Mehrphasenmodelle für die ungesättigte Bodenzone – ‚neue' Modellierungsansätze in der Hydrologie

Reinhard Hinkelmann und Rainer Helmig

Zusammenfassung

In diesem Beitrag werden Mehrphasenmodelle vorgestellt, die sich in anderen Disziplinen bereits bewährt haben und interessante Anknüpfungspunkte für hydrologische Fragestellungen bieten. Ein einheitliches Modellkonzept einer mehrdimensionalen Zweiphasenströmung für den Übergangsbereich der gesättigten / ungesättigten Bodenzone räumt Nachteile üblicher Vorgehensweisen aus, z.B. dynamische Modellgrenzen. Mit einem nicht-isothermen Zweiphasen-Mehrkomponenten-Modellkonzept können neben den Strömungsprozessen zusätzlich Transportprozesse von Bodenfeuchte und / oder Schadstoffen sowie Massentransferprozesse wie Verdunstung erfasst werden. Basierend auf dem Zweiphasenströmungs-Modellkonzept sollen verbesserte Prozessansätze für die Infiltration durch Makroporen entwickelt werden, die zunächst anhand von Laborexperimenten validiert werden sollen. Zur Übertragung der verbesserten Prozessansätze auf die Feldskala sollen geostatitistische Methoden weiterentwickelt werden, die auf vorhandenen Werkzeugen aufsetzen und verschiedene Felddaten einbeziehen. Die Zusammenführung der geschilderten Dinge führt zu einer stärker prozessorientierten hydrologischen Modellierung, bei der möglicherweise das Maß ereignisabhängiger Kalibrierung reduziert werden kann.

1. Einleitung

Mehrphasenmodelle in porösen oder geklüftet-porösen Medien simulieren die gekoppelten Strömungs-, Transport und Massentransferprozesse zweier oder mehrerer fluider Phasen, z.B. Wasser oder Luft. Sie sind häufig stark nichtlinear und sensitiv hinsichtlich der Wechselwirkungen mit den geologischen Untergrundstrukturen. Mehrphasenmodelle werden bereits seit einigen Jahrzehnten in der Erdölindustrie und in den letzten Jahren auch zunehmend für umweltrelevante Fragestellungen eingesetzt (PRUESS 1991, HELMIG 1997, WHITE & OOSTROM 2000), z.B. für die begleitende Entwicklung thermisch unterstützter Bodensanierungsverfahren (CLASS 2001), für die Abschätzung von Gas-Wasser Strömungs- und Transportprozessen im Umfeld von Endlagern mit radioaktiven Abfällen (JAKOBS 2003) sowie für die qualitative Prognose des Ausbreitungsverhaltens klima- und umweltgefährdender Gase wie Methan und CO_2 im Untergrund (SHETA et al. 2003, HINKELMANN 2003). In Abhängigkeit der Problemstellungen und der zu berücksichtigenden Raum- und Zeitskalen sind diese Modelle unterschiedlich weit entwickelt, insbesondere besteht für großskalige Fragestellungen in vielen Teilbereichen erheblicher Forschungsbedarf.

Nach Meinung der Autoren bieten mehrdimensionale Mehrphasenmodelle für den Untergrund bzw. für poröse oder geklüftet-poröse Medien verschiedene Anknüpfungspunkte zu

hydrologischen Problemstellungen im Übergangsbereich der gesättigten / ungesättigten Bodenzone, die bislang noch nicht ausreichend aufgegriffen worden sind und die in interdisziplinärer Bearbeitung zur Weiterentwicklung stärker prozessorientierter hydrologischer Modellierungsansätze beitragen können. Mit einem Zweiphasenmodell können beispielsweise die mehrdimensionalen gekoppelten Strömungsprozesse Infiltration, Zwischenabfluss und Grundwasserströmung mit einem einheitlichen Modellkonzept beschrieben werden; dabei werden z.B. auch horizontale Ausbreitungsvorgänge über gering permeablen Schichten sowie die Bewegung des Grundwasserspiegels erfasst. Nachteile üblicher Vorgehensweisen mit eindimensionalen Ansätzen und unterschiedlichen Ansätzen für den ungesättigten und gesättigten Bereich (dynamische Modellgrenzen) können hier ausgeräumt werden. Mit einem nicht-isothermen Zweiphasen-Mehrkomponenten-Modellkonzept können zusätzlich Massentransferprozesse wie Verdunstung und Kondensation sowie Transportprozesse von Bodenfeuchte und gelösten Schadstoffen simuliert werden.

Der nachfolgende Beitrag ist wie folgt gegliedert: In Kapitel 2 werden Mehrphasenmodelle für umweltrelevante Fragestellungen vorgestellt. Kapitel 3 fokussiert auf für hydrologische Fragestellungen wichtige Mehrphasen-Modellkonzepte für den Untergrund, während Kapitel 4 sich mit geostatistischen Methoden befasst. In Kapitel 5 wird über geplante Arbeiten berichtet, die die unterschiedlichen Ansätze zusammenführen sollen.

2. Mehrphasenmodelle im Untergrund

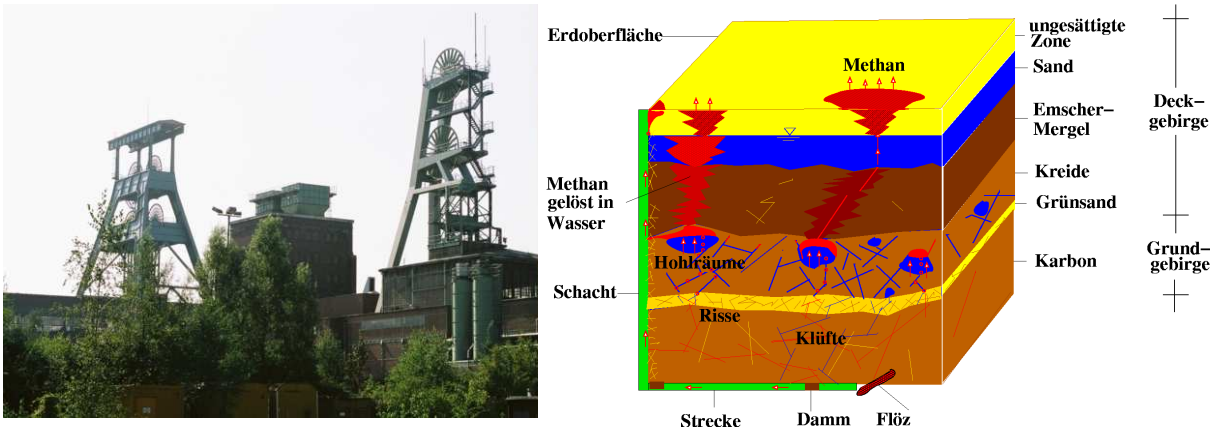

Abb. 1: Grubengebäude eines Steinkohlebergwerks, links; Prinzipskizze zum Ausbreitungsverhalten von Methan aus einem Bergwerk (aus SHETA et al. 2003), rechts

In Abbildung 1 sind ein Grubengebäude eines Steinkohlebergwerkes und eine Prinzipskizze zum Ausbreitungsverhalten von Methan aus einem Bergwerk dargestellt. Methan entweicht quasi dauerhaft aus Steinkohle und wird während des Betriebes von Bergwerken größtenteils über eine Bewetterung abgeführt. Im Zuge der Stilllegung von Bergwerken und der damit verbundenen Einstellung der Bewetterung migriert das Methangas ‚unkontrolliert' durch den mehrschichtigen, teilweise geklüfteten Untergrund und kann an den Austrittstellen an der Erdatmosphäre zu erheblichen Problemen führen, insbesondere in bebauten Gebieten. Die dominanten Prozesse im Umfeld eines Flözes werden durch ein dreidimensionales Zweipha-

senströmungs-Modellkonzept, bestehend aus den Phasen Wasser und Gas, entsprechend wiedergegeben, wobei davon ausgegangen wird, dass die zwei Phasen nicht mischbar sind und Massentransferprozesse zwischen den Phasen vernachlässigt werden können. Im Übergangsbereich der gesättigten / ungesättigten Bodenzone muss ein Zweiphasen-Mehrkomponenten-Modellkonzept (Phasen: Wasser, Gas; Komponenten: Wasser(dampf), (gelöste) Luft, (gelöstes) Methan) zugrunde gelegt werden, um in der Gasphase zwischen den Komponenten Luft, Methan und Wasserdampf unterscheiden zu können und um Lösungsprozesse von Methan und Luft in Wasser sowie Massentransferprozesse, z.B. den Übergang von Wasser zu Wasserdampf, erfassen zu können. Ein erhebliches Problem resultiert hier u.a. aus der zwangsläufig beschränkten Datenverfügbarkeit, obwohl das Umfeld von Steinkohlebergwerken i.d.R. sehr gut erkundet ist (SHETA et al. 2003, HINKELMANN 2003).

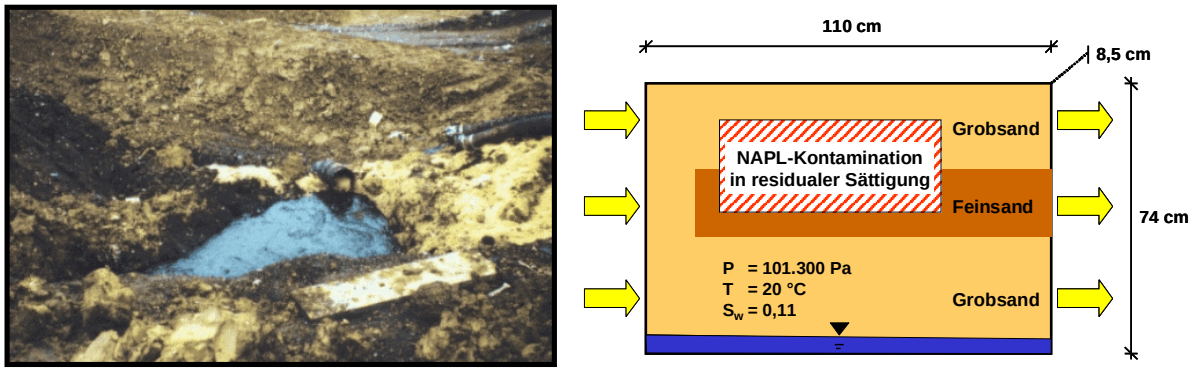

Abb. 2: In den Untergrund eindringender Schadstoff (NAPL), links; Prinzipskizze für experimentelle und numerische Simulation zur NAPL Entfernung (aus CLASS 2001), rechts

In Abbildung 2 ist links ein in den Untergrund eindringender Schadstoff, ein sog. NAPL (non-aqueous phase liquid), zu sehen, der eine eigene Schadstoffphase bildet. Im betrachteten System treten 3 Phasen auf (Wasser, Luft, NAPL). Wenn der Schadstoff in gering durchlässige Bodenschichten gelangt, ist es für viele Bodensanierungsverfahren wie z.B. die Bodenluftabsaugung ein großes Problem, den NAPL zu entfernen. In diesem Zusammenhang wurde ein Verfahren zur thermisch unterstützten Bodenluftabsaugung entwickelt, wozu FÄRBER 1997 experimentelle und CLASS 2001 numerische Arbeiten durchgeführt haben. Dabei hat sich als vorteilhaft erwiesen, ein erhitztes Gemisch aus Luft und Wasserdampf links einzusteuern, das dann rechts wieder entweichen kann; das System ist oben und unten geschlossen. Aufgrund des Eintrages von Energie verdampfen große Teile des Schadstoffs, d.h. dass Massentransferprozesse eine wichtige Rolle spielen und im Modellkonzept berücksichtigt werden müssen. Für die numerische Simulation wurde hier ein zweidimensionales nichtisothermes Dreiphasen-Dreikomponenten-Modellkonzept entwickelt, d.h. dass die drei Komponenten Wasser, Luft und NAPL prinzipiell in allen drei Phasen auftreten können, wobei natürliche ingenieurpraktische Vereinfachungen getroffen werden. Derart komplexe Prozesse sind bislang erst auf kleinen bis zu technischen Skalen annähernd verstanden und handhabbar. Auf der Feldskala stellt u.a. die häufig nicht ausreichende Datenverfügbarkeit ein erhebliches Problem dar.

3. Modellkonzepte für Mehrphasenmodelle im Untergrund für hydrologische Fragestellungen

3.1 Modellkonzept Zweiphasen

Für die Beschreibung der reinen Strömungsprozesse im Übergangsbereich der gesättigten / ungesättigten Bodenzone wird ein Zweiphasenströmungs-Modellkonzept für ein poröses Medium vorgeschlagen (siehe Abb. 3). Es wird dabei davon ausgegangen, dass die beiden Phasen Wasser (w) und Luft (l) sich nicht mischen bzw. diese Massentransferprozesse vernachlässigt werden dürfen.

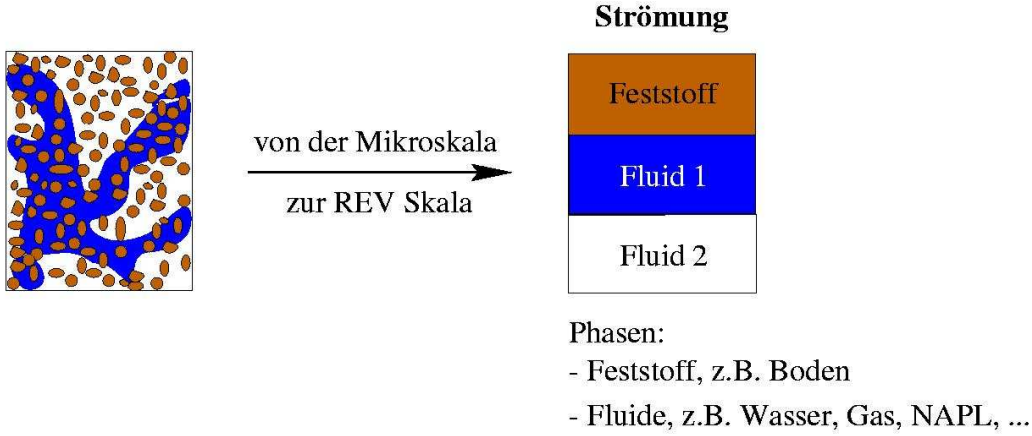

Abb. 3: Modellkonzept Zweiphasenströmung im porösen Medium

Die Kontinuitätsgleichung für jede Phase α mit α=w, l lautet:

$$\frac{\partial(\phi \rho_\alpha S_\alpha)}{\partial t} + div(\rho_\alpha \underline{v}_\alpha) - \rho_\alpha q_\alpha = 0$$

Es wird die Gültigkeit des erweiterten Darcy-Gesetzes vorausgesetzt:

$$\underline{v}_\alpha = \frac{k_{r\alpha}}{\mu_\alpha} \boldsymbol{K}\left(grad\, p_\alpha - \rho_\alpha \underline{g}\right)$$

Die Sättigungen *S* der beiden Phasen, die den jeweiligen Volumenanteil der Phase zum Volumen des porösen Mediums angeben, addieren sich zu eins, und es tritt ein Sprung im Druck zwischen den beiden fluiden Phasen auf, der durch den Kapillardruck p_c gegeben ist:

$S_w + S_l = 0$, $p_l - p_w = p_c$

In den Gleichungen steht ρ für die Dichte, *t* für die Zeit, *q* für einen Quell- oder Senkenterm, $\underline{v}$ für die Darcy-Geschwindigkeit, k_r für die relative Permeabilität, μ für die dynamische Zähigkeit, ***K*** für den Permeabilitätstensor, *p* für den Druck und $\underline{g}$ für die Erdbeschleunigung. Der Kapillardruck und die relative Permeabilität sind Funktionen der Sättigung. Gängige Parametrisierungen stammen von BROOKS & COREY und von VAN GENUCHTEN. Nähere Informationen einschließlich der in Abbildung 4 aufgeführten Formparametern können z.B. HELMIG 1997 entnommen werden.

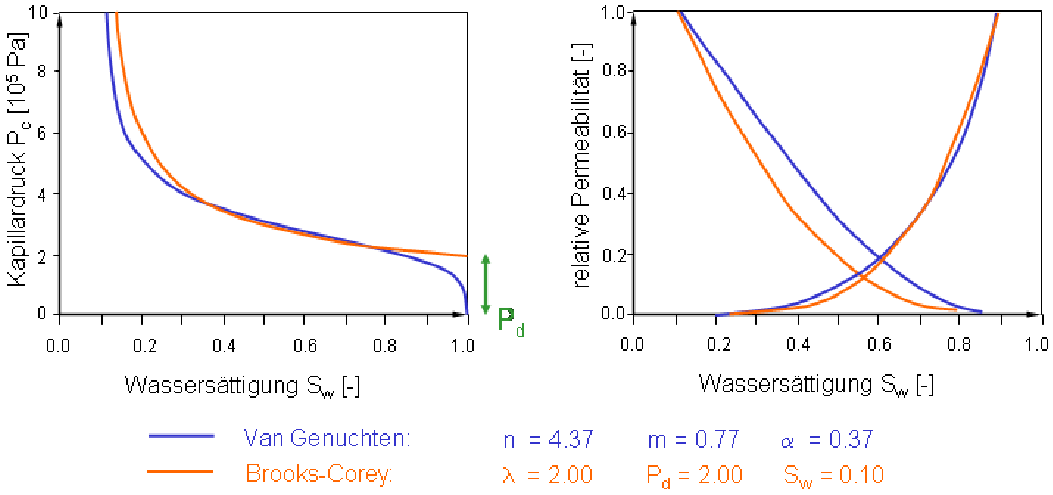

Abb. 4: Kapillardruck und relative Permeabilität als Funktion der Sättigung

3.2 Modellkonzept Zweiphasen-Mehrkomponenten nicht-isotherm

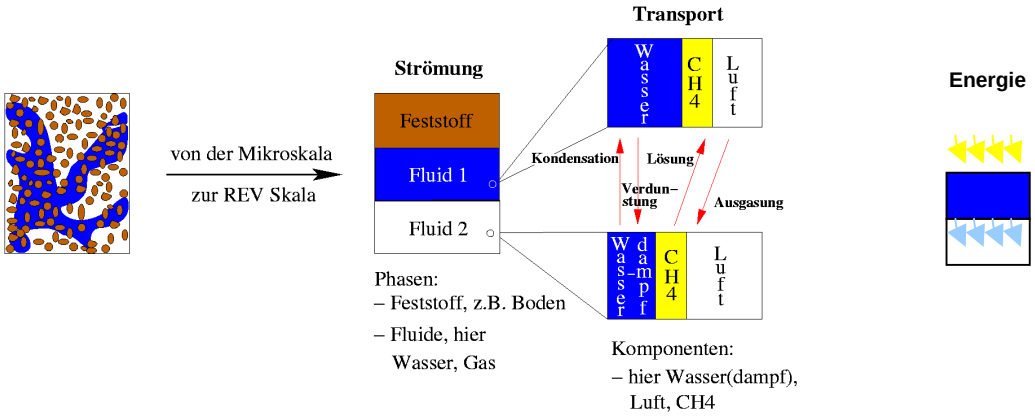

Abb. 5: Modellkonzept Zweiphasen-Mehrkomponenten nicht-isotherm für Strömung und Transport im porösen Medium

Müssen Lösungs- und Massentransferprozesse erfasst werden, so sollte ein nicht-isothermes Zweiphasen-Mehrkomponenten Modellkonzept zugrunde gelegt werden (siehe Abb. 5). Die Grundgleichungen werden hier nicht erläutert, siehe HELMIG 1997, CLASS 2001 oder HINKELMANN 2003. In Abbildung 5, die aus den in Kapitel 2 geschilderten Arbeiten zur Methanproblematik stammt, sind exemplarisch die drei Komponenten Wasser, Luft und Methan gezeigt. Für hydrologische Fragestellungen sind oftmals nur die zwei Komponenten Wasser und Luft von Interesse, wenn kein Stofftransport behandelt wird und z.B. Verdunstungsprozesse eine wichtige Rolle spielen. Die Betrachtung von drei Komponenten wird dann beim (Schad)Stofftransport, z.B. von Nitrat, erforderlich. Nitrat würde in Abb. 5 Methan ersetzen und nur in der Wasserphase auftreten; ggf. ist in solchen Fällen auch ein isothermes Modellkonzept ausreichend.

3.3 Modellierungssystem MUFTE-UG

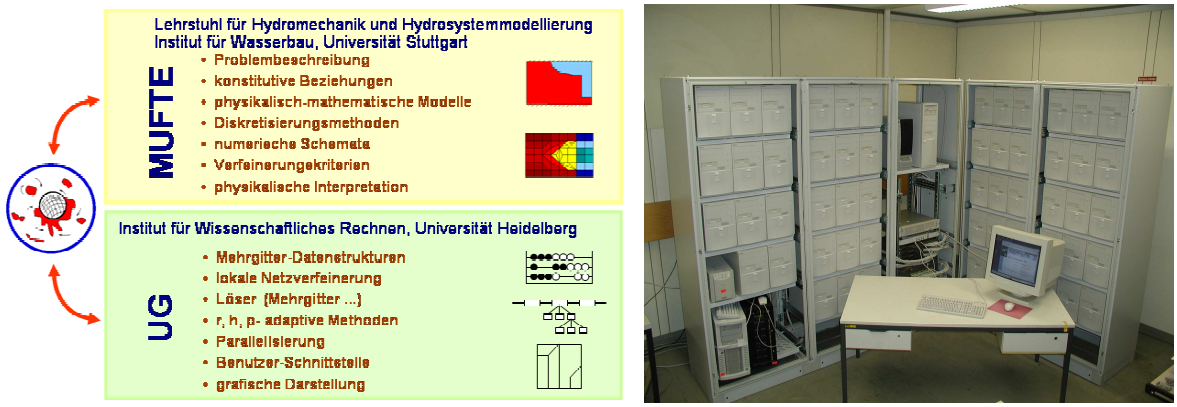

Abb. 6: Modellierungssystem MUFTE-UG, links; Linux-Cluster, rechts

Die aufgeführten Modellkonzepte sind Bestandteil des Modellierungssystems MUFTE-UG (siehe Abb. 6, HELMIG 1997, HINKELMANN 2003). MUFTE steht für **MU**ltiphase **F**low **T**ransport and **E**nergy Model und beinhaltet im Wesentlichen verschiedene Modellkonzepte und Diskretisierungsverfahren für isotherme und nicht-isotherme Mehrphasen-Mehrkomponenten Strömungs- und Transportprozesse in porösen und geklüftet-porösen Medien. UG ist die Abkürzung für **U**nstructured **G**rid und stellt schnelle Löser basierend auf parallelen adaptiven Mehrgitterverfahren bereit. Für mittel- und großskalige Systeme ist der Einsatz von leistungsfähigen Parallelrechnern, wie z.B. dem Linux-Cluster des Lehrstuhls für Hydromechanik und Hydrosystemmodellierung, unumgänglich.

4. Geostatistische Methoden

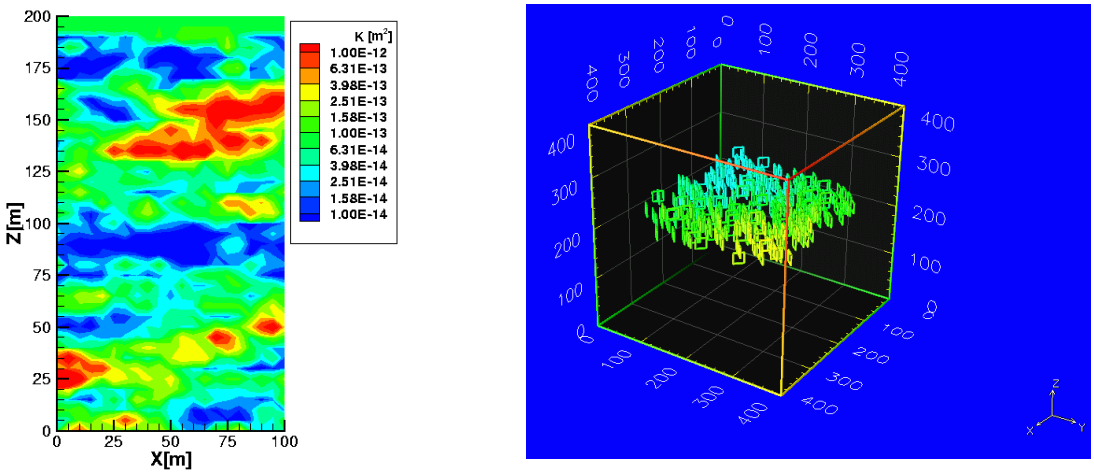

Abb. 7: Geostatistisch generierte Permeabilitätsverteilung, links, und Kluftverteilung, rechts

Numerische Simulationen sind immer mit Unsicherheiten behaftet. Bei Vorgabe gewisser Größen sind geostatistische Methoden in der Lage, Einflüsse von Unsicherheiten abzuschätzen, die aus der i.d.R. unbekannten ‚exakten' räumlichen Verteilung von Parameterfelder resultieren; dies ist für Mehrphasensysteme im Untergrund von besonderer Bedeutung. Es existieren verschiedene Methoden, die bei Vorgabe von Mittelwert, Varianz und Korrelations-

länge geostatistische Permeabilitätsfelder generieren, z.B. mit einem exponentiellen Variagramm, siehe Abb. 7, links und BARDOSSY 1992. Des Weiteren können bei Vorgabe von Kluftparametern wie Größe, Abstand, Dichte, Öffnungsweite, Orientierung und Konnektivität geostatistische Kluftnetzwerke erzeugt werden, siehe Abb.7, rechts und SILBERHORN-HEMMINGER 2002. Hier kann grundsätzlich gesagt werden, dass die Abschätzungen umso besser sind, je mehr geologische Informationen aus Messungen oder Erfahrungen vorliegen.

5. Geplante Untersuchungen

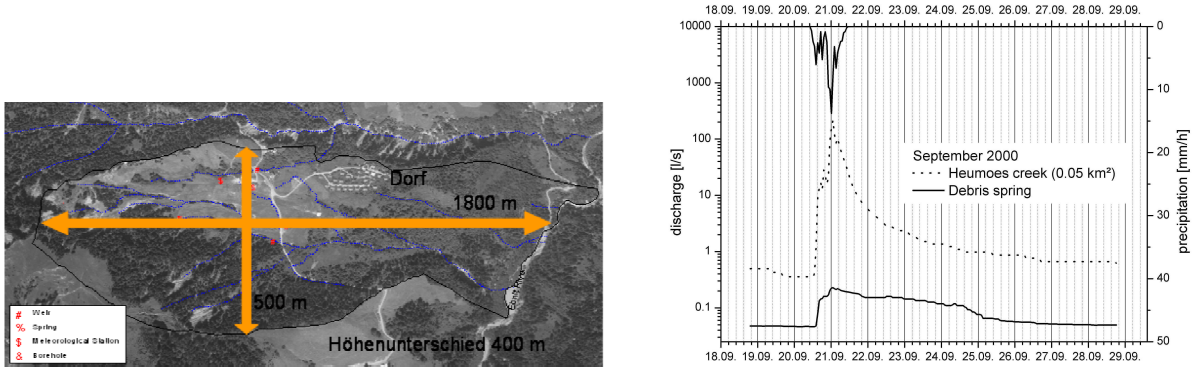

Abb. 8: Feldfall Heumöser Hang, links; gemessene Durchflüsse, rechts; (beide aus ZEHE et al. 2002)

Die vorgestellten Methoden und Werkzeuge sollen zukünftig zusammengeführt werden. Am Horizont steht dabei der Feldfall Heumöser Hang, zu dem umfangreiches Datenmaterial vorliegt, siehe Abb. 8 und ZEHE et al. 2002. Im Modellgebiet befindet sich sehr viele Makroporen, und die Messergebnisse signalisieren, dass die Makroporen den Schlüsselprozess für die schnelle Infiltration bei Starkregenereignissen darstellen.

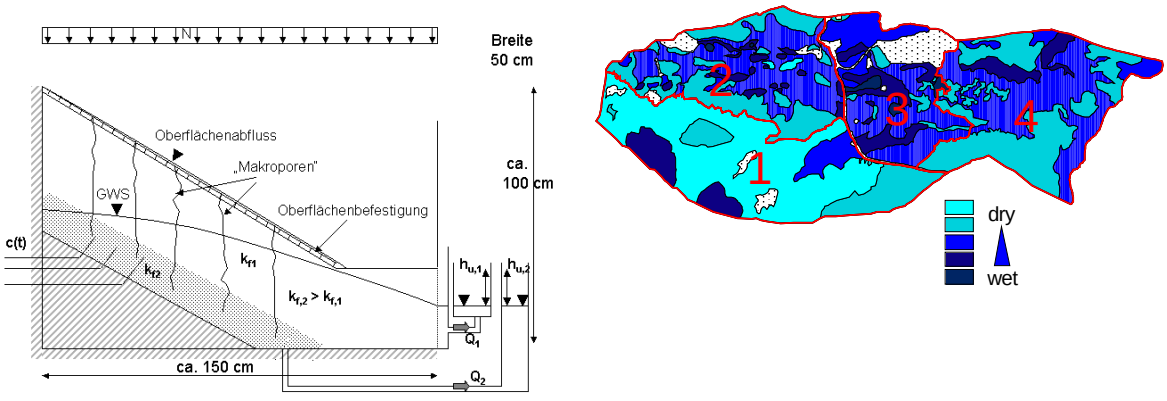

Abb. 9: Prinzipskizze für Infiltrationsexperimente, links; Karte der ökologischen Feuchte, rechts (aus ZEHE et al. 2002)

Basierend auf dem Zweiphasenströmungs-Modellkonzept sollen in einem ersten Schritt verbesserte Prozessansätze für die Infiltration über Makroporen entwickelt werden. Dabei sind die Autoren der Meinung, dass diese Ansätze zunächst an Experimenten im Labormaßstab überprüft werden müssen (siehe Abb. 9, links). Es soll ein Doppelkontinuumsansatz und ein gekoppeltes Modell einer eindimensionalen Rohrströmung mit einem porösen Medium ver-

glichen werden. Für die spätere Übertragung der gewonnenen Erkenntnisse auf größere Skalen bzw. für das Upscaling ist die Verknüpfung mit geostatistischen Methoden vorgesehen, um der Heterogenität der Untergrundstrukturen gerecht zu werden. Dazu sollen der geostatistische Kluftgenerator von SILBERHORN-HEMMINGER 2002 für die Anwendung auf Makroporen erweitert sowie vorhandene Informationen, wie z.B. die Karte der ökologischen Feuchte (siehe Abb. 9, rechts), einbezogen werden. In späteren Arbeiten soll das nichtisotherme Zweiphasen-Mehrkomponenten-Modellkonzept im Sinne eines SVAT-Modells (soil-vegetation-atmosphere-transfer) erweitert werden. Am Horizont steht dabei möglicherweise die Entwicklung einer Kopplung stärker prozessorientierter hydrologischer Methoden in Verbindung mit stochastischer Methoden, die das Maß von ereignisabhängiger Kalibrierung in der Hydrologie reduzieren kann.

Literatur

BARDOSSY, A. (1992): Geostatistical Methods: Recent Development and Applications in Surface and Subsurface Hydrology, UNESCO, Paris

CLASS, H. (2001): Theorie und numerische Modellierung nichtisothermer Mehrphasenprozesse in NAPL-kontaminierten porösen Medien. Mitteilungen Heft 105, Institut für Wasserbau, Universität Stuttgart

FÄRBER, A. (1997): Wärmetransport in der ungesättigten Bodenzone: Entwicklung einer thermischen In-situ Sanierungstechnologie. Mitteilungen Heft 96, Institut für Wasserbau, Universität Stuttgart

HELMIG, R. (1997): Multiphase Flow and Transport Processes in the Subsurface – A Contribution to the Modeling of Hydrosystems. Springer, Berlin, Heidelberg, New York

HINKELMANN, R. (2003): Efficient Numerical Methods and Information Processing Techniques in Environment Water. Habilitation. Mitteilungen Heft 117, Institut für Wasserbau, Universität Stuttgart

JAKOBS,H. (2004): Simulation nicht-isothermer Gas-Wasser-Prozesse in komplexen Kluft-Matrix-Systemen. Erscheint demnächst in Mitteilungen, Institut für Wasserbau, Universität Stuttgart

PRUESS, K. (1991): TOUGH 2, A General Purpose Numerical Simulator for Multiphase Fluid and Heat Flow. Lawrence Berkeley National Laboratory, University of California, USA

SHETA, H., R. HELMIG & R. HINKELMANN (2003): Dreidimensionale numerische Modellierung von Methanmigrationsprozessen im Untergrund. Proc. Oberhausener Grubengastage 2003, Frauenhofer IRB Verlag, UMSICHT-Schriftenreihe Band 44, Stuttgart, pp. 135-150

SILBERHORN-HEMMINGER (2002): Modellierung von Kluftaquifersystemen: Geostatistische Analyse und deterministisch-stochastische Kluftgenerierung. Mitteilungen Heft 114, Institut für Wasserbau, Universität Stuttgart

WHITE, M. D. & M. OOSTROM (2000): STOMP, Subsurface Transport over Multiple Phases, Pacific Northwest National Laboratory

ZEHE, E., F. LINDENMAIER & J. IHRINGER (2002): Hydrologische Untersuchung und Modellierung des Wasserhaushalts eines Kriechhangs zur Identifizierung kritischer hydrologischer Zustände und Niederschlagsbelastungen, DFG Abschlussbericht, Institut für Wasserwirtschaft und Kulturtechnik, Universität Karlsruhe