die berechneten Kapillardruck-



Tabelle 5.2: Physikalische Eigenschaften des Sandes in Experiment II

$d\alpha[1/Pa]$	$n[-]$	$S_{wr}[-]$	$S_{nr}$	$k[m^2]$	$\phi[-]$
0.00042	5.25	0.17	0.25	3.37E-11	0.36

Sättigungs-Werte bei den Höhen 70 cm, 60 cm, 50 cm und 40 cm dargestellt. Die Abbildung zeigt geschlossene Schleifen der  $p_c - S_w$ -Kurven. Zum Beispiel steigt bei der Höhe 50 cm der Kapillardruck  $p_c$  bei Absenkung des Wasserspiegels bis  $H = 7$  cm (Hauptdrainagekurve) bis ca.  $p_c = 3750$  Pa an (berechnet  $p_c = 3426$  Pa,  $S_w = 0.33$ ). Mit Anhebung des Wasserspiegels von 7 cm auf 42 cm (Primärimbibitionskurve) sinkt der Kapillardruck bis ca. 800 Pa (berechnet  $p_c = 742$  Pa,  $S_w = 0.77$ ). Durch Absenkung des Wasserspiegels auf  $H = 17$  cm (Primärdrainagekurve), steigt der Kapillardruck bis ca. 3120 Pa (berechnet  $p_c = 3117$  Pa,  $S_w = 0.35$ ). Mit Anhebung des Wasserspiegels bis  $H = 72$  cm (Erstsekundärimbibitionskurve) schließt sich die Schleife bei dem Kapillardruck 742 Pa. Die Primärimbibitionskurve läuft bis  $p_c = -2035$  Pa und  $S_w = 0.807$ , wobei die residuale Sättigung der Luftphase ca. 20% ist. Bei den Höhen 70 cm und 60 cm ist der Kapillardruckgradient bei dem Vorgangswechsel sehr steil, dadurch ist die Varianz der Wassersättigung sehr klein. Die sekundären Schleifen zeigen einen kleinen Hystereseverlauf [80]. Die berechneten Werte zeigen eine gute Übereinstimmung mit den gemessenen Werten.

Abb. 5.9 zeigt einen Vergleich zwischen den gemessenen und berechneten Wassersättigungen. Die numerische Simulation wird mit Betrachtung der Hysterese bzw. ohne Betrachtung der Hysterese durchgeführt. Die Übereinstimmung der gemessenen mit den berechneten Werten bei Betrachtung der Hysterese läßt sich als sehr gut im Vergleich zur Betrachtung ohne Hysterese einstufen.

### Zusammenfassung

Die Ergebnisse der Modellierung von mehrfachen Hysterese-Schleifen mit dem Modell *MUFTE-UG* zeigt eine sehr gute Übereinstimmung mit den experimentell ermittelten Daten.

Anhand der sehr guten Übereinstimmung von Experimenten und numerischen Ergebnissen wurde somit die Gültigkeit der Anwendung des Modells *MUFTE-UG* mit Berücksichtigung von Hysterese-Effekten in Zweiphasensystemen erwiesen.

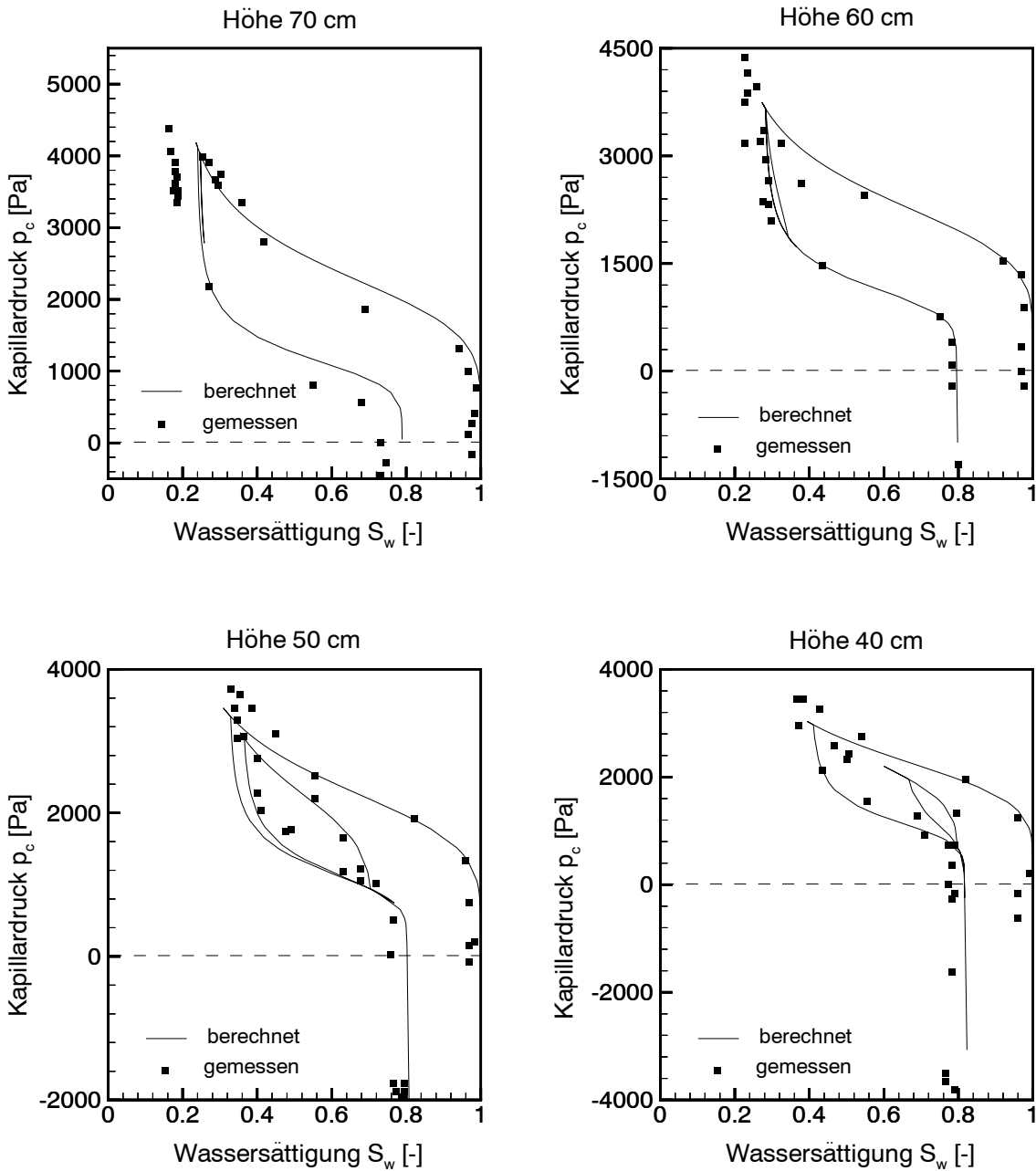


Abbildung 5.8: Vergleich zwischen gemessener und berechneter  $p_c - S_w$ -Beziehungen an den Höhen 70 cm bis 40 cm

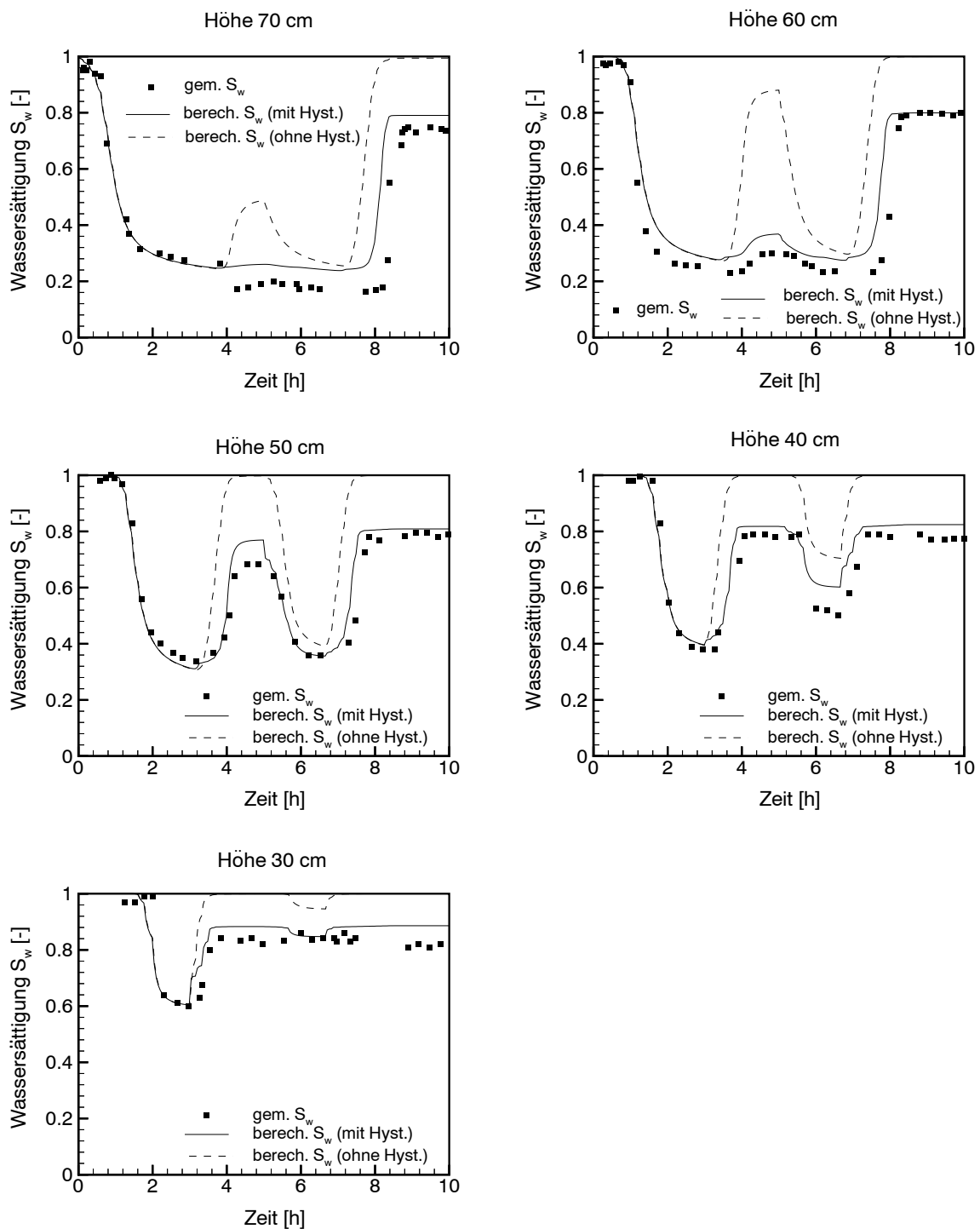


Abbildung 5.9: Vergleich zwischen gemessener und berechneter Wassersättigung an den Höhen 70 cm bis 30 cm

## 5.4 Dreiphasenströmungen unter Berücksichtigung von Hysterese-Effekten

Um die in *MUFTE-UG* im Rahmen dieser Arbeit implementierten Hysterese-Ansätze auch für Dreiphasensysteme zu validieren, wurde das 1D-Dreiphasen-Experiment von Lenhard et al. (1993)[78] verwendet. In diesem Experiment wurde durch die Variation des Wasserspiegels und durch die Infiltration von LNAPL Hysterese in den  $p_c - S_w$ - sowie  $k_r - S_w$ -Kurven hervorgerufen. Die Sättigung der Wasserphase und der LNAPL-Phase an bestimmten Stellen wurde mit Verwendung eines *gamma-radiation attenuation apparatus* gemessen und ausgewertet. Die experimentellen Ergebnisse wurden mit den numerischen Ergebnissen des *MUFTE-UG*-Modells verglichen.

Die Geometrie des 1D-Experimentes ist in Kap. 5.3 beschrieben, wobei das poröse Medium die Dimensionen von 6.0 cm Länge x 72.0 cm Höhe x 6.5 cm Dicke hat. Die Sättigungen wurden an den Höhen 67, 57, 47, 37, 27 und 17 cm gemessen.

Zu Beginn des Experimentes ist das Wasserspiegelniveau auf einer Höhe von 72 cm eingestellt. Zum Zeitpunkt  $t = 0$  wurde das Wasserspiegelniveau um 5 cm abgesenkt. Dann wurde der Wasserspiegel schrittweise um 5 cm je 5 min bis zu einer Höhe von 7 cm nach unten gefahren und dort konstant gehalten. Zum Zeitpunkt  $t = 12.12$  h wurden 250 ml LNAPL vom oberen Rand unter atmosphärischem Druck und in einer Zeit von 0.77 h infiltriert. Ab diesem Zeitpunkt wurde der Wasserspiegel schrittweise um 5 cm je 10 min variiert. Bei  $t = 17.4$  h wurde das Wasserspiegelniveau bis  $H = 42$  cm angehoben. Zum Zeitpunkt  $t = 19.4$  h wurde das Wasserspiegelniveau bis  $H = 17$  cm abgesenkt. Bei  $t = 21.1$  h wurde das Wasserspiegelniveau bis  $H = 52$  cm angehoben und dort konstant gehalten. Das Experiment wurde bei  $t = 25$  h beendet. Die physikalischen Eigenschaften des Sandes und der Fluide sind in Tab. 5.3 und 5.4 aufgelistet. Die Skalierungsfaktoren für das Luft-Wasser- ( $\beta_{gw}$ ), Luft-NAPL- ( $\beta_{gn}$ ) und NAPL-Wasser-System ( $\beta_{nw}$ ) entsprechen 1.00, 2.25 und 1.80.

### Numerische Simulation

#### Räumliche Diskretisierung

Es wurde das gleiche Netz wie in Kap. 5.3 verwendet. Die Zeitschrittlänge wurde mit maximal 60 Sekunden gewählt.

Tabelle 5.3: Physikalische Eigenschaften des Sandes

$d_\alpha[1/Pa]$	$i_\alpha[1/Pa]$	$n[-]$	$S_{wr}[-]$	$S_{nr}$	$S_{grw}[-]$	$S_{grn}[-]$	$k[m^2]$	$\phi[-]$
0.00062	0.00124	3.16	0.2	0.35	0.195	0.1	2.14E-11	0.4

Tabelle 5.4: Eigenschaften der verwendeten Fluide

		Wasser	LNAPL	Luft
Dichte $\rho$	$[kg/m^3]$	1030.0	830.0	1.2
Viskosität $\mu$	$[Pa \cdot s]$	1.E-3	2.046E-3	1.8E-5

### Anfangs- und Randbedingungen

Das Modell *MUFTE-UG* hat die Möglichkeit, als unbekannte Variablen zwei beliebige Sättigungen und einen Druck zu definieren. Für die Berechnung wurden die Gassättigung, die NAPL-Sättigung und der Gasdruck als unbekannte Variablen gewählt. Die Säule ist vor Beginn der Rechnung bis zur Höhe 72 cm vollständig mit Wasser gesättigt ( $S_g = 0.0$ ). Am oberen Rand wurden eine *Dirichlet*-Randbedingung für den Luftdruck von 100000 Pa (atmosphärischer Luftdruck) und eine *Neumann*-Randbedingung für die Luftphase von  $q_g = 0$  gewählt. Dort wurde auch als *Neumann*-Randbedingung für die NAPL-Phase  $q_n = 0.03 [kg/(sm^2)]$  in der Zeit von 12.12 h bis 12.89 h vorgegeben. Außerhalb dieser Zeiten ist  $q_n = 0$ . Am unteren Rand wurde eine *Dirichlet*-Randbedingung für die Luftsättigung sowie für die NAPL-Sättigung von  $S_g = S_n = 0$  herangezogen. Die *Dirichlet*-Randbedingung für den Luftdruck entspricht der zeitlichen Variation des Wasserspiegelniveaus. Der Luftdruck wurde folgenderweise berechnet:

$$p_g = p_n + p_{cgn} \quad , \quad (5.42)$$

$$p_n = p_w + p_{cnw} \quad . \quad (5.43)$$

Da die NAPL-Sättigung und die Luft-Sättigung am unteren Rand gleich null sind ( $S_n = S_g = 0$ ), ist  $p_{cgn} = p_{cnw} = 0.0$ . Wird dieser Wert in beide Gleichungen eingesetzt, ist zu erkennen, daß am unteren Rand  $p_g = p_w$  ist. Der linke und rechte Modellrand wurde jeweils als undurchlässig betrachtet (*Neumann*-Randbedingungen  $q_n = q_w = 0$ ).

### **Diskussion der numerischen Simulation im Vergleich zum Experiment**

Abb. 5.10 zeigt den Vergleich zwischen den numerischen Ergebnissen mit und ohne Be-

trachtung der Hysterese sowie die experimentellen Ergebnisse an den Höhen  $67\text{ cm}$ ,  $57\text{ cm}$ ,  $47\text{ cm}$ ,  $37\text{ cm}$ ,  $27\text{ cm}$  und  $17\text{ cm}$ . Die sich ergebende Übereinstimmung von den numerischen mit den experimentellen Ergebnissen ist sehr gut.

Nach der Infiltration von LNAPL wurde das Wasserspiegelniveau im Bereich von  $17\text{ cm}$  bis  $52\text{ cm}$  variiert. Die numerischen Ergebnisse an den Meßhöhen  $67\text{ cm}$  und  $57\text{ cm}$  ohne Betrachtung des Hysterese-Effektes zeigen eine bessere Übereinstimmung mit den experimentellen Ergebnissen als bei Betrachtung der Hysterese. Offenbar liegt also oberhalb von  $52\text{ cm}$  keine NAPL-Phase als eingeschlossenes Fluid vor, Hysterese-Effekte sind hier vernachlässigbar. Bei den unteren Meßpunkten ( $< 52\text{ cm}$ ) liefert die Berechnung mit Hysterese-Effekten die besseren Ergebnisse. Hier tritt also ein Einschließen der NAPL-Phase in Wasser auf. Im numerischen Modell wird dieser Effekt über die Kapillardruck-Sättigungs-Beziehung beschrieben. Die  $p_c - S_w$ -Beziehung bei  $67\text{ cm}$  und  $57\text{ cm}$  für das System Wasser-NAPL (s. Abb. 5.12) zeigt den Hysterese-Verlauf (Umkehrvorgang von Drainage zu Imbibition). Die Kapillardruck-Sättigungs-Kurve an den Höhen  $67\text{ cm}$  und  $57\text{ cm}$  ist beim Imbibitionsvorgang steiler als beim Drainagevorgang (s. Abb. 5.12). Bei steilem Kapillardruck (kleine Wassersättigung) produziert eine Änderung des Kapillardrucks eine geringe Änderung der Sättigung. Deshalb zeigt die berechnete NAPL-Sättigung mit Betrachtung der Hysterese bei der Höhe  $67\text{ cm}$  nach  $t = 18\text{ h}$  einen kaum variierenden Verlauf (s. Abb. 5.10). Der gleiche Effekt ist auch bei der Höhe  $57\text{ cm}$  mit Betrachtung der Hysterese zu sehen. Ohne Betrachtung der Hysterese ist bei den gleichen Höhen ein flacherer Verlauf der Kapillardruck-Sättigungs-Kurve zu erkennen. Deswegen ist hier die NAPL-Sättigungsverteilung mit der Variation des Wasserspiegels diskontinuierlich. Zum Beispiel wird für die Höhe  $57\text{ cm}$  zwischen  $t = 18\text{ h}$  und  $20\text{ h}$  die Sättigung der NAPL-Phase ohne Betrachtung der Hysterese besser beschrieben als mit Betrachtung der Hysterese.

Meßhöhe  $47\text{ cm}$  liegt direkt unterhalb des Wasserspiegelniveaus  $52\text{ cm}$ , dadurch ist dort die Einschließung der NAPL-Phase in die Wasserphase sehr gering. Die numerischen Ergebnisse ohne Betrachtung der Hysterese zeigen gute Übereinstimmung mit den gemessenen Daten.

Je tiefer die Meßhöhen sind, desto deutlicher ist die Übereinstimmung der experimentellen mit den berechneten Ergebnissen mit Betrachtung des Hysterese-Effektes (wie es z.B. bei den Höhen  $37\text{ cm}$ ,  $27\text{ cm}$ ,  $17\text{ cm}$  ersichtlich ist). Bei diesen Höhen ist ein großer Anteil von NAPL in der Wasserphase eingeschlossen. Dadurch spielt die Hysterese eine große Rolle.

Der Unterschied zwischen den berechneten und den gemessenen Ergebnissen ist auf die zugrundeliegenden  $k_r - S_w$ -Beziehungen zurückzuführen. Es ist zu bemerken, daß  $k_r - S_w$  nicht gemessen wurde, sondern nach der  $p_c - S_w$ -Beziehung (*Mualem*-Ansatz) geschätzt wurde. Bei der Höhe 27 cm zwischen  $t = 13$  h und  $t = 17$  h ist die gemessene Sättigung der NAPL-Phase größer als die berechneten Werte. Lenhard et al. konnten auch keine Begründung für dieses Verhalten bei der Verifikation ihres Modells *STOMP* geben. Bei  $t > 17$  h ist die Übereinstimmung sehr gut.

Direkt nach der Infiltration von LNAPL ( $t = 12.12$  h) ist die maximale Sättigung der NAPL-Phase ohne Betrachtung der Hysterese größer als mit Betrachtung der Hysterese. Mit Betrachtung der Hysterese ist ein Anteil der Luft-Phase in der NAPL-Phase in den großen Poren eingeschlossen (s. Abb. 5.11). Dadurch ist die NAPL-Phase gezwungen, in die kleinen Poren einzufließen. Aus diesem Grund zeigen die numerischen Ergebnisse eine bessere Übereinstimmung mit den experimentellen Ergebnissen mit Betrachtung der Hysterese.

### Zusammenfassung

Das 1D-Dreiphasen-Laborexperiment von Lenhard et al. wurde zur Verifizierung des *MUFTE-UG*-Modells für die Dreiphasenhysterese verwendet. Die  $p_c - S_w$ -Beziehung wurde experimentell bestimmt. Die  $k_r - S_w$ -Beziehung wurde von der  $p_c - S_w$ -Beziehung geschätzt. Die numerischen Ergebnisse zeigen eine gute Übereinstimmung mit den experimentellen Ergebnissen.

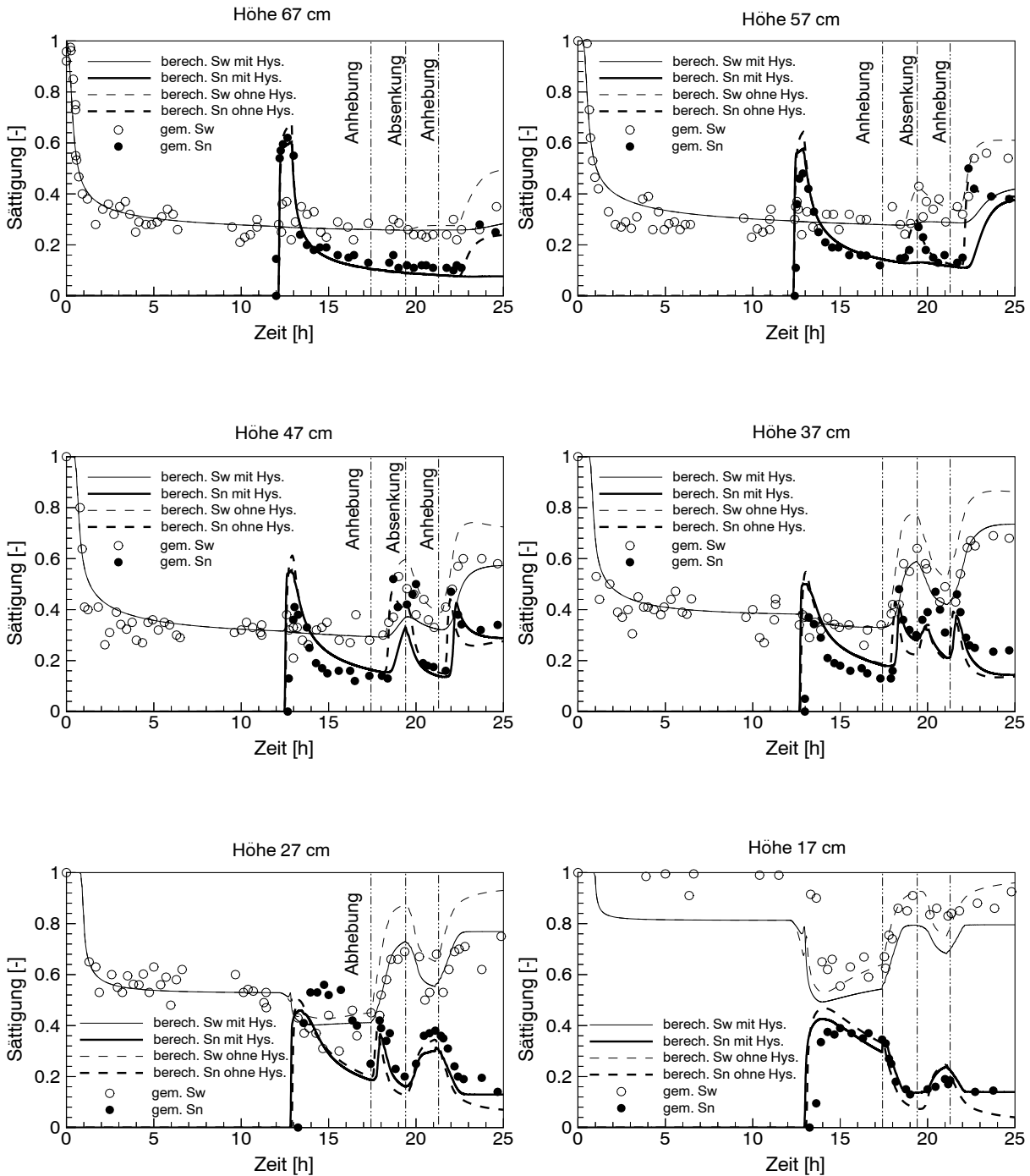
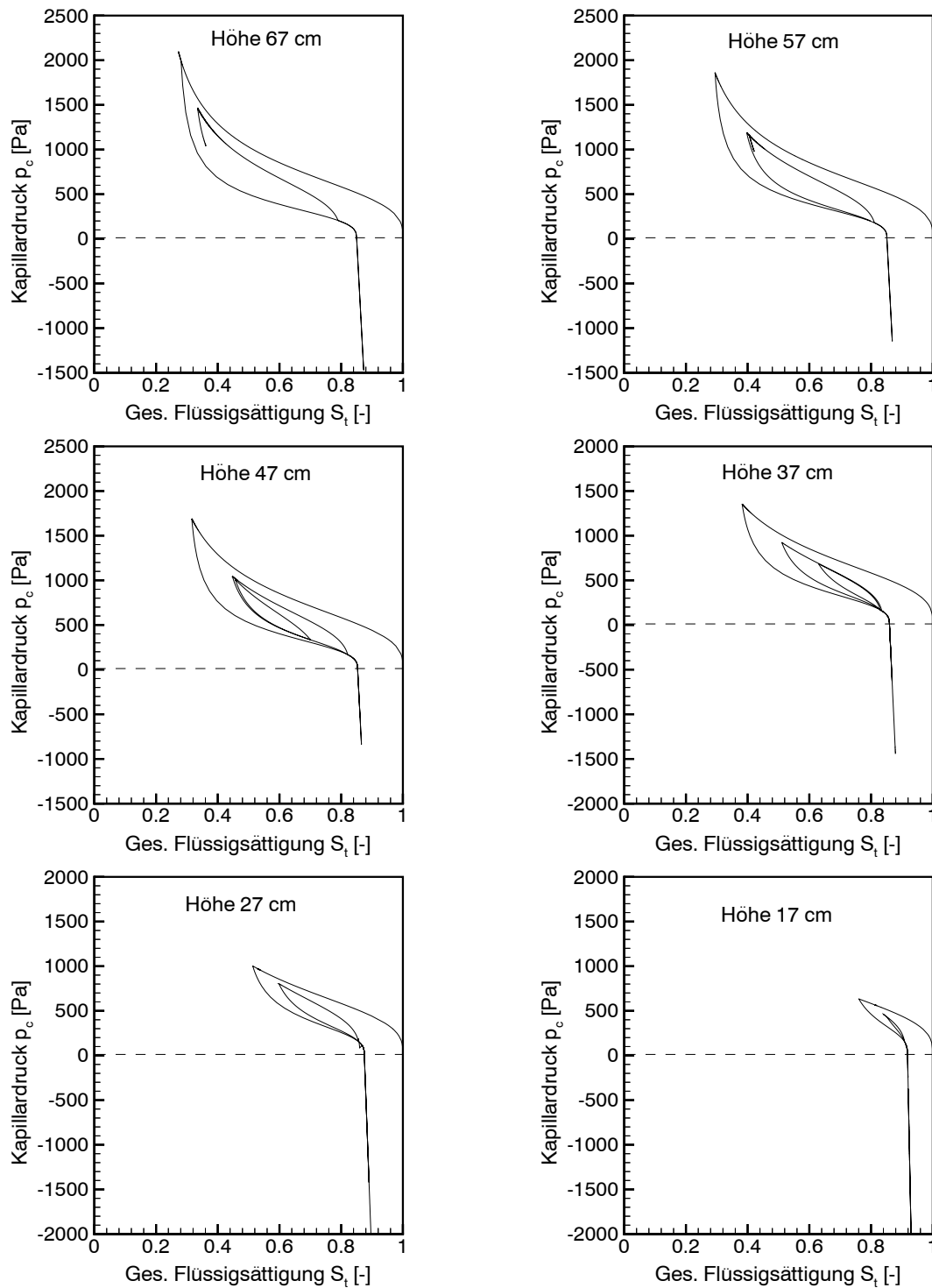
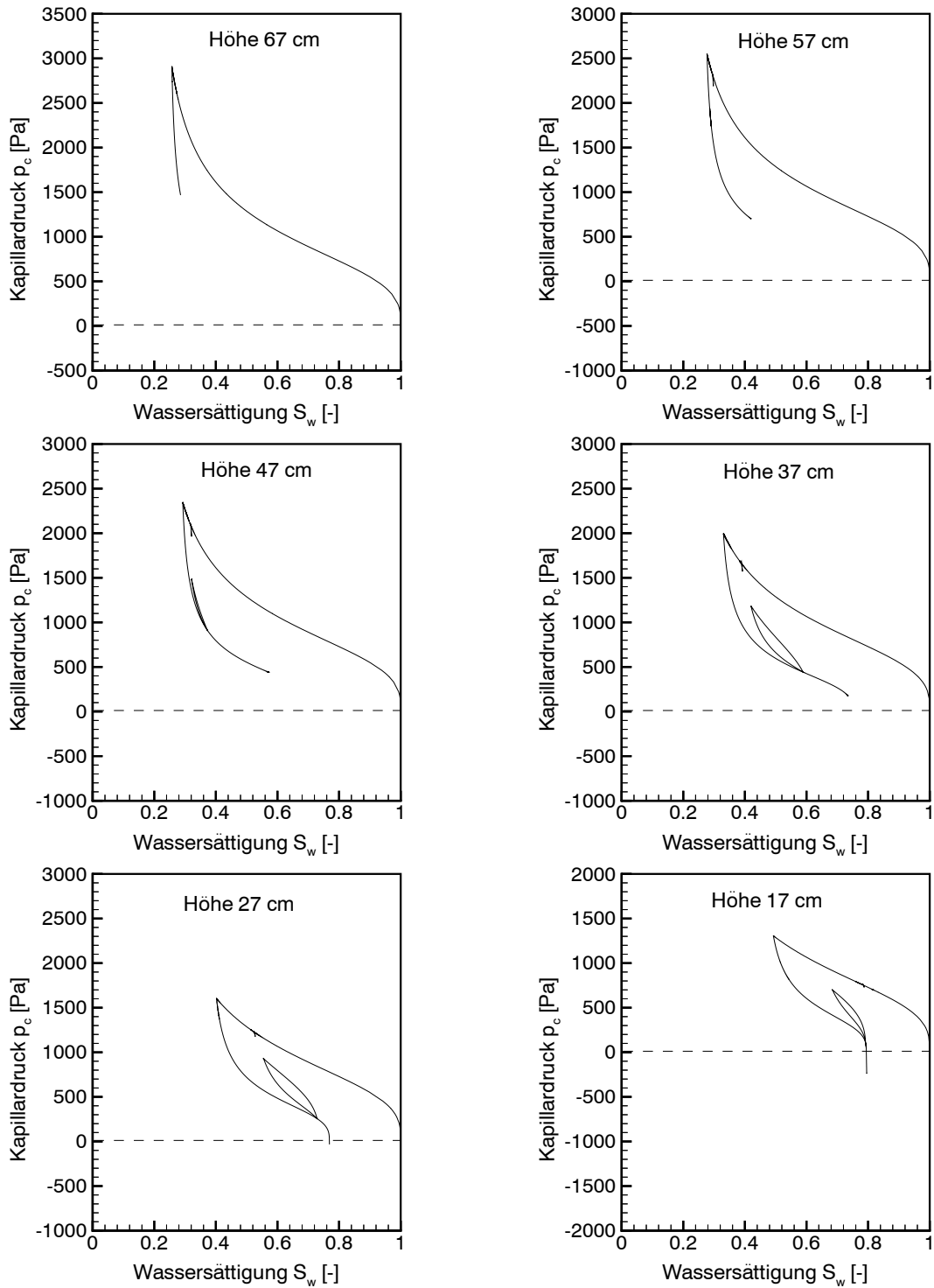


Abbildung 5.10: Vergleich zwischen gemessenen und berechneten Sättigungen an den Höhen 67 cm bis 17 cm



Abbildung 5.11:  $p_c$ - $S_t$ -Beziehungen an den Höhen 67 cm bis 17 cm

Abbildung 5.12:  $p_c$ - $S_w$ -Beziehungen an den Höhen 67 cm bis 17 cm

# 6 Numerische Simulation eines VEGAS-Experimentes unter Berücksichtigung von Hysterese-Effekten in der gesättigten Zone

## 6.1 Problemstellung und Zielsetzung des Experimentes

Die numerische Modellierung kann als ein wirkungsvolles Hilfsmittel zur Vordimensionierung von Laborexperimenten angesehen werden. Sie fördert zudem ein besseres Verständnis für das Verhalten des Schadstoffes im Boden und macht die Einflüsse der gewählten Parameter sichtbar. Hinsichtlich der numerischen Modellierung unterscheiden sich Probleme auf der Feldskala wesentlich von kleinskaligen Problemen, da die auftretenden Prozesse jeweils anders betrachtet werden müssen. Ein sehr wichtiger Faktor dabei sind kleinskalige und großskalige Heterogenitäten. Ein besonderes Augenmerk bei der Modellierung muß auf die Kapillardruck-Sättigungs-Beziehung und deren Einfluß auf die Ausbreitung von DNAPL gelegt werden.

Ziel der hier dargestellten Arbeit ist es, anhand eines kontrollierbaren großskaligen 2D-Experimentes (VEGAS - Versuchseinrichtung zur Grundwasser- und Altlastensanierung), das als Überbrückung von kleinskaligen zu feldskaligen Problemen dient, die numerische Modellierung für die Vordimensionierung von Laborversuchen zu verwenden, die auftretenden Prozesse zu verstehen, um eine Übertragung auf die Feldskala zu ermöglichen und damit eine Hilfe für die Prognose der Schadstoffausbreitung zu schaffen.

Mit Hilfe des Experimentes sollten folgende Punkte untersucht werden:

- *Eindringbedingungen und Sättigungsverteilung (Diskontinuität) im Boden beim Eindringen von DNAPL in eine weniger durchlässige Schicht*

Aufgrund des hohen Eindringdrucks des Mittelsands, der den Boden der Wanne bildet (s. Abb. 6.1), staut sich DNAPL im Grobsand oberhalb dieser Schicht. Sobald die Stauhöhe einen bestimmten Wert und damit die Eindringbedingung erreicht (s. Kap. 4), dringt DNAPL in den Mittelsand ein. An dieser Grenzfläche (Grob-, Mittelsand) ist die Sättigung diskontinuierlich, deshalb wurden dort die Eindringbedingung und die Sättigungsverteilung untersucht.

- *Einfluß der DNAPL-Sättigung auf den Durchfluß unterhalb der Versickerungsstelle*

Dieser Effekt ist für die numerische Modellierung von praktischen Anwendungen sehr wichtig, um so die Randbedingungen bestimmen zu können. Eine Messung der Quellstärke des DNAPL ist in der Praxis i. d. R. nicht möglich. Deshalb muß eine Abschätzung darüber mit Hilfe der Sättigung vorgenommen werden. Mit dem Experiment sollte die Interaktion zwischen der Quellstärke und der Sättigung bestimmt werden.

- *Drainage- und Imbibitions-Vorgänge (Hysterese) während der Infiltration und die resultierende residuale Sättigung der DNAPL-Phase*

Die Infiltration von DNAPL im Boden stellt einen Drainageprozess dar. Nach Infiltrationsende beginnt der Imbibitionsvorgang, durch den ein DNAPL-Anteil in der Wasserphase eingeschlossen wird und als residuale Sättigung im Boden zurückbleibt. Diese residuale Sättigung stellt eine Langzeitkontamination für das Grundwasser dar. Anhand des Experimentes sollte festgestellt werden, in welcher Größenordnung die residuale Sättigung vorliegt und inwiefern die im numerischen Modell implementierten Hysterese-Ansätze diese Sättigung abbilden.

- *Einfluß der horizontalen Grundwasserströmung auf die Infiltration und die Ausbreitung von DNAPL auf den gegen die Grundströmung geneigten, weniger durchlässigen Linsen*

Auf der linken und rechten Seite wurden in dem Aquifer Brunnen eingebaut, die als Festpotentiale zur Verfügung standen. Der linke Brunnen stellt das Einlaufbauwerk und der rechte Brunnen das Auslaufbauwerk dar. Aus dem Piezometerhöhenunterschied in beiden Brunnen ergab sich ein Gradient von 1 ‰, der während des Experimentes konstant gehalten wurde (s. Abb. 6.1). Das Fließverhalten von DNAPL wird durch Gravitations- und Kapillarkräfte sowie durch Kräfte, die durch den Was-

sergradienten hervorgerufen werden, beeinflusst. Infolge des höheren Eindringdrucks der Sandlinsen staut sich DNAPL oberhalb der Linsen und bewegt sich infolge der resultierenden Kräfte aus Gravitation und Wassergradient. Der Einfluß der Gravitationskraft ist proportional zum Neigungsgrad der Linsen. Die Linsenneigungen wurden im Versuchsaufbau gegen die Grundströmung gerichtet. Dadurch wirken die Kräfte des Wassergradienten und der Gravitation gegeneinander. Im Experiment wurde für verschiedene Linsenneigungen untersucht, ob DNAPL in Richtung der Neigung (infolge der Gravitationskraft) oder gegen die Neigung (infolge des Wassergradienten) fließt.

- *Einfluß der Heterogenitäten auf den Infiltrationsprozeß*

Für das Experiment wurden drei Sande unterschiedlicher Durchlässigkeit gewählt. Ein grober Sand dient als Fließmedium für DNAPL, aus Mittel- sowie Feinsand werden die großskaligen Heterogenitäten gebildet. Der Mittelsand verhindert den Fluß von DNAPL bis zu einem bestimmten Sättigungswert. Nach Erreichen dieses Sättigungswertes dringt DNAPL in den Sand ein. In den Feinsand kann DNAPL nur eindringen, wenn ein sehr hoher Eindringdruck überwunden wird. Dieser Fall tritt während des Verlaufs des Experimentes nicht ein. Die Eigenschaften der Sande sind in Tabelle 6.1 aufgelistet [60]. Die Konfigurationen der Heterogenitäten sind in Abb. 6.1 dargestellt. Es wurden Linsen aus feinem Sand mit unterschiedlichen Neigungen (0 %, 10 %, 5 % und 1 %) sowie eine Wanne, deren Wände aus feinem und deren Boden aus mittlerem Sand besteht, eingebaut.

Tabelle 6.1: Eigenschaften der Sande von [60]

	Grobsand	Mittelsand	Feinsand
$k$ [ $m^2$ ]	4.6E-10	3.1E-11	9.05E-12
Porosität [–]	$39.5 \pm 2.8$	$35.1 \pm 3.5$	$43.6 \pm 0.8$

## 6.2 Numerische Simulation zur Vordimensionierung des Experimentes

Das Experiment wird von Braun (1996)[13] im Detail beschrieben. Der Stahlcontainer ist 7 m lang, 3 m hoch und 1 m breit. Die Längsfront wurde zu Visualisierungszwecken aus Glas gefertigt und mittels Stahlstreben im Abstand von 0.75 m stabilisiert. Der Aquifer ( $L \times H \times B = 6.35 \text{ m} \times 2.4 \text{ m} \times 0.4 \text{ m}$ ) wird beidseitig durch je ein Becken begrenzt, welche als Festpotentiale regulierbar sind. Die Festpotentiale am linken und rechten Rand wurden so eingestellt, daß sich ein Wasserfluß von links nach rechts ergab. Um Lufteintritte zu unterbinden und einen gespannten Grundwasserleiter zu gewährleisten, wurde auf den Aquifer eine 0.2 m dicke Schicht Feinsand aufgebracht. Es wurden drei unterschiedlich durchlässige Sande verwendet, um eine genau definierte heterogene Bodenstruktur aufzubauen (s. Abb. 6.1).

Mit Hilfe numerischer Simulationen sollten folgende Punkte zur Vordimensionierung des Experimentes geklärt werden:

- geeigneter Grundwassergradient und der damit verbundene Wasserfluß, der sich in den beiden Becken einstellt
- Mindestmenge an DNAPL, die für das Experiment bereitgestellt werden sollte
- Infiltrationsrate und Lage der Schadstoffquelle (DNAPL)
- Einfluß der gewählten Konfiguration (Heterogenitäten, Infiltrationsquelle, Systemränder) auf das Ausbreitungsverhalten von DNAPL
- Laufzeit des Experimentes

### Bestimmung des Grundwassergradienten

Im Rahmen einer Diplomarbeit [51] am Institut für Wasserbau wurde mit Hilfe von numerischen Simulationen das Infiltrationsverhalten in Abhängigkeit des herrschenden Grundwassergradienten untersucht. Basierend auf dieser Voruntersuchung wurde der Grundwassergradient für das großskalige 2D-Experiment (VEGAS) festgelegt. Die numerischen Ergebnisse zeigen, daß das DNAPL-Infiltrationsverhalten bei einem herrschenden Grundwassergradient von 0.1% kaum beeinflußt wird.

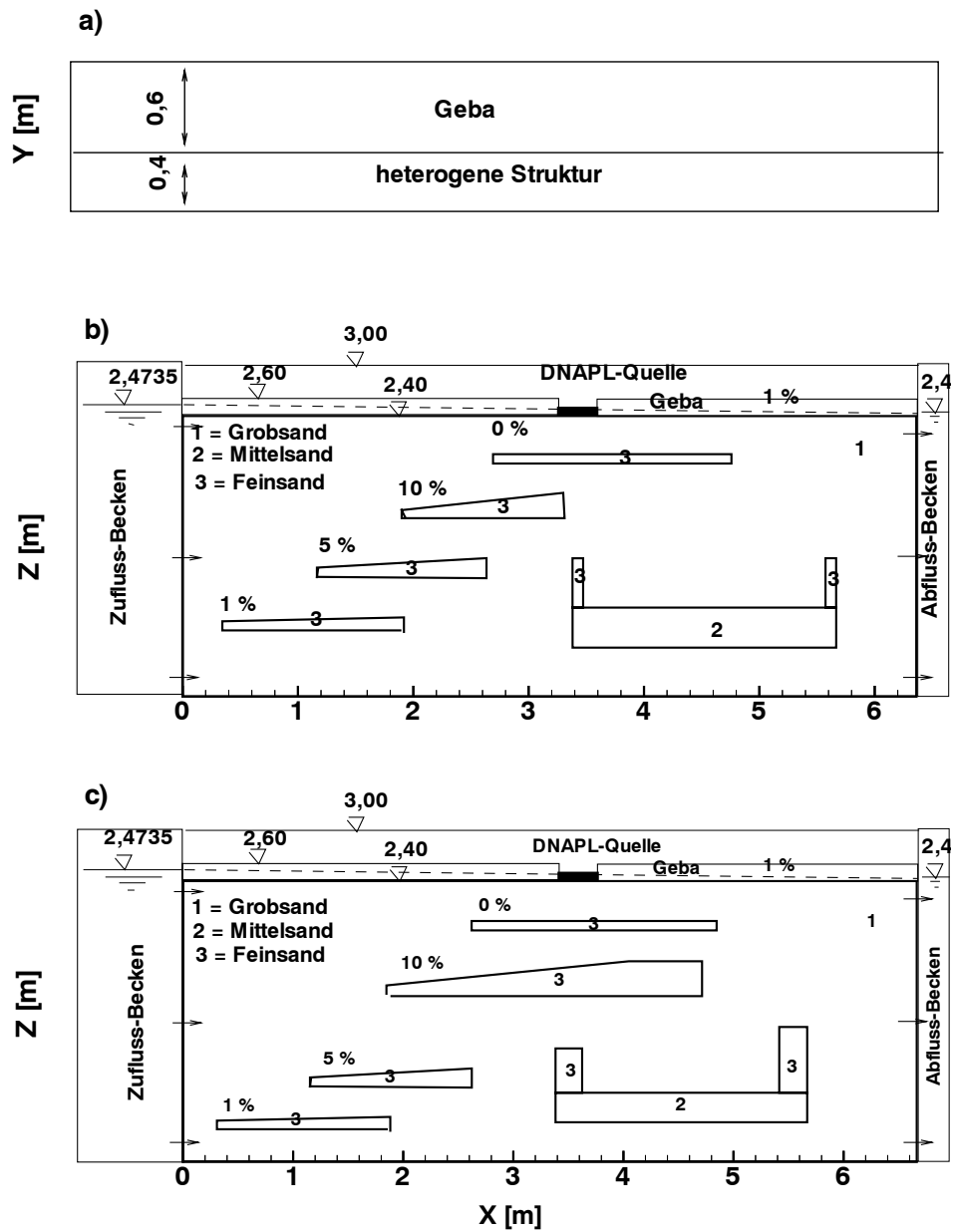


Abbildung 6.1: Struktur des DNAPL-Experimentes a): Horizontalschnitt b): Vertikalschnitt der geplanten Struktur c): Vertikalschnitt der gewählten Struktur

Dagegen hat ein Gradient von 1.0% einen deutlichen Einfluß auf den Infiltrationsprozeß. Aufgrund dieser Erkenntnisse und um die Effekte einer Grundwasserströmung in dem großskaligen 2D-Experiment untersuchen zu können, wurde ein Grundwassergradient von 1.0% gewählt.

Tabelle 6.2: Eigenschaften der Fluide

		Wasser	DNAPL
Dichte $\rho$	$[kg/m^3]$	1000.0	1460.0
Viskosität $\mu$	$[Pa\ s]$	0.001	0.001

Es wurde eine numerische Simulation mit dem finite Elemente-Modell *MUFTE* [47] durchgeführt. Hierbei wurde die Heterogenitäts-Konfiguration in Abb. 6.1 gewählt. Der Grundwassergradient von 1% wurde durch die Festpotentiale von 2.47 *mWs* am linken und 2.40 *mWs* am rechten Modellrand erzeugt. Als DNAPL wurde Trichloroethylen (TCE) eingesetzt. Die physikalischen Eigenschaften der verwendeten Fluide sind in Tab. 6.2 gezeigt. Die mittlere Temperatur im Experiment wurde zu 20 °C angenommen. Für die numerische Simulation benötigt man:

### Räumliche Diskretisierung

Die räumliche Diskretisierung des 2D-Modellgebietes wurde auf ein regelmäßiges Netz mit vertikalen und horizontalen Elementlängen von 5 cm festgelegt. Somit ergab sich ein Netz aus 7112 Elementen und 7296 Knoten. Die geneigten Linsen wurden schrittweise approximiert (s. Abb. 6.2). Mit Hilfe dieses feinen Netzes läßt sich die DNAPL-Front besser nachbilden.

Eine maximale Zeitschrittlänge von einer Sekunde wurde festgelegt.

### Anfangs- and Randbedingungen

Die Rinne ist zu Beginn der DNAPL-Infiltration vollständig mit Wasser gesättigt. Am linken und rechten Modellrand wurde ein hydrostatischer Druck der Wasserphase vorgegeben. Um ein Wasserspiegellagengefälle von 1% im Modellgebiet zu erreichen, wurde der Wasserdruck am linken Rand 622 Pa höher als am rechten Rand gewählt. Eine Erläuterung hierzu siehe *Bestimmung des Grundwassergradienten*. Unter der Annahme, daß während der numerischen Simulation kein DNAPL die seitlichen Ränder erreicht, wurde für diese eine *Dirichlet*-Randbedingung von  $S_n = 0$  gewählt. Die restlichen Gebietsränder mit Ausnahme des Infiltrationsbereiches wurden als undurchlässig betrachtet



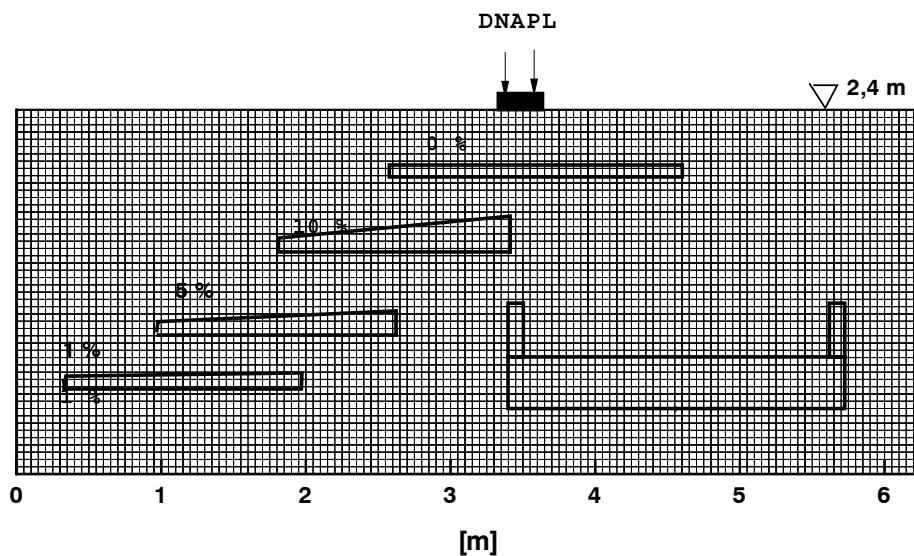


Abbildung 6.2: Finite-Elemente Netz

(*Neumann*-Randbedingungen  $q_n = q_w = 0$ ). Die DNAPL-Infiltationsquelle kann entweder als Massenfluß oder als DNAPL-Sättigung  $S_n$  vorgegeben werden. Als mögliche Randbedingungen für die Infiltrationszone kommen zwei Variationen in Frage:

Eine Möglichkeit ist eine Sättigungsrandbedingung. Die bessere Option stellt die Flußrandbedingung dar. Man kann bei der experimentellen Durchführung (Festlegung einer Stauhöhe von DNAPL über der Infiltrationszone) von einer zeitlich konstanten Fließrate von DNAPL in das Modellgebiet ausgehen.

Die Fließrate läßt sich folgendermaßen bestimmen:

Da ein Eindringen von DNAPL die Überschreitung des Eindringdruckes im Grobsand des Infiltrationsbereiches voraussetzt, und dieser sich mit 1.6 cm DNAPL-Höhe experimentell bestimmen ließ, wurde der entsprechende Schwellenwert der DNAPL-Sättigung für eine Stauhöhe von 4.0 cm DNAPL und unter Annahme der *Brooks-Corey*-Beziehung zu 0.4 berechnet (s. Abb. 6.3). Mit Hilfe dieses Wertes als Sättigungsrandbedingung wurde numerisch eine konstante Einfließrate von 80 l/h berechnet. Diese Fließrate wurde als Randbedingung für die Quelle eingesetzt (s. Abb. 6.4).

### Konstitutive Beziehungen

Für das Experiment wurden drei unterschiedlich durchlässige Sande verwendet (Fein-, Mittel- und Grobsand). Es wurde angenommen, daß in festgelegten Bereichen des

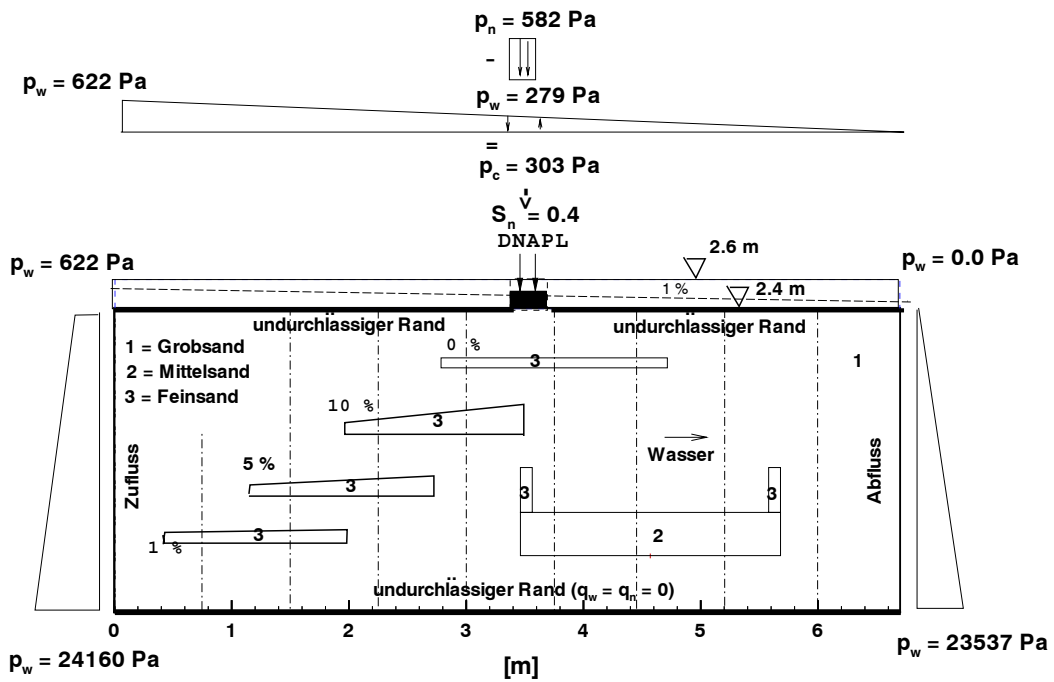


Abbildung 6.3: Randbedingung zur Bestimmung der Fließrate

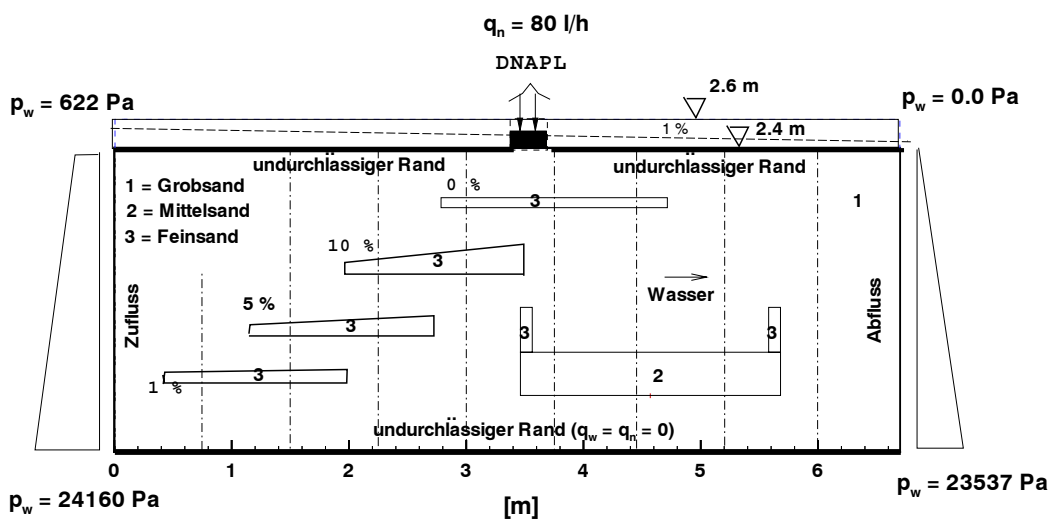


Abbildung 6.4: Randbedingung für die numerische Simulation

Modellgebietes jeweils eine Sandsorte homogen verteilt ist. Für diese Annahme werden im Modellgebiet drei Arten von REV's verwendet (REV1 für den Grobsand, REV2 für die mittlere Sandkorngröße und REV3 für den Feinsand). Zur Beschreibung der konstitutiven Beziehungen für die unterschiedlichen REV's benötigt man den Eindringdruck  $p_d$ , die Residualsättigung der Wasserphase  $S_{wr}$ , die Residualsättigung des DNAPLs  $S_{nr}$  und den Porengrößenverteilungsindex  $\lambda$ . Zur Beschreibung der Kapillardruck-Sättigungs- und der relative Permeabilität-Sättigungs-Beziehungen kommt das Modell von Brooks und Corey (1964) [14] zur Anwendung (s. Gl. (2.7), (2.87) und (2.88)).

Die Parameter für die konstitutiven Beziehungen wurden vor dem Experiment noch nicht experimentell gemessen. Lediglich der Eindringdruck  $p_d$  konnte von Braun bestimmt werden. Deshalb wurde eine Schätzung der Parameter auf der Grundlage von Korngrößensummenkurven verwendet (s. Kap. 2.2.2, Tab. 2.6).

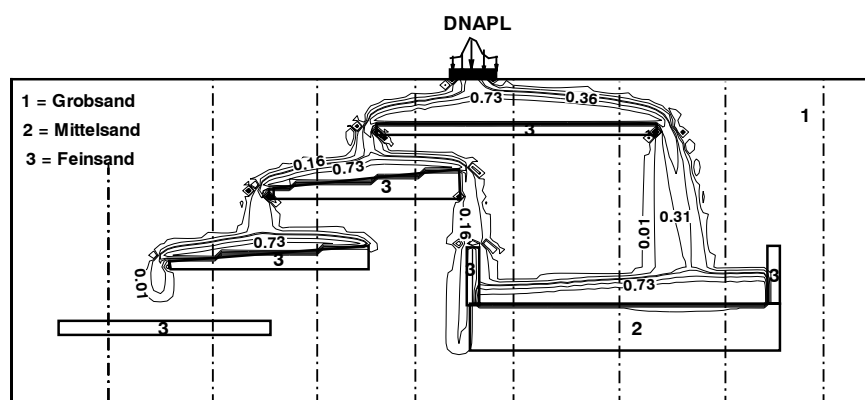


Abbildung 6.5: Numerische Ergebnisse nach 2.7 h

Abb. 6.5 zeigt das numerische Ergebnis der Sättigungsverteilung der DNAPL-Phase nach 9720 s (2.7 h). Bis zu diesem Zeitpunkt sind alle erwarteten Effekte eingetreten, so daß eine Beantwortung der zur Vordimensionierung notwendigen Fragen möglich ist.

In diesem zeitlichen Rahmen wurden die oben aufgeführten Punkte untersucht, die Ergebnisse sind im folgenden dargelegt.

**Mindestmenge an DNAPL, die für das Experiment bereitgestellt werden sollte**

Bis zu einer Laufzeit von 2.7 h werden in das Modellgebiet 180 l DNAPL infiltriert.

Daraus ergibt sich, daß für den Modellversuch circa 200 l DNAPI benötigt werden, um die gewünschten Prozesse hervorrufen zu können.

### **Lage der Schadstoffquelle**

Aus Kosten- und Entsorgungsgründen sollte für das DNAPL-Experiment möglichst wenig TCE eingesetzt werden. Es ist jedoch eine ungefähr gleichmäßige Verteilung des DNAPLs über den linken und rechten Rand der obersten Linse hinweg nötig, um das Fließverhalten auf den geneigten Linsen und das Eindringen in den Mittelsand (Boden der Wanne) aufgrund der Stauhöhe beobachten zu können. Erreicht DNAPL die obere Feinsandlinse (0% Neigung), kann es sich nur lateral bewegen, da ein Eindringen in den Feinsand nicht möglich ist. Die Bewegungsrichtung geht jedoch in Richtung des Grundwassergradienten. Mit Hilfe der numerischen Simulation sollte die Lage der Quelle sowie der oberen Linse so festgelegt werden, daß DNAPL auf der oberen Linse in beide Richtungen gleichmäßig verteilt. Abbildung 6.1 zeigt die gewählte Lage der Quelle und der Linse.

### **Einfluß der gewählten Anordnung der Heterogenitäten auf die Infiltration und die Ausbreitung des DNAPLs**

Die gewählte Struktur der Heterogenitäten muß auf die zu untersuchenden Effekte und die Zielsetzung ausgerichtet sein. Die ursprünglich geplante Konfiguration (s. Abb. 6.1) wurde so gewählt, daß die Wanne möglichst weit vom rechten Rand des Modellgebietes entfernt liegt, damit sie nicht von der Auslaufströmung beeinflusst wird. Des weiteren sollte die rechte Ecke der Wanne nicht durch eine Stahlstrebe verdeckt sein, um den Durchbruch des DNAPLs in den Mittelsand verfolgen zu können. Ein Modellauf ergab, daß sich das DNAPL auf der um 10 % geneigten Linse stromab ausbreitet und auf die linke Kante der Wanne stößt (s. Abb. 6.5). Deshalb wurde die obere Linse weiter nach rechts verlängert, das DNAPL fließt so in die Wanne hinein. Des weiteren zeigte der Modellauf, daß innerhalb des betrachteten Zeitraumes nur ein geringes Eindringen von DNAPL in den Boden der Wanne stattfindet. Damit dieser Effekt sichtbarer wird und TCE gespart werden kann, wurde die linke Kante der Wanne verkürzt. So staut sich nun infolge des Grundwassergradienten DNAPL im rechten Bereich dieser Heterogenität und die Eindringbedingung wird zu einem früheren Zeitpunkt erfüllt. Um die Breite der kontaminierten Volumens zu verkleinern, wurde die gesamte Struktur der unteren Heterogenitäten nach unten verschoben. Es ergibt sich die in Abbildung 6.1 gezeigte neue Struktur.

### **Laufzeit des Experimentes**

Das Eindringen von DNAPL in den Boden der Wanne sowie das Ausbreitungsverhalten über den Linsen wurde bis zum Zeitpunkt  $t = 2.7 h$  beobachtet (s. Abb. 6.5). Die erwartete Experimentdauer beträgt somit zwischen 2.5 und 3 Stunden.

## 6.3 Experiment und numerische Simulation

Im Anschluß an die Vordimensionierung wurde mit dem endgültig gewählten Versuchsaufbau das eigentliche Experiment sowie eine numerische Simulation durchgeführt. Beide Ergebnisse wurden miteinander verglichen, um die auftretenden Prozesse anschaulicher und verständlicher zu machen. Hier wurde sowohl der visuell beobachtete Verlauf der DNAPL-Verteilung als auch die gemessene zeitliche Sättigungsverteilung der NAPL-Phase mit den Simulationsergebnissen verglichen.

### 6.3.1 Experimentverlauf und -ergebnisse

#### 6.3.1.1 Experimentverlauf

Die infiltrierte Menge an TCE im Experiment betrug  $262.7 kg (\hat{=} 180 l)$ . Nach dem Experiment konnten  $88.8 kg (\hat{=} 61 l)$  durch Aktivkohlefilter und  $49.0 kg (\hat{=} 34 l)$  als Reinphase wiedergewonnen werden,  $124.9 kg (\hat{=} 85 l)$  des TCE verblieb im Boden. Die Infiltrationsrate von TCE im Experiment und die Zuflußrate von Wasser sind in Abb. 6.7 und 6.8 dargestellt. Die Infiltrationsrate von TCE zeigt einen relativ konstanten Verlauf von circa  $190 kg/h$ , lediglich zu den Zeitpunkten, an denen das als DNAPL-Quelle verwendete Faß gewechselt wurde, sind Sprünge zu erkennen (s. Abb. 6.6). Nach  $1.5 h$  wurde die Infiltration beendet. In der Zuflußrate des Wassers läßt sich ein mittlere Zufluß von  $195 l/h$  erkennen. Der Zufluß sinkt während der DNAPL-Infiltration leicht ab, nach Infiltrationsende bleibt er annähernd konstant.

Im Experiment wurden drei verschiedene Sättigungs-Meßtechniken angewendet:

- TDR-Technik (*time domain reflectometry*) Im Rahmen des Projektes *Experimentelle Grundlagenuntersuchung zum Transport organischer Stoffe (CKW's, . . .) in unterschiedlichen natuerlichen Böden* (PWAB-Forschungsvorhaben PW 93 138) von

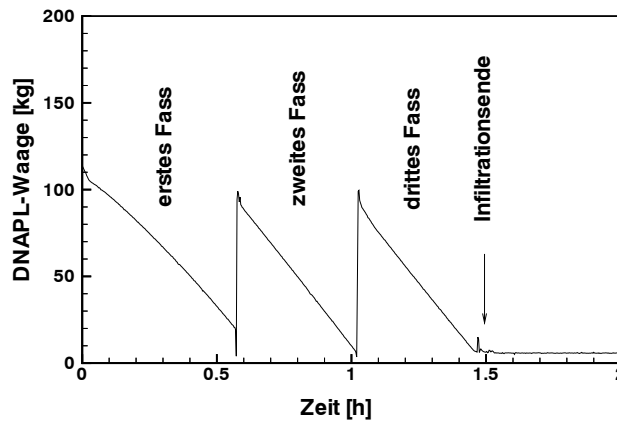


Abbildung 6.6: Gewicht der DNAPL-Fässer im Laufe des Versuchs (gem. von Trötschler)

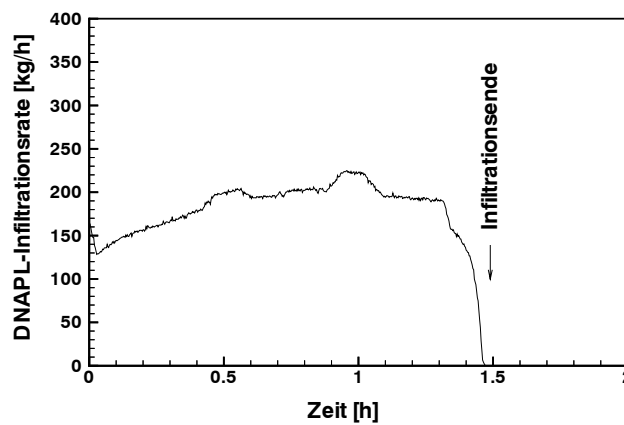


Abbildung 6.7: Infiltrationsrate von DNAPL (gemessen von Trötschler)

Herrn Dr. Zumühl, Institut für Bodenphysik der Universität Hohenheim wurde diese Technik verwendet.

- Faseroptische Fluorometer, Institut für Wasserbau, Universität Stuttgart
- Elektrotomographie (*electrical resistivity tomography*) der DGFZ Dresden

Zum Vergleich zwischen experimentellen und numerischen Ergebnissen wird die mit dem TDR-Technik gemessenen DNAPL-Sättigung an den Meßpunkten herangezogen. Die Lage

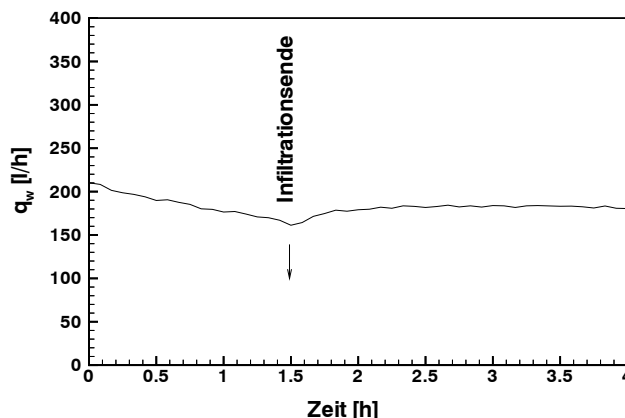


Abbildung 6.8: Zuflußrate von Wasser (gem. von Trötschler)

der Meßpunkte ist z.B. Abb. 6.15 zu entnehmen. Die TDR-Messung ist im Vergleich zur faseroptischen Fluorometermessung besser geeignet, da der Messbereich der Sonden mit TDR-Technik (*cm*-Auflösung) größer ist als bei der faseroptischen Technik (*mm*-Auflösung). Die Anzahl der Meßpunkte der Elektrotomographie war nicht ausreichend, um einen Vergleich der Ergebnisse zu ermöglichen. Eine Beschreibung der faseroptischen Technik ist bei Schmid (1994)[33] gegeben, die Elektrotomographie wird bei Börner et al. (1997)[12] beschrieben. Die TDR-Technik wird im folgenden kurz erläutert.

### Bestimmung der NAPL-Sättigung mit Hilfe der TDR-Technik

Mit Hilfe der TDR-Technik kann die NAPL-Sättigung im Aquifer bestimmt werden. Dafür wird die Wassersättigung im Grundwasserleiter gemessen. Die NAPL-Sättigung wird durch die gemessene Wasser-Sättigung bestimmt ( $S_n = 1.0 - S_w$ ) [124]. Aus dem Signal der TDR-Messung kann die mittlere Dielektrizitätszahl des Bodens im Bereich der TDR-Meßsonden bestimmt werden. Für wassergesättigte Böden wird zur Bestimmung des Wassergehaltes aus der Dielektrizitätszahl häufig das sogenannte Gemischt-Dielektrische-Modell verwendet ([30] und [61]). Diesem Modell liegt die Annahme zugrunde, daß sich die gemessene Dielektrizitätszahl aus den Dielektrizitätszahlen der einzelnen Phasen im Boden gemäß ihrer Volumenanteile zusammensetzt. Ersetzt man nun die Luftphase durch die NAPL-Phase, kann der Wassergehalt und bei Kenntnis der Porosität (Wassergehalt im Grundwasserleiter) die NAPL-Sättigung im Grundwasserleiter bestimmt werden:

$$\theta_{NAPL} = \theta_{Ws} - \theta_{Wm}; \quad \zeta_{\diamond} = \frac{\varepsilon_{\diamond}}{\varepsilon_W(20^{\circ}C)}; \quad \diamond = m, W, O, S$$

$$\theta_{Wm} = \frac{\zeta_m^\alpha - (1 - \theta_{Ws}) \zeta_S^\alpha - \theta_{Ws} \zeta_O^\alpha}{\zeta_W^\alpha - \zeta_O^\alpha} \quad (6.1)$$

wobei  $\theta_{NAPL}$  der NAPL-Gehalt,  $\theta_{Ws,m}$  der gesättigte bzw. gemessene Wassergehalt,  $\varepsilon_{W,O,S}$  die Dielektrizitätszahl von Wasser, organischer und Festsubstanz bei gegebener Temperatur,  $\varepsilon_m$  die gemessene Dielektrizitätszahl und  $\varepsilon_W(20^\circ C)$  diejenige von Wasser bei  $20^\circ C$  darstellen.  $\alpha$  ist ein Geometriefaktor, der die geometrische Anordnung der einzelnen Phasen des Bodens im Raum beschreibt.  $\alpha$  kann in erster Näherung zu 0.5 gesetzt werden. Dies entspricht einem homogenen isotropen Medium.

### 6.3.1.2 Experimentergebnisse

Für das Experiment liegen zwei Arten von Ergebnissen vor, die zum Vergleich mit der numerischen Simulation und zur Verdeutlichung der physikalischen Hintergründe der auftretenden Prozesse dienen. Zum einen wurden Daten des zeitlichen Sättigungsverlaufes des DNAPLs gemessen, um die in Kap. 6.1 formulierten physikalischen Fragen beantworten zu können. Die Messungen hierzu wurden mit der TDR-Technik an ausgewählten Meßstellen durchgeführt. Zum anderen wurde die Ausbreitung von DNAPL mit Hilfe von Fotos zum Prozeßverständnis herangezogen.

Aus den Daten des zeitlichen Sättigungsverlaufes von DNAPL lassen sich folgende Aussagen ableiten:

#### **Eindringbedingungen und Sättigungsverteilung (Diskontinuität) im Boden beim Eindringen von DNAPL in eine weniger durchlässige Schicht**

##### Eindringbedingung bei der DNAPL-Infiltration auf Höhe des Grundwasserspiegels

Die Meßstellen 114 und 115 liegen im Grobsand auf Höhe des Wasserspiegels. Der gemessene Eindringdruck in Grobsand ist  $200 Pa$ . Die erforderliche DNAPL-Stauhöhe  $h_d$ , damit DNAPL in den Grobsand eindringen kann, ist (s. Kap. 4):

$$h_d = \frac{p_a(grob)}{\rho_n \cdot g} = \frac{200}{1460 \cdot 9.81} = 1.4 \text{ cm} \quad (6.2)$$

Wenn die Stauhöhe von DNAPL an der Quelle größer als  $1.4 \text{ cm}$  ist, kann das DNAPL in den Grobsand fließen. Die gewählte Stauhöhe an der Quelle beträgt  $4 \text{ cm}$  DNAPL. Die Meßergebnisse an den Meßstellen 114 und 115 zeigen, daß die Eindringbedingung direkt nach Infiltrationsbeginn erfüllt worden ist (s. Abb. 6.11).

##### Eindringbedingung bei der DNAPL-Infiltration unterhalb des Grundwasserspiegels

Um diesen Fall im Mittelsand zu untersuchen, wurden die Meßstellen 103 und 106 bis 108



gewählt. Sie wurden in einer vertikalen Reihe in der Wanne angeordnet, wobei Meßstelle 103 im Mittelsand (Boden der Wanne) und Meßstellen 106 bis 108 im Grobsand darüber liegen (s. Abb. 6.15). In der Wanne wird annähernd ein hydrostatisches Gleichgewicht erhalten. Nach Definition von Kueper et al. (s. Kap. 4) ist die maximale Stauhöhe vor dem Eindringen in Mittelsand:

$$h_d = \frac{p_d(\text{mittel}) - p_d(\text{grob})}{(\rho_n - \rho_w) \cdot g} = \frac{700 - 200}{460 \cdot 9.81} = 11.1 \text{ cm} \quad (6.3)$$

Die optisch erfaßte DNAPL-Verteilung, die auf den aufgenommenen Bildern zu erkennen ist, läßt keinen Rückschluß auf die Stauhöhe zum Zeitpunkt des Eindringens zu. Eine grobe Abschätzung der Stauhöhe kann jedoch durch die Auswertung der Meßdaten erreicht werden. Im Experiment hat sich gezeigt, daß DNAPL die Meßstellen 106, 107 und 108 ca. 70 min nach Infiltrationsbeginn erreicht (s. Abb. 6.9, 6.10). Meßstelle 103 wird erst nach 90 min angesprochen (s. Abb. 6.9). Diese Zeitverzögerung zeigt, daß zunächst eine gewisse Stauhöhe erreicht werden muß, bevor ein Eindringen in den Mittelsand möglich ist. Der Abstand zwischen den Meßstellen beträgt jeweils 5 cm. Der gemessene Sättigungsverlauf bei der höchsten Meßstelle (Meßstelle 108) zeigt, daß die Stauhöhe diesen Punkt erreicht. Daraus läßt sich für das Überschreiten der Eindringbedingung auf eine Mindeststauhöhe von 15 cm schließen. Der Unterschied zwischen Rechnung und Messung läßt sich dadurch erklären, daß die eingebauten Sande entgegen der vorherigen Annahme nicht homogen vorliegen und somit eine Abweichung vom mittleren gemessenen Eindringdruck möglich ist.

Für die Untersuchung der Eindringbedingungen im Feinsand wurden die Meßstellen 112 und 113 gewählt. Für statische Bedingungen gilt:

$$h_d = \frac{p_d(\text{fein}) - p_d(\text{grob})}{(\rho_n - \rho_w) \cdot g} = \frac{1800 - 200}{460 \cdot 9.81} = 35.5 \text{ cm} \quad (6.4)$$

Wie in Abb. 6.11 zu sehen, hat DNAPL die Meßstelle 113 35 min nach Infiltrationsbeginn erreicht. Jedoch kann DNAPL Meßstelle 102 nicht erreichen, da der Druck, der durch die Stauhöhe von DNAPL oberhalb der Linse erzeugt wird, kleiner ist als der für die Eindringbedingung notwendige Eindringdruck der Linse (s. Abb. 6.10).

#### Diskontinuität der Sättigung an der Grenzfläche zweier heterogener Schichten

An der Grenzfläche zwischen zwei Schichten, die unterschiedliche physikalische Eigenschaften aufweisen, ist der Kapillardruck immer kontinuierlich, wohingegen die Sättigung diskontinuierlich ist. Die Sättigung der nichtbenetzenden Phase in einem groben Sand ist

größer als in einem feinen Sand (s. Kap. 4). Zur Untersuchung der Diskontinuität wurden die Meßstellen 106 und 103 für die Grenzfläche Grobsand - Mittelsand sowie 113 und 112 für die Grenzfläche Grobsand - Feinsand ausgewählt. An der Grenzfläche Grobsand - Mittelsand liegt die DNAPL-Sättigung an Meßstelle 106 nach 90 *min* bei  $S_n = 0.5$ ; zum selben Zeitpunkt beträgt die Sättigung bei Meßstelle 103  $S_n = 0.0$ . Nach Eindringen von DNAPL in den Mittelsand ist zu erkennen, daß die Diskontinuität der Sättigung erhalten bleibt. Nach 120 *min* erreicht die Sättigung an Meßstelle 106 ihren maximalen Wert  $S_n = 0.7$ , gleichzeitig ist die Sättigung bei Meßstelle 103  $S_n = 0.22$ . Die Sättigungsverläufe sind in Abb. 6.9 dargestellt. An der Grenzfläche Grobsand-Feinsand tritt das Phänomen der Diskontinuität noch stärker auf (s. Abb. 6.10, Abb. 6.11).

### **Einfluß der DNAPL-Sättigung auf den Durchfluß unterhalb der Versickerungsstelle**

Mit Hilfe der Meßstellen 114 und 115 sollte die Interaktion zwischen der Quellstärke und der Sättigung gezeigt werden. Der Verlauf der Massenflußrate von DNAPL weist eine Ähnlichkeit zu den gemessenen Sättigungen auf (s. Abb. 6.7, Abb. 6.11). Die gemessene Massenflußrate steigt bei Infiltrationsbeginn bis zu einem Wert von 200 *kg/h*. Gleichzeitig steigt die Sättigung an den Meßstellen 114 und 115 bis zu Werten von  $S_n = 0.52$  bzw.  $S_n = 0.59$ . Solange die Massenflußrate konstant bleibt, ist die Sättigung annähernd konstant. Ab Infiltrationsende sinkt die Massenflußrate, gleichzeitig sinkt die Sättigung bis auf residuale Werte an beiden Meßstellen. Die Ergebnisse des Experimentes zeigen, daß ein Zusammenhang zwischen Durchflußrate und Sättigung vorhanden ist und es somit möglich ist, bei numerischen Simulationen die Sättigung vorzugeben.

### **Drainage- und Imbibitions-Vorgänge (Hysterese) während der Infiltration und die resultierende residuale Sättigung der DNAPL-Phase**

Die Messungen zeigen, daß die DNAPL-Sättigung während der Drainage kontinuierlich bis zu einem maximalen Wert ansteigt und nach Infiltrationsende auf einen annähernd konstanten Wert absinkt (s. z. B. Abb. 6.11). Diese verbleibende Sättigung kann entweder diskontinuierlich als in die Wasserphase eingeschlossene Tropfen (residuale Sättigung infolge Hysterese) oder als kontinuierliche, oberhalb der Linsen gestaute Phase vorliegen. Durch eine numerische Untersuchung wird der Einfluß der Hysterese im Vergleich zur Messung später gezeigt.

### **Einfluß der horizontalen Grundwasserströmung auf die Infiltration und die Ausbreitung von DNAPL auf den gegen die Grundströmung geneigten, weniger durchlässigen Linsen**

#### Einfluß der Grundwasserströmung

Der Einfluß der Grundströmung ist z. B. an den Meßstellen 114 und 115 zu erkennen. Die maximale Sättigung bei Meßstelle 115 ist mit ca.  $S_n = 0.6$  um 10% größer als bei Meßstelle 114. Dies ist auf den Einfluß des Strömungsgradienten zurückzuführen. Das selbe Phänomen ist auch bei den Meßstellen 105 und 106 zu beobachten.

#### Einfluß der Linsenneigung

Die Meßstellen 101 und 102 sowie 113 wurden ausgewählt, um den Einfluß des Neigungswinkels der Linsen zu untersuchen. Bei Meßstelle 113 beträgt die Neigung 10%. Durch den Einfluß der Grundströmung kommt es zu einer leichten Stauung (s. Abb. 6.11). Die DNAPL-Sättigung erreicht einen maximalen Wert von ca.  $S_n = 0.30$ , da jedoch die Komponente der Gravitationskraft in Neigungsrichtung größer als der Strömungsgradient ist, infiltriert DNAPL gegen die Grundströmung in Richtung der Linsenneigung. Im Gegensatz dazu hat die Linse bei den Meßstellen 101 und 102 nur eine Neigung von 1%, was zur Folge hat, daß der Einfluß der Grundströmung überwiegt und DNAPL gegen die Linsenneigung in Richtung des Strömungsgradienten fließt. An Meßstelle 101 wird dementsprechend eine maximale Sättigung von nur ca.  $S_n = 0.05$  gemessen, wogegen an Meßstelle 102 ein Wert von fast  $S_n = 0.50$  zu beobachten ist (s. Abb. 6.9).

Mit der Auswertung der während des Versuchs aufgenommenen Fotos läßt sich folgendes Ergebnis erhalten:

#### **Einfluß der Heterogenitäten auf den Infiltrationsprozeß**

Die Bilder zeigen, daß die Bewegung des DNAPLs von den Heterogenitäten und somit von der Kapillarität dominiert wird, und zwar nicht nur von den bewußt eingebauten Linsen (großskalige Heterogenitäten), sondern auch von den kleinskaligen Heterogenitäten, die sich während des Einbaus in den Sanden unwillkürlich eingestellt haben (s. Abb. 6.12, 6.13). Das DNAPL zeigt sowohl *Pooling*-Effekte wie auch *Layering*-Effekte. Aufgrund der großskaligen Heterogenitäten staut sich DNAPL oberhalb der Linsen, da der Eindringdruck

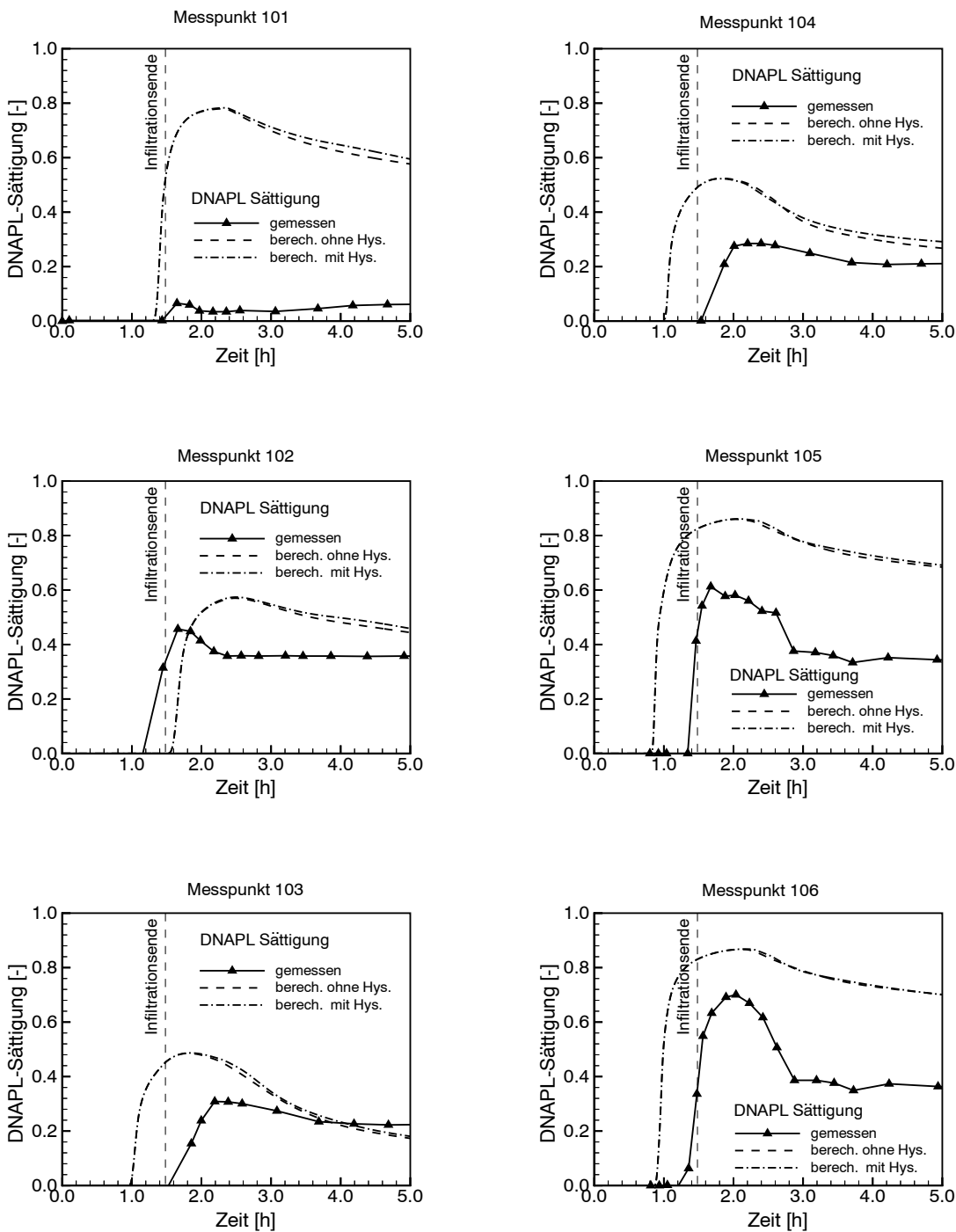


Abbildung 6.9: DNAPL-Sättigungsverlauf an den Messstellen 101 bis 106

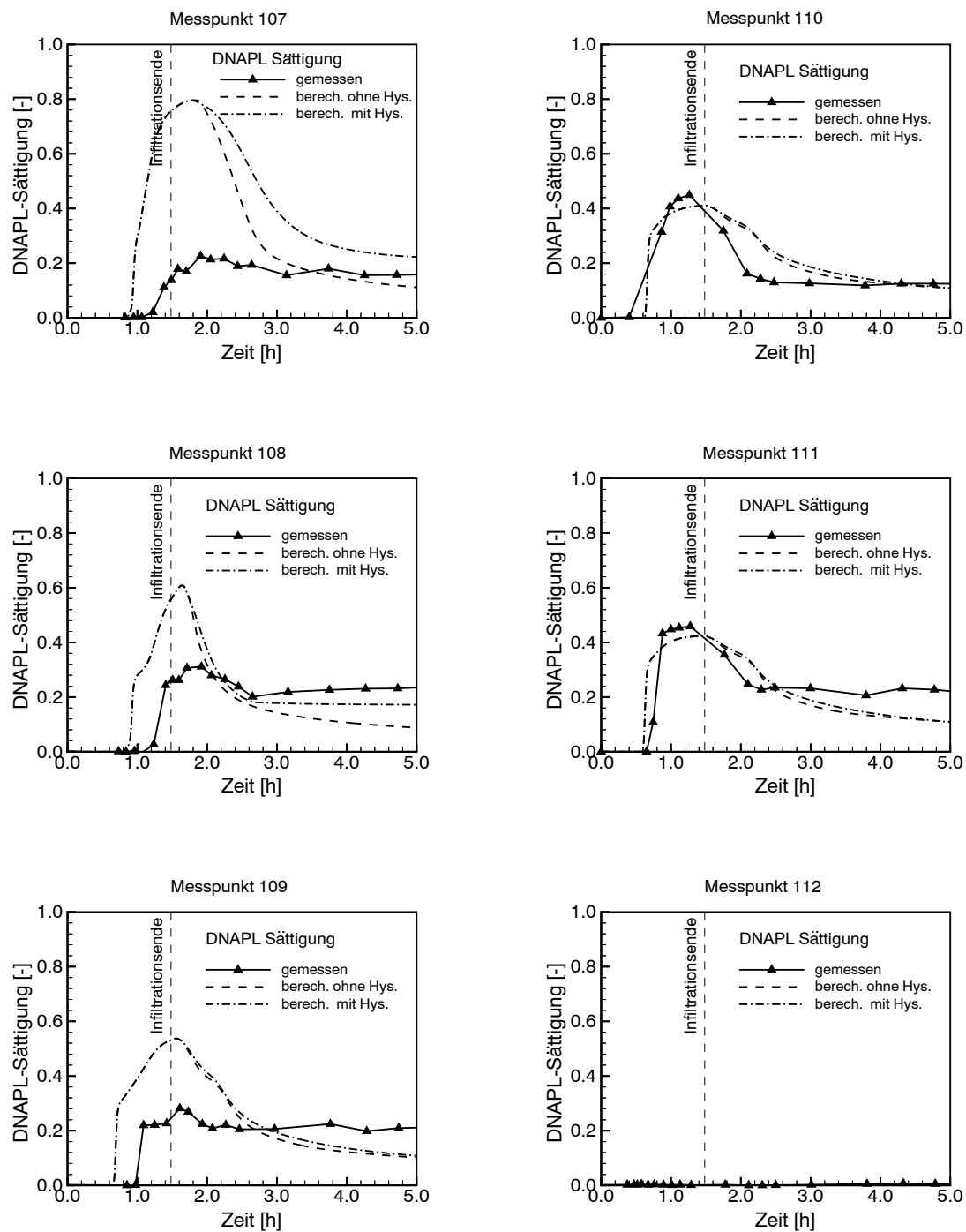


Abbildung 6.10: DNAPL-Sättigungsverlauf an den Meßstellen 107 bis 112

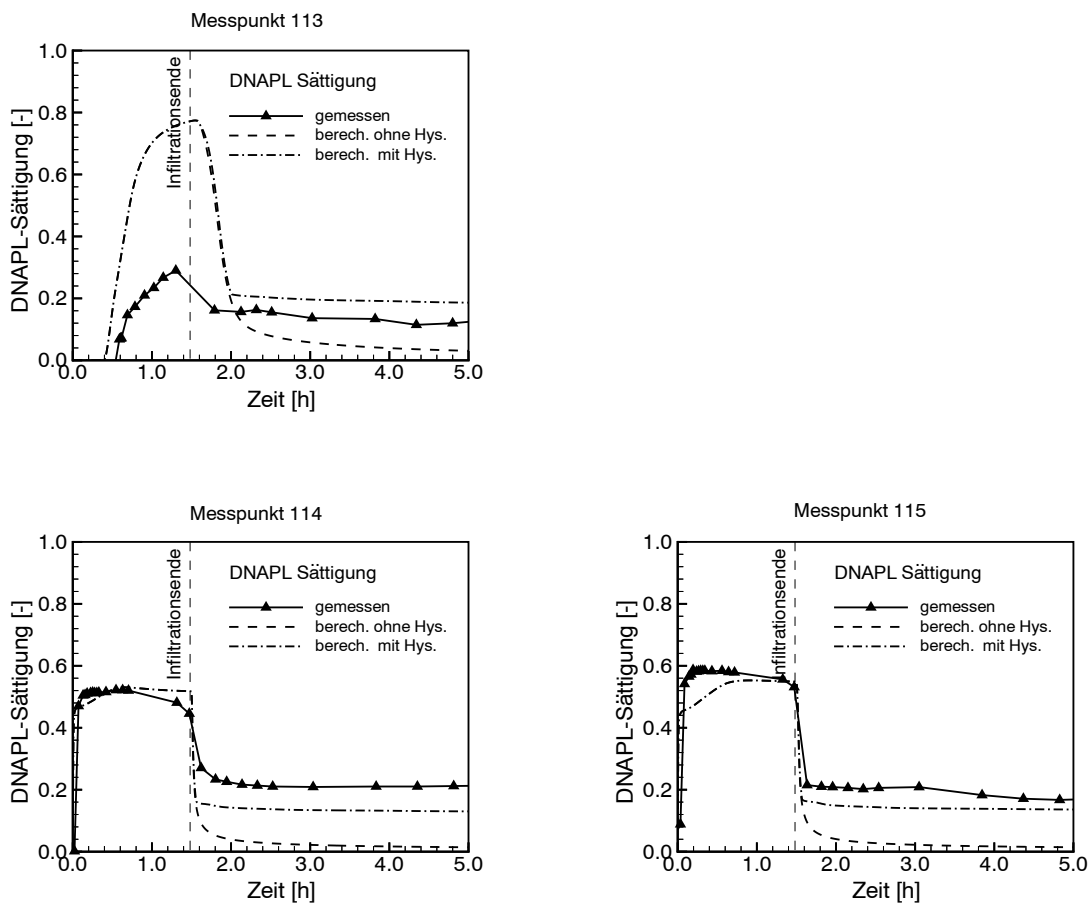


Abbildung 6.11: DNAPL-Sättigungsverlauf an den Meßstellen 113 bis 115

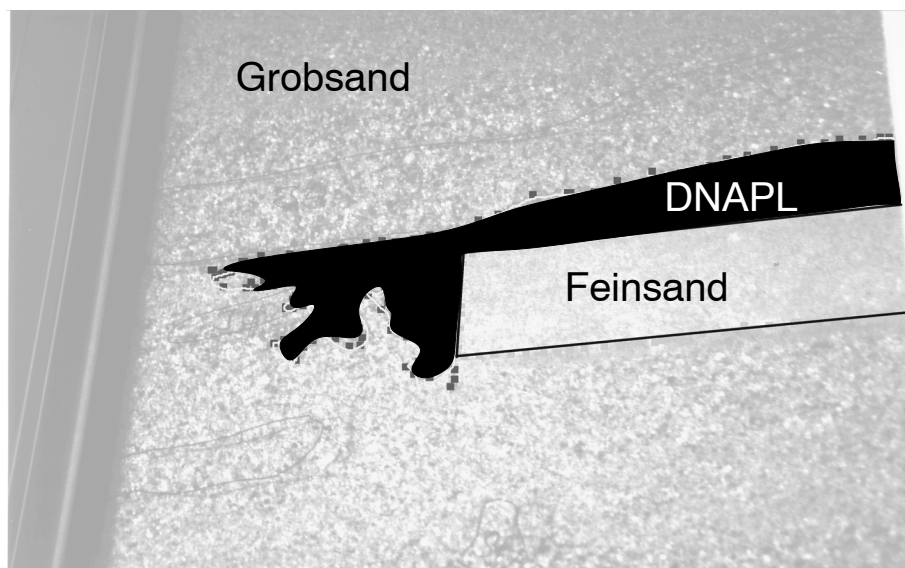


Abbildung 6.12: Experimentelle Ergebnisse

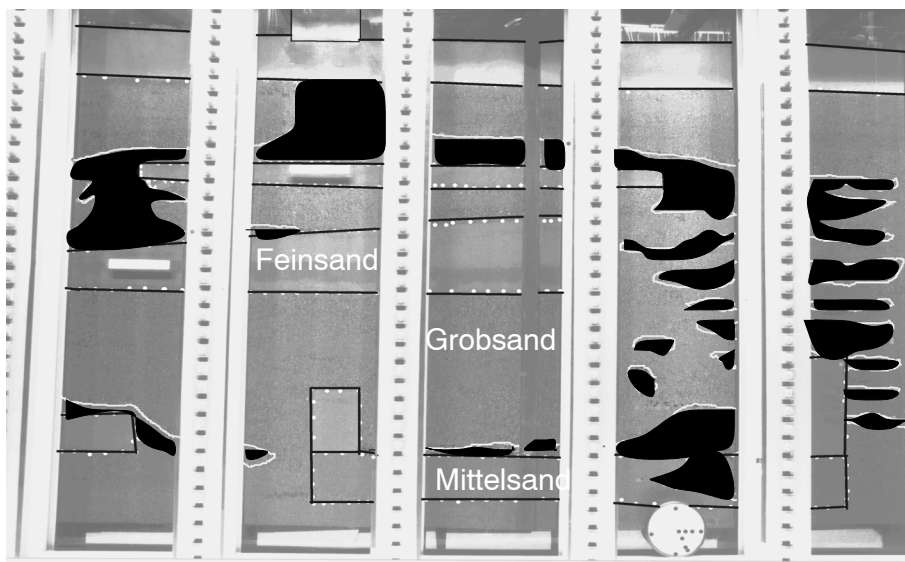


Abbildung 6.13: Experimentelle Ergebnisse

nicht überwunden werden kann (*Pooling*-Effekt). Im scheinbar homogenen Sand entstehen zusätzlich *Layering*-Effekte, d.h. DNAPL bildet Schichten. Verantwortlich dafür sind kleinskalige Heterogenitäten in den jeweiligen Sanden. Um diese Effekte numerisch zu erfassen, wurde ein neues Konzept entwickelt. Dieses Konzept wird später erläutert.

### 6.3.2 Numerische Simulation

Die numerischen Voruntersuchungen wurden mit dem Programm *MUFTE* durchgeführt. Im Rahmen des SFB 404 wurde dieses Programm in Zusammenarbeit mit dem Institut für Computeranwendungen in den Programmbaukasten *UG* implementiert. Hieraus entstand das neue Mehrphasenströmungsmodell *MUFTE-UG*. Die Einbindung in die *UG*-Umgebung erlaubt die Verwendung einer modernen Speicherstruktur mit schnellen Zugriffsmöglichkeiten, sowie die Anwendung von effizienten Gleichungslösern (z.B. Mehrgitterverfahren). Hierdurch konnten die Rechenzeiten deutlich verringert werden. In dem Programm ist sowohl ein Finite-Elemente- als auch ein Finite-Volumen-Verfahren (Box-Schema) implementiert (s. Helmig (1997) [48]). Die vorgestellten numerischen Simulationen wurden mit dem Finite-Volumen-Verfahren durchgeführt. Das Modellgebiet ist in Abb. 6.1 dargestellt. Die hydraulischen Eigenschaften der Sande sind in Tab. 6.1 angegeben. Die physikalischen Eigenschaften der verwendeten Fluide sind in Tab. 6.2 gezeigt. Das Experiment wurde mit Raumtemperatur ( $20^{\circ}\text{C}$ ) durchgeführt.

#### Räumliche Diskretisierung

Das zur Simulation verwendete Netz ist in Abb. 6.14 dargestellt, wobei die Elementlänge ca. 1 cm im Bereich der Grenzflächen zwischen Grobsand und Mittelsand sowie Grabsand und Feinsand und ca. 20 cm in den homogenen Bereichen beträgt. Somit ergibt sich ein Netz aus 4256 Elementen und 4349 Knoten. Aufgrund dieses feinen Netzes läßt sich die DNAPL-Front besser nachbilden. Die Zeitschrittlänge wurde zu maximal 10 Sekunden gewählt.

#### Anfangs- and Randbedingungen

Die Anfangs- und Randbedingungen entsprechen denjenigen im Vordimensionierungsabschnitt (s. Abb. 6.4). Die DNAPL-Infiltrationsquelle wird als konstanter Massenfluß über 1.5 h von 190 kg/h vorgegeben, wie von Trötschler gemessen.



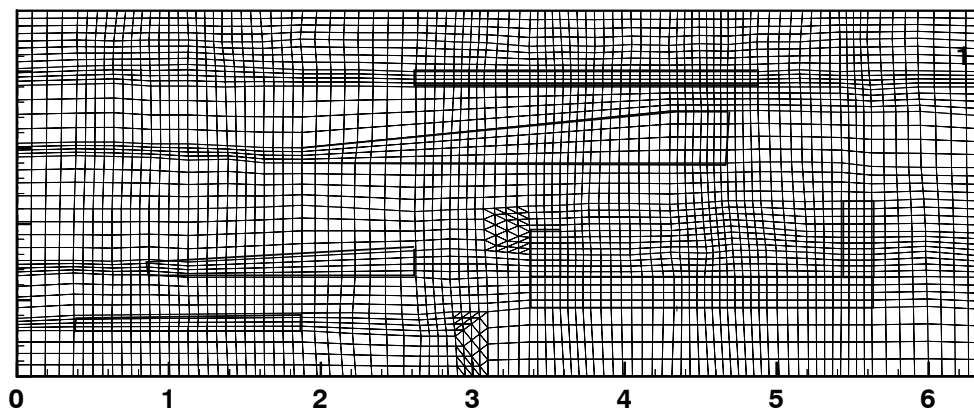


Abbildung 6.14: Diskretisierung des Modellgebietes (4349 Knoten, 4256 Elemente)

### Konstitutive Beziehungen

Die für die Simulation notwendigen Kapillardruck-Sättigungs-Beziehungen wurden von Allan im Rahmen von VEGAS experimentell ermittelt, wobei im Grobsand ein Wasser-DNAPL-System, im Mittel- und Feinsand entsprechend ein Wasser-Luft-System zugrundegelegt wurde. Um die Übertragbarkeit zwischen einem Wasser-Luft- und einem Wasser-DNAPL-System zu gewährleisten, wurde der Skalierungsansatz nach Parker et al. (1987)[103] verwendet. Die relative Permeabilität-Sättigungs-Beziehungen wurden hier nicht gemessen, sondern aus der  $p_c - S_w$ -Beziehung mit Hilfe des *Burdine/BC*-Ansatzes abgeleitet. Zur Parametrisierung der  $p_c - S_w$ - bzw.  $k_r - S_w$ -Beziehungen kommt das Modell von Brooks und Corey (1964)[14] zur Anwendung (s. Gl. (2.7),(2.87) und (2.88)). Für die gemessenen  $p_c - S_w$ -Daten wurden die Parameter  $\lambda$ ,  $p_d$  und  $S_{wr}$  angepaßt (s. Abb.2.9 und Tab. 2.1).

### Konzeptionsmodelle

Ein besonderes Augenmerk bei der Modellierung muß auf die Erfassung der Kapillardruck-Sättigungs-Beziehung und deren Einfluß auf die Ausbreitung des DNAPLs gelegt werden. In diesem Kapitel werden die zwei verschiedenen konzeptionellen Modelle erläutert, die in dem verwendeten numerischen Modell umgesetzt sind.





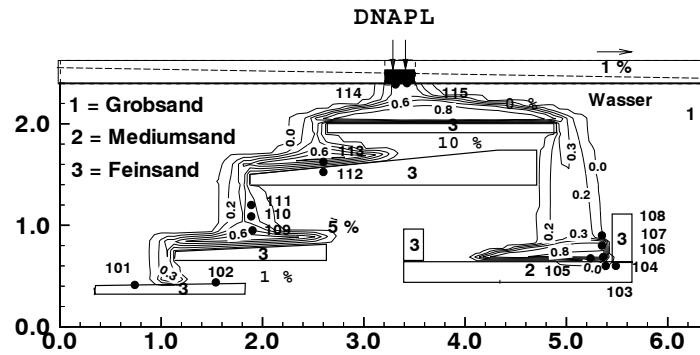


Abbildung 6.20: Numerische Ergebnisse nach 5400 s

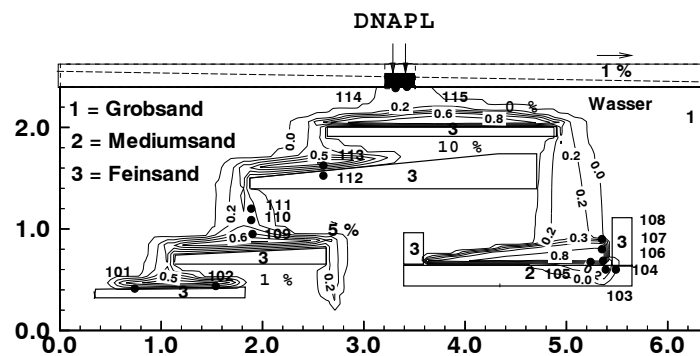


Abbildung 6.21: Numerische Ergebnisse nach 6600 s

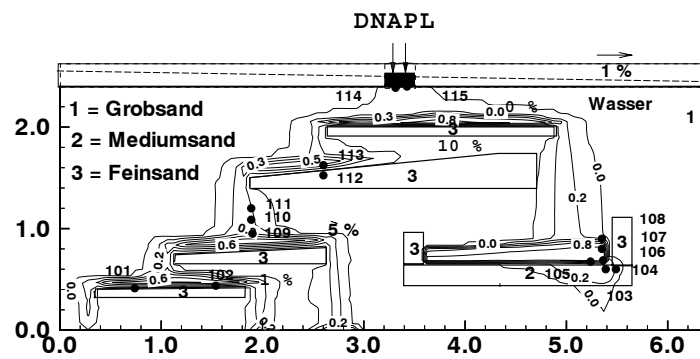


Abbildung 6.22: Numerische Ergebnisse nach 8100 s

### Das kleinskalige Konzept (Geostatistisches Konzept)

Um kleinskalige Heterogenitäten numerisch zu erfassen, wurde das kleinskalige Konzept (s. Kap. 4) verwendet. Für die Generierung des Permeabilitätsfeldes wurde das Modell *SIMSET* von Bardossy (1993)[8] verwendet. Das Modell benutzt die *1D-Turning-Band-Simulation*smethode. Die Grundidee der *Turning-Band-Simulation* ist es, die mehrdimensionale Realisation aus einer Reihe von eindimensionalen Simulationen aufzubauen. Durch die Projektion eines Punktes auf die geraden Linien der eindimensionalen Simulation und einer darauffolgenden Aufsummierung erhält man die mehrdimensionale Realisation [8] (s. Abb. 6.23). Das Permeabilitätsfeld wird durch den Mittelwert, die Varianz ( $v$ ), die

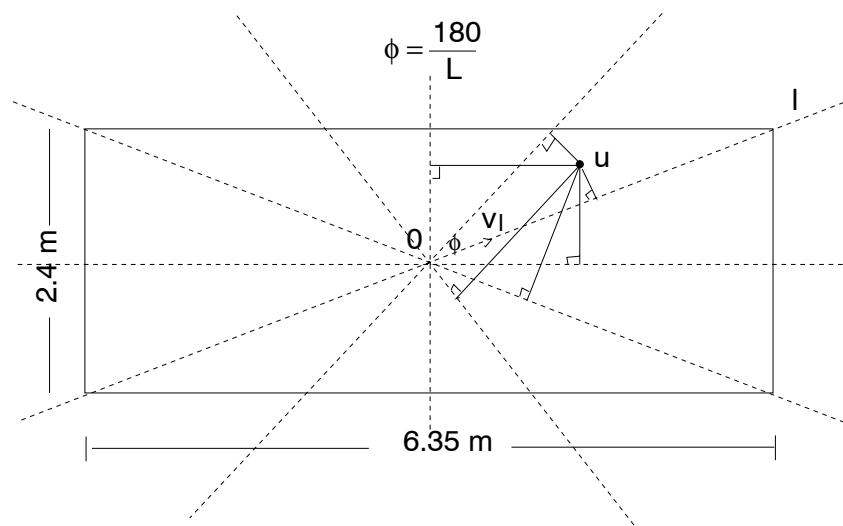


Abbildung 6.23: Turningband Methode

Lognormalverteilung und die Korrelationslänge ( $c$ ) beschrieben. Da das Variogramm des Experiment-Aquifers nicht experimentell bestimmt wurde, wurde für die Realisation einer Zufallsfunktion das theoretische exponentielle Variogramm verwendet. Das exponentielle Variogramm wird durch die Parameter  $v$ ,  $c$  und den *Nugget*-Effekt  $n$  definiert. Der *Nugget*-Effekt wird zu Null angenommen, da keine lokalen räumliche Diskontinuitäten existieren.  $c$  wird in horizontaler Richtung größer als in vertikaler Richtung gewählt, da die optische Auswertung des Experimentes horizontale *Layering*-Effekte im homogenen Sand zeigt (s. Abb. 6.13), was ein Zeichen dafür ist, daß die Permeabilität in horizontaler Richtung deutlich größer ist als in vertikaler Richtung. Aus dem selben Grund wurde im *SIMSET*-Modell der Anisotropiewinkel ( $\phi$ ) zu Null gewählt. Für  $v$  wurde berücksichtigt,

daß die Varianz in den vorliegenden Sanden nur gering ist.

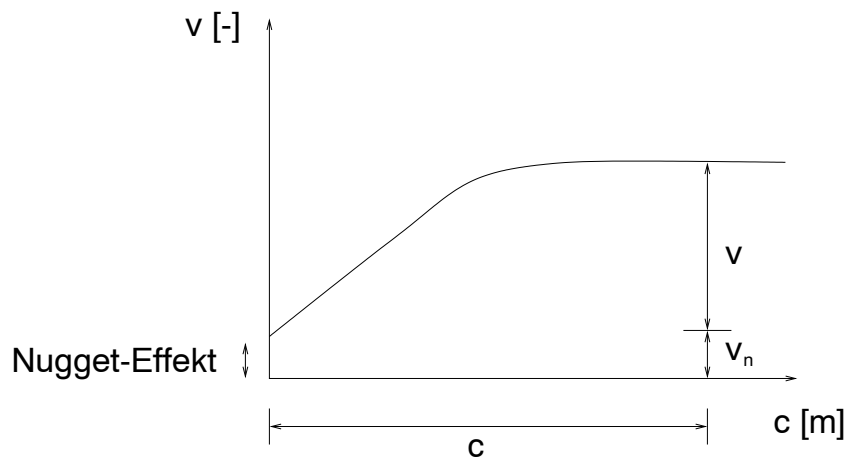


Abbildung 6.24: Theoretisches Variogramm

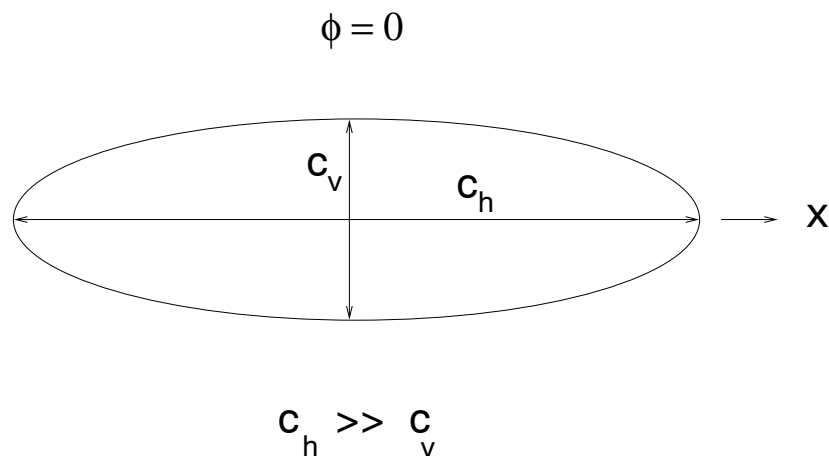


Abbildung 6.25: Anisotropie der Permeabilität

Es wurde versucht, mit dem numerischen Modell den optischen Verlauf des DNAPLs im Experiment nachzubilden. Hierzu braucht man ein passendes Permeabilitätsfeld, das durch verschiedene Parameter beschrieben wird. Mit Hilfe von verschiedenen Realisationen, in denen lediglich die Parameter  $v$  und  $c$  variiert wurden, wurde versucht, den numerisch berechneten DNAPL-Verlauf an den Verlauf im Experiment anzupassen. Für die erste Realisation wird  $c$  zu  $1.5 \text{ m}$ ,  $v$  zu  $1.5$  und der Anisotropiefaktor ( $c_h/c_v$ ) zu  $10$

angenommen (s. Abb. 6.26). Das damit erzeugte Permeabilitätsfeld ist in Abb. 6.27 dargestellt. Die numerischen Ergebnisse (Abb. 6.28) zeigen *Layering*-Effekte im homogenen Sand, jedoch kann DNAPL im Vergleich zum Experiment (s. Abb. 6.13) die Wanne nicht erreichen. Deshalb wurde für die zweite Realisation ein Variogramm gewählt, das einer Kombination zweier Variogramme entspricht (Abb. 6.29). Dies bietet die Möglichkeit, für Punkte mit kleiner räumlicher Distanz eine kleine Varianz zu wählen und für weiter entfernt liegende Punkte eine größere Varianz anzunehmen. Dadurch kann erreicht werden, daß die mit dem erzeugten Permeabilitätsfeld (s. Abb. 6.30) DNAPL-Verteilung in horizontaler und vertikaler Richtung numerisch besser beschrieben wird. Wie aus Abb. 6.31 zu ersehen ist, wird auch mit dieser Realisation der horizontale *Layering*-Effekt nicht abgebildet. Deshalb wurden weitere Realisationen durchgeführt, von denen einige Ergebnisse in den Abb. 6.34 bis 6.46 zu sehen sind.

Es ist ersichtlich, daß in keiner der Realisationen der Verlauf des Experimentes sehr dicht angenähert wurde. Der Grund hierfür ist, daß die Parameter, die eine den experimentellen Voraussetzungen entsprechende Realisation möglich machen, und die relativen Permeabilitäten der Sande nicht experimentell bestimmt wurden. Um die passenden Parameter zu treffen, müssen entweder noch weitere Realisationen durchgeführt werden oder die Parameter experimentell bestimmt werden. Entsprechendes gilt für die relativen Permeabilitäten. Falls die entsprechenden Parameter sowie die relativen Permeabilitäten auf experimentellem Wege nicht zur Verfügung gestellt werden können, könnte man zur Kalibrierung des Modells diese Daten mittels inverser Modellierung bestimmen. Jedoch stellt die numerische Simulation auf jeden Fall einen sehr wichtigen Schritt in Richtung eines besseren Prozeßverständnisses dar.

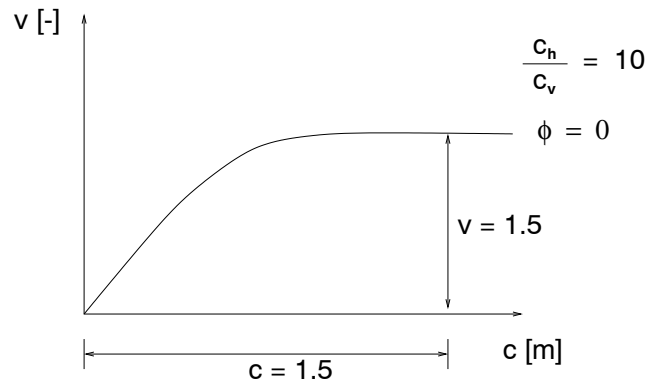


Abbildung 6.26: Parameter der ersten Realisation

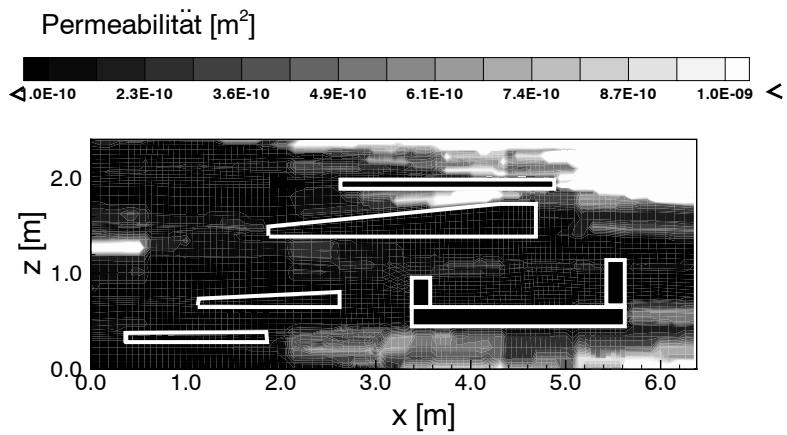


Abbildung 6.27: Permeabilitätsverteilung für die erste Realisation

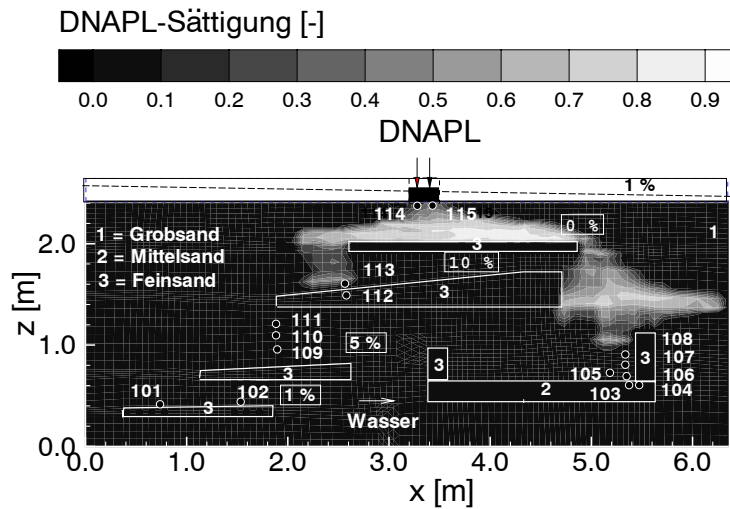


Abbildung 6.28: Numerische Simulation nach 1.45 h für die erste Realisation



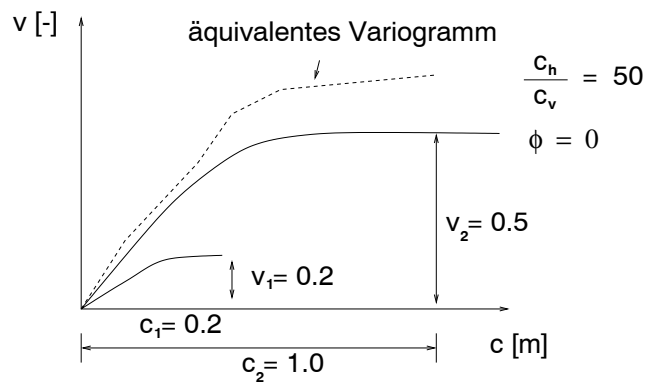


Abbildung 6.29: Parameter der zweiten Realisation

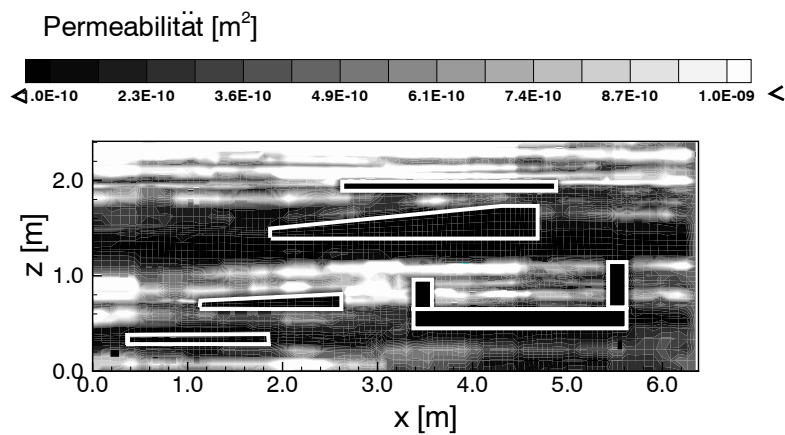


Abbildung 6.30: Permeabilitätsverteilung für die zweite Realisation

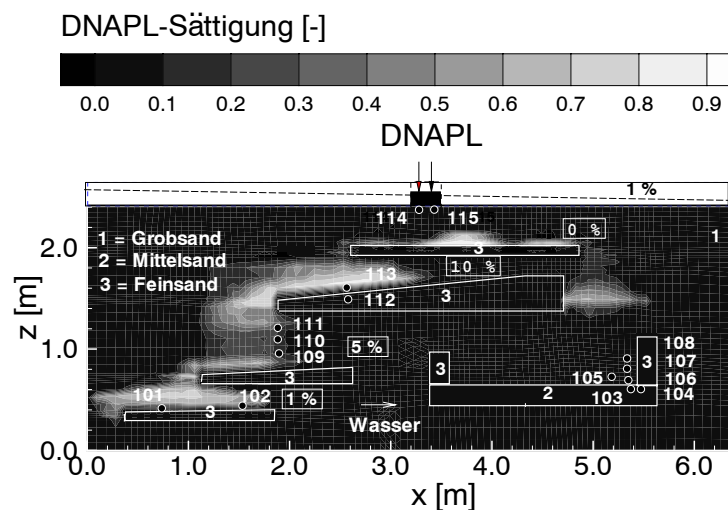


Abbildung 6.31: Numerische Simulation nach 1.88 h für die zweite Realisation

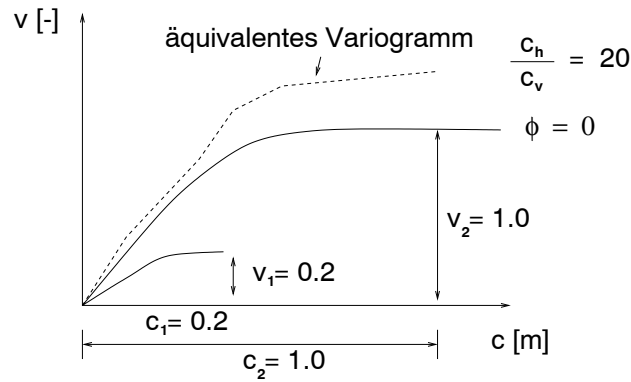


Abbildung 6.32: Parameter der dritten Realisation

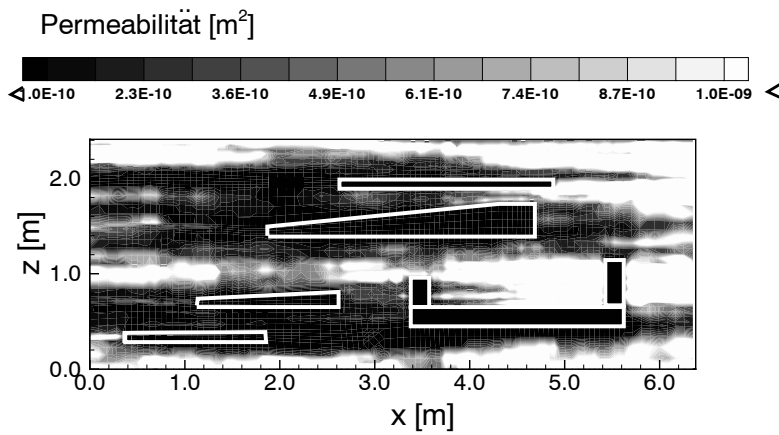


Abbildung 6.33: Permeabilitätsverteilung für die dritte Realisation

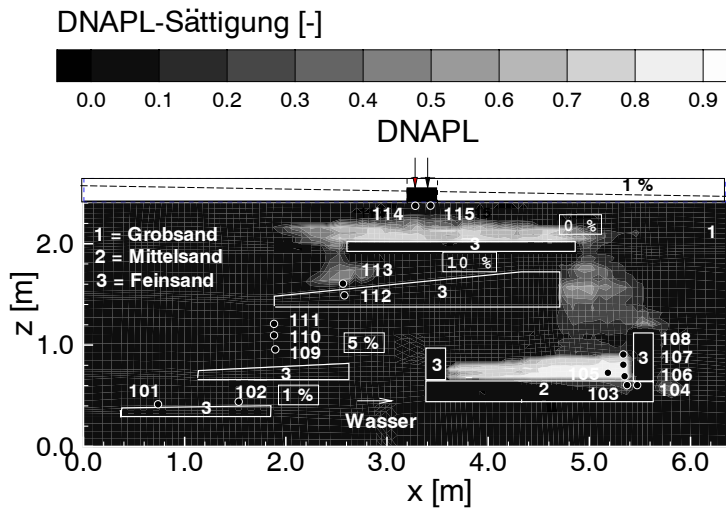


Abbildung 6.34: Numerische Simulation nach 1.88 h für die dritte Realisation

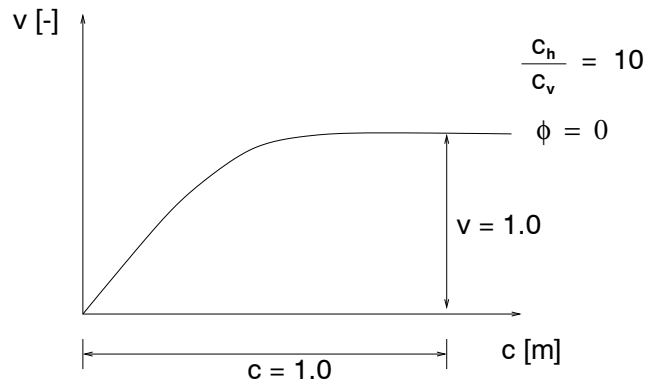


Abbildung 6.35: Parameter der vierten Realisation

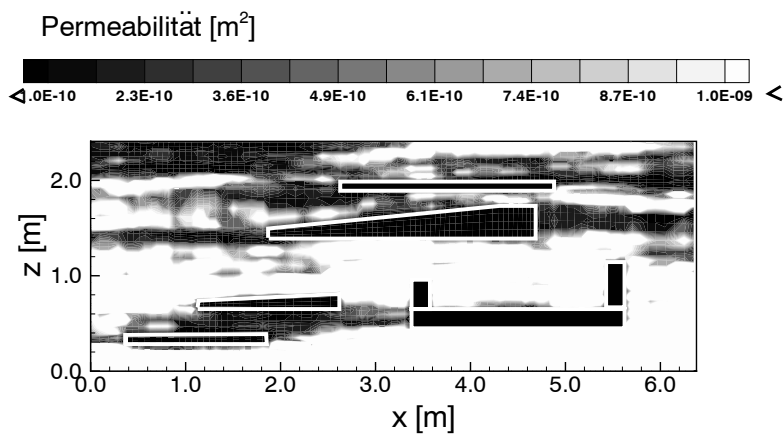


Abbildung 6.36: Permeabilitätsverteilung für die vierte Realisation

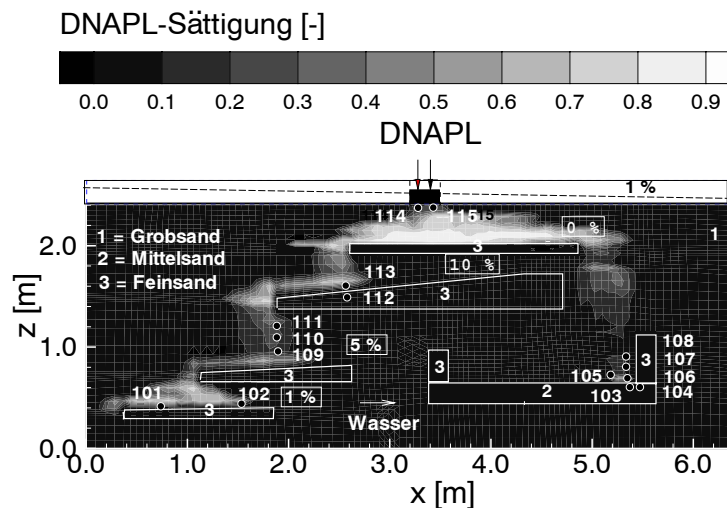


Abbildung 6.37: Numerische Simulation nach 1.45 h für die vierte Realisation

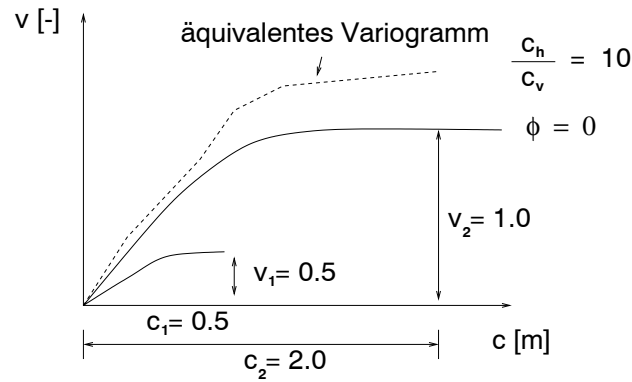


Abbildung 6.38: Parameter der fünften Realisation

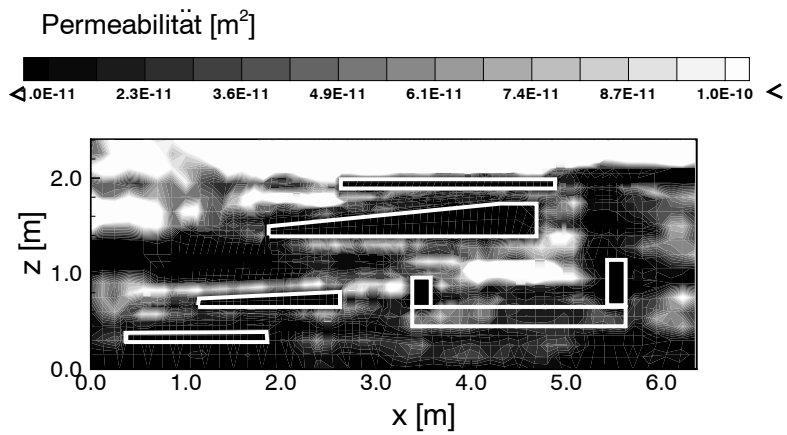


Abbildung 6.39: Permeabilitätsverteilung für die fünfte Realisation

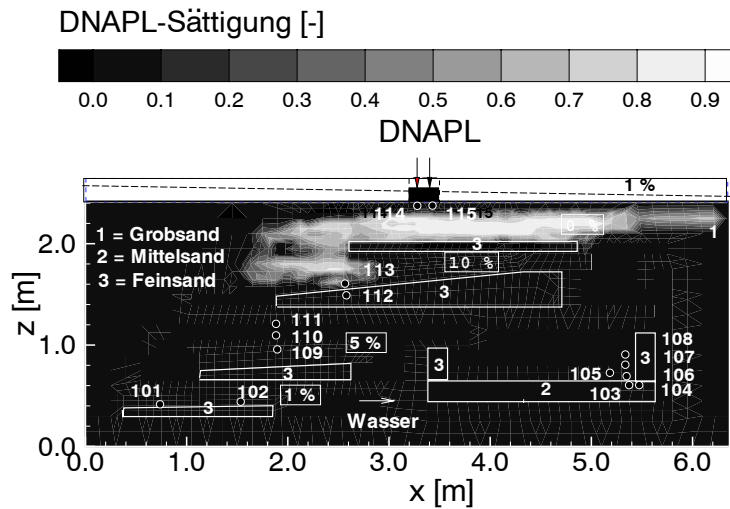


Abbildung 6.40: Numerische Simulation nach 1.88 h für die fünfte Realisation

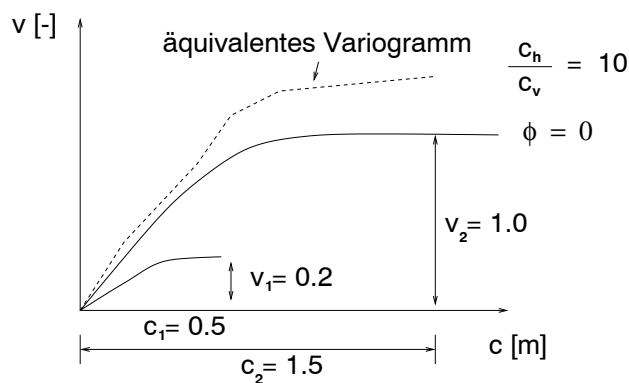


Abbildung 6.41: Parameter der sechsten Realisation

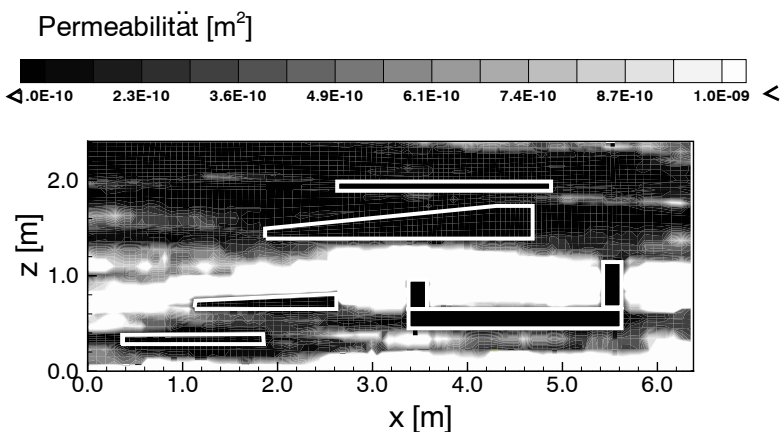


Abbildung 6.42: Permeabilitätsverteilung für die sechste Realisation

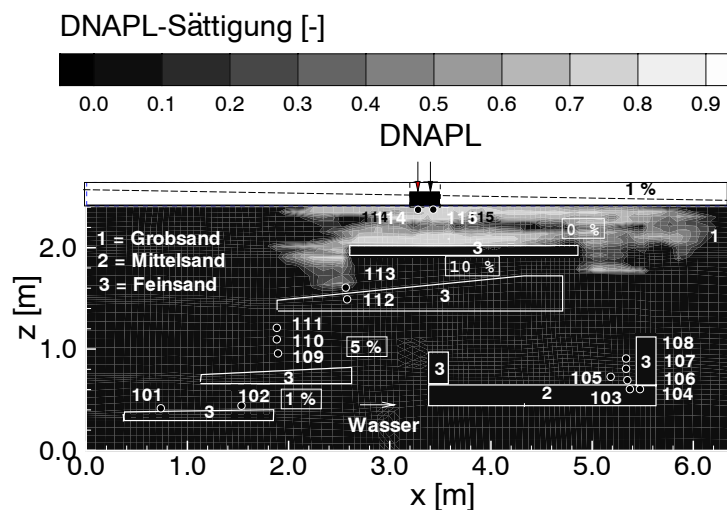


Abbildung 6.43: Numerische Simulation nach 1,45 h für die sechste Realisation

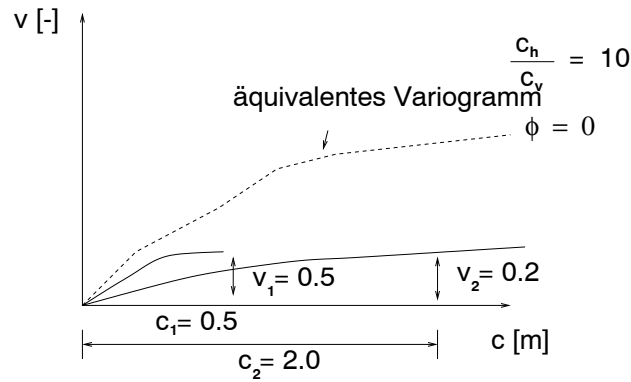


Abbildung 6.44: Parameter der siebten Realisation

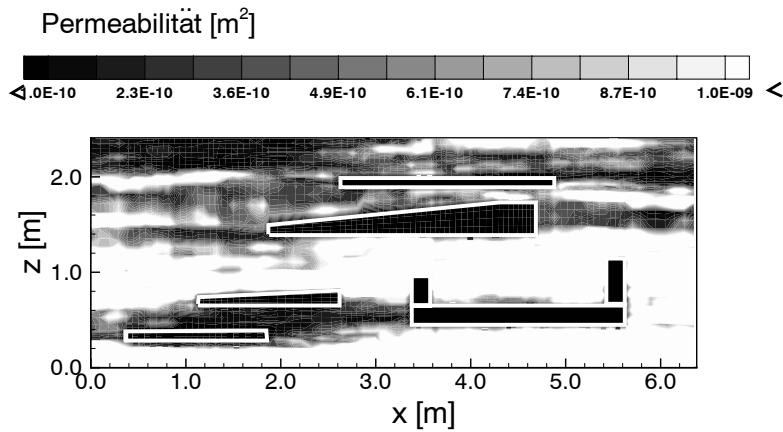


Abbildung 6.45: Permeabilitätsverteilung für die siebte Realisation

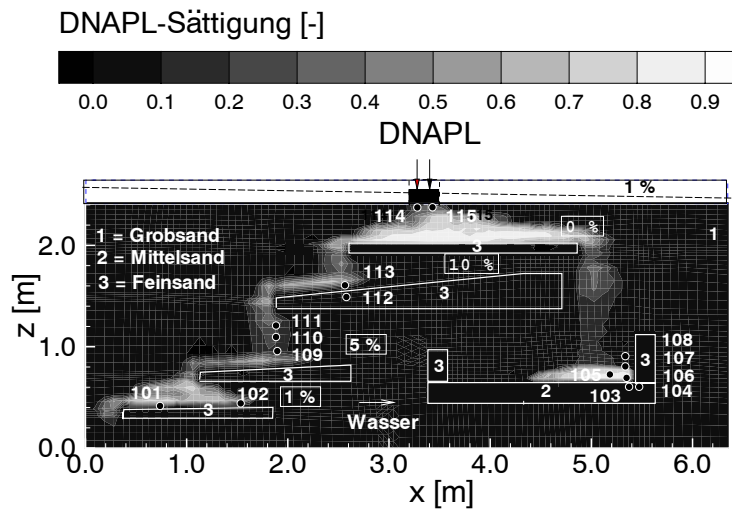


Abbildung 6.46: Numerische Simulation nach 1.45 h für die siebte Realisation

### 6.3.3 Effekt der Hysterese

Für die numerische Modellierung eines zeitlich begrenzten Infiltrationsprozesses ist es wichtig, nicht nur den Drainagevorgang zu betrachten, sondern auch das Verhältnis von Gravitations- und Kapillarkräften und damit den Imbibitionsvorgang mit einzubeziehen, um die residuale Sättigung und die Ausbreitung der nichtbenetzenden Phase zu erfassen. Die residuale Sättigung ist abhängig von der Sättigung der NAPL-Phase bei Umkehrung des Verdrängungsvorgangs von Drainage zu Imbibition (s. Kap. 3). Wie oben erläutert, konnten im Rahmen des Experimentes die Bereiche der residualen Sättigung oberhalb der Linsen nicht von den Bereichen unterschieden werden, in denen DNAPL gestaut wird und als kontinuierliche Phase vorliegt. Mit Hilfe der numerischen Untersuchung lassen sich diese Bereiche abschätzen. Da für das kleinskalige Konzept im Rahmen dieser Arbeit eine Anpassung der Parameter  $c$  und  $v$  nicht möglich war, wurde die numerische Untersuchung unter Verwendung des großskaligen Konzeptes durchgeführt, das gleichzeitig eine Vereinfachung und Rechenzeiterparnis darstellt.

Für den Drainagevorgang wurde die Kapillardruck-Sättigungs-Beziehung nach Brooks und Corey (s. Gl. 2.7) verwendet und für den Imbibitionsvorgang wurde der Ansatz nach van Genuchten (s. Gl. 2.10) angenommen. Die entsprechenden Parameter sind in Tab. 2.1 und 3.1 gegeben. Die Hysterese-Effekte wurden nach dem Modell von Parker et al. simuliert (s. Kap. 3). Abb. 6.9 bis 6.11 zeigen den Vergleich zwischen den gemessenen Sättigungen der DNAPL-Phase und den berechneten mit und ohne Betrachtung der Hysterese-Effekte. Der Unterschied zwischen den gemessenen und berechneten Werten ist deshalb so groß, da beim großskaligen Konzept der Einfluß der kleinskaligen Heterogenitäten nicht berücksichtigt wird. Trotz dieser Unterschiede zeigt die berechnete Sättigung unter Berücksichtigung der Hysterese an bestimmten Meßstellen eine bessere Übereinstimmung mit den gemessenen Werten.

Wie in Abb. 6.11 zu sehen, ist der Einfluß der Hysterese an den Meßstellen 114 und 115 deutlich zu erkennen. Die berechneten Sättigungsverteilungen der NAPL-Phase liegen nahe an den gemessenen. Die durch Hysterese entstehende residuale Sättigung liegt bei circa 0.2. Bei den anderen Meßstellen ist der Effekt der Hysterese gering. Wie in Kap. 3 gezeigt, entsteht Hysterese durch die entgegengesetzte Wirkungsrichtung von Gravitation und Kapillarkräften. Die Meßstellen, die geringe Hysterese-Effekte zeigen, liegen vorwiegend oberhalb der Linsen mit geringer Neigung, da dort der Einfluß der Gravitation auf das Fließverhalten des DNAPL nur gering ist. Dort staut sich DNAPL als kontinuierliche

Phase. Im folgenden werden anhand einiger Meßstellen die gemessenen und berechneten Ergebnisse diskutiert.

Die Meßstellen 114 und 115 liegen direkt unterhalb der Quelle im Grobsand. Dort ist der Einfluß der Gravitationskraft und somit der Effekt der Hysterese deutlich zu sehen.

Meßstelle 113 liegt oberhalb der um 10% geneigten Linse. Aufgrund dieser Neigung ist der Einfluß der Gravitation groß. Dadurch ist dort Hysterese zu beobachten.

An den Meßstellen 109, 110 und 111, die oberhalb der 5%-Linse vertikal übereinander angeordnet sind, ist der Effekt der Hysterese wenig zu sehen, da sich DNAPL oberhalb der Linse staut.

Meßstelle 102 liegt über der um 1% geneigten Linse. Die Rechnung zeigt, daß hier die Hysterese aufgrund des geringen Einflusses der Gravitation keine Rolle spielt.

Die Meßstellen 106, 107 und 108 liegen im Bereich der Wanne vertikal übereinander. Meßstelle 106 zeigt keine Hysterese, da sie an der Grenzfläche zwischen Grob- und Mittelsand liegt und sich DNAPL dort staut. Die Meßstellen 107 und 108 zeigen Hysterese-Effekte, da nach Erreichen der Eindringbedingung DNAPL in den Mittelsand eindringt.

### 6.3.4 Zusammenfassung

Um die Beeinflussung der NAPL-Verteilung durch großskalige bzw. kleinskalige Heterogenitäten in gesättigten porösen Medien numerisch zu untersuchen, wurden im Rahmen dieser Arbeit zwei Konzepte diskutiert. Zum einen wurde das homogene Konzept vorgestellt, das nur große Heterogenitäten (z. B. Linsen) betrachtet. Jeder vorliegende Sand wird bei diesem Konzept als homogen angenommen, so daß nur *Pooling*-Effekte aufgezeigt werden. Zum anderen wurde das kleinskalige Konzept verwendet, das die Heterogenitäten innerhalb der Sande erfaßt. Mit diesem Konzept können sowohl die auftretenden *Pooling*- als auch *Layering*-Effekte simuliert werden.



# 7 Numerisches Experiment zu Dreiphasensystemen unter Berücksichtigung von Hysterese-Effekten

## 7.1 Zielsetzung des Experimentes

Durch Unfälle z.B. bei Transporten oder an Pipelines gelangen immer wieder hydrophobe Stoffe, die leichter als Wasser sind (LNAPL), in den Untergrund und verursachen eine Kontamination des betroffenen Gebietes. Nach Eintritt des LNAPLs in den Boden bewegt es sich infolge der Gravitation abwärts durch die ungesättigte Zone hindurch und erfährt infolge von Kapillarkräften eine laterale Ausbreitung. Trifft LNAPL im Zuge des Fortschreitens auf den Grundwasserspiegel, so breitet es sich entlang des Kapillarsaums aus, da aufgrund des Dichteunterschiedes zu Wasser ein Eindringen in die gesättigte Zone nicht möglich ist. Es kann jedoch zu einem Einschluß von LNAPL in der Wasserphase kommen, wenn sich die Lage des Grundwasserspiegels z.B. infolge von Regenfällen ändert. Sinkt der Wasserspiegel, so folgt die LNAPL-Phase dem Wasserspiegel abwärts. Hebt sich der Wasserspiegel wieder an, so verdrängt Wasser die LNAPL-Phase, wodurch ein Teil des LNAPLs in der nun gesättigten Zone eingeschlossen wird und dort als Residualsättigung und somit als Langzeitkontamination festgehalten wird. In diesem Kapitel wird der Einfluß der konstitutiven Beziehungen unter Berücksichtigung von Hysterese-Effekten auf die LNAPL-Verteilung im Boden bei einer Variierung der Grundwasserspiegellage numerisch untersucht. Diese Untersuchung dient zur Vordimensionierung eines im Rahmen von VEGAS durchgeführten Experimentes.

## 7.2 Experiment und numerische Simulation

### 7.2.1 Modellaufbau

Der Modellaufbau ist in Abb. 7.1 dargestellt. Die Abmessungen betragen  $L \times H \times B = 3 \text{ m} \times 2.8 \text{ m} \times 1.0 \text{ m}$ . Der Aquifer besteht aus einem heterogenen Medium, das sich aus Grob- und Mittelsand zusammensetzt. Die Anordnung der Sande ist Abb. 7.1 und die physikalischen Eigenschaften der Sande sind Tabelle 6.1 zu entnehmen. Der rechte sowie der linke Rand des Aquifers ist undurchlässig. Die Wasserspiegellage im Experiment wird über den unteren Rand mit Hilfe von Brunnen gesteuert. Die LNAPL-Phase (Xylol) wird auf einer Rechteckfläche ( $L \times B = 1.0 \text{ m} \times 0.01 \text{ m}$ ) unter konstantem Druck infiltriert. Die gesamte Infiltrationsmenge beträgt  $77.7 \text{ kg}$  und wird über eine Dauer von  $1390 \text{ s}$  eingespeist. Die physikalischen Eigenschaften der Fluide sind in Tab. 7.1 angegeben. Die Temperatur wird mit  $20 \text{ }^\circ\text{C}$  angenommen.

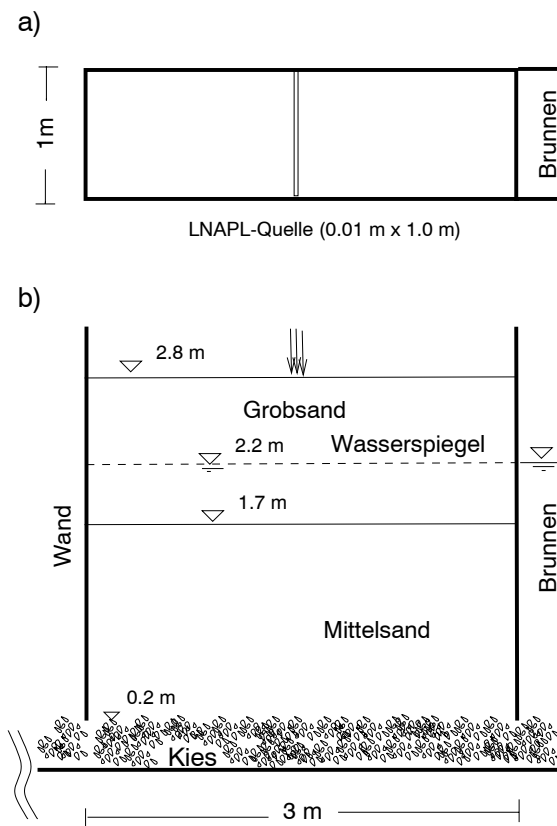


Abbildung 7.1: Versuchsaufbau a) Draufsicht, b) Schnitt

Tabelle 7.1: Eigenschaften der Fluide

		Wasser	LNAPL(Xylol)
Dichte $\rho$	$[kg/m^3]$	1000.0	860.0
Viskosität $\mu$	$[Pa\ s]$	0.001	0.0006

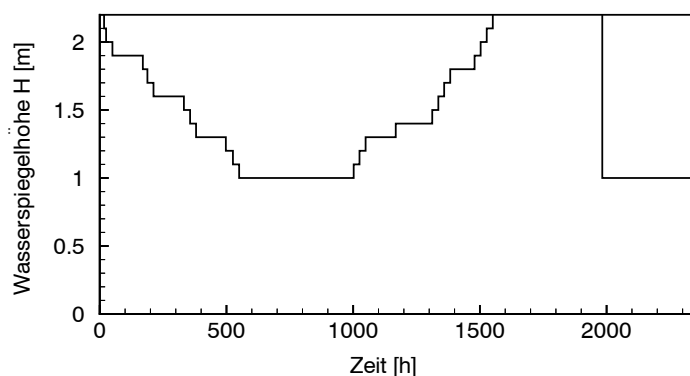


Abbildung 7.2: Zeitlicher Verlauf der Wasserspiegelschwankungen

Der zeitliche Verlauf der Wasserspiegellage ist in Abb. 7.2 zu sehen. Um Hysterese-Effekte hervorzurufen, wird der Wasserspiegel zunächst langsam abgesenkt, dann konstant gehalten und anschließend wieder angehoben.

### 7.2.2 Numerisches Experiment

Das Modell *MUFTE-UG* für Dreiphasensysteme ohne Berücksichtigung von Hysterese wurde von Huber und Helmig [55] entwickelt. Im Rahmen der vorliegenden Arbeit wurde dieses Modell um einen Hysterese-Ansatz erweitert (s. Kap. 3) und für die folgende numerische Simulation eingesetzt.

#### Räumliche Diskretisierung

Die verwendete Diskretisierung ist in Abb. 7.3 dargestellt. Im Bereich des Überganges gesättigte – ungesättigte Zone, über den sich die Änderung der Wasserspiegellage erstreckt, wurde eine Verfeinerung des Elementnetzes vorgenommen. Es wurde eine maximale Zeitschrittlänge von 1800 s gewählt.

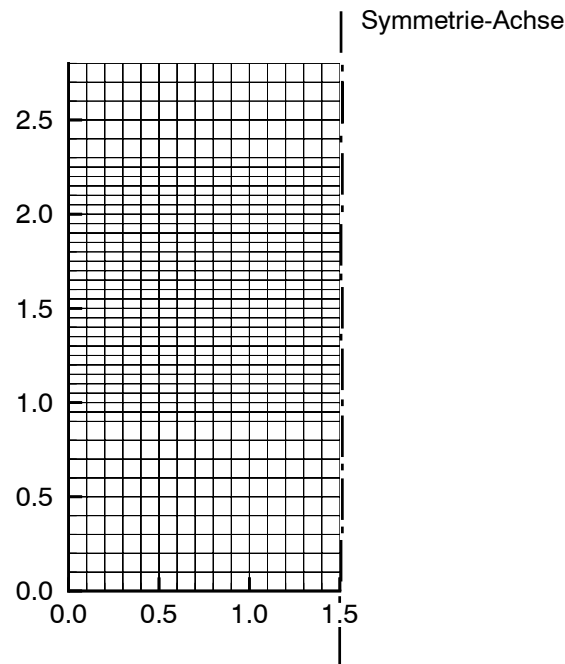


Abbildung 7.3: Räumliche Diskretisierung (630 Elemente, 688 Knoten)

### Anfangs- and Randbedingungen

Als Primärvariablen wurden Gassättigung  $S_g$ , LNAPL-Sättigung  $S_n$  und Gasdruck  $p_g$  gewählt. Vor Beginn der Infiltration ist das Modellgebiet bis zu einer Höhe von 2.20 m vollständig mit Wasser gesättigt ( $S_n = S_g = 0$ ). Oberhalb des Wasserspiegels wird eine residuale Sättigung der Wasserphase ( $S_n = 0, S_g = 1 - S_{wr}$ ) angesetzt. Der rechte und der linke Rand wird als undurchlässig betrachtet (*Neumann*-Randbedingungen  $q_n = q_w = 0$ ). Der obere Rand, ausgenommen der LNAPL-Quelle, wird als für Wasser und LNAPL undurchlässig angenommen. Für die Quelle wird eine konstante Fließrate von 0.027 kg/s angenommen und der Gasphase wird am oberen Rand atmosphärischer Druck als eine *Dirichlet*-Randbedingung vorgegeben. Am unteren Rand werden für alle Primärvariablen *Dirichlet*-Randbedingungen angesetzt:  $S_n = S_g = 0$ ,  $p_g$  entspricht dem zeitlichen Verlauf der Wasserspiegellage.

### Konstitutive Beziehungen

Die Fitting-Parameter für die im Zweiphasensystem Wasser-Gas gemessenen Kapillardruck-Sättigungs-Daten der verwendeten Sande wurden nach van Genuchten ermittelt und sind in Tab. 7.2 angegeben.

Die Kapillardruck-Sättigungs-Beziehungen der Sande im Dreiphasensystem wurden nach den Ansätzen von Parker aus dem Zweiphasensystem Wasser-Gas skaliert. Die Skalierungs-

faktoren nach Gl. (2.50) und (2.51) wurden berechnet zu:  $\beta_{gn} = 2.23$  und  $\beta_{nw} = 1.81$  (mit  $\sigma_{gn} = 0.030 [N/m]$  und  $\sigma_{nw} = 0.037 [N/m]$ ).

Die  $p_c - S_w$ -Kurven im Dreiphasensystem werden nach Parker durch die Kurve des Zweiphasensystems NAPL-Wasser (s. Abb. 7.6) und des Zweiphasensystems Gas-(NAPL+Wasser) (s. Abb. 7.7) beschrieben.

Die  $k_r - S_w$ -Beziehungen der drei Phasen sind in Abb. 7.8 und 7.9 gegeben.

Tabelle 7.2: Fitting-Parameter nach van Genuchten (System Wasser-Gas)

Drainage (d)	$d\alpha [1/Pa]$	$d n [-]$	$d S_{wr} [-]$	$d S_{nr} [-]$
Grobsand	.001	4.7	0.05	0.0
Mittelsand	.00055	5.0	0.15	0.0
Imbibition (i)	$i\alpha [1/Pa]$	$i n [-]$	$i S_{wr} [-]$	$i S_{nr} [-]$
Grobsand	.0015	3.50	0.05	0.2
Mittelsand	.00075	4.5	0.15	0.2

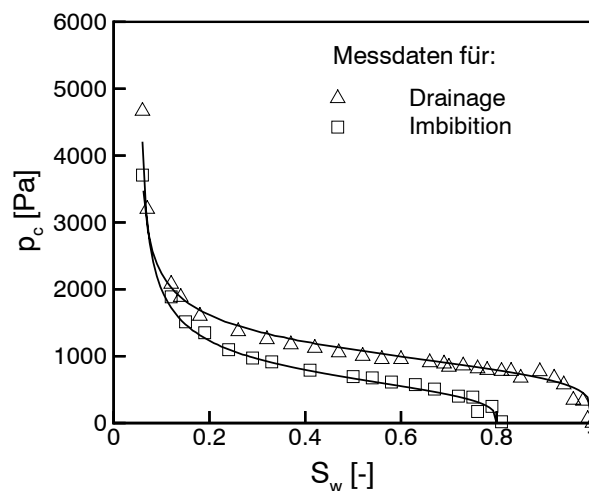
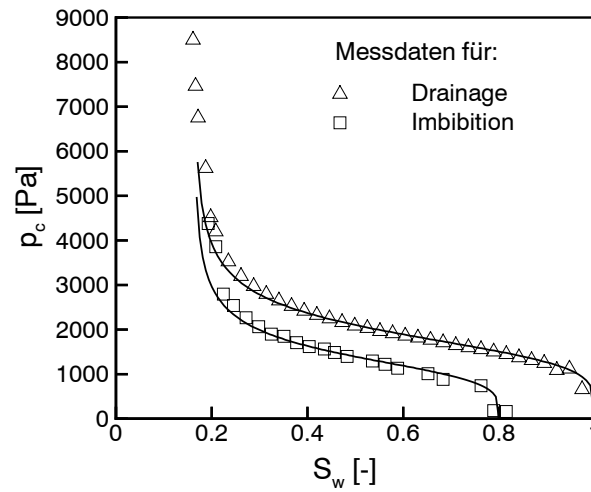
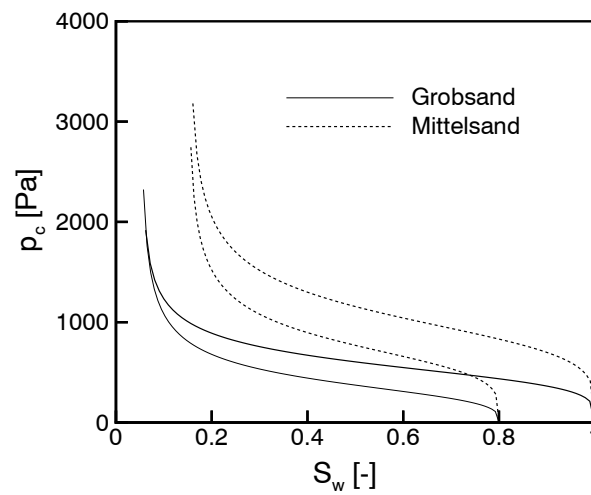


Abbildung 7.4:  $p_c - S_w$ -Kurve für das System Wasser-Gas (Grobsand)

Abbildung 7.5:  $p_c - S_w$ -Kurve für das System Wasser-Gas (Mittelsand)Abbildung 7.6:  $p_c - S_w$ -Kurve im Dreiphasensystem für Wasser-NAPL

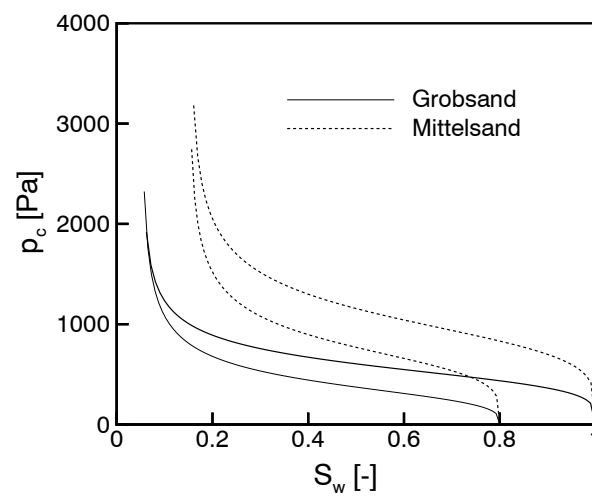


Abbildung 7.7:  $p_c - S_t$ -Kurve im Dreiphasensystem für (NAPL+Wasser)-Gas

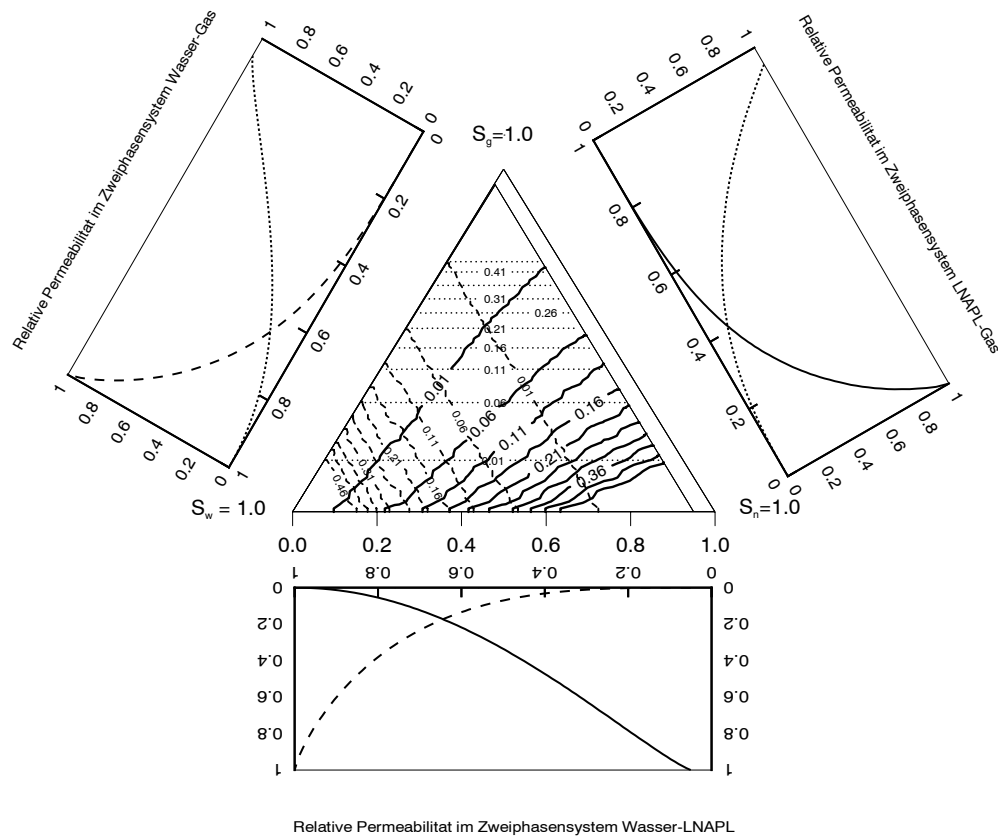


Abbildung 7.8: Relative Permeabilität-Sättigungs-Beziehung für Grobsand

### 7.2.3 Numerische Ergebnisse

Abb. 7.10 bis 7.14 zeigen Isolinien der berechneten Sättigung der LNAPL-Phase mit und ohne Betrachtung der Hysterese-Effekte für verschiedene Wasserstände. Die numerischen Ergebnisse mit Betrachtung der Hysterese während der Wasserspiegelabsenkung zeigen keinen Unterschied zur Betrachtung ohne Hysterese. Während der Wasserspiegelanhebung ist dieser Unterschied jedoch sehr groß.

Abb. 7.10 zeigt den zeitlichen Verlauf der LNAPL-Sättigung während der Infiltration. Der Wasserspiegel ist konstant auf  $2.20\text{ m}$  eingestellt. Erreicht LNAPL den Wasserspiegel, breitet es sich infolge der geringeren Dichte lateral entlang des Wasserspiegels aus und verdrängt einen Teil der Wasserphase unterhalb des Wasserspiegels. Nach  $10\text{ h}$  ist ein Gleichgewicht erreicht, in dem LNAPL eine eigene Schicht oberhalb des Wasserspiegels bildet.



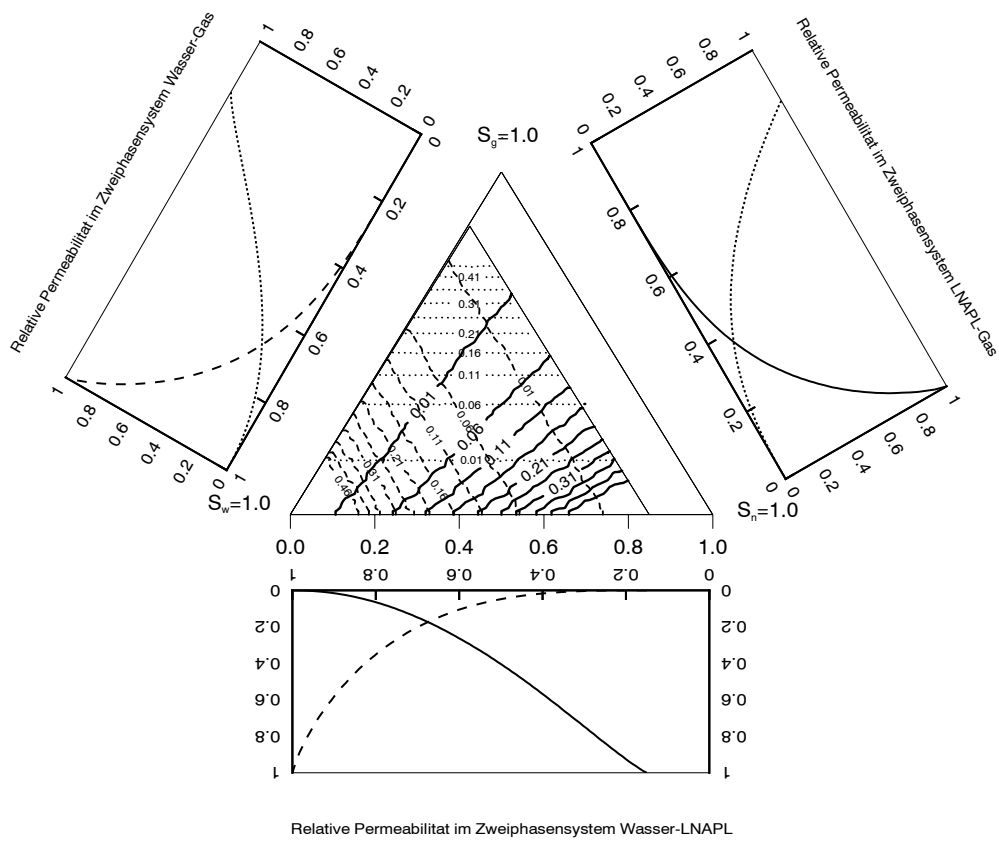
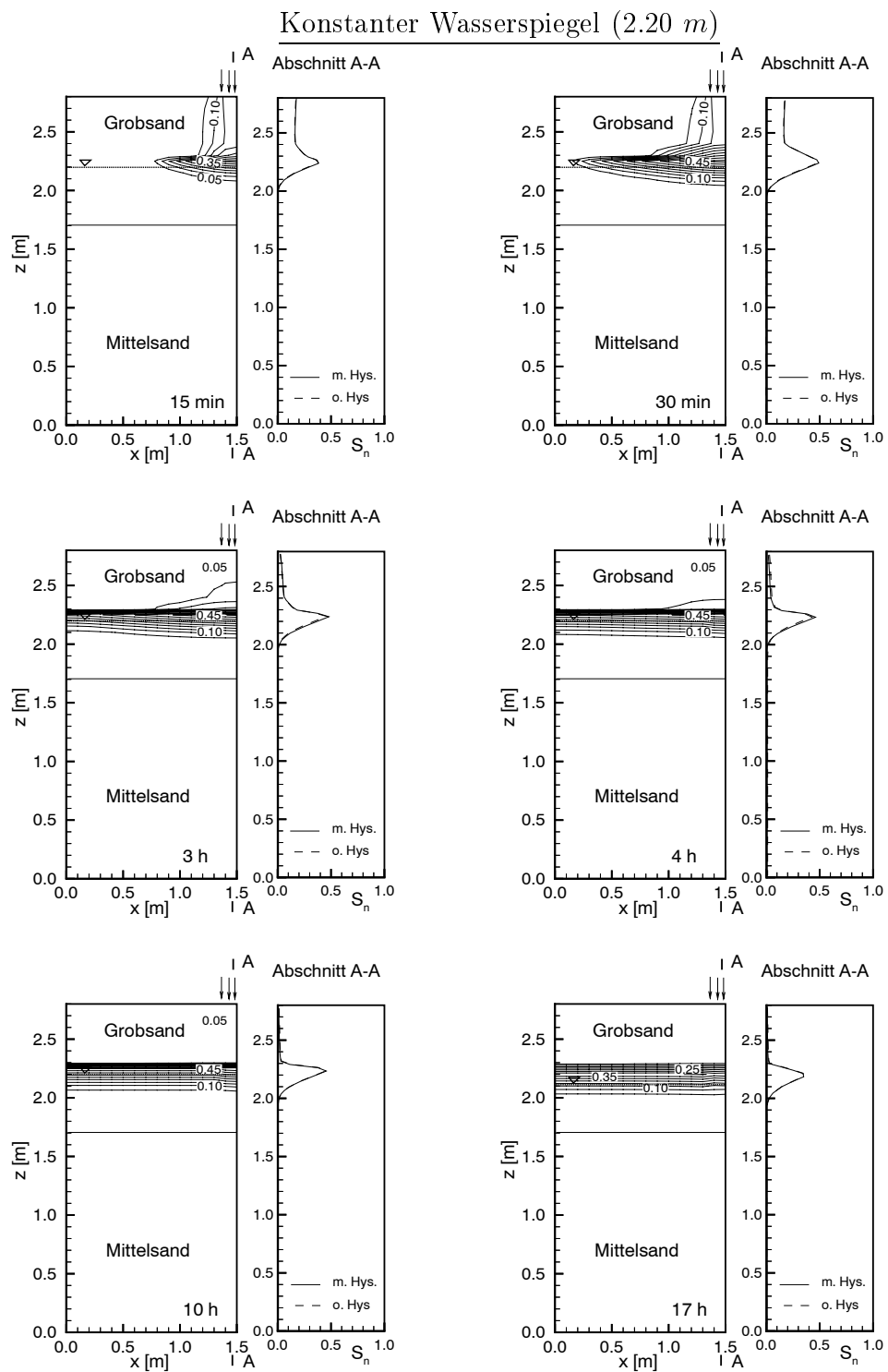


Abbildung 7.9: Relative Permeabilität-Sättigungs-Beziehung für Mittelsand

Nach 17  $h$  wird der Wasserspiegel um 10  $cm$  abgesenkt und dort bis  $t = 25 h$  konstant gehalten. Aufgrund der Gravitationskraft folgt LNAPL dem Wasserspiegel nach unten. Das gleiche Szenario ist in den folgenden Abbildungen zu sehen. Es ist zu bemerken, daß keine residuale Sättigung von LNAPL in der ungesättigten Zone entsteht, da für  $S_{nr}$  sowohl in den  $p_c - S_w$ - als auch in den  $k_r - S_w$ -Beziehungen nach Parker während der Infiltration von NAPL (Drainage) gilt:  $S_{nr} = 0$ .

Abb. 7.13 und 7.14 zeigen die numerischen Ergebnisse mit und ohne Betrachtung der Hysterese-Effekte während der Wasserspiegelanhebung. Die numerischen Ergebnisse mit Hysterese zeigen eine andere Sättigungsverteilung von NAPL als ohne Betrachtung von Hysterese. Nach 1310  $h$  steht der Wasserspiegel bei 1.4  $m$ . Die numerischen Ergebnisse ohne Betrachtung der Hysterese zeigen, daß LNAPL dem Wasserspiegel nach oben folgt und keine residuale Sättigung in der gesättigten Zone entsteht. Die Ergebnisse mit Hysterese zeigen, daß ein Anteil von LNAPL in der gesättigten Zone als residuale Sättigung zurückgehalten wird. Dieser Anteil ist in der Wasserphase eingeschlossen und ist nicht mobil. Für weitere Anhebungen des Wasserspiegels bleibt die gesamte Menge von LNAPL in der Wasserphase eingeschlossen.

Wird der Wasserspiegel wieder bis zu 1.00  $m$  abgesenkt, wird die LNAPL-Phase, die in der Wasserphase eingeschlossen ist, wieder beweglich und folgt dem Wasserspiegel infolge der Gravitationskraft nach unten (s. Abb. 7.14). Mit Anhebung des Wasserspiegels bis 2.20  $m$  wird die NAPL-Phase wieder in der Wasserphase eingeschlossen (s. Abb. 7.14).



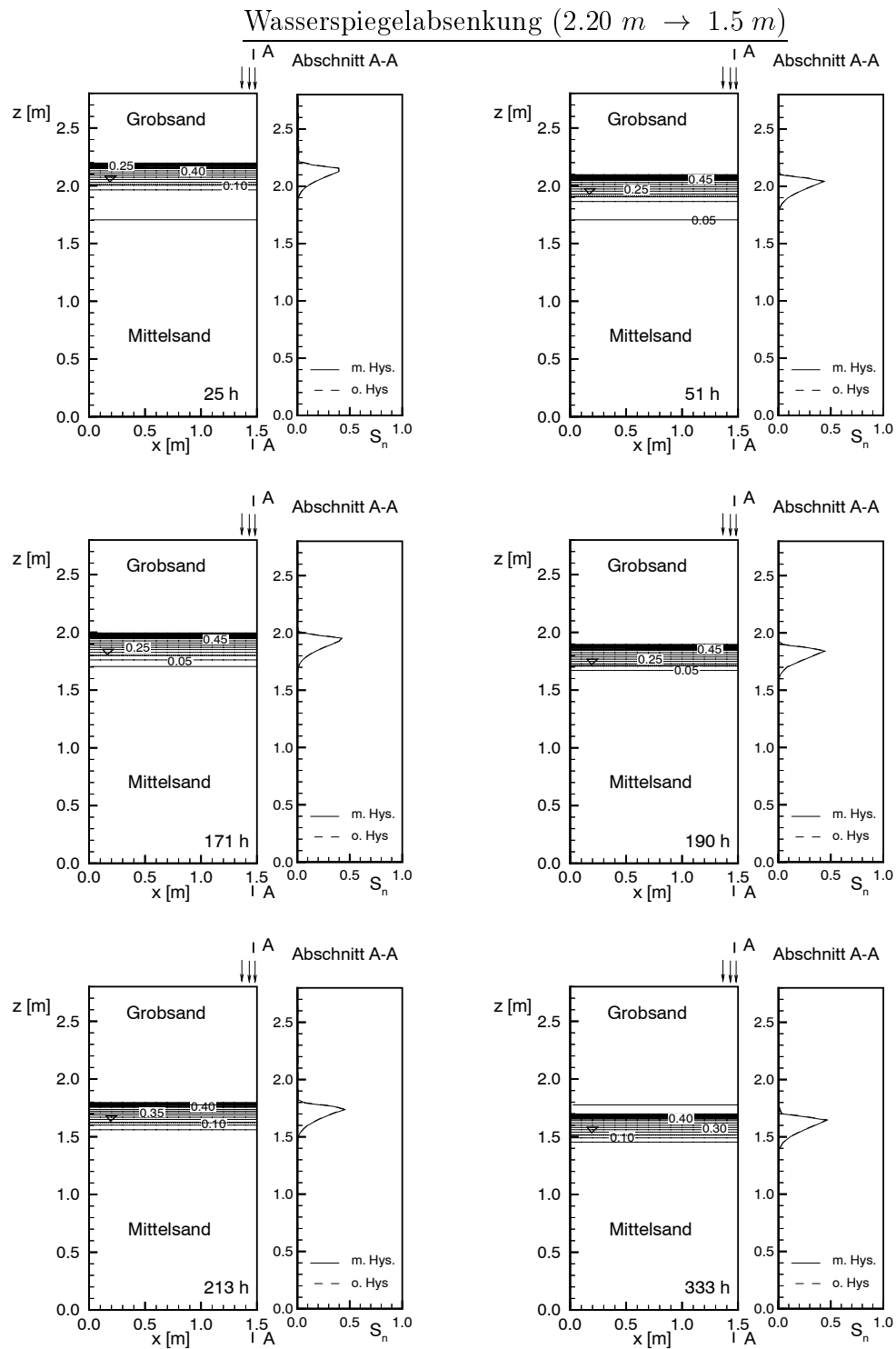


Abbildung 7.11: Numerische Ergebnisse

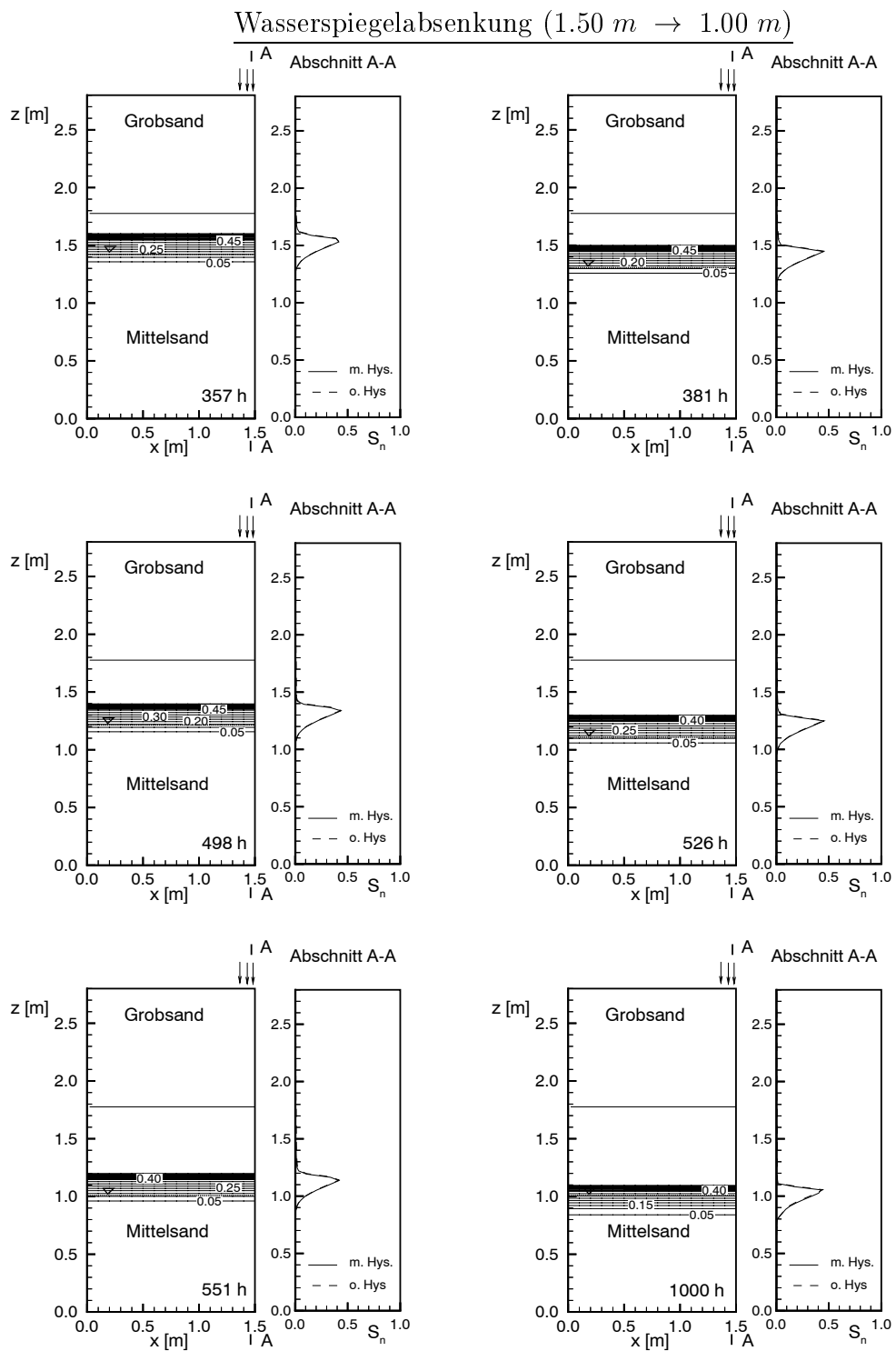


Abbildung 7.12: Numerische Ergebnisse

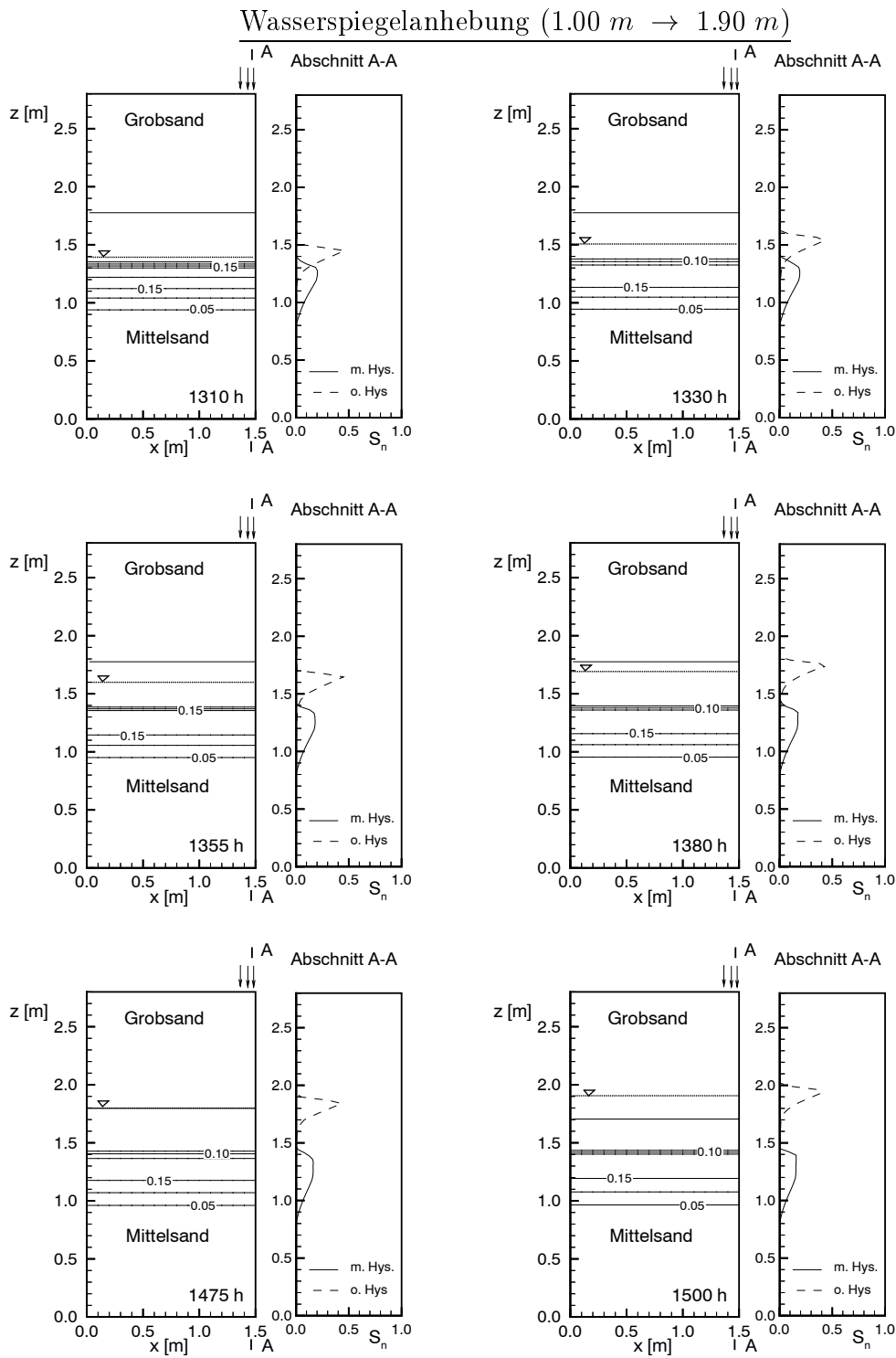
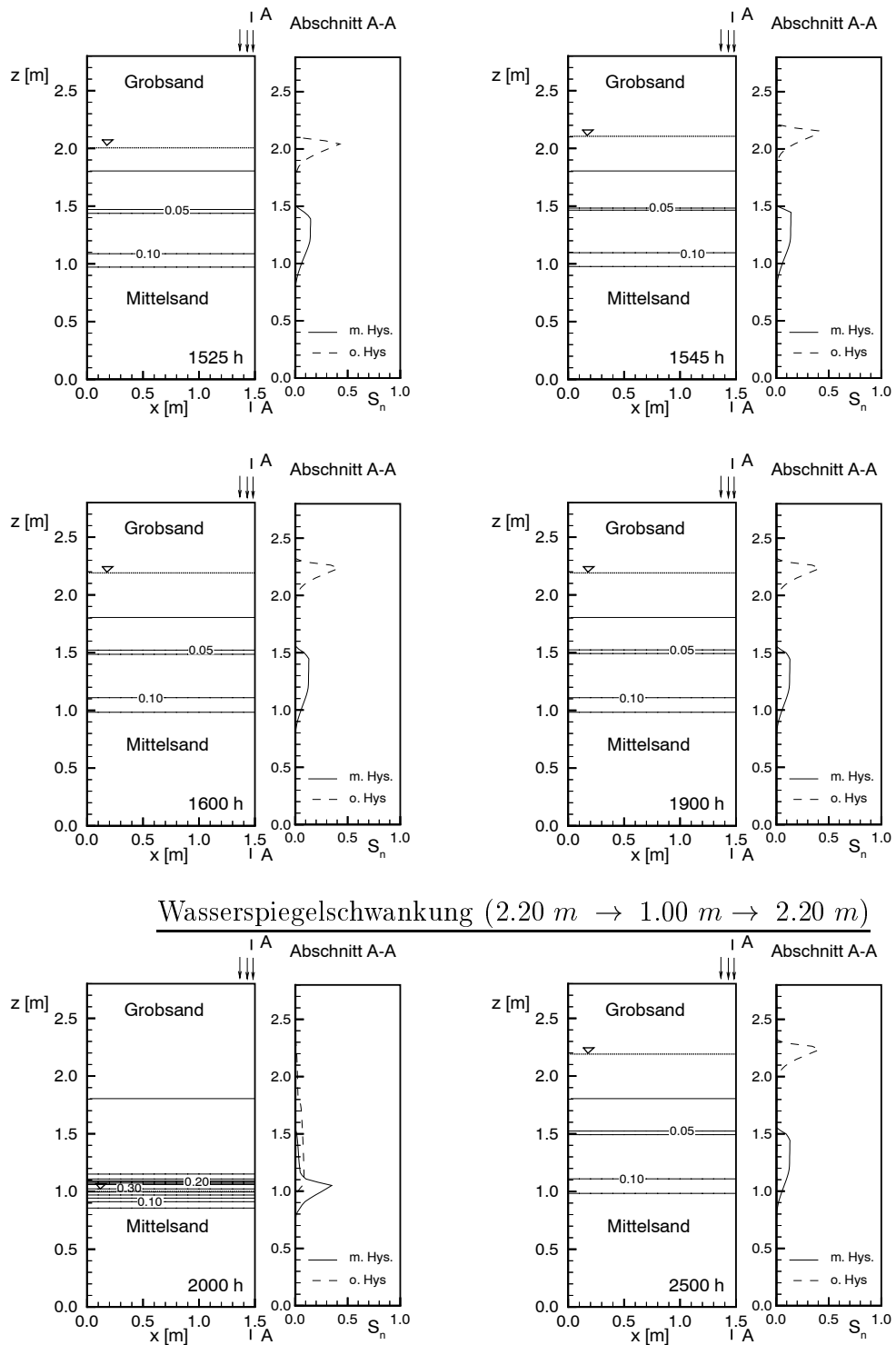


Abbildung 7.13: Numerische Ergebnisse

Wasserspiegelanhebung (1.90 m  $\rightarrow$  2.20 m)



Wasserspiegelschwankung (2.20 m  $\rightarrow$  1.00 m  $\rightarrow$  2.20 m)

Abbildung 7.14: Numerische Ergebnisse

# 8 Zusammenfassung und Ausblick

Die vorliegende Arbeit behandelt den Einfluß von Heterogenitäten und Hysterese auf die Infiltration und Remobilisierung von hydrophoben Stoffen (NAPL) in porösen Medien. Diese Prozesse sind entscheidend bei der Ausbreitung und dem Verbleib von nicht mit Wasser mischbaren Schadstoffen im natürlichen Untergrund und müssen bei der Wahl von geeigneten Sanierungsverfahren und deren optimalen Einsätze berücksichtigt werden.

Die einzelnen Prozesse werden auf den verschiedenen Größenmaßstäben von der “Mikroskala” bis zur “Makroskala” erläutert. Hieraus werden die konstitutiven Beziehungen (Kapillardruck-Sättigungs- und relative Permeabilität-Sättigungs-Beziehungen) abgeleitet und erklärt.

Die Infiltration in die gesättigte Zone wird mit Hilfe eines Zweiphasenmodells beschrieben, während der analoge Prozeß in der ungesättigten Zone auf einem Dreiphasen-Konzept (Wasser-NAPL-Luft) basiert. Hierbei werden die bekanntesten empirischen Ansätze für Zweiphasensysteme aufgezeigt: die Modelle von Brooks und Corey sowie von van Genuchten. Für Dreiphasensysteme wird das Konzept von Parker et al. erläutert.

Bei der Remobilisierung von Schadstoffen tritt Hysterese in den konstitutiven Beziehungen auf. Der wichtigste Ansatz in diesem Zusammenhang, jener nach Parker et al., wird in diesem Rahmen vorgestellt.

Um lokale Schwankungen in den Bodeneigenschaften auf der Makroskala, welche unter dem Begriff “Heterogenitäten” zusammengefaßt werden, in die Untersuchung zu integrieren, werden geostatistische Wahrscheinlichkeitsverteilungen verwendet.

Zur Überprüfung und Analyse der verschiedenen Ansätze und Theorien werden diese in das Programmsystem *MUFTE-UG* implementiert. Dem entsprechenden mathematisch-numerischen Konzept liegt ein Finite Volumen (Box)-Verfahren zugrunde, welches mit einem Newton-Raphson Iterationsalgorithmus zur Lösung der stark nichtlinearen Gleichungen gekoppelt ist.

Mit Hilfe von *MUFTE-UG* wird anschließend das Verifikationsproblem von Rogers et al. zur Infiltration unter Einfluß von Kapillarität und Gravitation gelöst, für welches eine analytische Lösung existiert.



Ferner werden kontrollierte Experimente von Lenhard et al. zur Überprüfung der in *MUFTE-UG* implementierten Hysterese-Ansätze nach Parker et al. verwendet. Dabei werden die mit Hilfe der numerischen Simulation erzielten Resultate mit den Experimentergebnissen verglichen. Es wird eine sehr gute Übereinstimmung festgestellt.

Als Validierung des mathematisch-numerischen Modells wird ein kontrolliertes großskaliges Experiment, das in der VEGAS-Einrichtung am Institut für Wasserbau der Universität Stuttgart stattfand, herangezogen. Abschließend wird eine Modellrechnung zur Vor-dimensionierung eines Laborexperimentes in VEGAS, welches Infiltration und anschließende Remobilisierung infolge von Wasserspiegelschwankungen beinhaltet, präsentiert.

Die im Rahmen dieser Arbeit entwickelten Modellansätze und Implementierungen sind somit verifiziert. Die konstitutiven Beziehungen wurden erfolgreich von der Mikro- auf die Makroskala abgeleitet. Auch der Übergang von Zweiphasen- auf Dreiphasenansätze konnte realisiert werden. Durch die Anwendung von geostatistischen Verteilungsfunktionen für raumbezogene Größen wie z. B. Permeabilitäten wurde die Brücke von einer deterministischen Beschreibung zu einer probabilistischen Betrachtung geschlagen.

Diese Arbeit liefert somit einen Beitrag zur effektiven, wirklichkeitsgetreuen Nachbildung und Simulation von Schadensfällen und deren Auswirkungen auf die Umwelt sowie für die Beurteilung von Sanierungsmaßnahmen und ihren Folgen.

# Literaturverzeichnis

- [1] L.M. Abriola and G.F. Pinder. A multiphase approach to the modelling of porous media contamination by organic compounds 1. Equation development. *Water Resources Research*, 21, 1985.
- [2] A.W. Adamson. *Physical chemistry of surfaces*, volume 4, page 664. Wiley-Interscience, New York, 1982.
- [3] J. Allan, J. Ewing, R. Helmig, and J. Braun. Scale effects in multiphase flow modeling. In *Remediation of chlorinated and recalcitrant compounds, The first international conference*, Monterey, California, 1998.
- [4] J.W. Amyx, D.M. Bass, and R.L. Whiting. *Petroleum Reservoir Engineering*. McGraw-Hill, New York, 1960.
- [5] L. M. Arya and J. F. Paris. A physico empirical model to predict the soil moisture retention characteristic from particle size distribution and bulk density data. *Soil Sci. Soc. Am. J.*, 45:1023 – 1030, 1981.
- [6] S. F. Averjanov. About permeability of subsurface soils in case of incomplete saturation. *Engineering Collection*, VII:19–21, 1950.
- [7] K. Aziz and A. Settari. *Petroleum Reservoir Simulation*. Applied Science Publishers, London, 1979.
- [8] A. Bardossy. Stochastische Modelle zur Beschreibung der Raum-Zeitlichen Variabilität des Niederschlages. Technical Report Mitteilungsheft 44, Mitteilung des Instituts für Hydrologie und Wasserwirtschaft, Universität Karlsruhe, 1993.
- [9] P. Bastian and R. Helmig. Fully-Coupled Solution Techniques for Two Phase Flow in Porous Media. 1. Multigrid solution and large scale computing, Submitted to *Advances in Water Resources*. Technical report, SFB 404 Mehrfeldproblem in der Kontinuumsmechanik, 1997. Preprint.
- [10] P. Bastian, R. Helmig, R. Huber, and C. Braun. Modelling and efficient solution technique for multiphase flow in porous media. Technical report, SFB 404 Mehrfeldproblem in der Kontinuumsmechanik, 1996.

- [11] J. Bear. *Dynamics of Fluids in Porous Media*. Elsevier, New York, 1972.
- [12] F. Börner and T. Richter. Nutzung hochfrequenter elektromagnetischer Messverfahren zur Charakterisierung von Mehrphasensystemen in Labor und Feld. In *Proceedings des Dresdner Grundwasserforschungszentrums e.V., Fachtagung aktuelle Arbeiten der Grundwasserforschung und -applikation, Dresden*, 1997.
- [13] J. Braun. Ausbreitung von NAPL in gesättigten und ungesättigten Böden. In *VEGAS-Workshop und BMBF/PWAB-Seminar In-Situ Technologien zur Grundwasser- und Altlastensanierung, Universität Stuttgart*, Stuttgart, 1996.
- [14] R.H. Brooks and A.T. Corey. Hydraulic Properties of Porous Media. In *Hydrol. Pap.*, volume 3, Fort Collins, 1964. Colorado State University.
- [15] H.W. Brown. Capillary pressure investigations. *Trans. AIME*, 192:67 – 74, 1951.
- [16] W. Brutsaert. Some methods of calculating unsaturated permeability. *Trans. ASAE*, 10:400–404, 1967.
- [17] N.T. Burdine. Relative permeability calculations from pore-size distribution data. Technical report, Petroleum Transactions, AIME, 1953.
- [18] G. S. Campbell. A simple model for determining unsaturated hydraulic conductivity from moisture retention data. *Soil Sci.*, 117:311 – 314, 1974.
- [19] G. S. Campbell and Sho Shiozawa. Prediction of hydraulic properties of soils using particle-size density data. In *Indirect methods for estimating the hydraulic properties of unsaturated soils, Riverside, California, Oct. 11-13*, 1989.
- [20] P. C. Carman. Fluid flow through a granular bed. *Trans. Inst. Chem. Eng., London*, 15:150–166, 1937.
- [21] L.J.J. Catalan and F.A.L. Dullien. Application of gravity drainage to the recovery of residual LNAPL in homogeneous and lensed sand packs. *Journal Contaminant Hydrology*, 18, 1995.
- [22] I. Chatzis and F. A. L. Dullien. Dynamic immiscible displacement mechanisms in pore doublets: theory versus experiment. *Journal of Colloid and Interface Science*, 91(1):199 – 222, 1983.

- [23] E. C. Childs and N. Collis-George. The permeability of porous materials. *Proc. Roy. Soc.*, A201:392–405, 1950.
- [24] R.M. Cohen and J.W. Mercer. *DNAPL Site Evaluation*. C. K. Smoley, CRC Press, Boca Raton, 1993.
- [25] A.T. Corey. The interrelation between gas and oil relative permeabilities. *Prod. Mon.*, 19:19–38, 1954.
- [26] T. Corey. *Mechanics of immiscible fluids in porous media*. Water resources publications, Littleton, Colo., 1985.
- [27] J. Croisé, H. Sheta, and R. Helmig, editors. *Numerical Simulation of NAPL-infiltration and redistribution processes in unsaturated heterogeneous porous media, Groundwater Quality: Remediation and Protection (GQ 95)*, volume 225. IAHS Publication, 1995.
- [28] J. Croisé, H. Sheta, and R. Helmig. Numerische Modellierung von NAPL-Infiltrationsvorgängen in Lockergesteinen. Technical Report 95/1 (HG 215), Institut für Wasserbau, Universität Stuttgart, 1995.
- [29] J.H. Dane and P.J. Wierenga. Effect of hysteresis of the prediction infiltration, redistribution and drainage of water in a layered soil. *J. Hydrology*, 25:229 – 242, 1975.
- [30] S. Dasberg and F. N. Dalton. Time domain reflectometry field measurements of soil water content and electrical conductivity. *Soil Sci. Soc. Am. J.*, 49:293–297, 1985.
- [31] M. Delshad and G.A. Pope. Comparison of the Three-Phase Oil Relative Permeability Models. *Transport in Porous Media*, 4:59 – 83, 1989.
- [32] A.H. Demond and P.V. Roberts. Estimation of Two-Phase Relative Permeability Relationships for Organic Liquid Contaminants. *Water Resources Research*, 29(4):1081 – 1090, 1993.
- [33] Th. Dracos and F. Stauffer, editors. *Development and application of a fiberoptic fluorimeter for in-situ tracer concentration measurements, Transport and Reactive Processes in Aquifers*. Balkema, Rotterdam, 11.-15. April, 1994.
- [34] F. A. L. Dullien. *Porous media fluid transport and pore structure*. Academic Press., New York, NY, 1979.

- [35] J. Dupuit. *Etudes theoriques et pratiques sur le mouvement des eaux les canaux decouverts et a travers les terrains permeables*. Deuxieme Ed. Dunod, Paris, 1863.
- [36] D.H. Everett. A general approach to hysteresis, 4, An alternative formulation of the domain model. *Trans. Faraday Soc.*, 51:1551–1557, 1955.
- [37] D.H. Everett. Adsorption hysteresis, in Solid Gas Interface. *edited by E. A. Flood, chap. 36, Marcel Dekker, New York*, 2:1055–1113, 1967.
- [38] D.H. Everett and F.W. Smith. A general approach to hysteresis, 2, Development of the domain theory. *Trans. Faraday Soc.*, 50:187–197, 1954.
- [39] D.H. Everett and W.I. Whitton. A general approach to hysteresis, 1. *Trans. Faraday Soc.*, 48:749–752, 1952.
- [40] J. Ewing and R. Helmig. Scale effects of heterogeneity in multiphase flow modeling. *In Vorbereitung*, 1998.
- [41] D. A. Farrell and W. E. Larson. Modelling of the pore structure of porous media. *Water Resources Research*, 8:148–153, 1972.
- [42] C.R. Faust. Simulation of Three-Dimensional Flow of Immiscible Fluids Withen and Below the Unsaturated Zone. *Water Resources Research*, 25, 1989.
- [43] A. S. Fokas and Y. C. Yortos. On the exactly soluble equation  $S_t = [(\beta S + \gamma)^{-2} S_x]_x + \alpha(\beta S + \gamma)^{-2} S_x$  occurring in two phase flow in porous media. *Soc. Ind. Appl. Math. J. Appl. Math.*, 42(318), 1982.
- [44] John I. Gates and W. Tempelaar Lietz. Relative permeability of California cores by the capillary-pressure method. Technical report, Drilling and Production Practice. Am. Petrol. Inst., 1950.
- [45] M.T. Van Genuchten. A Closed-Form Equation for Predicting the Hydraulic Conductivity of Unsaturated Soils. *Soil Sci. Soc. Am. J.*, 44:892 – 898, 1980.
- [46] W.B. Haines. Studies in the physical properties of soil: V. The hysteresis effect in capillary properties, and the modes of moisture distribution associated therewith. *J. Agric. Sci.*, 20:97 – 116, 1930.

- [47] R. Helmig. Theorie und Numerik der Mehrphasenströmungen in geklüftet-porösen Medien. Technical Report 34, Dissertation, Mitteilung Inst. für Strömungsmechanik und Elektronisches Rechnen im Bauwesen, Universität Hannover, 1993.
- [48] R. Helmig. *Multiphase flow and transport processes in the subsurface, a contribution to the modeling of hydrosystems*. Springer-Verlag Berlin Heidelberg, Germany, 1997.
- [49] R. Helmig, C. Braun, and M. Emmert. MUFTE – A numerical model for simulation of multiphase flow processes in porous and fractured-porous media. Programmdokumentation (HG 208). Technical Report 94/3, Institut für Wasserbau, Universität Stuttgart, 1994.
- [50] R. Helmig, M. Emmert, and H. Sheta. Problem and Issues of Constitutive Relationships Needed for Accurate Modelling of Multiphase Flow in Heterogeneous Porous Media. In H. Kobus, B. Barczewski, and H.-P. Koschitzky, Hrsg., *Groundwater and Subsurface Remediation*, Environmental Engineering. Springer-Verlag, Berlin, 1996.
- [51] A. Hemminger. Numerische Modellierung zur TCE-Versickerung in einem künstlich geschichteten Aquifer. Master's thesis, Institut für Wasserbau, Universität Stuttgart, 1996.
- [52] D. Hillel. *Fundamentals of Soil Physics*. Academic Press., New York, 1980.
- [53] N.T. Hoa, R. Gaudu, and C. Thirriot. Influence of the hysteresis effect on transient flows in saturated-unsaturated porous media. *Water Resources Research*, 13, 1977.
- [54] C. Hofstee, J. H. Dane, and W. E. Hill. Three-fluid retention in porous media involving water, PCE and air. *J. of Contaminant Hydrology*, 25:235 – 247, 1997.
- [55] R. Huber and R. Helmig. Investigation and Simulation of Three-Phase Flow in Porous Media. Technical Report 2, Wissenschaftl. Bericht 2/97, Fachgeb. f. Numer. Methoden und Informationsverarb., Institut f. Bauinformatik, TU Braunschweig, 1997.
- [56] T.H. Illangasekare, E.J. Armbruster III M. ASCE, and D.N. Yates. Non-aqueous phase fluid in heterogeneous aquifers, experimental study. *Journal of Environmental Engineering*, 1995.
- [57] S. Irmay. On the hydraulic conductivity of unsaturated soils. *Trans. Am. Geoph.*, 35:463–467, 1954.

- [58] D. B. Jaynes. Comparison of soil-water hysteresis models. *J. Hydrol.*, 75, 1984.
- [59] Sven A. Jonasson. Estimation of the van Genuchten parameters from grain-size distribution. In *Indirect methods for estimating the hydraulic properties of unsaturated soils, Riverside, California, Oct. 11-13, 1989*.
- [60] R. Josef, B. Barczewski, H.-P. Koschitzky, and J. Braun. Untersuchungen zur Optimierung hydraulischer Verfahrenstechnologien zur Schadstoffeliminierung aus Grundwasser mittels Tensiden. In *Möglichkeiten und Grenzen der Reinigung kontaminierter Grundwässer*, Frankfurt am Main, DECHEMA, 1990. Resümee und Beiträge des 12. DECHEMA-Fachgesprächs Umweltschutz.
- [61] H. Flühler K. Roth, R. Schulin and W. Attinger. Calibration of time domain reflectometry for water content measurement using a composite dielectric approach. *Water Resources Research*, 26:2267 – 2273, 1990.
- [62] J.J. Kaluarachchi and J.C. Parker. Effects of hysteresis on water flow in the unsaturated zone. *Water Resources Research*, 1988.
- [63] J.J. Kaluarachchi and J.C. Parker. Multiphase flow with a simplified model for oil entrapment. *Transport in porous Media*, 7:1 – 14, 1992.
- [64] L.D. King. Description of Soil Characteristics for Partially Saturated Flow. *Soil Sci. Am. Proc.*, 29:359 – 362, 1965.
- [65] A. Klute. Methods of soil analysis part 1., physical and mineralogical methods. *2nd Ed. American Society of Agronomy, Agronomy Series, Madison, WI*, 9, 1986.
- [66] A. Klute and Heerman. Soil water profile development under a periodic boundary condition. *Soil Sci.*, 117:265 – 271, 1974.
- [67] H. Kobus, B. Barczewski, and H.-P. Koschitzky, editors. *Groundwater and Subsurface Remediation*. Environmental Engineering. Springer-Verlag, Berlin, 1996.
- [68] J.B. Kool and J.C. Parker. Development and evaluation of closed-form expressions for hysteretic soil hydraulic properties. *Water Resources Research*, 23(1):105–114, 1987.
- [69] J. Kozeny. Über kapillare Leitung des Wassers im Boden. Technical Report 136, Sitzungsberichte. Akad. der Wissensch., Wien, Math.-naturw. Klass. Abt. IIa, 1927.

- [70] B.H. Kueper and E.O. Frind. An overview of immiscible fingering in porous media. *Journal Contaminant Hydrology*, 5:83 – 95, 1989.
- [71] B.H. Kueper and E.O. Frind. Two-Phase Flow in Heterogeneous Porous Media: 1. Model Development. *Water Resources Research*, 6:1049–1057, 1991.
- [72] B.H. Kueper and E.O. Frind. Two-Phase Flow in Heterogeneous Porous Media: 2. Model Application. *Water Resources Research*, 6:1057–1070, 1991.
- [73] B.H. Kueper and D.B. McWhorter. The behavior of dense, nonaqueous phase liquids in fractured clay and rock. *Ground water*, 29(5):716 – 728, 1991.
- [74] T. Kuppusamy, J. Sheng, J.C. Parker, and R.J. Lenhard. Finite-Element Analysis of Multiphase Immiscible Flow through Soils. *Water Resources Research*, 23:625–630, 1987.
- [75] G. E. Laliberte and R. H. Brooks. Hydraulic properties of disturbed soil materials affected by porosity. *Proc. SSSA*, 31:451–454, 1967.
- [76] C. S. Land. Calculation of imbibition relative permeability for two- and three-phase flow from rock properties. *Trans. Am. Inst. Min. Metall. Pet. Eng.*, 243, 1968.
- [77] R.J. Lenhard. Scaling fluid content-pressure relations of different fluid systems in porous media. *14th Annual American Geophysical Union Hydrology Days*, edited by H.J. Morel-Seytoux, Hydrology Days Publ., Atherton, CA:223–235, 1994.
- [78] R.J. Lenhard, T.G. Johnson, and J.C. Parker. Experimental observations of nonaqueous-phase liquid subsurface movement. *J. Contam. Hydrol.*, 12:79–101, 1993.
- [79] R.J. Lenhard, M. Oostrom, and M.D. White. Modeling fluid flow and transport in variably saturated porous media with the STOMP simulator, 2. Verification and validation exercises. *Advances in Water Resources*, 18(6):365–373, 1995.
- [80] R.J. Lenhard and J.C. Parker. A Model for Hysteric Constitutive Relations Governing Multiphase Flow 2. Permeability-Saturation Relations. *Water Resources Research*, 23(12):2197 – 2206, 1987.
- [81] R.J. Lenhard, J.C. Parker, and J.J. Kaluarachchi. Comparing simulated and experimental hysteretic two-phase transient fluid flow phenomena. *Water Resources Research*, 27(8):2113–2124, 1991.



- [82] R.J. Lenhard, J.C. Parker, and S. Mishra. On the correspondence between Brooks–Corey and van Genuchten models. *Journal of Irrigation and Drainage Engineering*, 115(4):744 – 751, 1989.
- [83] M. C. Leverett. Capillary behaviour in porous solids. *AIME*, 142:152–169, 1941.
- [84] M.C. Leverett. Flow of Oil-Water Mixtures through Unconsolidated Sands. *Transactions of the AIME*, 132:149 – 171, 1939.
- [85] S.A. Lorentz, D.S. Durnford, and A.T. Corey. *Liquid retention measurement on porous media using a controlled outflow cell*. Dept. of chemical and Biorecourse Engineering, Colorado state University, Fort collins, Co, 17pp., 1992.
- [86] L. Luckner, M. TH. van Genuchten, and D. R. Nielsen. A Consistent set of parametric models for the two-phase flow of immiscible fluids in the subsurface. *Water Resources Research*, 25(10):2187–2193, 1989.
- [87] T.J. Marshall. A relation between permeability and size distribution of pores. *J. Soil Sci.*, 9, 1958.
- [88] C. T. Miller, G. Christakos, P. T. Imhoff, J. F. McBride, and J. A. Pedit. Multi-phase flow and transport modeling in heterogeneous porous media: challenges and approaches. *Advances in Water Resources*, 21(2):77–120, 1998.
- [89] E.E. Miller and R.D. Miller. Physical Theory for Capillary Flow Phenomena. *Transport in Porous Media*, 3:324 – 332, 1988.
- [90] R. J. Millington and J. P. Quirk. Permeability of porous media. *Nature*, 183:387–388, 1959.
- [91] T.F. Moore and R.L. Slobod. The effect of viscosity and capillarity on the displacement of oil by water. *Producers Monthly*, 20, 1956.
- [92] Y. Mualem. Modified approach to capillary hysteresis based on a similarity hypothesis. *Water Resources Research*, 9:1324–1331, 1973.
- [93] Y. Mualem. A conceptual model of hysteresis. *Water Resources Research*, 10:514–520, 1974.
- [94] Y. Mualem. A new model for predicting the hydraulic conductivity of unsaturated porous media. *Water Resources Research*, 12:513–522, 1976.

- [95] Y. Mualem. Extension of the similarity hypothesis used for modeling the soil water characteristics. *Water Resources Research*, 13(4):773–780, 1977.
- [96] Y. Mualem. A modified dependent-domain theory of hysteresis. *Soil Science*, 137,(5):283–291, 1984.
- [97] Y. Mualem and G. Dagan. A dependent domain model of capillary hysteresis. *Water Resources Research*, 11(3):452–460, 1975.
- [98] M. Muskat, R.D. Wyckoff, H.G. Botset, and W.M. Meres. Flow of Gas-Liquids Mixtures through Sands. *Transactions of the AIME*, 123:69 – 96, 1937.
- [99] D. R. Nielsen, Don Kirkham, and E. R. Perrier. Soil capillary conductivity: comparison of measured and calculated values. *Soil Sc. Soc.*, 24:157–160, 1960.
- [100] M. Oostrom and R.J. Lenhard. Comparison of relative permeability-saturation-pressure parametric models for infiltration and redistribution of a light nonaqueous-phase liquid in sandy porous media. *Advances in Water Resources*, 21(2):145–157, 1998.
- [101] M. Osborne and J. Sykes. Numerical modeling of immiscible organic transport at the Hyde park landfill. *Water Resources Research*, 22(1):25–33, 1986.
- [102] J.C. Parker and R.J. Lenhard. A Model for Hysteric Constitutive Relations Governing Multiphase Flow 1. Saturation-Pressure Relations. *Water Resources Research*, 23(12):2187 – 2196, 1987.
- [103] J.C. Parker, R.J. Lenhard, and T. Kuppusamy. A Parametric Model for Constitutive Properties Governing Multiphase Flow in Porous Media. *Water Resources Research*, 23(4):618 – 624, 1987.
- [104] S.J. Perrens and K.K. Watson. Numerical analysis of two-dimensional infiltration and redistribution. *Water Resources Research*, 13:781–790, 1977.
- [105] A. Poulouvassilis. Hysteresis of pore water, An application of the concept of independent domains. *Soil Sci.*, 93:405–412, 1962.
- [106] K. Pruess. Analysis of flow processes during TCE infiltration, in heterogeneous soils at the Savannah river site, Aiken, South Carolina. Technical Report LBL-32418, Earth sciences division, Lawrence Berkeley Laboratory, Univ. of Cal., Berkeley, 1985.

- [107] W. R. Purcell. Capillary pressure – their measurement using mercury and the calculation of permeability therefrom. *Trans. Am. Inst. Min. Engrs, Petrol. Devel. Technol.*, 186:39–46, 1949.
- [108] L.A. Richards. Capillary Conduction of Liquids through Porous Mediums. *Physics*, 1:318 – 333, 1931.
- [109] G.A. Riedi and F. Stauffer. Hydraulische Charakteristika von Sandpackungen mit Berücksichtigung des Hysteresiszyklus Drainage-Imbibition. Technical Report R 17-82, IHW ETH Zürich, 1982.
- [110] C. Rogers and W. F. Shadwick. Bäcklund Transformation and their Applications, Mathematics in Science and Engineering series. *Academic Press, New York*, 1982.
- [111] C. Rogers, M. P. Stallybrass, and D. L. Clements. On two phase filtration under gravity and with boundary infiltration: Application of a Bäcklund transformation. *Nonlinear Analysis, Theory, Methods and Applications*, 7(7):785–799, 1983.
- [112] A.E. Scheidegger. The Physics of Flow Through Porous Media. In *University of Toronto Press*, Toronto and Buffalo, 3rd Edition, 1974.
- [113] H.O. Schiegg. Verdrängungs–Simulation dreier nicht mischbarer Fluide in poröser Matrix. Technical Report 40, Versuchsanstalt für Wasserbau, Hydrologie und Glaziologie, Eidgenössische Technische Hochschule Zürich, 1979.
- [114] H.O. Schiegg. Grundlagen, Aufbau und Resultate von Laborexperimenten zur Erforschung von Ölausbreitungen in Grundwasserträgern. Technical Report 43, VAW-Mitteilung, 1980.
- [115] F. Schuille. *Dense Chlorinated Solvents in Porous and Fractured Media*. Lewis Publ., 1988.
- [116] P.S. Scott, G.J. Farquhar, and N. Kouwen. Hysteretic effects on net infiltration. *Am. Soc. Agric. Eng.*, 11-83:163–171, 1983.
- [117] R.L. Slobod and A. Chambers. Use of centrifuge for determining connate water, and capillary pressure curves of small core samples. *Trans. AIME*, 192:127–134, 1951.
- [118] F. Stauffer, H.-J. Franke, and T. Dracos. Hysteretic storativity concept for aquifer simulation. *Water Resources Research*, 28(9):2307–2314, 1992.

- [119] H.L. Stone. Probability model for estimating three-phase relative permeability. *Trans. SPE of AIME*, 249:214 – 18, 1970.
- [120] H.L. Stone. Estimation of three-phase relative permeability and residual oil data. *Journal Can. Petro. Technol.*, 12(4):53 – 61, 1973.
- [121] G. C. Topp. Soil-water hysteresis: The domain model theory extended to pore interaction conditions. *Soil Sci. Soc. Amer. Proc.*, 35:219–225, 1971b.
- [122] I. Fatt und H. Dykstra. Relative permeability studies. *Trans. Am. Inst. Min. Engrs*, 192:149–255, 1951.
- [123] M. R. J. Wyllie und M. B. Spangler. Application of electrical resistivity measurements to problem of fluid flow in porous media. *Bull. Am. Ass. Petrol. Geologists*, 36:359–403, 1952.
- [124] K. Roth und T. Zurmühl. Experimentelle Untersuchungen zum Transport organischer Stoffe in Böden. In *Bericht über das 5. PWAB-Statuskolloquium am 27. Februar*, Forschungszentrum Karlsruhe GmbH, 1996. Projekt Wasser–Abfall–Boden (PWAB), FZKA-PWAB-Berichte, 16, 159–194.
- [125] M. Vauclin, R. Haverkamp, and G. Vauchaud. *Résolution Numérique de une Equation de Diffusion non Linéaire*. Presses Universitaires de Grenoble, 1979.
- [126] N. C. Wardlaw. The effect of geometry, wettability, viscosity, and interfacial tension on trapping in single pore-throat pairs. *J. of Canadian Petroleum Technology*, 21(3), 1982.
- [127] H.J. Welge and W.A. Bruce. The restored state method for determination of oil in place and connate water. Technical report, Drilling and Production Practice. Am. Petrol. Inst., 1947.
- [128] M.D. White, M. Oostrom, and R.J. Lenhard. Modeling fluid flow and transport in variably saturated porous media with the STOMP simulator, 1. Nonvolatile Three-Phase Model Description. *Advances in Water Resources*, 18(6):353–364, 1995.
- [129] J.L. Wilson, S.H. Conrad, W.R. Mason, W. Peplinski, and E. Magam. Laboratory investigation of residual liquid organics from spills, leaks, and the disposal of hazardous wastes in groundwater. Technical Report EPA/600/6-90/004, EPA, 1990.

- 
- [130] R.D. Wyckoff and H.G. Botset. The Flow of Gas-Liquid Mixtures through Unconsolidated Sands. *Physics*, 7:325 – 345, 1936.
- [131] S. T. Yuster. Theoretical considerations of multiphase flow in idealized capillary systems. In *Proc. 3d. World Petrol. Congr.*, pages 2:437–445, 1951.





