nagra
Nationale Genossenschaft für
die Lagerung radioaktiver Abfälle

TECHNISCHER BERICHT 93-20

Inverse Modellierung zur Bestimmung hydrogeologischer Parameter eines Zweiphasensystems

S. Finsterle

Februar 1993

Versuchsanstalt für Wasserbau, Hydrologie
und Glaziologie, ETH, Zürich

Hardstrasse 73 CH-5430 Wettingen Telefon 056-37 11 11

nagra Nationale Genossenschaft für die Lagerung radioaktiver Abfälle

TECHNISCHER BERICHT 93-20

Inverse Modellierung zur Bestimmung hydrogeologischer Parameter eines Zweiphasensystems

S. Finsterle

Februar 1993

Versuchsanstalt für Wasserbau, Hydrologie und Glaziologie, ETH, Zürich

Hardstrasse 73 CH-5430 Wettingen Telefon 056-37 11 11

Der vorliegende Bericht wurde im Auftrag der Nagra erstellt. Der Autor hat seine eigenen Ansichten und Schlussfolgerungen dargestellt. Diese müssen nicht unbedingt mit denjenigen der Nagra übereinstimmen.

"Copyright (c) 1993 by NAGRA, Wettingen (Schweiz). / Alle Rechte vorbehalten.
Das Werk einschliesslich aller seiner Teile ist urheberrechtlich geschützt. Jede Verwertung ausserhalb der engen Grenzen des Urheberrechtsgesetzes ist ohne Zustimmung der Nagra unzulässig und strafbar. Das gilt insbesondere für Uebersetzungen, Einspeicherung und Verarbeitung in elektronischen Systemen und Programmen, für Mikroverfilmungen, Vervielfältigungen usw."

VORWORT

In wenig durchlässigen Gesteinen kann neben dem Grundwasser oft auch eine Gasphase vorhanden sein. Das Gas kann natürlichen Ursprung aufweisen oder künstlich durch den Bau von Stollen oder die Freisetzung von Korrosionsgasen in die Felsmatrix eingedrungen sein. Für hydrodynamische Berechnungen ist es notwendig, das Vorhandensein einer freien Gasphase zu berücksichtigen, da schon geringe Gasanteile das Fliessverhalten und die für die Beschreibung des Gesteins massgebenden Parameter wesentlich beeinflussen. Das am Lawrence Berkeley Laboratory entwickelte Programm TOUGH ermöglicht die deterministische Berechnung solcher Zweiphasensysteme.

Im allgemeinen sind die für solche Berechnungen notwendigen Materialparameter gänzlich unbekannt; oft ist nicht einmal sicher, ob Gasblasen in einem System überhaupt vorhanden sind oder unter veränderten Druckverhältnissen entstehen können. In solchen Fällen ist es mit dem in der vorliegenden Arbeit vorgestellten Inversen Modell möglich, aufgrund von Messdaten optimale Parametersätze zu bestimmen. Die Anwendung der inversen Methodik liefert zudem Informationen über die Genauigkeit und Zuverlässigkeit der bestimmten Parametersätze. Voraussetzung für eine erfolgreiche Inverse Modellierung ist ein gutes Systemverständnis sowie eine robuste Methodik zur Detektierung des Optimums.

Die vorliegende Untersuchung entstand im Rahmen eines Zusammenarbeitsvertrages zwischen der *Nationalen Genossenschaft für die Lagerung radioaktiver Abfälle (Nagra)*, und der *Versuchsanstalt für Wasserbau, Hydrologie und Glaziologie (VAW)* an der ETH unter der Leitung von *Prof. Dr. Dr.h.c. D. Vischer* sowie *Dr. J. Trösch.* Ein Manuskript dieser Arbeit wurde von *Prof. Dr. H. Flühler* kritisch durchgesehen. Für die grosszügige Unterstützung seitens der Nagra sei hier stellvertretend *Dr. S. Vomvoris* und *Dr. P. Hufschmied* gedankt. Ein besonderer Dank gilt *Dr. K. Pruess (Lawrence Berkeley Laboratory)*; er hat mit seinen Erläuterungen zur Physik der Zweiphasenströmung und mit dem Programm TOUGH eine solide Grundlage für die Inverse Modellierung geschaffen. Im weiteren sei *E. Wyss (SOLEXPERTS)* für die sorgfältige Durchführung des Gastests im Felslabor Grimsel gedankt.

ZUSAMMENFASSUNG

Der Nachweis der Langzeitsicherheit eines Endlagers für radioaktive Abfälle basiert u.a. auf hydrodynamischen Modellrechnungen, welche den Systemzustand im Endlager, im unmittelbaren Nahfeld sowie in der grossräumigen Umgebung prognostizieren. Das Vorhandensein von Naturgas sowie die Produktion von Korrosionsgasen im Endlager selbst führen dazu, dass der zu untersuchende Bereich als Zweiphasensystem zu beschreiben ist. Ein mathematisch-numerisches Modell, welches die Strömung der flüssigen und gasförmigen Phase im porösen Medium simuliert, hat zahlreiche Effekte wie Kapillarität, relative Permeabilität, Phasenübergänge etc. zu berücksichtigen. Die chemische Zusammensetzung der einzelnen Phasen sowie deren physikalischen Eigenschaften sind zudem abhängig von den aktuellen Druck- und Temperaturverhältnissen.

Die Resultate jeder Prognoseberechnung hängen von zahlreichen Parametern ab, welche die strömungsrelevanten Gesteinseigenschaften im Modell repräsentieren. Die Bestimmung dieser Modellparameter erfolgt mittels Kalibrierung des Modells anhand von Messdaten, welche den Systemzustand an diskreten Punkten in Raum und Zeit wiedergeben.

In der vorliegenden Arbeit werden die theoretischen Grundlagen zusammengestellt, welche die Beziehung zwischen den fehlerbehafteten Messdaten und den daraus abgeleiteten Modellparametern beschreiben. Ein Verfahren zur automatischen Kalibrierung eines Zweiphasenmodells wird erarbeitet und in einem Computerprogramm implementiert. Die Parameterschätzung mittels Inverser Modellierung verlangt eine genaue Beschreibung der signifikanten Prozesse, der Modellgeometrie, der Anfangs- und Randbedingungen im sogenannten Funktionalen Modell. Zusätzlich muss die Fehlerstruktur der Messdaten im Stochastischen Modell zusammengefasst und ein Optimierungskriterium formuliert werden. Unter gewissen Voraussetzungen lassen sich damit optimale Parameter - bezogen auf die gegebene Modellstruktur und die zur Verfügung stehenden Daten - bestimmen und deren Genauigkeit abschätzen.

Anhand eines synthetischen Laborexperimentes wird das Vorgehen bei der Inversen Modellierung aufgezeigt. Die Auswertung des Gastests im Felslabor Grimsel stellt sodann ein Anwendungsbeispiel dar, bei dem das gewählte Kalibrierungsverfahren im Rahmen einer praxisbezogenen Fragestellung eingesetzt wird.

Die automatische Kalibrierung zur Bestimmung hydrogeologischer Modellparameter ermöglicht ein besseres Verständnis des Systemverhaltens unter Zweiphasenbedingungen und erhöht somit die Zuverlässigkeit der anschliessenden Prognoseberechnung.

RESUME

Parmi les formations géologiques étudiées en Suisse, en vue d'un stockage potentiel de déchets radioactifs, certaines contiennent du gaz naturel. De plus, à l'intérieur même du dépôt, la production de gaz de corrosion pourrait conduire à la formation d'une zone non saturée affectant les conditions d'entreposage. La caractérisation hydrogéologique du site de stockage nécessite une compréhension des systèmes d'écoulements. Leur modélisation est effectuée à l'aide d'un modèle numérique d'écoulement à deux composantes sous conditions biphasiques.

Dans cette étude, l'estimation des paramètres liés au gaz contenu dans la formation est réalisée par modélisation inverse. Par des techniques d'optimisation, dans le cadre d'un modèle conceptuel donné, les paramètres du modèle d'écoulement sont estimés à partir de données expérimentales sur l'état du système. L'approche théorique permettant l'obtention des paramètres du modèle à partir des données de terrain est présentée. La procédure d'estimation des paramètres proposées est implémentée dans un logiciel de calibration automatique du modèle numérique. Cet outil informatique permet l'identification des principaux paramètres régissant les écoulements souterrains d'eau et de gaz au sein de milieux poreux.

L'approche de modélisation inverse proposée est testée sur des données synthétiques, ainsi que sur les données réelles en provenance du laboratoire du Grimsel. L'applicabilité de la procédure et ainsi également démontrée dans un cadre géologique réel.

L'estimation de paramètres hydrogéologiques par calibration automatique d'un modèle numérique d'écoulement améliore la compréhension du comportement de systèmes biphasiques, et assure une meilleur qualité des prédictions réalisées à partir du modèle.

SUMMARY

Investigations related to the disposal of radioactive wastes in Switzerland consider formations containing natural gas as potential host rocks for a repository. Moreover, gas generation in the repository itself may lead to an unsaturated zone of significant extent and impact on the system's performance. The site characterization procedure requires the estimation of hydraulic properties being used as input parameters for a two-phase two-component numerical simulator.

In this study, estimates of gas-related formation parameters are obtained by inverse modeling. Based on discrete observations of the system's state, model parameters can be estimated within the framework of a given conceptual model by means of optimization techniques. This study presents the theoretical background that relates field data to the model parameters. A parameter estimation procedure is proposed and implemented in a computer code for automatic model calibration. This tool allows identification of key parameters affecting flow of water and gas in porous media.

The inverse modeling approach is verified using data from a synthetic laboratory experiment. In addition, the Gas test performed at the Grimsel Test Site is analyzed in order to demonstrate the applicability of the proposed procedure when used with data from a real geologic environment.

Estimation of hydrogeologic parameters by automatic model calibration improves the understanding of the two-phase flow processes and therefore increases the reliability of the subsequent simulation runs.

INHALTSVERZEICHNIS

VORWORT I
ZUSAMMENFASSUNG II
RESUME III
SUMMARY IV
INHALTSVERZEICHNIS V
FIGURENVERZEICHNIS IX
TABELLENVERZEICHNIS XI

1 EINLEITUNG

1.1 Problemstellung und Motivation 1
1.2 Zielsetzung, Aufgabenstellung und Vorgehen 2
1.3 Zum Modellbegriff 3

2 DAS DIREKTE PROBLEM

2.1 Direktes Problem - Inverses Problem 8
2.2 Definitionen und Konzepte der Zweiphasenströmung 9
2.2.1 Vorbemerkungen 9
2.2.2 Komponente, Phase, Lösung 11
2.2.3 Phasenzustand, Phasenübergang, Phasenwechsel 13
2.2.4 Dichte 19
2.2.5 Viskosität 22
2.2.6 Residuale Sättigung, effektive Sättigung 24
2.2.7 Kapillarität 28
2.2.7.1 Kapillarität bei mikroskopischer Betrachtungsweise 28
2.2.7.2 Kapillarität bei makroskopischer Betrachtungsweise 30
2.2.7.3 Hysteresis 33
2.2.8 Relative Permeabilität 34
2.2.8.1 Konduktivität -Permeabilität 34
2.2.8.2 Relative Permeabilität bei mikroskopischer Bertrachtungsweise 35
2.2.8.3 Relative Permeabilität bei makroskopischer Bertrachtungsweise 36
2.2.9 Kompressibilität und thermische Ausdehnung der Matrix 40

2.3 Mathematische Beschreibung der Zweiphasenströmung 42
2.3.1 Erhaltungsgleichungen 42
2.3.2 Anreicherungsterme 43
2.3.2.1 Massenanreicherung 43
2.3.2.2 Wärmeanreicherung 43

2.3.3 Flussterme 44
2.3.3.1 Massenfluss 44
2.3.3.2 Wärmefluss 45

2.3.4 Quellen und Senken 45
2.3.5 Bilanzgleichungen: Zusammenfassung 46
2.3.6 Primäre thermodynamische Variablen 46

2.4 Numerisches Verfahren 48
2.4.1 Integrierte Finite Differenzen 48
2.4.2 Räumliche Diskretisierung 48
2.4.3 Zeitliche Diskretisierung 50
2.4.4 Behandlung der Nichtlinearität 51
2.4.5 Anfangs- und Randbedingungen 52

2.5 Zusammenfassung Kapitel 2 53

3 DAS INVERSE PROBLEM

3.1 Vorbemerkungen 54
3.2 Klassifizierung der Verfahren 55
3.3 Parameter- und Systemzustandsvektor 58
3.4 Das Stochastische Modell 59

3.5 Maximum-Likelihood-Schätzung 65
3.5.1 Ausgangslage 65
3.5.2 Betrachtungsweise nach Bayes und Fisher 65
3.5.3 Herleitung der Zielfunktion 67
3.5.4 Eigenschaften der Maximum-Likelihood-Schätzung 69

3.6 Minimierungsalgorithmus 70
3.6.1 Klassifizierung der Verfahren 70
3.6.2 Gradient und Hessesche Matrix 71
3.6.3 Methode nach Newton 75
3.6.4 Methode nach Gauss-Newton 76
3.6.5 Die Modifikation nach Levenberg-Marquardt 77

3.7 Fehleranalyse 78
3.7.1 Vorbemerkungen 78
3.7.2 Empirische Varianz 79
3.7.3 Modelltest 80
3.7.4 Kovarianzmatrix der geschätzten Parameter 83
3.7.5 Kovarianzmatrix des berechneten Systemzustandes 85
3.7.6 Fortpflanzung von Unsicherheit 86
3.7.7 Intervallschätzung 88
3.7.8 Einfluss der Nichtlinearität auf die Fehleranalyse 88

3.8 Identifizierbarkeit, Eindeutigkeit und Stabilität 90
3.8.1 Vorbemerkungen 90
3.8.2 Definitionen 91
3.8.3 Diskussion 92
3.8.4 Vergleich von Modellstrukturen 95

3.9 Implementierung 96
3.10 Zusammenfassung Kapitel 3 98

4 ANWENDUNGSBEISPIELE

4.1 Überblick 99

4.2 Synthetisches Experiment 99
4.2.1 Vorbemerkungen 99
4.2.2 Vorgehen 100
4.2.3 Beschreibung des Experimentes 102
4.2.4 Berechnungsfälle: Überblick 109
4.2.5 Bemerkung zu den Abbildungen 109
4.2.6 Fall A: exakte Daten 110

4.2.7 Fall B: verrauschte Daten 113
4.2.7.1 Ziele 113
4.2.7.2 Fallbeschreibung und Annahmen 114
4.2.7.3 Resultate der Parameterschätzung 115

4.2.8 Fall C: Fehler im Stochastischen Modell 124
4.2.9 Fall D: Fehler im Funktionalen Modell 126
4.2.10 Fall E: Prognoseberechnung und Fehlerfortpflanzung 128
4.2.11 Zusammenfassung synthetisches Experiment 135

4.3 Gastest Felslabor Grimsel 136
4.3.1 Zielsetzungen 136
4.3.2 Beschreibung des Gastests 137
4.3.2.1 Grundidee und Testaufbau 137
4.3.2.2 Lage 138
4.3.2.3 Geologie 139
4.3.2.4 Instrumentierung 140

4.3.3 Resultate der Design-Berechnungen 143
4.3.4 Testphase I: Hydraulische Tests unter Einphasenbedingungen 144
4.3.5 Testphase II: Gasinjektion 155
4.3.6 Testphase III: Hydraulische Tests unter Zweiphasenbedingungen 167
4.3.7 Gastest Felslabor Grimsel: Zusammenfassung 172

5 ABSCHLIESSENDE BEMERKUNGEN UND SCHLUSSFOLGERUNGEN

5.1 Aufgabenstellung, Grundlagen und durchgeführte Arbeiten 173
5.2 Beschreibung des Zweiphasensystems (Kapitel 2) 174
5.3 Theorie der Inversen Modellierung (Kapitel 3) 175
5.4 Erkenntnisse aus den Anwendungsbeispielen (Kapitel 4) 176

LITERATURVERZEICHNIS 178

FIGURENVERZEICHNIS

Figur 2.1: Sättigungsdampfdruck als Funktion der Temperatur (nach *IFC* [1967])
Figur 2.2: Massenanteil der Luft in der flüssigen Phase als Funktion von Druck und Temperatur
Figur 2.3: Logarithmus des Massenanteils von Wasserdampf in der Gasphase als Funktion von Druck und Temperatur
Figur 2.4: Dichte der flüssigen Phase als Funktion von Druck und Temperatur
Figur 2.5: Dichte der Gasphase als Funktion von Druck und Temperatur
Figur 2.6: Dynamische Viskosität der flüssigen Phase als Funktion der Temperatur
Figur 2.7: Dynamische Viskosität der Gasphase als Funktion von Druck und Temperatur
Figur 2.8: Grenzflächenspannungen und Benetzungswinkel
Figur 2.9: Kapillare Steighöhe, Kapillardruck
Figur 2.10a: Bestimmung der Brooks-Corey Parameter λ und p_d
Figur 2.10b: Kapillardruckkurven
Figur 2.11: Relative Permeabilität als Funktion der effektiven Phasensättigung
Figur 2.12: Relative Permeabilitätsfunktionen
Figur 2.13: Definition der Geometrie
Figur 3.1: Indirekter Ansatz zur Lösung des Inversen Problems
Figur 3.2: Iterationsschritt nach Newton im nicht-linearen Modell
Figur 3.3: Einfluss des Levenberg-Parameters auf den Optimierungsschritt
Figur 3.4: F-Verteilung, Verwerfungsbereich, Irrtumsrisiko erster und zweiter Art
Figur 3.5: Zweidimensionale Konfidenzregion
Figur 3.6: Programmstruktur ITOUGH
Figur 4.1: Konzept des synthetischen Experimentes und Vorgehen
Figur 4.2: Synthetisches Experiment: Versuchsaufbau
Figur 4.3: Synthetisches Experiment: Charakteristische Kurven
Figur 4.4a: Gassättigung
Figur 4.4b: Kapillardruck
Figur 4.5: Kapillardruck: Systemverhalten und Beobachtungspunkte
Figur 4.6: Fliessraten: Systemverhalten und Beobachtungspunkte
Figur 4.7: Fall Ad: Zielfunktion und Suchpfade
Figur 4.8: Fall Af: Zielfunktion und Suchpfade
Figur 4.9: Fall A: Zielfunktion und Suchpfade
Figur 4.10: Fall Bd: Zielfunktion, Suchpfade, 95%-Fehlerellipse
Figur 4.11: Fall Bf: Zielfunktion, Suchpfade, 95%-Fehlerellipsen
Figur 4.12: Fall B: Zielfunktion, Suchpfade, 95%-Fehlerellipsen

Figur 4.13a: Sensitivität hinsichtlich Parameter n
Figur 4.13b: Sensitivität hinsichtlich Parameter $1/\alpha$
Figur 4.14: Fall B: Überprüfung der 95%-Fehlerellipse
Figur 4.15: Fall C: Verhalten der Parameterschätzung bei gleichzeitiger Bestimmung der Varianzen einzelner Beobachtungsarten
Figur 4.16: Fall D: Geschätzter Systemzustand
Figur 4.17: Fall E: Histogramme und Dichtefunktion der vier Parameter
Figur 4.18a: Fall E: Gassättigungsprofile
Figur 4.18b: Fall E: Gasdruckprofile
Figur 4.19: Fall E: Fliessraten, 95%-Fehlerband und Monte Carlo Realisationen
Figur 4.20: Fall E: Verteilung der Fliessraten zum Zeitpunkt t=7200 und t=10800 Sekunden
Figur 4.21: Felslabor Grimsel, Scherfläche in FRI-Zone
Figur 4.22: Laborstollen, Hauptzugangsstollen, Kluft, Bohrlöcher und Packeranordnung
Figur 4.23: Versuchslayout, Bezeichnung der Bohrungen und Intervalle
Figur 4.24: Testphase I: Vergleich zwischen beobachtetem und berechnetem Druckverlauf für Pulstest P2012-1 und P2012T-2
Figur 4.25: Testphase I: Sensitivitätskoeffizienten für Pulstest P2012-1 und P2012T-2
Figur 4.26: Testphase I: Auswertung von Test QCH12-1 unter alleiniger Verwendung der Fliessraten (Jacob-Lohman-Plot); Druckreaktion in Intervall I0.2
Figur 4.27: Testphase I: Radialsymmetrisches Kluft-Matrix Modell
Figur 4.28: Testphase I: Gemessener und gerechneter Systemzustand Test QCH12-1
Figur 4.29: Testphase I: Sensitivitäten der Fliessraten und Druckdaten hinsichtlich der geschätzten Parameter
Figur 4.30: Testphase I: Test QCH12-1 (Kalibrierung) und PRQCH12-1 (Prognose)
Figur 4.31: Testphase II: Vergleich des Druckverlaufs in Intervall I1.2 und I0.2, Testabschnitt QCHG-1 (Kalibrierung), PRG-1 und EXTR-1 (Prognose)
Figur 4.32: Testphase II: Gasmasse und Gasvolumen
Figur 4.33: Testphase II: Fliessraten
Figur 4.34 Testphase II: Sättigungs- und Druckprofile am Ende der Testabschnitte
Figur 4.35: Charakteristische Kurven für Zone 1, Zone 2 und Matrix
Figur 4.36: Testphase II: Sensitivität der Zielfunktion
Figur 4.37: Testphase III: Kalibrierung der Einphasenmodelle unter Verwendung von Injektionsraten (Jacob-Lohman Plot)
Figur 4.38: Testphase III: Druckreaktion in Intervall I0.2 für Ein- und Zweiphasenmodell
Figur 4.39: Testphase III: Systemverhalten der kalibrierten Modelle

TABELLENVERZEICHNIS

Tabelle 1.1: Modellbildung, Modellbegriffe
Tabelle 2.1: Definition der residualen und effektiven Sättigung
Tabelle 2.2: Exponenten für Gleichung (2.35) und (2.36)
Tabelle 2.3: Primäre thermodynamische Variablen
Tabelle 3.1: Zusammenstellung der Fehlerquellen und ihre Charakterisierung
Tabelle 3.2: Konsequenzen aus Modelltest
Tabelle 3.3: Verfahren zur Schätzung der Unsicherheit einer Prognoseberechnung
Tabelle 4.1: Wahrer Parametersatz des synthetischen Experimentes
Tabelle 4.2: Anfangswerte der zu schätzenden Parameter
Tabelle 4.3: Berechnungsfälle (verwendete Daten: d=Kapillardruckdaten, f=Fliessraten)
Tabelle 4.4: Resultate Fall A
Tabelle 4.5: Resultate Fall Bd
Tabelle 4.6: Resultate Fall Bf
Tabelle 4.7: Resultate Fall B
Tabelle 4.8: Fall E: Mittelwert und Varianzen der Parameter
Tabelle 4.9: Testphase I: Überblick über die modellierten Tests
Tabelle 4.10: Testphase I: Modellgrössen für Pulstests P2012-1 und P2012T-2
Tabelle 4.11: Testphase I: Resultate der Pulstest Auswertung und Vergleich mit Typkurvenverfahren
Tabelle 4.12: Testphase I: Resultate Test QCH12-1 und Vergleich mit Jacob-Lohman-Auswertung
Tabelle 4.13: Testphase I: Kovarianz-/Korrelationsmatrix der geschätzten Parameter
Tabelle 4.14: Testphase II: Überblick über die modellierten Tests
Tabelle 4.15: Testphase II: Sensitivitäten gasbezogener Modellparameter
Tabelle 4.16: Testphase II: Zusammenstellung der Resultate
Tabelle 4.17: Testphase II: Überprüfung der Linearitätsannahme
Tabelle 4.18: Testphase III: Überblick über die modellierten Tests
Tabelle 4.19: Testphase III: Resultate der Parameterschätzung unter Annahme wassergesättigter Verhältnisse
Tabelle 4.20: Testphase III: Vergleich Einphasen-/Zweiphasenmodell

1 EINLEITUNG

1.1 Problemstellung und Motivation

Die vorliegende Arbeit entstand im Rahmen eines Zusammenarbeitsvertrages zwischen der *Nationalen Genossenschaft für die Lagerung Radioaktiver Abfälle (Nagra)* und der *Versuchsanstalt für Wasserbau, Hydrologie und Glaziologie (VAW)* an der ETH. Die zu behandelnden Fragen stehen somit im Zusammenhang mit dem Nachweis der Langzeitsicherheit eines Endlagers für radioaktive Abfälle in der Schweiz. Dieser Nachweis basiert auf einer Kette von Modellrechnungen, angefangen bei der Freisetzung von Radionukliden aus dem Endlager über deren Transport in der Geosphäre und Biosphäre bis hin zur Dosisberechnung. Die Anwendung mathematisch-numerischer Modelle steht dabei im Vordergrund, da mit deren Hilfe nicht nur der aktuelle Zustand eines Systems genähert wiedergegeben, sondern darüber hinaus eine Prognoseberechnung unter geänderten Randbedingungen durchgeführt werden kann. Es versteht sich, dass eine umfassende Sicherheits- und Risikoanalyse weit über eine deterministische Berechnung des zukünftigen Systemzustandes hinausgeht. Im folgenden soll lediglich von der Simulation der Transportvorgänge im Grundwasser die Rede sein.

Voraussetzung für eine zuverlässige Prognoseberechnung ist die adäquate Beschreibung der am Transportvorgang beteiligten physikalischen Prozesse sowie eine genügend genaue Charakterisierung des durchflossenen Mediums und der betrachteten Fluide. Das in dieser Arbeit verwendete Computermodell TOUGH, das am *Lawrence Berkeley Laboratory* entwickelt wurde, beschreibt den Transport der Komponenten Wasser und Luft sowie von Wärmeenergie in der flüssigen und gasförmigen Phase. Die Motivation zur Simulation von Zweiphasenströmungen kommt einerseits daher, dass an zwei der potentiellen Standorte für ein Lager schwach- und mittelradioaktiver Abfälle Naturgas vorgefunden wurde und dessen Einfluss auf die Bestimmung sicherheitsrelevanter Parameter untersucht werden soll. Andererseits können durch die Produktion von Korrosionsgasen im Endlager selbst die Druckverhältnisse und das hydraulische Fliessfeld im Nahbereich verändert werden.

Verglichen mit herkömmlichen Grundwassermodellen führt die Berücksichtigung der Transportvorgänge in der Gasphase zu einer starken Zunahme der Anzahl Modellparameter, welche angenommen, gemessen oder in einem Kalibrierungsverfahren geschätzt werden müssen. Während immer differenziertere und leistungsfähigere Simulationsprogramme zur Verfügung stehen, bleibt die exakte Bestimmung der Modellparameter eine

sowohl prinzipiell als auch in der praktischen Durchführung schwierige Aufgabe. Zu deren Bewältigung soll die vorliegende Arbeit einen Beitrag leisten.

1.2 Zielsetzung, Aufgabenstellung und Vorgehen

Soll ein numerisches Modell für Prognoseberechnungen eingesetzt werden, muss der Wert und allenfalls das statistische Verhalten derjenigen Parameter bekannt sein, welche als Eingabegrössen in der mathematischen Formulierung des Problems auftreten. Entsprechende Kenntnisse lassen sich mit Hilfe hydraulischer Tests oder durch einfache Beobachtung gewisser Systemgrössen (z.B. der Druckverteilung im Untersuchungsgebiet) gewinnen.

Das Ziel der vorliegenden Arbeit besteht darin, die Interpretation der Messdaten aussagekräftiger und effizienter zu gestalten. Aussagekräftig bedeutet hier, dass die resultierenden Parameter modellbezogen, d.h. im Hinblick auf den vorgesehenen Modellgebrauch als optimal zu betrachten sind. Zusätzlich soll die Genauigkeit der Modellparameter angegeben werden, um unter anderem den Einfluss von Fehlern auf die Prognoseberechnung abschätzen zu können. Eine weitgehende Automatisierung des vorgeschlagenen Verfahrens erlaubt es, auch kompliziertere Modellstrukturen zu untersuchen; die Erhöhung der Effizienz zielt demnach auf eine Verbesserung der Berechnungsmodelle und somit auf eine erhöhte Zuverlässigkeit der anschliessenden Prognoseberechnung.

Im Rahmen dieser allgemeinen Zielvorgabe befasst sich die vorliegende Untersuchung mit dem Thema der Parameterbestimmung unter spezieller Berücksichtigung der Zweiphasenproblematik. Ein konkreter Auftrag liesse sich wie folgt formulieren:

Es soll eine Methodik erarbeitet werden zur Bestimmung von Eingabeparametern eines mathematisch-numerischen Modells zur Simulation von Zweiphasenströmungen.

Als Schwerpunkt wird die Schätzung von Parametern durch Kalibrierung des Modells anhand von Messdaten behandelt. Im Vordergrund stehen dabei nicht die zahlreich zur Verfügung stehenden Optimierungsverfahren, sondern deren Anwendung auf synthetische Beispiele und Felduntersuchungen unter Zweiphasenbedingungen. Die Diskussion der Resultate führt im weiteren auf das Problem der Identifizierbarkeit der Parameter und die Frage nach der optimalen Modellstruktur.

Die Thematik wird schrittweise wie folgt behandelt (der Bericht ist entsprechend gegliedert):

Im Sinne einer Einleitung sollen einige allgemeine Gedanken zum Modellbegriff formuliert werden (*Kapitel 1*). *Kapitel 2* beschreibt das sogenannte Direkte Problem; er befasst sich mit den Konzepten und Phänomenen der Zweiphasenströmung und deren mathematisch-numerische Behandlung. Anschliessend wird das Programm TOUGH vorgestellt, das von Dr. Karsten Pruess am Lawrence Berkeley Laboratory entwickelt wurde (PRUESS 1987); TOUGH übernimmt die Lösung des Direkten Problems. *Kapitel 3* erläutert die theoretischen Grundlagen der Parameterschätzung durch Inverse Modellierung und beschreibt das gewählte Optimierungsverfahren, welches in einem neu entwickelten Programm ITOUGH implementiert ist. *Kapitel 4* - der Hauptteil dieser Arbeit - befasst sich mit Anwendungsbeispielen. Das Vorgehen bei der Inversen Modellierung wird anhand eines synthetischen Beispiels aufgezeigt. Abschliessend soll das Verfahren auf Daten eines Feldversuches, welche von der Nagra zur Verfügung gestellt wurden, angewandt werden. Die sich daraus ergebenden Schlussfolgerungen sind in *Kapitel 5* zusammengestellt.

1.3 Zum Modellbegriff

Die hier angebrachten, sehr allgemein gehaltenen Bemerkungen zum Modellbegriff rechtfertigen sich nicht nur deshalb, weil Modellbildung im weitesten Sinne Ausgangspunkt und Grundlage jeder wissenschaftlichen Theorie, ja selbst der Wahrnehmung ist, sondern weil aus dieser Tatsache Konsequenzen entstehen für die Interpretation der in diesem Bericht präsentierten Resultate.

Der Begriff *Modell* sei definiert als das Ergebnis eines Abstraktionsprozesses, bei dem das betrachtete System aufgrund bestimmter Kriterien auf einzelne Aspekte reduziert ist.

Entscheidend bei dieser Definition ist, dass nichts über die Selektionskriterien oder die Methode, solche zu finden, noch über die Anforderung an die Qualität der selektierten Eigenschaften ausgesagt ist. Das Selektionskriterium kann eine fundierte wissenschaftliche Theorie sein, aber auch Intuition, Erfahrung, Beobachtung, vielleicht Zufall, ein Vorurteil oder einfach eine Tradition unter Berufung auf eine Autorität dienen als Entscheidungsgrundlagen zur Beantwortung der Frage, welche Eigenschaften als signifikant zu betrachten sind. Die Modellbildung ist zusätzlich von zahlreichen Faktoren abhängig, die mit dem abzubildenden Objekt oder Prozess gar nichts zu tun haben, wie z.B. die zur

Verfügung stehende Zeit, die Qualifikation des Modellierers oder die Leistungsfähigkeit des benutzten Computers.

Der Entscheid für den Einsatz eines *mathematisch-numerischen Modells* zur Untersuchung einer bestimmten Fragestellung kann verschieden motiviert sein:

- Numerische Modelle erlauben es, unterschiedliche Hypothesen über das Verhalten eines Systems miteinander zu vergleichen. Das Modell dient der *Erklärung* eines beobachteten oder plausibel erscheinenden Sachverhaltes. Ein möglichst gutes Verständnis des Systemverhaltens ist eine Grundvoraussetzung, ohne die jeder weitere Modelleinsatz fragwürdig erscheinen muss. Insbesondere führt die starke Kopplung der Prozesse in einem Zweiphasensystem zu oft überraschenden Effekten, die es zu erklären gilt.

- Ein Modell zeichnet sich durch seine *Prognosefähigkeit* aus. Eingriffe in ein Grundwassersystem können simuliert und der Einfluss auf ausgewählte Zielgrössen abgeschätzt werden. Die überaus langsamen Fliessvorgänge im Wirtgestein eines Endlagers für radioaktive Abfälle sowie der Zeithorizont, für den eine Prognose abgegeben werden muss, erschweren eine experimentelle Untersuchung - mathematisch-numerische Modelle müssen herangezogen werden. Der Einsatz eines Modells für Prognosezwecke setzt eine vorgängige Kalibrierung und Validierung voraus.

- Die in einem Experiment *messbaren* Grössen (z.B. Grundwasserstände) entsprechen nicht immer den *interessierenden* Grössen (z.B. Durchflussbilanzen). Mit Hilfe eines mathematisch-numerischen Modells, das den gemessenen Systemzustand nachvollzieht, können die eigentlichen Zielgrössen abgeleitet werden.

- Finanzielle Überlegungen sowie Zeitgründe rechtfertigen unter Umständen den Einsatz numerischer Modelle. Die im allgemeinen teuren Messkampagnen können durch den Computer zwar nicht ersetzt werden, doch lässt sich die Qualität der aus den Experimenten gewonnenen Aussagen durch den Einsatz inverser Methoden, wie sie in dieser Arbeit vorgestellt werden, entscheidend verbessern.

Inverse Modellierung steht als Bindeglied zwischen den Beobachtungen und dem mathematisch-numerischen Modell. Jeder der oben erwähnten Einsatzmöglichkeiten wird durch die Resultate der Inversen Modellierung beeinflusst. Modellbildung ist somit als iterativer Prozess zu verstehen, der anhand modellexterner Kriterien ständig überprüft werden muss.

Im folgenden werden einige (Modell)begriffe erläutert, um klarzustellen, wie sie im Rahmen dieser Untersuchung zu verstehen sind.

Unter einem *konzeptionellen Modell* sei die qualitative Beschreibung eines Systems, Subsystems oder Prozesses verstanden, welche diejenigen Aspekte des Systemverhaltens wiederzugeben vermag, die für den vorgesehenen Modellgebrauch relevant sind (nach HYDROCOIN 1990).

Das *mathematisch-numerische Modell* bezeichnet die Formulierung des konzeptionellen Modells mit Hilfe mathematischer Ausdrücke und deren Umsetzung in numerische Algorithmen, um die anstehenden Gleichungen einer Behandlung mit dem Computer zugänglich zu machen. Die Implementierung gilt es zu verifizieren.

Der Begriff *Modellstruktur* umfasst nicht nur das mathematisch-numerische Modell, sondern auch die Anfangs- und Randbedingungen, die räumliche und zeitliche Diskretisierung sowie die Zonierung für einen bestimmten Anwendungsfall.

Als Beispiel sei ein mathematisch-numerisches Modell zur Beschreibung von Zweiphasenströmungen betrachtet. Ein solches Modell besteht aus einer Vielzahl von Submodellen, von denen jedes einzelne in Frage gestellt werden kann und somit begründet werden muss. Der Modellaufbau umfasst mehrere Teilaufgaben (Tabelle 1.1):

In einem ersten Schritt gilt es, die signifikanten physikalischen und chemischen Prozesse zu identifizieren und in entsprechende mathematische Ausdrücke umzusetzen (*Funktionales Modell*). Für die Inverse Modellierung ist zusätzlich das statistische Verhalten der beteiligten Zufallsvariablen (Beobachtungen und Modellparameter) zu beschreiben (*Stochastisches Modell*). Ein geeignetes numerisches Verfahren hat sicherzustellen, dass die konstituierenden Gleichungen hinsichtlich der unbekannten Grössen, die den Systemzustand repräsentieren, für verschiedene Geometrien, Anfangs- und Randbedingungen gelöst werden können. Dieser Teil der Modellbildung lässt sich in mehr oder weniger allgemeingültiger Form durchführen; das Resultat besteht in einem Computerprogramm, das zur Simulation eines bestimmten Prozesses herangezogen werden kann (*Numerisches Modell*). Zur Lösung einer konkreten Aufgabe muss zusätzlich die Modellgeometrie (Dimensionalität und Ausdehnung) festgelegt werden. Die sogenannte Parametrisierung bezeichnet den Vorgang, bei dem das System in räumlich und zeitlich diskrete Einheiten unterteilt wird. Dies ist einerseits aus numerischen Gründen notwendig, andererseits kann damit die Anzahl der Parameter reduziert werden.

Im nächsten Schritt müssen den so gewählten Modellparametern Zahlenwerte zugewiesen werden. Die vorliegende Arbeit befasst sich mit diesem Teil der Modellbildung, nämlich der Parameterschätzung durch Kalibrierung eines Modells anhand von Messdaten. Ist die Modellbildung soweit abgeschlossen, kann der Systemzustand als Folge des gewählten konzeptionellen Modells berechnet werden (Simulation). Ein kalibriertes und validiertes Modell kann sodann für Prognoseberechnungen herangezogen werden.

<table>
<tr><td rowspan="6">Konzeptualisierung</td><td>Prozesse</td><td colspan="2">Identifikation der signifikanten physikalischen und chemischen Prozesse</td></tr>
<tr><td rowspan="2">Mathematisches Modell</td><td>Funktionales Modell</td><td>Umsetzung in mathematische Ausdrücke
- Kontinuitätsgleichung
- Bewegungsgleichung
- Zustandsgleichungen</td></tr>
<tr><td>Stochastisches Modell</td><td>Beschreibung des statistischen Verhaltens aller Zufallsvariablen</td></tr>
<tr><td>Numerisches Modell</td><td colspan="2">Wahl eines numerischen Verfahrens
Codierung</td></tr>
<tr><td rowspan="2">Modellstruktur</td><td>Modell-geometrie</td><td>Dimensionalität
Ausdehnung</td></tr>
<tr><td>Parametri-sierung</td><td>Diskretisierung
Zonierung</td></tr>
<tr><td>Parameterschätzung
Identifizierung
Inverse Modellierung</td><td colspan="3">Zuweisung von Werten an die Modellparameter</td></tr>
<tr><td>Simulation
Direktes Problem</td><td colspan="3">Lösung des Direkten Problems für gegebene Anfangs- und Randbedingungen</td></tr>
</table>

Tabelle 1.1: Modellbildung, Modellbegriffe

Die Interpretation der Resultate schliesslich ist nichts anderes als eine weitere Modellbildung aufgrund erweiterter Kenntnisse, die sich aus der Berechnung ergeben haben. Hier wird auch ersichtlich, dass Modellieren ein iterativer Prozess ist und somit die Erfahrung des Modellierers ein wichtiger Bestandteil darstellt. Eine Modellrechnung kann z.B. zur

Identifikation der signifikanten Prozesse herangezogen werden, etwa zur Beantwortung der Frage, ob die Diffusion in der Gasphase ein signifikanter Prozess im Hinblick auf den Transport von Feuchtigkeit darstellt. Die Simulation könnte zeigen, dass die Diffusion für eine gegebene Modellstruktur im konkreten Fall vernachlässigt, d.h. der Diffusionskoeffizient als Modellparameter zu Null gesetzt werden darf. Die Entscheidung hingegen, ob überhaupt ein Diffusionsterm im mathematischen Modell eingeführt werden soll, muss aufgrund anderer Grundlagen gefällt werden.

Aus diesen Bemerkungen ergibt sich, dass das Vertrauen in das Resultat einer Modellrechnung gerechtfertigt werden muss. Dies geschieht im Falle mathematisch-numerischer Modelle u.a. mittels der Verifizierung, der Kalibrierung und der Validierung des Modells anhand von Messdaten. Man sollte sich dabei im klaren darüber sein, welcher Teil des Modells (welches Submodell) durch welches Verfahren überprüft wird. Ein optimal geschätzter Parametersatz garantiert nicht, dass das verwendete Modell das reale System auch optimal beschreibt. Die Wahl zwischen alternativen Modellen muss aufgrund anderer Kriterien getroffen werden. Hiermit ist die Frage nach der optimalen Modellstruktur angesprochen, welche nach erfolgreicher Kalibrierung eines Modells angegangen werden muss.

Es wird mehrfach darauf hinzuweisen sein, dass die in einem Kalibrierungsverfahren geschätzten Parameter immer Modellparameter sind (und nicht etwa Aquiferparameter!), das heisst, Wert und Genauigkeit der Parameter ist abhängig von der gewählten Modellstruktur. Aus der Sicht der analytischen Statistik, die im folgenden eine Rolle spielen wird, sind die Parameter zudem als Verteilungsparameter (z.B. Erwartungswert) einer bestimmten Schätzfunktion zu betrachten.

Um zu verdeutlichen, dass es sich bei den oben eingeführten Modellbegriffen um wohldefinierte Konzepte handelt, werden sie in dieser Arbeit als stehende Ausdrücke gross geschrieben.

2 DAS DIREKTE PROBLEM

2.1 Direktes Problem - Inverses Problem

Der Begriff "Direktes Problem" muss in seinem Verhältnis zum "Inversen Problem" erläutert werden.

Das Ziel einer hydrodynamischen Modellrechnung sei die Bestimmung eines (zukünftigen) Systemzustandes als Funktion eines bestimmten konzeptionellen Modells mit gegebenen Modellparametern, Anfangs- und Randbedingungen. Dieser Systemzustand wird anhand der sogenannten Systemvariablen (z.B. Druck, Temperatur und Gassättigung) oder von diesen abgeleiteten Grössen (z.B. Fliessraten) beschrieben. Beim *Direkten Problem* sind die Systemvariablen unbekannt und müssen mit Hilfe eines analytischen oder numerischen Verfahrens berechnet werden. Die Modellparameter, Anfangs- und Randbedingungen hingegen sind bekannte Eingabegrössen, die in Form von Koeffizienten in den zu lösenden Gleichungen erscheinen.

Beim *Inversen Problem* ist der Systemzustand an diskreten Punkten in Form von Messwerten gegeben. Gesucht sind nun die Modellparameter sowie die Anfangs- und Randbedingungen, welche den vorliegenden, an diskreten Punkten gemessenen Systemzustand hervorgerufen haben. Es ist zu beachten, dass die Eindeutigkeit der Lösung nicht gewährleistet werden kann.

Zahlreiche Methoden zur Inversen Modellierung beruhen auf einem iterativen Verfahren, bei dem eine Anfangsschätzung der gesuchten Modellparameter durch mehrmaliges Lösen des Direkten Problems auf geschickte Weise derart verändert wird, dass eine geringere Abweichung zwischen den gemessenen und berechneten Systemvariablen entsteht. Die exakte und robuste Lösung des Direkten Problems ist somit eine zentrale Voraussetzung für die Behandlung des Inversen Problems.

Die Lösung des Direkten Problems wird in dieser Arbeit vom Simulationsprogramm TOUGH übernommen. Es soll in den folgenden Kapiteln im Detail beschrieben werden.

2.2 Definitionen und Konzepte der Zweiphasenströmung

2.2.1 Vorbemerkungen

Die grundlegenden Definitionen und Konzepte der Fluiddynamik im porösen Medium sind bereits oft beschrieben worden [siehe z.B. BEAR (1972), DAKE (1978), BEAR & BACHMAT (1990)]. Die Unterscheidung verschiedener, massstabsabhängiger Betrachtungsebenen ist bei der Diskussion der Mehrphasenströmung von besonderer Bedeutung. Im folgenden werden die einzelnen Betrachtungsebenen zusammenfassend erläutert.

Molekulare Betrachtungsweise : Studium der Bewegung der Moleküle und ihrer gegenseitigen Beeinflussung unter Berücksichtigung der Einwirkung äusserer Einflüsse (DRACOS 1987).

Eine molekulare Betrachtungsweise ist u.a. bei der Behandlung von Diffusionsprozessen in der Gasphase angezeigt. Es muss z.B. die Frage beantwortet werden, ob die Molekül-Molekül-Kollision oder die Molekül-Wand-Kollision überwiegt. Im ersten Fall handelt es sich um molekulare Diffusion, im zweiten um Knudsen Diffusion.

Kontinuumsbetrachtung : Die Materie sei eine hypothetische Substanz, die kontinuierlich im Raum verteilt ist und die durch einen Satz von Variablen beschrieben werden kann, welche ihrerseits kontinuierliche und differenzierbare Funktionen von Ort und Zeit sind (BEAR & BACHMAT, 1990).

Die Kontinuumsbetrachtung ist ein fundamentales Konzept der Strömungslehre, welche auch in ihrer mikroskopischen Schreibweise (Navier-Stokes-Gleichung) eine Kontinuumstheorie darstellt.

Mikroskopische Betrachtungsweise : Auf mikroskopischer Ebene betrachtet man einen (mathematischen) Punkt, der innerhalb der betrachteten Phase oder auf einer Phasengrenze liegt.

Während die einzelne Phase bereits eine Mittelung molekularer Eigenschaften ist und somit ein Kontinuum darstellt, stellt eine Phasengrenze bei mikroskopischer Betrachtungsweise eine Diskontinuität dar.

Makroskopische Betrachtungsweise : Makroskopische Betrachtungsweise bedeutet eine über ein Repräsentatives Elementarvolumen (REV) gemittelte Betrachtung der mikroskopischen Eigenschaften. Die bei mikroskopischer Betrachtungsweise vorhandenen Diskontinuitäten sind nicht mehr erkennbar (SCHIEGG 1979).

Beim Übergang von mikroskopischer zu makroskopischer Betrachtungsweise, der mit einem Mittelungsprozess verbunden ist, entstehen *neue* konstituierende Gleichungen (z.B. Darcy-Gesetz) mit *neuen* Parametern (z.B. k-Wert, Gassättigung). Dieser Vorgang unterscheidet sich z.B. von demjenigen bei der Mittelung von Punkt-k-Werten zur Bestimmung von Gebiets-k-Werten, bei dem keine neuen Gleichungen oder Parameter entstehen.

Während zahlreichen makroskopisch feststellbaren Phänomenen mikroskopische oder molekulare Prozesse zugrunde liegen, muss für eine grossräumige Simulation der Übergang zu einer geometrisch erfassbaren, kontinuierlichen Betrachtungsweise vollzogen werden. Als Beispiel sei auf das verallgemeinerte (makroskopische) Gesetz von Darcy hingewiesen, bei dem sich die relative Durchlässigkeitsfunktion anhand mikroskopischer Betrachtungen zumindest qualitativ erklären lässt. In ähnlicher Weise lassen sich für spezielle Porengrössenverteilungen Kapillardruckkurven herleiten. Trotzdem bleibt man beim Übergang von der mikroskopischen auf die makroskopische Ebene auf empirische Ansätze angewiesen, da sich die Geometrie des Porenraumes einer einfachen Beschreibung entzieht.

Ein anderer Weg führt über die Berechnung der Strömung in einem stochastisch generierten Poren- oder Kluftnetzwerk, in dem mikroskopische Fliessgesetze formuliert werden zur Bestimmung der (makroskopischen!) Parameter eines *äquivalent porösen Mediums*. Als Beispiel sei die Berechnung eines anisotropen Durchlässigkeitstensors in einem stark geklüfteten Medium erwähnt (HERBERT & SPLAWSKI 1990), oder die Abschätzung residualer Sättigungen als Funktion des Vernetzungsgrades des Porenraumes (PRUESS & TSANG 1990). Dieser *mesoskopische* Bereich stellt ein nützliches Bindeglied beim Übergang zwischen mikroskopischer und makroskopischer Betrachtung dar.

In den folgenden Kapiteln werden einige Begriffe der Zweiphasenströmung zusammengestellt. Es müssen dabei sowohl die Eigenschaften der Fluide als auch diejenigen des durchflossenen Mediums beschrieben werden.

2.2.2 Komponente, Phase, Lösung

Bei den hier aufgeführten Definitionen der Begriffe Komponente, Phase und Lösung ist zu beachten, dass sie sich auf ein konzeptionelles Modell beziehen und somit z.T. nicht mit den Definitionen aus der Chemie übereinzustimmen brauchen.

Komponente (κ): Eine Komponente ist definiert als eine Substanz mit einer bestimmten chemischen Zusammensetzung, die im mathematischen Modell als Einheit aufgefasst wird.

Eine Komponente kann sowohl aus einem chemischen Element (z.B. Wasserstoff, Stickstoff), einem molekularen Stoff (z.B. reines Wasser, Kochsalz) oder aus einem Gemisch verschiedener Substanzen (z.B. Luft) bestehen. Entscheidend ist allein die Tatsache, dass sich die Massenbilanzgleichungen und Gleichgewichtsreaktionen stets auf eine Komponente als Ganzes beziehen. Der Entscheid, was als Komponente zu betrachten ist, hängt somit vom gewählten konzeptionellen Modell ab. Ist z.B. der Partialdruck der Luft als Funktion ihrer chemischen Zusammensetzung von Interesse, muss die Luft als eine Summe mehrerer Komponenten modelliert werden. Im allgemeinen genügt es jedoch, die Luft als eine einzige Komponente zu betrachten, da deren Zusammensetzung im wesentlichen konstant bleibt und der Partialdruck keine sensitive Grösse darstellt. Im Programm TOUGH werden die beiden Komponenten *Wasser (W)* und *Luft (L)* behandelt.

Phase (β): Der Begriff Phase bezieht sich auf den Aggregatzustand eines deformierbaren Mediums; er kann fest, flüssig oder gasförmig sein, wobei Gase und Flüssigkeiten im Begriff des Fluids zusammengefasst werden. Eine Phase besteht aus einer oder mehreren Komponenten.

Die Einführung des Begriffs Phase impliziert, dass die einzelnen Fluide - mikroskopisch betrachtet - nicht mischbar sind, also eine klar definierte Grenzfläche zwischen den jeweiligen Phasen besteht und eine von der Fluidkombination abhängige Grenzflächenspannung vorhanden ist. Diese führt im porösen Medium zu einer Kapillardruckdifferenz. Daraus wird ersichtlich, dass zwei verschiedene Flüssigkeiten mit unterschiedlichen Eigenschaften (z.B. Wasser und Öl) als zwei verschiedene Phasen betrachtet werden müssen, obwohl sie denselben Aggregatzustand aufweisen. Andererseits kann es nur *eine* Gasphase geben, da sich zwischen verschiedenartigen Gasen keine Grenzfläche ausbildet, die Gase somit stets mischbar sind.

Der Begriff Fluid wird in der Fluidmechanik als ein Medium bezeichnet, das bereits bei der geringsten Einwirkung von Schubspannungen eine unbegrenzt anwachsende Verformung erleidet. Sowohl Gase als auch Flüssigkeiten weisen diese Eigenschaft des Fliessens auf und werden somit unter dem Begriff Fluid zusammengefasst.

Im Programm TOUGH wird die *gasförmige (g)* und *flüssige (f)* Phase behandelt. Für die Energiegleichung wird zudem das Wärmespeichervermögen der *festen (s)* Phase (Matrix) mitberücksichtigt.

Besteht eine Phase aus mehreren Komponenten, sind die physikalischen Eigenschaften der Phase von deren Zusammensetzung abhängig, ausgedrückt durch die Massenanteile der entsprechenden Komponenten. Der Massenanteil X_β^κ ist die Masse der Komponente κ in der Phase β bezogen auf die totale Masse der Phase β:

$$X_\beta^\kappa = \frac{m_\beta^\kappa}{m_\beta} \tag{2.1}$$

Die Summe aller Massenanteile einer Phase ergibt somit den Wert Eins:

$$\sum_\kappa X_\beta^\kappa = 1 \tag{2.2}$$

Unter der Annahme eines thermodynamischen Gleichgewichts ist die Verteilung einer Komponente auf die verschiedenen Phasen eindeutig bestimmt. Eine Änderung des thermodynamischen Zustandes kann daher zum Auftauchen oder Verschwinden einzelner Phasen führen sowie deren Zusammensetzung beeinflussen.

Lösung: Eine Lösung ist definiert als ein Fluid, das aus mehreren Komponenten zusammengesetzt ist.

Während sich der Begriff Phase auf die *physikalischen* Eigenschaften eines Fluids bezieht, ist mit dem Begriff Lösung dessen *chemische* Zusammensetzung angesprochen. Die im Hohlraum eines porösen Mediums auftretenden Fluide sind in den allermeisten Fällen als Lösungen zu bezeichnen, da sie sich aus mehreren Komponenten mit wechselnden Massenanteilen zusammensetzen.

Mit Hilfe obiger Definitionen lässt sich der hydraulische Teil von TOUGH als Zweiphasen-Zweikomponenten-Simulationsprogramm bezeichnen, bei dem der gekoppelte Transport der Komponenten Wasser und Luft in flüssiger und gasförmiger Phase

berechnet wird. Wie bereits angedeutet, wird zusätzlich eine Energiebilanzgleichung gelöst, wobei der konvektive Transport von Wärme in der gasförmigen und flüssigen Phase sowie der konduktive Wärmefluss in der Gesteinsmatrix berücksichtigt wird.

Die folgende Diskussion bezieht sich, wenn nicht ausdrücklich erwähnt, auf ein Zweiphasen-Zweikomponenten-System.

2.2.3 Phasenzustand, Phasenübergang, Phasenwechsel

Die physikalischen Eigenschaften der Fluide (Dichte, Viskosität und innere Energie) werden durch Zustandsgleichungen als Funktion der thermodynamischen Variablen Druck und Temperatur sowie der chemischen Zusammensetzung der Phase beschrieben. Der thermodynamische Zustand bestimmt zudem, welche Phase oder Phasenkombination vorliegt.

Die Definition eines *Phasenzustandes* im hier verwendeten Sinne setzt eine makroskopische Betrachtungsweise voraus. Während bei mikroskopischer Betrachtungsweise eine Pore oder ein Porenabschnitt zu einem bestimmten Zeitpunkt nur von einer einzigen Phase eingenommen werden kann, lassen sich bei makroskopischer Betrachtungsweise zwei Phasenzustände unterscheiden, von denen der eine sich weiter unterteilen lässt:

(a) es liegt nur eine Phase vor
  (aa) es liegt die flüssige Phase vor
  (ab) es liegt die gasförmige Phase vor
(b) es liegen beide Phasen gleichzeitig vor

Der aktuell vorliegende Phasenzustand lässt sich anhand der *Sättigung* erfassen:

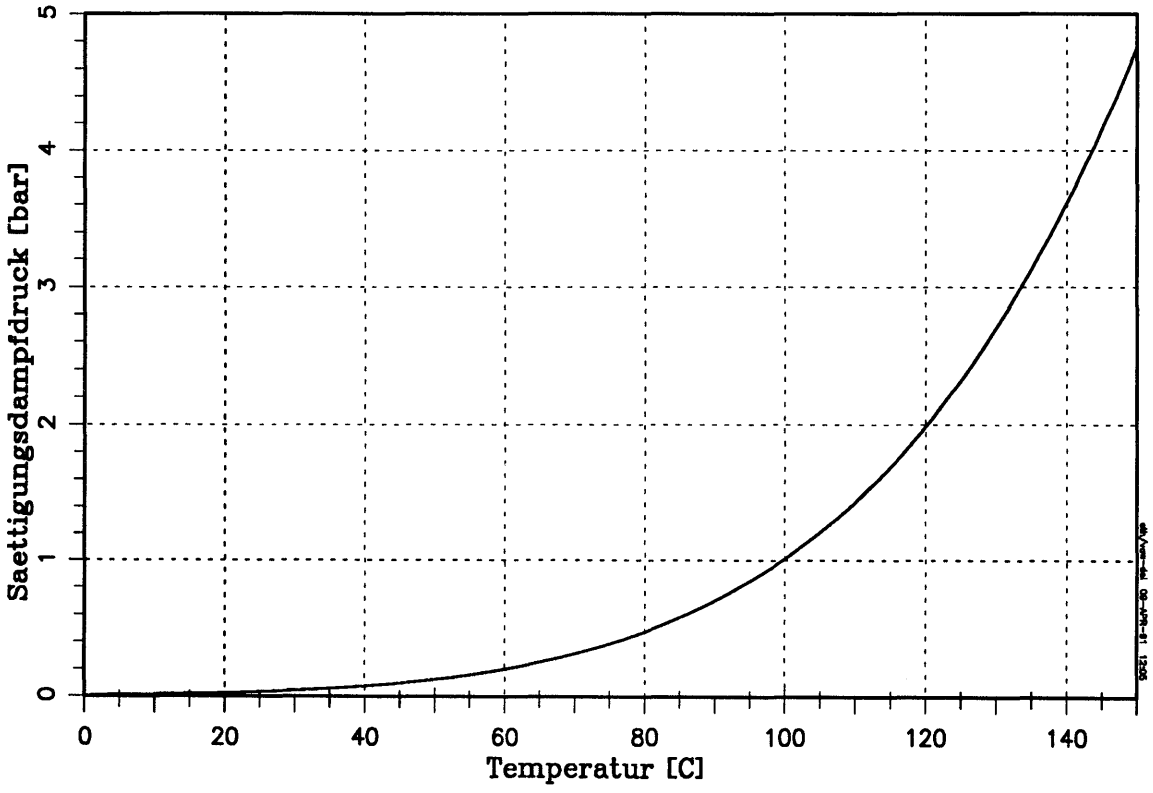
$$S_\beta = \frac{V_\beta}{\phi} \tag{2.3}$$

Dabei ist ϕ die Porosität und V_β das von der Phase β eingenommene Volumen mit:

$$\sum_\beta S_\beta = 1 \tag{2.4}$$

Ein System oder Teilsystem (z.B. Diskretisierungseinheit in einem numerischen Modell) befindet sich also entweder in einem Einphasenzustand ($S_\beta = 0$ oder $S_\beta = 1$) oder einem Zweiphasenzustand ($0 < S_\beta < 1$).

Ein *Phasenübergang* findet statt, wenn durch eine Änderung des thermodynamischen Zustandes eine Komponente von einer Phase in eine andere wechselt (z.B. durch Verdampfen, Kondensation, Lösung von Luft in Wasser). Dies ist eine Lagrange'sche Betrachtung einer Komponente. Ändert hingegen ein Volumenelement seinen Phasenzustand von einem Einphasen- in ein Zweiphasensystem (oder umgekehrt), so sei dies als Phasenzustandswechsel oder *Phasenwechsel* bezeichnet. Ein Phasenwechsel kann aufgrund eines Verdrängungsvorganges oder durch eine Änderung der thermodynamischen Variablen Druck und Temperatur zustande kommen. Es stellt sich dabei die Frage, unter welchen thermodynamischen Bedingungen die einzelnen Phasen existieren können. Es ist z.B. leicht einzusehen, dass bei Temperaturen über dem Siedepunkt von Wasser die flüssige Phase verschwindet und nur noch der Zustand (ab) zulässig ist. Eine entscheidende Grösse für die Bestimmung der möglichen Phasenzustände bildet der Sättigungsdampfdruck. Figur 2.1 zeigt den Sättigungsdampfdruck als Funktion der Temperatur bis 150 °C, wie er vom International Formulation Committee (IFC 1967) aufgrund umfangreicher Messungen angegeben wird und in parametrisierter Form in TOUGH implementiert ist.



Figur 2.1: Sättigungsdampfdruck als Funktion der Temperatur (nach IFC 1967)

Es lassen sich nun leicht die gesuchten Bedingungen formulieren, unter denen die einzelnen Phasenzustände auftreten:

$$p_{tot} > p_L + p_{Sat} \quad \Rightarrow \quad \text{Zustand (aa)}$$
$$p_{tot} = p_L + p_{Sat} \quad \Rightarrow \quad \text{Zustand (b)}$$
$$p_{tot} < p_L + p_{Sat} \quad \Rightarrow \quad \text{Zustand (ab)}$$

wobei

p_{tot} : totaler Systemdruck
p_L : Partialdruck der Luft
p_{Sat} : Sättigungsdampfdruck

Punkte in einem Temperatur-Druck-Diagramm, die unterhalb der Sättigungsdampfdruckkurve liegen, verweisen auf einen thermodynamischen Ungleichgewichtszustand. Da diese Zustände den Modellannahmen widersprechen, wird die Kurve von Figur 2.1 in den folgenden Diagrammen jeweils eingezeichnet; sie markiert die Grenze zwischen zulässigen und nicht zulässigen thermodynamischen Zuständen.

Der Sättigungsdampfdruck in Figur 2.1 entspricht dem Partialdruck des Wasserdampfes bei 100% relativer Luftfeuchtigkeit. Die relative Luftfeuchtigkeit ist der Quotient aus dem Partialdruck des Wasserdampfes p_D im Gleichgewichtszustand und dem Sättigungsdampfdruck p_{Sat}:

$$r_D = \frac{p_D}{p_{Sat}} \tag{2.5}$$

In einem porösen Medium unter Zweiphasenbedingungen ist die relative Luftfeuchtigkeit eine Funktion des Matrixpotentials. Unter Vernachlässigung osmotischer Kräfte reduziert sich das Matrixpotential auf den Einfluss der Kapillarkräfte (Gleichung von Kelvin):

$$r_D = \exp\left(-\frac{p_{cap}}{\rho_f}\frac{M_W}{R \cdot T}\right) \tag{2.6}$$

wobei

r_D	:	relative Luftfeuchtigkeit	[-]
p_{cap}	:	Kapillardruck = p_g - p_f	[Pa]
R	:	ideale Gaskonstante ≈ 8.31	[J K^{-1} mol^{-1}]
T	:	Temperatur	[K]
M_W	:	Molekulargewicht von Wasser ≈ 0.018	[kg mol^{-1}]
ρ_f	:	Dichte der flüssigen Phase	[kg m^{-3}]

Die Tatsache, dass durch das Vorhandensein von Kapillarkräften der Dampfdruck im Gleichgewichtszustand leicht unterhalb des Sättigungsdampfdruckes liegt, wird auch als *Dampfdruckerniedrigung* bezeichnet.

Ist der Dampfdruck bekannt, kann der Partialdruck der (wasserfreien) Luft in einem Zweiphasensystem einfach aus der Differenz zwischen dem totalen Druck, der dem Gasdruck p_g entspricht, und dem Dampfdruck errechnet werden:

$$p_L = p_g - r_D \cdot p_{Sat} \tag{2.7}$$

Die Menge Luft, die in Wasser löslich ist, wird durch das *Gesetz von Henry* angenähert:

$$X_f^L = p_L \cdot K_H \cdot \frac{M_L}{M_W} \tag{2.8}$$

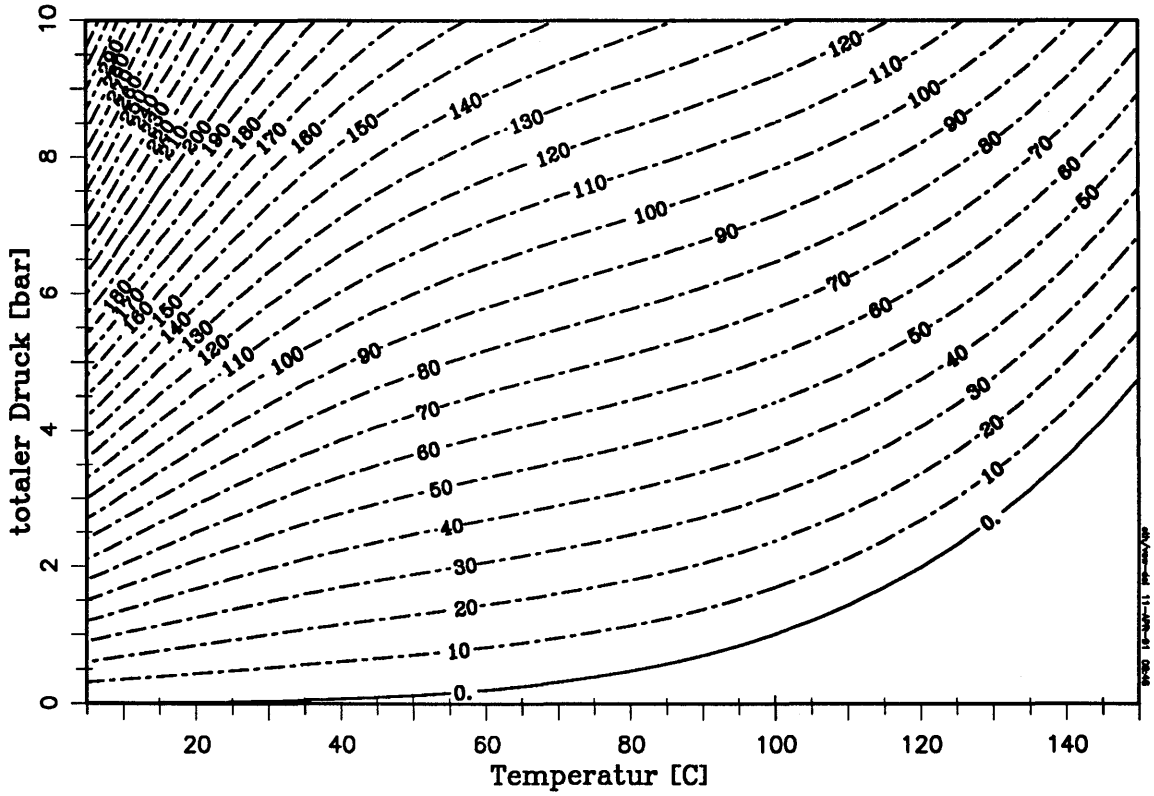
wobei

X_f^L	:	Massenanteil der Luft in der flüssigen Phase	[kg/kg]
p_L	:	Partialdruck der Luft	[Pa]
K_H	:	Henry-Koeffizient	[Pa^{-1}]
M_W	:	Molekulargewicht von Wasser ≈ 0.018	[kg mol^{-1}]
M_L	:	Molekulargewicht von Luft ≈ 0.02896	[kg mol^{-1}]

Der Henry-Koeffizient kann als Kapazitätsterm $(\partial X_f^L/\partial p_L)\cdot(M_W/M_L)$ aufgefasst werden. Die Temperaturabhängigkeit des Henry-Koeffizienten wurde einer Tabelle in TCHOBANOGLOUS & SCHROEDER (1985) entnommen und durch folgende Funktion angenähert:

$$K_H(T) = 8.942\cdot10^{-11} + 1.470\cdot10^{-10}\cdot\exp\left(-4.394\cdot10^{-2}\cdot(T - 273.15)\right) \tag{2.9}$$

Die Löslichkeit von Gasen nimmt zudem mit zunehmendem Salzgehalt des Wassers ab. Die folgenden Angaben gelten für reines Wasser. Figur 2.2 zeigt die Massenanteile der Luft in der flüssigen Phase als Konturlinien in einem Temperatur-Druck-Diagramm. Es ist zu beachten, dass hier nicht der Partialdruck der Luft, sondern der totale Druck angegeben ist unter der Gleichgewichtsannahme, dass der Dampfdruck dem Sättigungsdampfdruck entspricht.



Figur 2.2: Massenanteil der Luft in der flüssigen Phase (in mg/kg) als Funktion von Druck und Temperatur

Im Diagramm erkennt man den linearen Ansatz des Henrygesetzes (gleicher Abstand der Isolinien in Richtung des Druckes bei gegebener Temperatur). Da der Henry-Koeffizient mit zunehmender Temperatur abnimmt (siehe (2.9)), liegen die Isolinien bei hohen Temperaturen weiter auseinander als bei niedrigen Temperaturen. Eine weitere Nichtlinearität in Richtung der Temperatur ist eine Folge des Dampfdruckes, der bei hohen Temperaturen stark ansteigt und über die Beziehung (2.7) in die Berechnung eingeht. Die unterste Isolinie entspricht der Sättigungsdampfdruckkurve von Figur 2.1. Punkte in der rechten unteren Ecke verweisen somit auf thermodynamische Ungleichgewichtszustände.

Der Figur 2.2 sind zwei Informationen zu entnehmen: Einerseits lässt sich daraus der Massenanteil der Luft ablesen, der unter Zweiphasenbedingungen in gelöster Form in der flüssigen Phase transportiert wird. Andererseits zeigt das Diagramm den maximalen Massenanteil der Luft in der flüssigen Phase; er stellt eine obere Grenze dar für die Existenz eines Systems, das sich im Zustand (aa) (nur flüssige Phase) befindet. Wird dieser Wert erreicht (z.B. durch Temperaturerhöhung oder Druckerniedrigung von Wasser, das nur teilweise luftgesättigt ist), ensteht durch Ausgasung ein Zweiphasensystem.

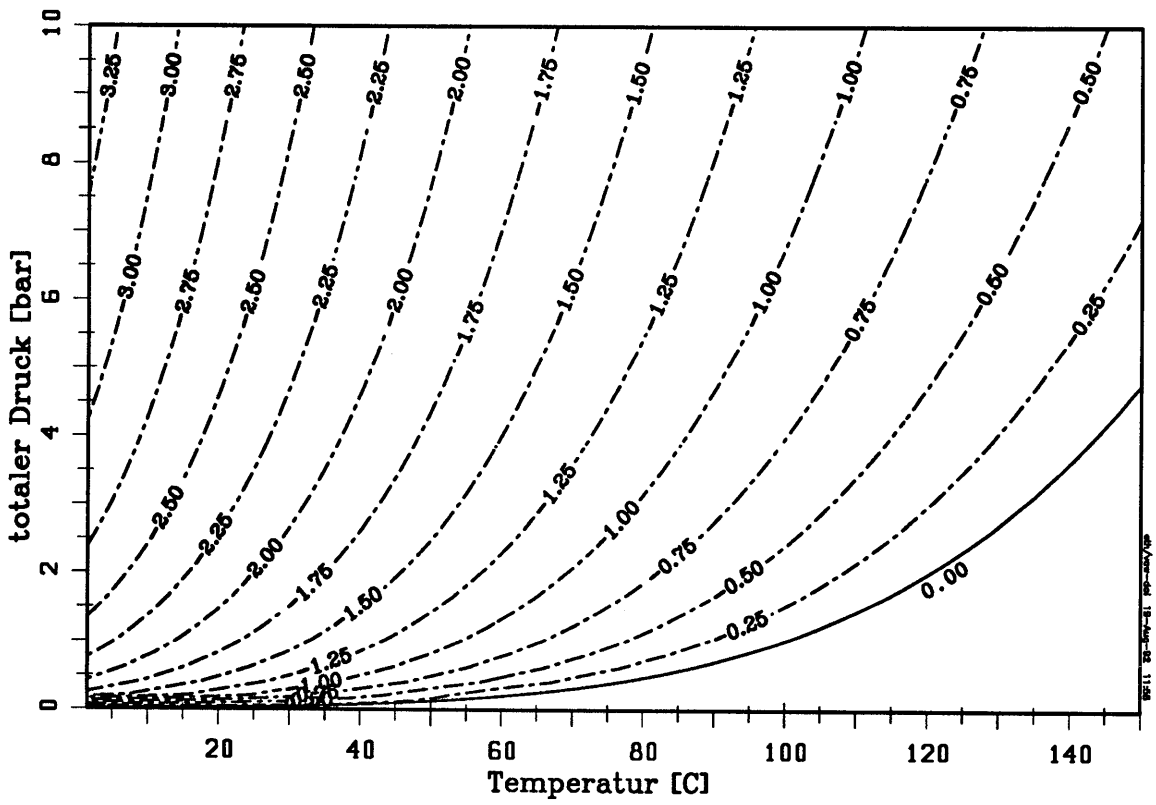
Die analoge Information soll nun für die Gasphase zusammengestellt werden. Um den Massenanteil des Wasserdampfes in der Gasphase berechnen zu können, muss sowohl die Dichte des Wasserdampfes als auch die Dichte der Luft in der Gasphase als Funktion von Druck und Temperatur bestimmt werden. Die Dichte des Wasserdampfes wurde wiederum in parametrisierter Form der Referenz IFC (1967) entnommen. Die Dichte der Luft lässt sich aus dem Gasgesetz bestimmen, wenn man für den Druck den Partialdruck der Luft einsetzt:

$$\rho_L = \frac{p_L \cdot M_L}{R \cdot T} \tag{2.10}$$

Der Massenanteil des Wasserdampfes in der Gasphase ergibt sich zu:

$$X_g^W = \frac{\rho_D}{\rho_D + \rho_L} \tag{2.11}$$

Der Dampfgehalt nimmt bei Druckwerten nahe dem Sättigungsdampfdruck stark zu, wo er definitionsgemäss den Wert 1 annimmt. Aus diesem Grunde wurde für Figur 2.3 die logarithmische Darstellungsform gewählt.



Figur 2.3: Logarithmus des Massenanteils von Wasserdampf in der Gasphase als Funktion von Druck und Temperatur

Figur 2.3 zeigt den Massenanteil des Wasserdampfes in der Gasphase, wie er sich in einem Zweiphasensystem (Zustand (b)) unter Gleichgewichtsbedingungen einstellt. Zusätzlich können die angegebenen Werte auch als die maximal möglichen Massenanteile interpretiert werden, die in einem Einphasensystem (Zustand (ab)) nicht überschritten werden können. Sie definieren den Dampfgehalt bei 100% relativer Luftfeuchtigkeit. Wird dieser Wert erreicht (z.B. durch Temperaturerniedrigung), findet durch Kondensation ein Phasenübergang der Komponente Wasser statt, und es entsteht ein Zweiphasensystem.

Die hier gewählte Darstellung der maximalen Massenanteile der Komponenten Luft und Wasser in der flüssigen und gasförmigen Phase geschieht im Hinblick auf die korrekte Definition der Anfangsbedingungen im numerischen Modell TOUGH. Soll ein Einphasenpunkt (Zustand (aa) oder (ab)) definiert werden, sind obige Einschränkungen bezüglich der Massenanteile zu beachten. Der Vollständigkeit halber sei zudem auf eine weitere Bedingung hingewiesen. Bei einem Zweiphasenpunkt - definiert als ein Porenvolumen mit einer Gassättigung S_g zwischen Null und Eins, wobei die Grenzwerte nicht eingeschlossen sind - muss sichergestellt werden, dass der totale Druck den Sättigungsdampfdruck, vermindert um die oben definierte Dampfdruckerniedrigung, übersteigt:

$$p_{tot}\,(0 < S_g < 1) > r_D \cdot p_{Sat} \qquad (2.12)$$

Hiermit sind alle Voraussetzungen für die Bestimmung einer korrekten Anfangsbedingung zusammengestellt.

Die in diesem Kapitel besprochenen Phasenübergänge können das Systemverhalten nachhaltig beeinflussen. Als Beispiel sei auf die Arbeit von PRUESS (1988) hingewiesen, der die Fliessvorgänge in der Umgebung eines stark wärmeproduzierenden Endlagers für radioaktive Abfälle untersucht. In einem Kluft-Matrix System bewirken Unterschiede in den Permeabilitäten lokale Verdampfungs- und Kondensationserscheinungen, die zusammen mit den in der Matrix wirkenden Kapillarkräften zu komplexen Fliessvorgängen führen, welche die Druck- bzw. Temperaturverhältnisse im Endlager selber beeinflussen.

2.2.4 Dichte

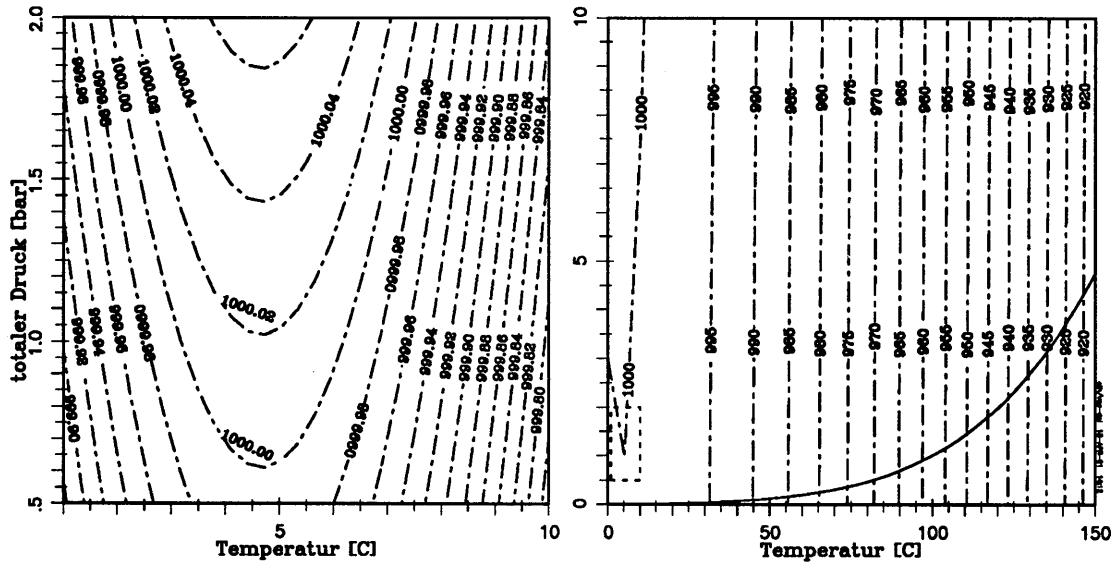
Die Druckabhängigkeit der Dichte einer Phase β wird im allgemeinen über die *Kompressibilität* c_β beschrieben. Die Kompressibilität ist definiert als die relative Volumenänderung (und somit Dichteänderung) pro Druckänderung und hat die Einheit [Pa^{-1}]:

$$c_\beta = \frac{1}{\rho} \cdot \left(\frac{\partial \rho}{\partial p}\right) \tag{2.13}$$

Die Temperaturabhängigkeit der Dichte wird mittels des *thermischen Ausdehnungskoeffizienten* α [K^{-1}] beschrieben:

$$\alpha = -\frac{1}{\rho} \cdot \left(\frac{\partial \rho}{\partial T}\right) \tag{2.14}$$

Figur 2.4 zeigt die Dichte der flüssigen Phase in einem Temperatur-Druck-Diagramm, wie sie aufgrund der Steam Table Equations (IFC 1967) in TOUGH implementiert ist. Die Werte gelten für reines Wasser.



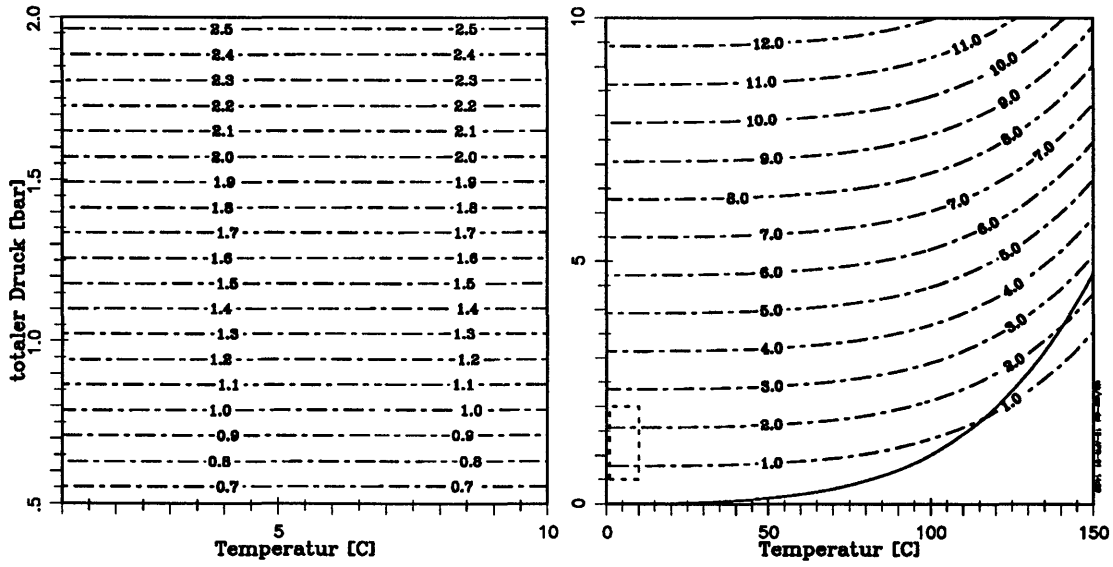
Figur 2.4: Dichte der flüssigen Phase als Funktion von Druck und Temperatur

Die Kompressibilität der flüssigen Phase nimmt mit zunehmender Temperatur leicht ab. Sie beträgt bei 20 °C:

$$c_f \approx 4.6 \cdot 10^{-10} \ Pa^{-1} \tag{2.15}$$

Der thermische Ausdehnungskoeffizient nimmt mit zunehmender Temperatur zu. Bei 4 °C ist er Null und führt damit zu einer Anomalie des Dichteverhaltens von Wasser. Für niedrige Temperaturen lassen sich relativ einfache Formeln für die Temperaturabhängigkeit der Dichte angeben [siehe z.B. HUTTER & TRÖSCH (1975)].

Für die Berechnung der Dichte der Gasphase betrachtet TOUGH die Luft als ein ideales Gas (siehe (2.10)) und addiert dazu die Dichte des Wasserdampfes, wie sie von IFC (1967) angegeben wird (Figur 2.5).



Figur 2.5: Dichte der Gasphase als Funktion von Druck und Temperatur

Im Temperaturbereich bis ca. 100 °C ist die Dichte der Gasphase vorwiegend druckabhängig. Setzt man (2.10) in (2.13) ein, erhält man für die Kompressibilität der Gasphase die einfache Beziehung

$$c_g \approx \frac{1}{p} \tag{2.16}$$

Bei höheren Temperaturen nimmt die Dichte wegen zunehmenden Dampfgehaltes ab.

Ein Vergleich des Dichteverhaltens der flüssigen und der gasförmigen Phase lässt folgende Schlussfolgerungen zu:

- Die Kompressibilität von Wasser ist für viele Anwendungen vernachlässigbar klein und kann als konstant angenommen werden, während die Kompressibilität der Gasphase druckabhängig ist (siehe 2.16) und von ihrem Betrag her nicht vernachlässigt werden darf.

- Die thermische Ausdehnung kann bei Anwendungen mit grossen Temperaturänderungen eine signifikante Rolle spielen (z.B. Geothermie, Wärmeentwicklung in einem Endlager für stark radioaktive Abfälle). Die Anomalie des Dichteverhaltens von Wasser bei 4^0C ist in offenen, stehenden Gewässern von grosser Bedeutung, dürfte aber im Grundwasser irreleveant sein.

2.2.5 Viskosität

Die dynamische Viskosität ist ein Proportionalitätsfaktor, der die zeitliche Änderung der Winkelverformung eines Fluidteilchens mit der Schubspannung verknüpft:

$$\tau = \mu \frac{\partial \gamma}{\partial t} \tag{2.17}$$

wobei

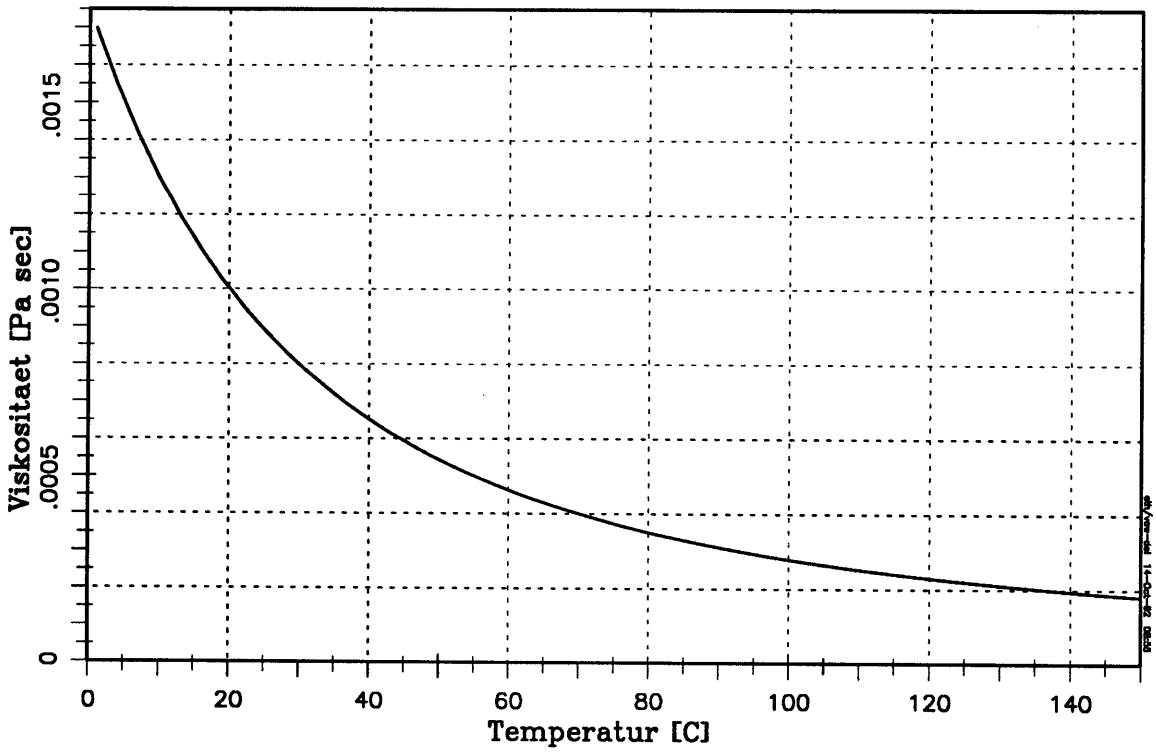
τ	: Schubspannung	$[N\ m^{-2}]$
μ	: dynamische Viskosität	$[kg\ m^{-1}\ s^{-1}]$
$\frac{\partial \gamma}{\partial t}$	: Winkelgeschwindikgkeit	$[s^{-1}]$

Die kinematische Viskosität ist definiert als:

$$\nu = \frac{\mu}{\rho} \tag{2.18}$$

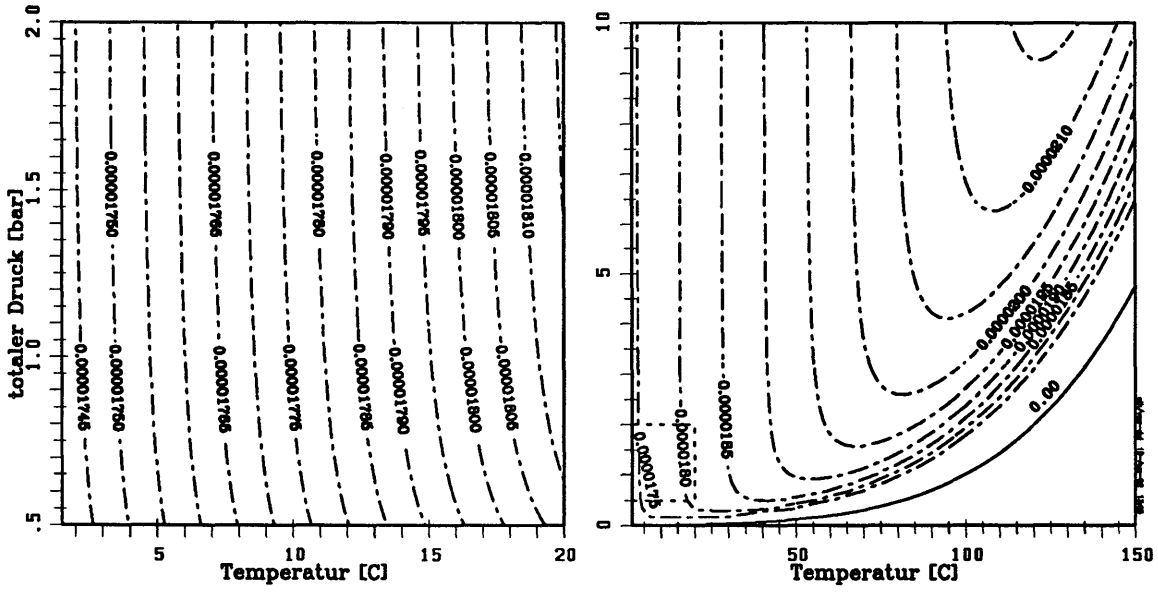
und hat die Einheit eines Diffusionskoeffizienten. Zähigkeit kann somit als eine Impulsdiffusion quer zur Strömungsrichtung aufgefasst werden.

Die Viskosität in der flüssigen Phase ist von der Temperatur abhängig. Je tiefer die Temperatur, desto zähflüssiger das Fluid. Figur 2.6 zeigt die dynamische Viskosität von reinem Wasser als Funktion der Temperatur (IFC 1967).



Figur 2.6: Dynamische Viskosität der flüssigen Phase als Funktion der Temperatur

Die Viskosität der Gasphase zeigt das umgekehrte Verhalten. Mit zunehmender Temperatur nimmt deren Zähigkeit zu. Berücksichtigt man hingegen, dass bei erhöhter Temperatur der Dampfgehalt in der Gasphase zunimmt, ergibt sich bei thermodynamischen Zuständen nahe der Sättigungsdampfdruckkurve eine erneute Reduktion der Viskosität. TOUGH berechnet die Viskosität des Luft-Wasserdampf-Gemisches (Figur 2.7) anhand einer Formel nach HIRSCHFELDER ET AL. (1954) unter Verwendung der Wasserdampfviskosität aus IFC (1967).



Figur 2.7: Dynamische Viskosität der Gasphase als Funktion von Druck und Temperatur

Einfache Formeln zur Berechnung der Viskosität als Funktion der Temperatur finden sich z.B. in DRACOS (1987). Neben der Temperaturabhängigkeit der Viskosität ist vor allem die Tatsache zu beachten, dass die Zähigkeit und somit der Fliesswiderstand im porösen Medium eines Gases rund 75-mal geringer ist als bei einer Flüssigkeit.

2.2.6 Residuale Sättigung, effektive Sättigung

Bevor auf die Kapillarität, die relative Permeabilität und die entsprechenden charakteristischen Kurven eingegangen wird, muss der Begriff der residualen und effektiven Sättigung eingeführt und erläutert werden.

Der Begriff der *residualen Sättigung* $S_{r\beta}$ besagt, dass unterhalb einer bestimmten Sättigung das Fluid kein zusammenhängendes Kontinuum mehr bildet und somit ein Fliessen aufgrund eines Druckgradienten nicht mehr stattfinden kann. Die residuale Sättigung, multipliziert mit der Porosität, beinhaltet somit das von anderen Phasen vollständig eingeschlossene Fluidvolumen. Dieses Volumen ist abhängig von der Porenstruktur, aber auch von der Art und Weise des Verdrängungsvorganges. Residuale Sättigung bedeutet hingegen nicht, dass Werte unterhalb der residualen Sättigung nicht existieren können. Durch einen Phasenübergang (Verdampfen oder Kondensation) oder durch Kompression der Gasphase lassen sich leicht Zustände geringerer Sättigung erklären. Der Sättigungsbereich, innerhalb dessen ein Darcy-Fluss stattfinden kann, ($S_{r\beta} < S_\beta \leq 1$), wird als kohärent bezeichnet. Die residuale Sättigung definiert somit den Übergang von kohärenter zu inkohärenter Phasenverteilung. Bei $S_\beta < S_{r\beta}$ ist die relative Permeabilität der Phase β Null, während die relative Permeabilität der jeweils anderen Phase eine Funktion der Sättigung ist oder den Wert Eins erhält. Die *effektive Sättigung* ist wie folgt definiert:

$$S_{e\beta} = \frac{S_\beta - S_{r\beta}}{1 - S_{r\beta}} \qquad (S_{r\beta} \leq S_\beta \leq 1) \tag{2.19}$$

Bei der Betrachtung der Kapillardruckkurven eines Zweiphasensystems findet sich in zahlreichen Modellen hingegen folgende Definition:

$$S_e = \frac{S_f - S_{rf}}{1 - S_{rf} - S_{rg}} \qquad (S_{rf} < S_f \leq 1 - S_{rg}) \tag{2.20}$$

Die Tatsache, dass die effektive Sättigung unterschiedlich definiert werden kann, je nachdem, ob sich der Begriff auf die relative Permeabilitätsfunktion oder die Kapillardruckkurve bezieht, zeigt deutlich den Modellcharakter der residualen Sättigung, die an eine hydro*mechanische* Betrachtungsweise geknüpft ist. Eine rein physikalische Interpretation ist somit nicht zulässig. Die Definition einer Kapillardruckdifferenz, welche zu einem Massenfluss führt, ist bei inkohärenter Verteilung der flüssigen Phase ($S_f < S_{rf}$) nicht sinnvoll, da dieser Zustand nicht durch einen rein hydromechanischen Prozess (Drainage) herbeigeführt werden kann. Geringere Sättigungen mit höherer Kapillarität - verstanden als Bindungsenergie der Wassermoleküle oder als (Matrix)potential - sind jedoch

durchaus denkbar; sie können z.B. durch Verdunstung der verbleibenden Wassermenge herbeigeführt werden.

Eine ähnliche Schwierigkeit ergibt sich bei der residualen Gassättigung. Als Modellparameter einer Kapillardruckkurve bezeichnet sie den Sättigungsgrad, bei dem die Kapillareffekte verschwinden. Als Modellparameter der relativen Permeabilitätsfunktion entspricht sie dem Sättigungsgrad, bei dem die relative Permeabilität für die Gasphase Null ist. Diese beiden Punkte brauchen hingegen nicht übereinzustimmen. Auf diese Schwierigkeit hat bereits BROOKS & COREY (1966) hingewiesen; sie setzen $S_{rg} = 0$ und nehmen an, dass k_{rg} $(S_f=S_{rf}) = 1$ ist. Damit haben sie eine Einheitlichkeit der Definitionen erreicht. LUCKNER ET AL. (1989) wechseln konsequenterweise von der einen in die andere Definition, ohne jedoch speziell darauf hinzuweisen. Stützt man sich auf die theoretische Herleitung der relativen Permeabilitätsfunktion aus der Kapillardruckkurve, wie dies in Kapitel 2.2.8.3 vorgestellt wird, impliziert dies eine einheitliche Definition der residualen Sättigungen.

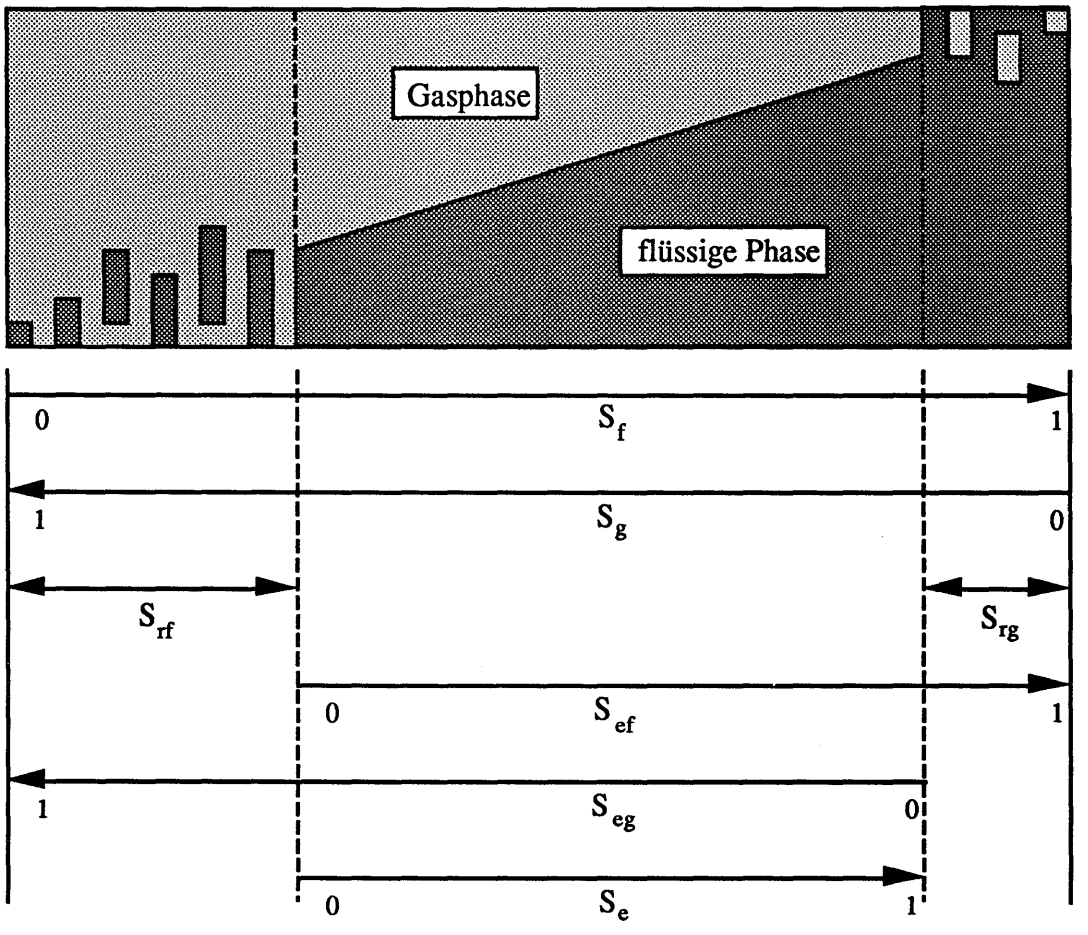
Anstelle einer theoretischen Herleitung besteht die Möglichkeit, die residualen Sättigungen zu messen oder zusammen mit anderen Modellparametern zu schätzen. In den allermeisten Fällen werden sich die geschätzten Werte unterscheiden, je nachdem, ob sie sich auf die Kapillardruckkurve oder auf die relative Permeabilitätsfunktion beziehen. Sie sind dann verstärkt als Parameter mit Modellcharakter zu interpretieren, anhand derer die charakteristischen Kurven an Messdaten angepasst werden.

Die Frage, ob (2.19) oder (2.20) zur Anwendung kommen soll, ist von Fall zu Fall unterschiedlich zu beantworten. Es muss dabei geklärt werden, ob durch Prozesse, die nicht hydromechanischer Natur sind, Sättigungen unterhalb der residualen Sättigung erreicht werden können, und ob diese weitere Reduktion der einen Phase die Fliessverhältnisse in der jeweils anderen Phase beeinflusst. Entspricht z.B. die residuale Gassättigung dem Volumen der Gasphase in einseitig abgeschlossenen Porenräumen, kann die Gassättigung durch Kompression oder Temperaturabsenkung zwar weiter reduziert werden, die Fliessverhältnisse für die flüssige Phase verbessern sich jedoch nicht, sodass deren relative Permeabilität bei residualer Gassättigung den Wert Eins erhält; eine Interpretation der effektiven Sättigung gemäss (2.20) drängt sich auf. Entspricht hingegen die residuale Gassättigung dem Volumen einzelner Gasblasen, die von Flüssigkeit eingeschlossen sind, führt deren allmähliche Reduktion (durch Kompression, Lösung, etc.) zu einer Erhöhung der Anzahl Fliesswege und somit zu einem weiteren Ansteigen der relativen Permeabilität der flüssigen Phase; die effektive Flüssigkeitssättigung ist gemäss (2.19) zu definieren.

Die allgemeinste Darstellung der Problematik findet sich bei LUCKNER ET AL. (1989). Sie definieren die relative Permeabilität im Verhältnis zur Permeabilität eines beliebigen Punktes, der nicht der maximalen Sättigung entsprechen muss. Für die effektive Sättigung wählen sie (2.19) und erhalten somit relative Permeabilitäten, die auch grösser als Eins sein können. PARKER & LENHARD (1987) und LENHARD & PARKER (1987) befassen sich speziell mit der residualen Sättigung des nicht-benetzenden Fluids in einem Dreiphasensystem.

Die oben angegebene Definition der residualen Sättigung, die sich meist auf eine hydromechanische Betrachtung stützt, verliert im Laufe der Diskussion an Eindeutigkeit; residuale Sättigung ist sodann vermehrt als Modellparameter zu interpretieren.

Tabelle 2.1 ist ein Versuch, die Begriffe der residualen und effektiven Sättigung darzustellen und deren unterschiedliche Bedeutung für die Kapillarität und relative Permeabilität aufzuzeigen. Die Abbildung enthält eine schematische Darstellung der Phasenverteilung und der Bereiche, auf die sich die Definitionen der residualen und effektiven Sättigung beziehen. Für die einzelnen Sättigungsbereiche sind unten die entsprechenden Konzepte tabellarisch zusammengestellt.



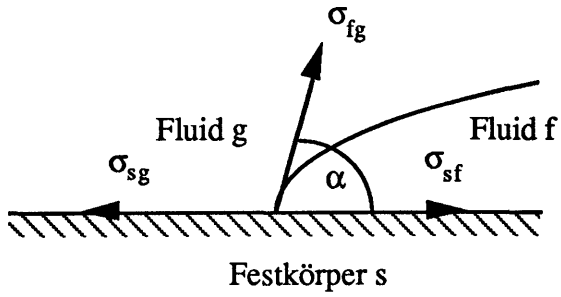
Sättigung	Definition Bereich	rel. Perm. Funktionen	Kapillardruck-kurve
$S_f \leq S_{rf}$	flüssige Phase inkohärent pendularer Bereich	$k_{rf} = 0$ $0 < k_{rg} \leq 1$	$p_c \leq p_{max}$
$S_f > S_{rf}$ $S_g > S_{rg}$	beide Phasen kohärent funikularer Bereich	$0 < k_{rf} < 1$ $0 < k_{rg} < 1$	$0 < p_c \leq p_{max}$
$S_g \leq S_{rg}$	Gasphase inkohärent insularer Bereich	$0 < k_{rf} \leq 1$ $k_{rg} = 0$	$p_c = 0$
S_e	$\frac{S_\beta - S_{r\beta}}{1 - S_{r\beta}}$	$S_{r\beta} \leq S_\beta \leq 1$	-
S_e	$\frac{S_f - S_{rf}}{1 - S_{rf} - S_{rg}}$	-	$S_{rf} < S_f \leq 1 - S_{rg}$

Tabelle 2.1: Definition der residualen und effektiven Sättigung

2.2.7 Kapillarität

2.2.7.1 Kapillarität bei mikroskopischer Betrachtungsweise

Kapillarität ist eine Folge der Grenzflächenspannung σ_{ij}, die überall dort auftritt, wo zwei Phasen (Index i und j) in Berührung kommen. In einem porösen Medium unter Zweiphasenbedingungen wirken somit drei Grenzflächenspannungen σ_{fg}, σ_{sf} und σ_{sg}:



Figur 2.8: Grenzflächenspannungen und Benetzungswinkel

Im Gleichgewicht heben sich die drei Kräfte auf (Gleichung von Young):

$$\sigma_{sg} = \sigma_{sf} + \sigma_{fg} \cdot \cos \alpha \tag{2.21}$$

Daraus ergibt sich der Benetzungs- oder Randwinkel unter Gleichgewichtsbedingungen zu:

$$\alpha = \arccos \left(\frac{\sigma_{sg} - \sigma_{sf}}{\sigma_{fg}} \right) \tag{2.22}$$

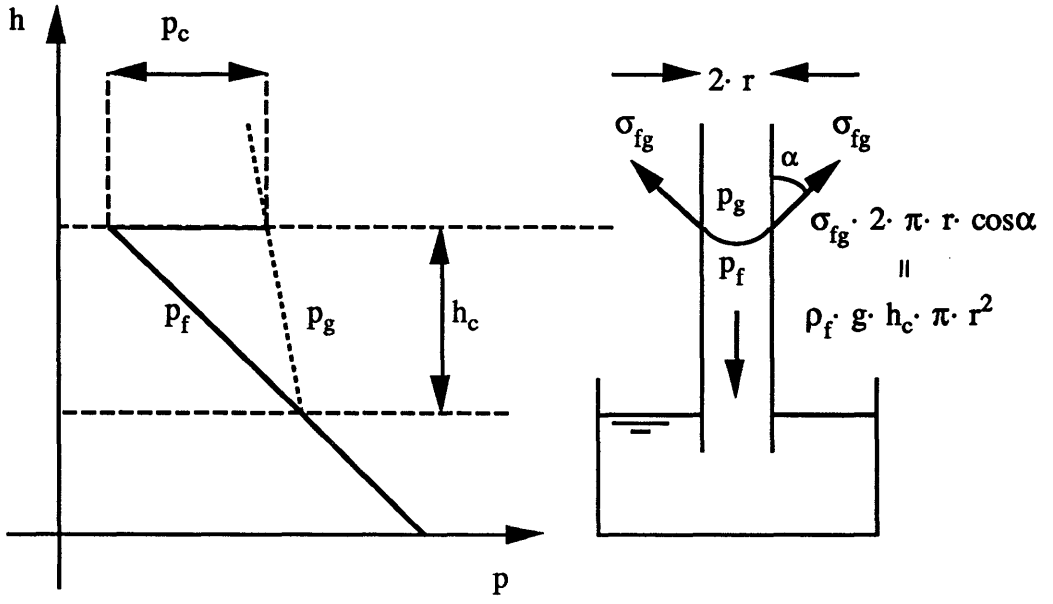
Jenes Fluid, dessen Randwinkel spitz ist, wird das den Feststoff *benetzende* Fluid genannt. Das Fluid mit $\alpha > \pi/2$ wird als *nicht-benetzend* bezeichnet.

In einer Kapillare mit kreisförmigem Querschnitt, die in einen Behälter mit Flüssigkeit eingetaucht ist (Figur 2.9), bildet die Grenzfläche zwischen flüssiger und gasförmiger Phase einen Kugelabschnitt (Meniskus). Die Grenzflächenspannung greift am Umfang an und entspricht dem Betrage nach dem Gewicht der daran hängenden Flüssigkeitssäule. Aus dieser Betrachtung ergibt sich die Laplace-Gleichung der Kapillarität:

$$\rho_f \cdot g \cdot h_c = \frac{2 \cdot \sigma_{fg} \cdot \cos \alpha}{r} \tag{2.23}$$

wobei:

ρ_f	:	Dichte der flüssigen Phase	[kg/m^3]
h_c	:	statische Kapillardruckhöhe	[m]
σ_{fg}	:	Grenzflächenspannung	[N/m]
α	:	Benetzungswinkel	[-]
r	:	Porenradius	[m]
g	:	Erdbeschleunigung	[m^2/s]



Figur 2.9: Kapillare Steighöhe, Kapillardruck

Die Grenzflächenspannung erzeugt eine Druckdiskontinuität am gekrümmten Meniskus; der Kapillardruck ist definiert als die Differenz des Druckes in der nicht-benetzenden Phase und der benetzenden Phase:

$$p_c = p_{nb} - p_b \qquad (2.24)$$

Aus Gleichung 2.24 und der Definition der Benetzbarkeit wird ersichtlich, dass der Kapillardruck stets positiv ist.

SCHIEGG (1979) gibt einen ausgezeichneten Überblick über die Kapillarität bei mikroskopischer Betrachtungsweise für Zwei- und Dreiphasensysteme. Er verweist zudem auf die Abhängigkeit der kapillaren Steighöhe von der Dynamik.

2.2.7.2 Kapillarität bei makroskopischer Betrachtungsweise

Die Krümmung des Meniskus - und somit der Kapillardruck - ist über die Grenzflächenspannungen abhängig vom Chemismus und der Temperatur der beteiligten Phasen. Über den Radius r (oder einen äquivalenten Porenradius r*) in der Laplace-Gleichung ist der Kapillardruck zudem eine Funktion der Porengeometrie. Die jeweilige Lage des Meniskus innerhalb einer Pore bestimmt bei makroskopischer Betrachtung die Sättigung, d.h. den Volumenanteil des Porenraumes, der vom benetzenden oder nicht-benetzenden Fluid eingenommen wird. Die makroskopische Betrachtung der Kapillarität führt auf die sogenannte Kapillardruckkurve, welche die gegenseitige Abhängigkeit von Kapillardruck und Sättigung beschreibt:

$$p_c = p_c(S_f) \tag{2.25}$$

Die experimentelle Bestimmung dieser Beziehung erfordert die exakte Erfassung sowohl des Wassergehaltes als auch der Saugspannung. In SCHIEGG (1980) ist der Aufbau einer entsprechenden Versuchsanordnung im Detail dokumentiert. SCHNEEBELI ET AL. (1990) beschreiben ein Messverfahren zur in situ Bestimmung der Sättigung bei geringen Porositäten und hohen Kapillarkräften, wie sie in granitischen Gesteinen anzutreffen sind. Das Messprinzip zur Erfassung des Matrixpotentials beruht auf der Bestimmung der relativen Luftfeuchtigkeit. Die Kapillarkraft ergibt sich dann aus der Beziehung (2.6). Der experimentelle Aufwand ist sowohl in materieller als auch in zeitlicher Hinsicht beträchtlich. Zahlreiche Autoren haben deshalb versucht, einen funktionalen Zusammenhang zwischen Sättigung und Kapillardruck herzuleiten. Nebst vielen anderen sind wohl die Modelle von LEVERETT (1941), BROOKS & COREY (1964) und VAN GENUCHTEN (1980) die bekanntesten. In diesen Modellen treten Parameter auf, welche die Geometrie des Porenraumes zu erfassen suchen (z.B. Porengrössenverteilung, Vernetzungsgrad des Porenraumes, etc.). Diese Parameter dienen meist als Optimierungsparameter zur Anpassung der Modelle an Messdaten. Eine Alternative besteht darin, die Modellparameter auf einfache messbare Grössen wie die Porosität, die Kationenaustauschkapazität, den Sand- oder Tongehalt zurückzuführen [siehe z.B. RAWLS & BRAKENSIEK (1989)].

Die zentrale Bedeutung einfacher funktionaler Beziehungen zwischen Sättigung und Kapillardruck wird vor allem bei der analytischen Behandlung der Strömung im ungesättigten Bereich ersichtlich, wo zur Lösung der Richards-Gleichung der Speicherkoeffizient $\partial S_\beta/\partial h$ berechnet werden muss. Aber auch die numerische Simulation von Zweiphasenströmungen ist auf die Ableitung der Kapillardruckkurve angewiesen, sofern in den

Kontinuitätsgleichungen der Kapillardruck als die unbekannte Grösse auftritt. TOUGH benutzt die Schreibweise mit der Gassättigung als unbekannte Variable (Kapitel 2.3.6). Der Kapillardruck wird sodann als sekundäre Variable aus der Gassättigung berechnet. Dieses Vorgehen erlaubt es, auch nicht-differenzierbare Kapillardruckkurven zu verwenden. Trotzdem ist eine einfache funktionale Beziehung von Vorteil. TOUGH bietet eine Reihe von parametrisierten Kapillardruckkurven an. Im folgenden seien die Funktionen von Brooks-Corey und van Genuchten vorgestellt.

Van Genuchten's (VG) Kapillardruckkurve gibt in ihrer ursprünglichen Form die effektive Sättigung als Funktion des Kapillardruckes an (VAN GENUCHTEN 1980):

$$S_e(p_c) = \left(1 + |\alpha \cdot p_c|^n\right)^{-m} \tag{2.26}$$

Die Funktion von Brooks-Corey (BC) lautet (BROOKS & COREY 1964):

$$S_e(p_c) = \left(\frac{p_d}{p_c}\right)^{\lambda} \tag{2.27}$$

wobei:

S_e	:	effektive Sättigung	[-]
p_c	:	Kapillardruck = p_g - p_f	[Pa]
n, m	:	VG-Parameter, wobei m = 1 - 1/n	[-]
α	:	VG-Parameter	[Pa^{-1}]
λ	:	BC-Parameter	[-]
p_d	:	BC-Parameter	[Pa]

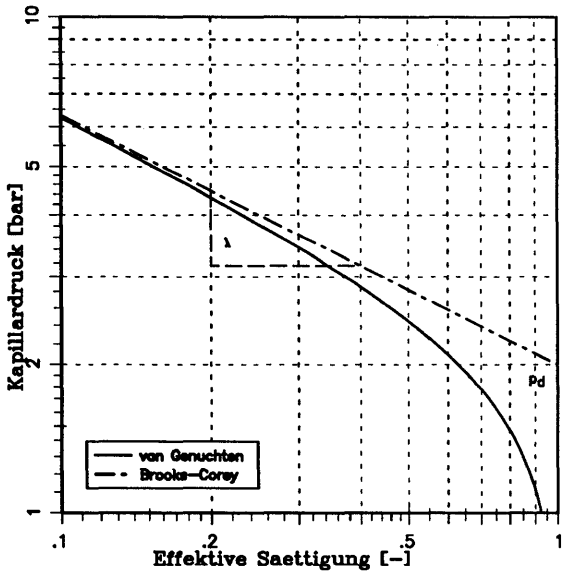


Fig. 2.10a: Bestimmung der Brooks-Corey Parameter λ und p_d

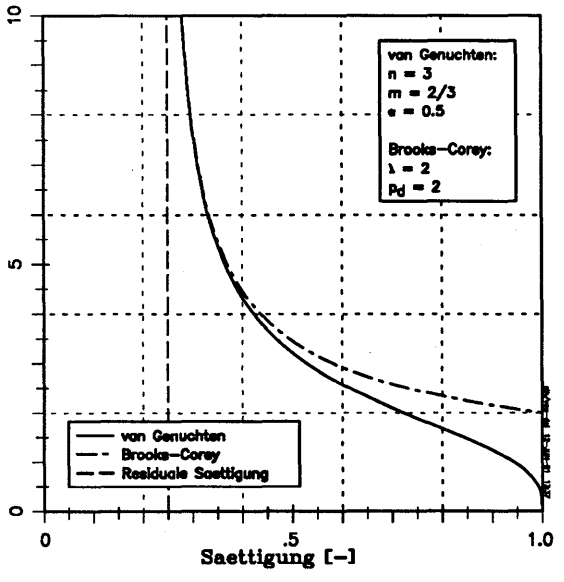


Fig. 2.10b: Kapillardruckkurven

Die Formparameter λ, p_d, n, m und α können auf Kennwerte zurückgeführt werden, welche die Geometrie des Porenraumes charakterisieren. BROOKS & COREY (1964) zeigen, dass experimentelle Daten in einem Kapillardruck-S_e-Diagramm in doppellogarithmischer Darstellung auf eine Gerade zu liegen kommen (Figur 2.10a). Deren negative Steigung λ sowie der Lufteintrittswert $p_d = p_c(S_e=1)$ können als charakteristische Konstanten betrachtet werden. λ liegt typischerweise zwischen 0.2 und 3.0. $\lambda = 0$ würde bedeuten, dass nur eine Porengrösse vorhanden ist. Ein grosser Wert für λ ist demnach für ein schlecht sortiertes Material mit einer grossen Spannweite der Porengrössen charakteristisch. Der Lufteintrittswert p_d entspricht dem minimalen Kapillardruck, der zu einer Verdrängung des nicht-benetzenden Fluids führt. Er ist somit ein Mass für die Pore mit dem maximalen äquivalenten Porenradius. Vergleicht man nun den Ansatz von Brooks-Corey mit demjenigen von van Genuchten (LENHARD ET AL. 1991), erkennt man eine Übereinstimmung der beiden Modelle für Werte nahe der residualen Sättigung, und es lassen sich folgende Beziehungen zwischen den Formparametern ableiten:

$$n \triangleq \lambda + 1 \tag{2.28}$$

$$\alpha \triangleq 1 / p_d \tag{2.29}$$

VAN GENUCHTEN (1980) gibt eine direkte Bestimmung der Formparameter n und α an. Der Parameter m wird meist in Abhängigkeit von n bestimmt ($m = 1 - 1/n$), um eine geschlossenen Integration der Gleichung von Mualem (siehe Kapitel 2.2.8.3) zu ermöglichen.

Dieses Kapitel hat gezeigt, dass die Formparameter theoretisch auf geometrische Kennwerte des Porenraumes zurückgeführt werden können. Im allgemeinen werden sie jedoch durch Anpassung des Modells an Messdaten bestimmt. Sie sind dann wiederum als Modellgrössen zu interpretieren, welche mehr oder weniger losgelöst sind von einer physikalischen oder geometrischen Bedeutung. FUENTES ET AL. (1991) versuchen durch Angabe von Nebenbedingungen eine physikalisch sinnvolle Kapillardruckkurve zu erhalten. Aus Konvergenzüberlegungen erhalten sie die Bedingung $\lambda > 1$ für das Brooks-Corey-Modell sowie $n \cdot m > 1$ für das van Genuchten-Modell.

Im Programm TOUGH wird der Kapillardruck als Funktion der Sättigung benötigt. Der Ausdruck (2.26) nach p_c aufgelöst und n durch m ersetzt ergibt:

$$p_c(S_f) = \frac{1}{\alpha}\left\{\left[\frac{S_f - S_{fr}}{1 - S_{gr} - S_{fr}}\right]^{-1/m} - 1\right\}^{1-m} \qquad (S_{fr} \le S_f \le 1-S_{gr}) \tag{2.30}$$

Die Funktion von Brooks-Corey erhält folgende Form:

$$p_c(S_f) = p_d \cdot \left(\frac{S_f - S_{fr}}{1 - S_{gr} - S_{fr}} \right)^{-1/\lambda} \qquad (S_{fr} \leq S_f \leq 1\text{-}S_{gr}) \qquad (2.31)$$

Die Werte für S_{fr}, S_{gr}, m und α (bzw. p_d und λ) sind die vom Benutzer einzugebenden Parameter.

2.2.7.3 Hysteresis

Die Hysteresis der Kapillardruckkurve lässt sich aus einer mikroskopischen Betrachtung der Form und Lage des Meniskus erklären. Diese ändern sich jeweils je nach Verdrängungsvorgang; sie sind abhängig davon, ob es sich um Drainage oder um Imbibition handelt. Drei Effekte sind im wesentlichen dafür verantwortlich:

- *Randwinkelhysteresis:*
  Die Differenz zwischen dem Vorrück- und dem Rückzugswinkel wird als Randwinkelhysteresis bezeichnet. Ihre Grösse ist vorwiegend abhängig von der Rauhigkeit der Oberfläche und vom Betrag des Winkels [für Details siehe DEMOND & ROBERTS (1991)].

- *Lagehysterersis* :
  Bei variablem Porendurchmesser ändert sich der massgebende Porenradius und somit die Lage des Meniskus innerhalb des Porenganges.

- *Residuale Sättigung:*
  Teile der verdrängten Phase können in abgeschlossenen Porenabschnitten zurückgehalten werden. Das sogenannte *Fingering* führt zudem zum Einschluss gewisser Anteile des verdrängten Fluids und somit zur Bildung einer residualen Sättigung, deren Wert von der Porengeometrie, der Heterogenität sowie dem Verdrängungsvorgang abhängig ist.

Im allgemeinen gilt: Bei Imbibition ist der Randwinkel und der massgebende Porenradius grösser als bei Drainage, der Kapillardruck somit kleiner. Die residualen Sättigungen sind von der Art des Verdrängungsvorganges und der Anzahl der Fliesswechsel abhängig.

Zahlreiche Autoren haben versucht, die Kapillardruckhysteresis in den parametrisierten Modellen zu berücksichtigen [siehe z.B. STAUFFER & DRACOS (1984), MUALEM (1984), KOOL & PARKER (1987)]. Allen Verfahren ist gemeinsam, dass sie - ausgehend von einem bestehenden Kapillardruckmodell - Modifikationen an den Parametern vorschlagen, welche abhängig sind von den Parametern der Hauptdrainage- und Hauptimbibitionskurve sowie von der aktuellen Sättigung beim Fliesswechsel. Als Beispiel sei auf die Arbeit von LUCKNER ET AL. (1989) hingewiesen, die eine Erweiterung des van Genuchten-Modells vorstellt. NIEMI & BODVARSSON (1988) haben ein Modell von Mualem in das Programm TOUGH implementiert und den Einfluss der Hysteresis in einem Kluft-Matrix-System untersucht.

2.2.8 Relative Permeabilität

2.2.8.1 Konduktivität - Permeabilität

Die hydraulische Leitfähigkeit K [m/s], wie sie im Gesetz von Darcy auftritt, ist ein makroskopischer Parameter, der den Fliesswiderstand eines Fluids im porösen Medium repräsentiert. In diesem Koeffizienten ist der Einfluss der Zähigkeit sowie eine Haftbedingung an der Matrixoberfläche miteingeschlossen. Er umfasst also Eigenschaften sowohl des Fluids (Viskosität) als auch des porösen Mediums (Randbedingung in der Kapillare). Für die Behandlung zweier oder mehrere Phasen müssen die einzelnen Beiträge separiert werden:

$$K_\beta = k \cdot k_{r\beta} \cdot \frac{\rho_\beta \cdot g}{\mu_\beta} \qquad (2.32)$$

wobei

K_β	:	hydraulische Leitfähigkeit der Phase β	[m/s]
k	:	absolute Permeabilität	[m^2]
$k_{r\beta}$	:	relative Permeabilität	[-]
ρ_β	:	Dichte der Phase β	[kg/m^3]
g	:	Erdbeschleunigung	[m/s^2]
μ_β	:	dynamische Viskosität der Phase β	[Pa·s]

Die Abhängigkeit der Dichte und der Viskosität von Druck und Temperatur wurde bereits in den Kapiteln 2.2.4 und 2.2.5 behandelt. Das Produkt $k \cdot k_{r\beta}$ wird als *effektive Permeabilität* k_β bezeichnet. Dabei ist k die *absolute Permeabilität*, eine Grösse, welche das poröse Medium charakterisiert; $k_{r\beta}$ ist eine dimensionslose Zahl zwischen 0 und 1, die

von der Phasensättigung S_β abhängig ist und *relative Permeabilität* genannt wird. In den folgenden Kapiteln soll ein funktionaler Zusammenhang zwischen Sättigung und relativer Permeabiltät hergeleitet werden.

2.2.8.2 Relative Permeabilität bei mikroskopischer Betrachtungsweise

Die Abhängigkeit der effektiven Permeabilität von der Sättigung lässt sich erklären, wenn man die Fliesswege der einzelnen Phasen im Porenraum mikroskopisch betrachtet. Mehrere Effekte lassen sich erkennen:

- Der Fliesswiderstand ist abhängig von Form und Grösse der von der Phase β durchflossenen Pore und kann anhand der Gleichung von Poiseuille wie folgt geschrieben werden:

$$k_\beta = \frac{R^2}{c \cdot \mu_\beta} \tag{2.33}$$

  Dabei ist R^2 der hydraulische Radius und c ein Formfaktor. In einer Pore mit variablem Durchmesser muss ein mittlerer hydraulischer Radius und ein mittlerer Formfaktor bestimmt werden. Basierend auf der Laplace-Gleichung der Kapillarität kann man davon ausgehen, dass bei gegebenem Kapillardruck das benetzende Fluid in den engeren und das nicht-benetzende Fluid in den weiteren Poren fliesst. Ansätze für die Bestimmung eines mittleren hydraulischen Radius finden sich in BURDINE (1953) und MUALEM (1976a).

- Gleichung (2.33) gilt für gestreckte Poren mit variablem Radius. Der Einfluss einer gekrümmten Porenachse kann mit Hilfe eines Faktors, der die Tortuosität als Funktion der Sättigung enthält, berücksichtigt werden. Die Tortuosität sei wie folgt definiert:

$$\tau = \frac{L_{eff}}{L} \tag{2.34}$$

  Dabei ist L die gerade Verbindung vom Anfang der Pore bis zu deren Ende, während L_{eff} die effektive Porenlänge - der gekrümmten Porenachse entlang gemessen - darstellt. Der Einfluss der Tortuosität auf die Permeabilität ist ein zweifacher. Einmal ist die tatsächliche Fliessrichtung nicht mit derjenigen identisch, für die das Fliessgesetz formuliert ist. Die Geschwindigkeit muss um den Faktor τ reduziert werden. Der zweite Effekt der Tortuosität bezieht sich auf den Druckgradienten, der über die effektive Porenlänge berechnet werden muss. Die Tortuosität geht somit quadratisch und

umgekehrt proportional in die Bestimmung der Permeabilität ein. Die Abhängigkeit der Tortuosität von der Sättigung wurde von BURDINE (1953) empirisch bestimmt und durch eine einfache Potentialfunktion angegeben.

- Der Fliessquerschnitt, welcher der Phase β zur Verfügung steht, ist direkt proportional zur entsprechenden Sättigung. Dies folgt aus der Annahme, dass das poröse Medium als ein Bündel paralleler, gekrümmter Kapillaren mit variablem Porenradius repräsentiert werden kann.

Diese drei Effekte ergeben eine Abhängigkeit zwischen Sättigung und effektiver Permeabilität; der Zusammenhang kann wegen der Kompliziertheit der Porengeometrie jedoch nur qualitativ beschrieben werden.

2.2.8.3 Relative Permeabilität bei makroskopischer Betrachtungsweise

Eine quantitative Bestimmung der relativen Permeabilität als Funktion der Sättigung ergibt sich aus einer Kombination des Gesetzes von Poiseuille, der Berechnung des mittleren hydraulischen Radius, dem empirischen Ansatz für die Berücksichtigung der Tortuosität und der Reduzierung des Fliessquerschnittes proportional zur Phasensättigung. Die mikroskopischen Ansätze werden über alle diejenigen Poren integriert, die von der jeweiligen Phase eingenommen werden und auf den Zustand bei maximaler Sättigung bezogen:

$$k_{rf} = S_e^{\,A} \left\{ \frac{\int_0^{S_e} \frac{1}{[p_c(S^*)]^B}\, dS^*}{\int_0^{1} \frac{1}{[p_c(S^*)]^B}\, dS^*} \right\}^C \qquad (2.35)$$

$$k_{rg} = (1 - S_e)^A \left\{ \frac{\int_{S_e}^{1} \frac{1}{[p_c(S^*)]^B}\, dS^*}{\int_0^{1} \frac{1}{[p_c(S^*)]^B}\, dS^*} \right\}^C \qquad (2.36)$$

Dabei ist k_{rf} die relative Permeabilität der flüssigen Phase, k_{rg} diejenige der Gasphase, S_e ist die effektive Sättigung, $p_c = p_c(S^*)$ die skalierte Kapillardruckkurve. Die Exponenten A, B und C sind der Tabelle 2.2 zu entnehmen. Man beachte die Integrationsgrenzen der Nenner; sie sind eine Folge der Annahme, dass die Gasphase die grösseren Poren und die flüssige Phase die engeren Poren einnimmt.

	A	B	C
Burdine	2	2	1
Mualem	1/2	1	2

Tabelle 2.2: Exponenten für Gleichung (2.35) und (2.36)

Falls die Kapillardruckkurve in einer Form vorliegt, die analytisch integriert werden kann, lassen sich geschlossene Ausdrücke für die relativen Permeabilitäten herleiten. Das Modell von Brooks-Corey wird im allgemeinen zusammen mit Burdines Theorie benutzt. (2.31) in (2.35) bzw. (2.36) eingesetzt und integriert ergibt:

$$k_{rf} = S_e^{\frac{2+3\lambda}{\lambda}} \tag{2.37}$$

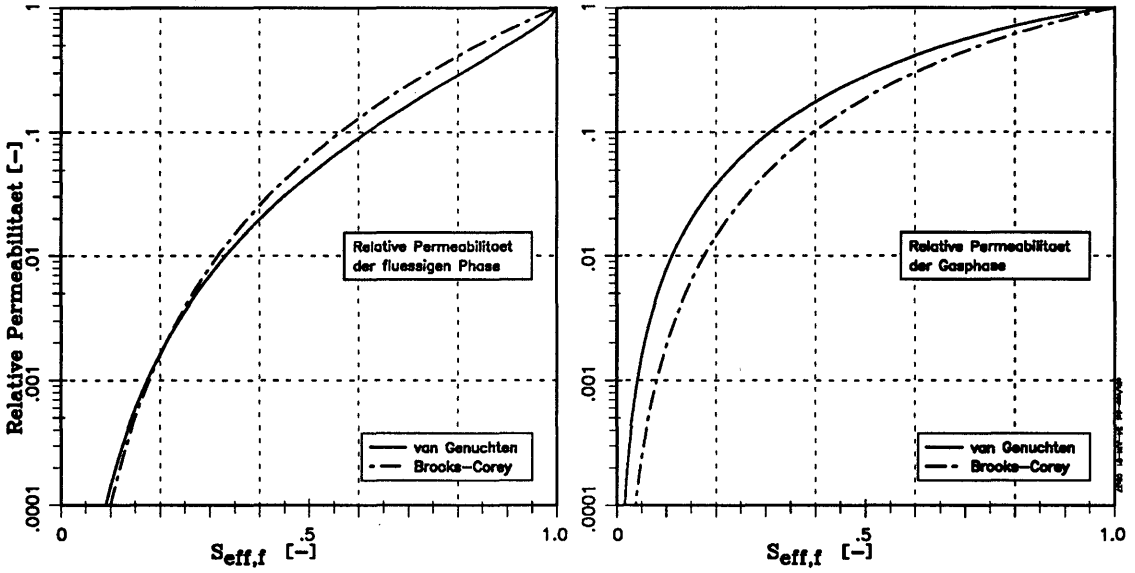
$$k_{rg} = (1 - S_e)^2 \cdot \left(1 - S_e^{\frac{2+\lambda}{\lambda}}\right) \tag{2.38}$$

Van Genuchten zieht den Ansatz von Mualem vor und erhält:

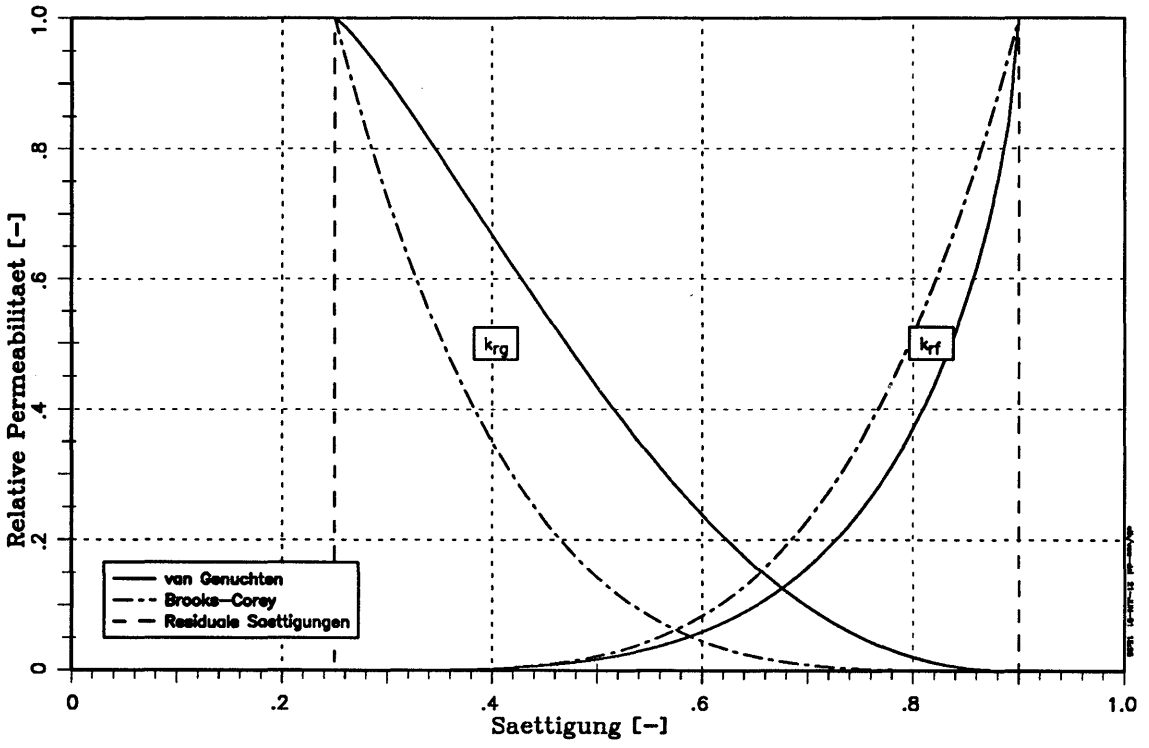
$$k_{rf} = S_e^{\varepsilon} \cdot \left[1 - (1 - S_e^{1/m})^m\right]^2 \tag{2.39}$$

$$k_{rg} = (1 - S_e)^{\gamma} \cdot \left[1 - S_e^{1/m}\right]^{2m} \tag{2.40}$$

Dabei sind ε und γ weitere Formparameter, die den Vernetzungsgrad der Poren charakterisieren (MUALEM 1976b). Im allgemeinen wird $\varepsilon = 1/2$ und $\gamma = 1/3$ gesetzt (LUCKNER ET AL. 1989). Hiermit ist der theoretische Zusammenhang zwischen Kapillarität, Sättigung und relativer Permeabilität gezeigt.



Figur 2.11: Relative Permeabilität als Funktion der effektiven Phasensättigung



Figur 2.12: Relative Permeabilitätsfunktionen

In Figur 2.11 ist die relative Permeabilität der flüssigen und der gasförmigen Phase als Funktion der effektiven Sättigung dargestellt. Figur 2.12 zeigt die relative Permeabilität als Funktion der Flüssigkeitssättigung unter der Annahme, dass $S_{eg} = 1 - S_{ef}$. In beiden

Modellen ist eine relativ starke gegenseitige Beeinflussung der Phasen ersichtlich. Der Sättigungsbereich, in dem beide Phasen einigermassen mobil sind, ist eng begrenzt. In der Nähe der residualen Sättigung reduziert sich die Permeabilität der jeweils anderen Phase beträchtlich. Andere Ansätze gehen davon aus, dass die beiden Phasen weitgehend getrennte Fliesswege einnehmen und sich somit gegenseitig kaum beeinflussen. Für die Gasphase wird vereinfachend $k_{rg} = 1 - k_{rf}$ postuliert [siehe z.B. GRANT (1977)].

Aus obiger Herleitung wird ersichtlich, dass auch die relative Permeabilität einer Hysteresis unterliegen kann. Deren Effekt wird für Zweiphasensysteme im allgemeinen als gering angegeben. In einem Dreiphasensystem und unter bestimmten Randbedingungen können jedoch signifikante Änderungen der Resultate auftreten [siehe z.B. STAUFFER & DRACOS (1984); LENHARD & PARKER (1987); KALUARACHCHI & PARKER (1987)].

Während der funktionale Zusammenhang zwischen relativer Permeabilität und Kapillarität herleitbar ist, kann man oft nicht umhin, die Parameter für die einzelnen Funktionen getrennt zu bestimmen. Dies ist eine Folge der vereinfachenden Annahmen, die der theoretischen Herleitung zugrunde liegen. So werden z.B. isotrope Verhältnisse vorausgesetzt. Im weiteren sei auf die Diskussion über die Definition der effektiven Sättigung verwiesen (siehe Kapitel 2.2.6), die den Modellcharakter der geschätzten Parameter (insbesondere der residualen Sättigung) verdeutlicht hat.

RUSSO ET AL. (1991) beschreiben die Schätzung von VG- und BC-Parametern mittels Inverser Modellierung. Sie kommen zum Schluss, dass starke Korrelationen auftreten und die einzelnen Parameter somit nur sehr schlecht identifizierbar sind. MISHRA & PARKER (1989) bestimmen die VG-Parameter unter Berücksichtigung der Hysteresis und in Kombination mit Transportparametern anhand synthetischer Datensätze. Eine ähnliche Untersuchung wurde von KOOL & PARKER (1988) vorgelegt. Sie benutzen Daten eines synthetischen Infiltrations-Austrocknungs-Experimentes und beurteilen die Identifizierbarkeit der Parameter in Abhängigkeit von Mess- und Modellfehlern. BOND & WIERENGA (1990) schätzen den residualen Wassergehalt aufgrund von Ausbreitungsexperimenten im Labor. JENNINGS ET AL. (1988) bestimmen punktweise Kapillardruckkurven und relative Permeabilitäten durch automatische Modellanpassung an ein Laborexperiment, bei dem der Druckgradient stufenweise erhöht wird.

Diese Literaturauswahl zeigt, dass die Bestimmung der Modellparameter für die relative Permeabilitätsfunktion und die Kapillardruckkurve durch Inverse Modellierung vorwiegend anhand synthetischer Beispiele bzw. von Laborexperimenten mit wohl definierten

Anfangs- und Randbedingungen durchgeführt wird. Die Resultate geben Einblick in die Identifizierbarkeit der einzelnen Parameter. Die Übertragung der geschätzten Parameterwerte auf grossmassstäbliche Modelle mit geänderter Modellstruktur ist jedoch nicht unproblematisch. Eine detaillierte Diskussion zu diesem Thema findet sich in Kapitel 4 dieser Arbeit.

2.2.9 Kompressibilität und thermische Ausdehnung der Matrix

Eine Änderung des Porenwasserdruckes führt zu einer Änderung der effektiven Spannung σ' im Korngerüst und somit zu einer Deformation des Porenraumes [für Details siehe LANG & HUDER (1985)]. Die elastischen Eigenschaften eines Volumenelementes V können unter Vernachlässigung der Querdeformationen durch ein lineares Gesetz beschrieben werden:

$$\alpha = -\frac{1}{V}\frac{\partial V}{\partial \sigma'} \tag{2.41}$$

Nimmt man an, dass die Matrix selber inkompressibel ist, geht die Volumenänderung vollständig zulasten bzw. zugunsten des Porenraumes und man erhält für die relative Änderung der Porosität als Folge einer Druckänderung die Beziehung

$$c_\phi = \frac{1}{\phi}\frac{\partial \phi}{\partial p} = \alpha\frac{1-\phi}{\phi} \tag{2.42}$$

Das spezifische Speichervermögen des porösen Mediums lässt sich wie folgt angeben:

$$S = \rho_f \cdot g \cdot \phi \cdot \left(S_g \cdot c_g + S_f \cdot c_f + c_\phi \right) \tag{2.43}$$

Aus dieser Formel wird ersichtlich, dass bereits bei relativ geringer Gassättigung S_g die Speicherkapazität des porösen Mediums wegen der hohen Kompressibilität der Gasphase c_g sehr gross sein kann, während in einem gespannten, wassergesättigten Grundwasserleiter sowohl die Kompressibilität der flüssigen Phase c_g als auch des Korngerüstes c_ϕ berücksichtigt werden muss. Der Speicherkoeffizient als wichtiger Schätzparameter bei der Auswertung herkömmlicher hydraulischer Tests erhält unter Zweiphasenbedingungen eine zusätzliche Bedeutung, da er u.U. Aufschluss über das Vorhandensein einer freien Gasphase geben kann. Bei bekannter Porosität und Druckverhältnissen kann mit Hilfe der Gleichung (2.43) eine grobe Abschätzung der Gassättigung vorgenommen werden.

Das Porenvolumen kann zusätzlich durch Temperaturänderungen beeinflusst werden. Eine relative Änderung der Porosität sei proportional zu einem thermischen Ausdehnungskoeffizienten, der folgendermassen definiert ist:

$$\varepsilon = \frac{1}{\phi}\frac{\partial \phi}{\partial T} \tag{2.44}$$

Hiermit ist der Überblick über die vom Simulationsprogramm TOUGH berücksichtigten physikalischen Prozesse abgeschlossen. Es sei nochmals darauf hingewiesen, dass die Konzepte, welche der mathematischen Beschreibung der Zweiphasenströmung zugrunde liegen, ausgesprochenen Modellcharakter aufweisen. Inverse Modellierung stellt ein Versuch dar, das Modellkonzept mit den natürlichen Verhältnissen - repräsentiert durch einzelne Beobachtungsdaten - in Beziehung zu setzen. Ein sorgfältiger Modellaufbau ist Voraussetzung dafür, dass dieser Versuch einer Naturerklärung mittels eines mathematisch-numerischen Modells gelingen kann.

2.3 Mathematische Beschreibung der Zweiphasenströmung

2.3.1 Erhaltungsgleichungen

In diesem Kapitel sollen die Grundlagen zur mathematischen Beschreibung von Zweiphasenströmungen im porösen Medium gegeben werden. Es gilt die kontinuumsmechanischen Grundgleichungen aufzustellen, welche die Masse, den Impuls und die Energie bilanzieren. Für jede betrachtete Komponente wird eine Kontinuitätsgleichung formuliert. Die Impuls- oder Bewegungsgleichung führt im porösen Medium unter Zweiphasenbedingungen zum Verallgemeinerten Darcy-Gesetz. Die Energiegleichung behandelt die konduktive und konvektive Wärmeübertragung. Es entstehen somit drei Erhaltungsgleichungen des Typs (2.45) - je eine für die Komponente Wasser und Luft sowie eine für die Wärmeenergie -, welche mit Hilfe eines geeigneten numerischen Verfahrens (siehe Kapitel 2.4) gelöst werden müssen:

$$\frac{d}{dt}\int_V M^k dv = \int_\Gamma \mathbf{F}^k \cdot \mathbf{n}\, d\Gamma + \int_V q^k\, dv \qquad (2.45)$$

Der Index k steht hier für die Komponenten Luft, Wasser sowie für die Wärmeenergie. M^k ist der Massen- bzw. Wärmeanreicherungsterm, $\mathbf{F}^k$ der Massen- bzw. Wärmeflussterm und q^k der Quellen- und Senkenterm. $\mathbf{n}$ ist ein Einheitsvektor, der senkrecht auf dem Gebietsrand steht. Die Gleichung besagt, dass die zeitliche Änderung der Masse M^k in einem Gebiet mit dem Volumen V der Summe der Zu- und Wegflüsse $\mathbf{F}^k$ über den Gebietsrand Γ und den Quellen und Senken innerhalb des betrachteten Gebietes entspricht.

In den folgenden Kapiteln werden die einzelnen Terme, wie sie dem Simulationsprogramm TOUGH zugrunde liegen, behandelt. Es sind dies Ausdrücke für die Massen- bzw. Wärmeanreicherung, die Flussterme mit dem Verallgemeinerten Darcy-Gesetz für den konvektiven Teil, das Fick'sche Gesetz für die Diffusion in der Gasphase, ein Transportgesetz für die Wärme sowie die Quellen- und Senkenterme. Die drei resultierenden Bilanzgleichungen sind sodann in Kapitel 2.3.5 zusammengefasst.

2.3.2 Anreicherungsterme

2.3.2.1 Massenanreicherung

Die Masse der Komponente κ ist die Summe der Massen der beiden Phasen multipliziert mit dem entsprechenden Massenanteil. Das Produkt $\phi \cdot S_\beta$ entspricht dem Volumen, das von der Phase β eingenommen wird:

$$M^\kappa = \phi \sum_{\beta=f,g} S_\beta \cdot \rho_\beta \cdot X_\beta^\kappa \tag{2.46}$$

Dichte und Massenanteil sind nicht-lineare Funktionen von Druck und Temperatur (siehe Kapitel 2.2)

2.3.2.2 Wärmeanreicherung

Wärme wird sowohl im Korngerüst als auch in den Fluiden gespeichert:

$$M^E = (1 - \phi) \cdot \rho_M \cdot C_M \cdot T + \phi \sum_{\beta=f,g} S_\beta \cdot \rho_\beta \cdot u_\beta \tag{2.47}$$

wobei

ϕ	: Porosität	[-]
ρ_M	: Dichte der Matrix	[kg/m^3]
C_M	: spezifische Wärme der Matrix	[J/kg·K]
T	: Temperatur	[K]
S_β	: Sättigung der Phase β	[-]
ρ_β	: Dichte der Phase β	[kg/m^3]
u_β	: innere Energie der Phase β	[J/kg]

Die spezifische innere Energie ist gleich der spezifischen Enthalpie abzüglich der spezifischen Druckenergie:

$$u_\beta = h_\beta - p/\rho_\beta \tag{2.48}$$

Enthalpie und Dichte sind wiederum Funktionen des thermodynamischen Zustandes.

2.3.3 Flussterme

2.3.3.1 Massenfluss

Der Massenfluss der Komponente κ (= Stofffluss) besitzt einen advektiven und einen diffusiven Anteil. Der advektive Fluss ist die Summe der einzelnen Phasenflüsse multipliziert mit dem jeweiligen Massenanteil der Komponente κ. Daraus ergibt sich:

$$F^{\kappa} = \sum_{\beta=f,g}(F_{\beta}\cdot X_{\beta}^{\kappa}) + F_{diff}^{\kappa} = \sum_{\beta=f,g}F_{\beta}^{\kappa} + F_{diff}^{\kappa} \qquad (2.49)$$

Der Massenfluss der Phase β aufgrund eines Druckgradienten und der Gravitation wird durch das *Verallgemeinerte Gesetz von Darcy* beschrieben:

$$F_{\beta} = -k\cdot\frac{k_{r\beta}\cdot\rho_{\beta}}{\mu_{\beta}}\left(\nabla p_{\beta} - \rho_{\beta}\cdot g\right) \qquad (2.50)$$

Das *Fick'sche Gesetz* beschreibt den diffusiven Massenfluss in der Gasphase. In TOUGH wird nur die Diffusion in der Gasphase berücksichtigt:

$$F_{diff}^{\kappa} = -D_{DL}\cdot\rho_{g}\cdot\nabla X_{g}^{\kappa} \qquad (2.51)$$

Die treibende Kraft ist dabei der Konzentrationsgradient ∇X_g^{κ}. Aus der Beziehung

$$X_{g}^{W} = 1 - X_{g}^{L} \qquad (2.52)$$

folgt, dass ein massengleicher Austausch von Wasserdampf und Luft stattfindet:

$$F_{diff}^{L} = -F_{diff}^{W} \qquad (2.53)$$

Diese Art von Diffusion wird auch *Binäre Diffusion* genannt. Aufgrund des unterschiedlichen molekularen Gewichts der beiden Komponenten führt der Diffusionsprozess zu Druckänderungen, die ihrerseits durch einen Darcy-Fluss gemäss (2.50) kompensiert werden [für Details siehe THORSTENSON & POLLOCK (1989); FINSTERLE ET AL. (1990a)].

Der Diffusionskoeffizient für Wasserdampf-Luft-Gemische kann wie folgt als Funktion der Temperatur und Sättigung geschrieben werden (PRUESS 1987):

$$D_{DL} = D_{DL}^{0}\cdot\frac{\phi\cdot S_{g}\cdot p_{0}}{\tau\cdot p}\left(\frac{T}{T_{0}}\right)^{\theta} \qquad (2.54)$$

Dabei ist D^0_{DL} der Diffusionskoeffizient bei $p_0 = 1$ bar und $T_0 = 273.15$ K. Er beträgt für Wasserdampf-Luft-Gemische ca. $2.13 \cdot 10^{-5}$ m^2/s. Für den Exponenten θ wird der Wert 1.8 empfohlen (PRUESS 1987).

2.3.3.2 Wärmefluss

Der Wärmefluss enthält einen konduktiven und einen konvektiven Anteil:

$$F^E = -K\nabla T + \sum_{\beta=f,g} \sum_{\kappa=L,W} h^{\kappa}_{\beta} \cdot F^{\kappa}_{\beta} \qquad (2.55)$$

Dabei ist $h^{\kappa}_{\beta}\left[\frac{J}{kg}\right]$ die spezifische Enthalpie der Komponente κ in der Phase β. $K\left[\frac{J}{s \cdot m \cdot K}\right]$ ist eine gemittelte Wärmeleitfähigkeit des teilweise gesättigten porösen Mediums. Deren Wert hängt von der Porosität und der Sättigung ab. Näherungsformeln werden vom Programm TOUGH angeboten (PRUESS 1987).

2.3.4 Quellen und Senken

Der Quellen- bzw. Senkenterm behandelt die Injektion und Entnahme einzelner Komponenten bzw. von Energie. Bei der Injektion muss eine - eventuell zeitabhängige - Injektionsrate angegeben werden; sie bezieht sich auf die Masse der Komponente Wasser oder Luft [kg/s] bzw. auf eine Wärmeenergie [J/s]. Bei Masseninjektion kann zudem die spezifische Enthalpie [J/kg] des injizierten Fluids vorgegeben werden. Der Phasenzustand der injizierten Komponente ist bestimmt durch den thermodynamischen Zustand am Injektionsort unter der Annahme, dass Gleichgewichtsbedingungen herrschen. Im Gegensatz dazu kann bei einer Entnahme nicht direkt bestimmt werden, welche der beiden Komponenten dem System entnommen wird. Die Produktionsrate in [kg/s] bezieht sich auf die totale Masse eines Phasengemisches. Die Zusammensetzung des produzierten Gemisches bestimmt sich nach der Mobilität der einzelnen Phasen am Entnahmeort; sie ist somit eine Funktion der relativen Permeabilität und des Viskositätsverhältnisses in unmittelbarer Nähe der Entnahmestelle. Die Anteile der einzelnen Komponenten in den beiden Phasen sowie die Enthalpie des produzierten Phasengemisches bestimmen sich wiederum aufgrund des thermodynamischen Zustandes am Entnahmeort. Soll dem System nur Wärmeenergie entnommen werden - z.B. durch einen Wärmetauscher - wird dies durch eine Produktionsrate in [J/s] angegeben.

2.3.5 Bilanzgleichungen: Zusammenfassung

Gleichungen (2.46) - (2.55) in (2.45) eingesetzt ergibt für die drei Bilanzgleichungen folgende Ausdrücke:

Komponente Luft: (2.56a)

$$\frac{d}{dt}\int_V \phi \sum_{\beta=f,g} S_\beta \cdot \rho_\beta \cdot X_\beta^L \, dv =$$

$$\int_\Gamma \left[\sum_{\beta=f,g} -k \frac{k_{r\beta}}{\mu_\beta} \rho_\beta \cdot X_\beta^L \cdot (\nabla p_\beta - \rho_\beta \cdot g) - \delta_{\beta g} \cdot D_{DL} \cdot \rho_\beta \cdot \nabla X_\beta^L \right] \cdot n \, d\Gamma + \int_V q^L \, dv$$

Komponente Wasser: (2.56b)

$$\frac{d}{dt}\int_V \phi \sum_{\beta=f,g} S_\beta \cdot \rho_\beta \cdot X_\beta^W \, dv =$$

$$\int_\Gamma \left[\sum_{\beta=f,g} -k \frac{k_{r\beta}}{\mu_\beta} \rho_\beta \cdot X_\beta^W \cdot (\nabla p_\beta - \rho_\beta \cdot g) - \delta_{\beta g} \cdot D_{DL} \cdot \rho_\beta \cdot \nabla X_\beta^W \right] \cdot n \, d\Gamma + \int_V q^W \, dv$$

Wärmeenergie: (2.56c)

$$\frac{d}{dt}\int_V (1 - \phi) \cdot \rho_M \cdot C_M \cdot T + \phi \sum_{\beta=f,g} S_\beta \cdot \rho_\beta \cdot u_\beta \, dv =$$

$$\int_\Gamma \left[-K \nabla T + \sum_{\beta=f,g} \sum_{\kappa=L,W} h_\beta^\kappa \cdot F_\beta^\kappa \right] \cdot n \, d\Gamma + \int_V q^E \, dv$$

wobei das $\delta_{\beta g}$ den Wert 1 annimmt, falls $\beta = g$ und den Wert 0, falls $\beta = f$.

2.3.6 Primäre thermodynamische Variablen

In den drei Kontinuitätsgleichungen (2.56) dürfen drei Variablen als unbekannte Grössen auftreten; sie werden im folgenden primäre thermodynamische Variablen genannt. Die Wahl der primären Variablen hängt vom jeweiligen Phasenzustand ab. In einem Zweiphasensystem seien die drei Variablen der Druck in der Gasphase, die Gassättigung und

die Temperatur. Handelt es sich hingegen um ein Einphasensystem, fällt die Gassättigung als Variable ausser Betracht, da deren Wert bekannt ist ($S_g = 0$ oder $S_g = 1$). Als neue Unbekannte tritt der Massenanteil der Luft auf. Durch den Variablentausch (siehe Tabelle 2.3) ist der aktuelle Phasenzustand in einem System jederzeit erkennbar.

Phasenzustand	primäre Variable		
	#1	#2	#3
eine Phase	p_g	T	X_β^L
zwei Phasen	p_g	S_g	T

Tabelle 2.3: Primäre thermodynamische Variablen

Im weiteren sind ergänzende Gleichungen zu formulieren, welche die Koeffizienten der Transportgleichung als Funktionen der primären Variablen ausdrücken. Diese Beziehungen wurden in den vorangegangenen Kapiteln im Detail erläutert. Es sind dies u.a. die charakteristischen Kurven (Kapillardruck und relative Permeabilität); aber auch die Abhängigkeit der Fluideigenschaften von Druck und Temperatur sowie die Nebenbedingungen (2.2) und (2.4) gehören zu den sekundären Gleichungen. Die drei Kontinuitätsgleichungen (2.56) sind somit stark gekoppelt und hochgradig nicht-linear.

Es sei darauf hingewiesen, dass auch andere Variablenkombinationen möglich sind. Oft wird anstelle der Gassättigung der Kapillardruck als unbekannte Grösse eingesetzt. Die entsprechenden Differentialgleichungen finden sich z.B. in PEACEMAN (1977).

2.4 Numerisches Verfahren

2.4.1 Integrierte Finite Differenzen

In diesem Kapitel wird die Lösung der Kontinuitätsgleichungen (2.56) mit Hilfe der "Integrated Finite Difference Method" (IFDM) vorgestellt. Die IFDM ist in NARASIMHAN & WITHERSPOON (1976) und PRUESS (1987) kurz beschrieben. Die numerische Lösung einer partiellen Differentialgleichung mit der Methode der Finiten Differenzen basiert auf der Ersetzung der partiellen Ableitungen durch Differenzenquotienten. Das Untersuchungsgebiet wird räumlich in N genügend kleine Einheiten unterteilt. Für jedes Element werden die drei Kontinuitätsgleichungen unter Berücksichtigung der Anfangs- und Randbedingungen ausgewertet. Die Zeit wird ebenfalls durch Differenzenquotienten diskretisiert. Dies führt pro Zeitschritt zu einem Gleichungssystem mit 3·N nicht-linearen algebraischen Gleichungen, die durch ein geeignetes Verfahren gelöst werden müssen.

2.4.2 Räumliche Diskretisierung

Das Volumenintegral in (2.45) kann wie folgt ersetzt werden:

$$\int_{V_n} M^k dv = V_n \cdot M_n^k \tag{2.57}$$

Dabei ist M^k eine extensive, auf das Einheitsvolumen bezogene Grösse, und M_n^k ist der Mittelwert von M^k im Volumen V_n. In analoger Weise kann das Oberflächenintegral durch eine Summe diskreter Zuflüsse über M Randsegmente der Fläche A_{nm} approximiert werden:

$$\int_{\Gamma_n} F^k \cdot n \, d\Gamma = \sum_{m=1}^{M} A_{nm} \cdot F_{nm}^k \tag{2.58}$$

Als Beispiel sei die Verallgemeinerte Darcy-Gleichung in diskretisierter Form dargestellt:

$$\left(F_\beta^\kappa\right)_{nm} = -k_{nm} \cdot \left(\frac{k_{r\beta} \cdot \rho_\beta}{\mu_\beta}\right)_{nm} \cdot \left(X_\beta^\kappa\right)_{nm} \cdot \left[\frac{p_{\beta n} - p_{\beta m}}{D_{nm}} - \left(\rho_\beta\right)_{nm} \cdot B_{nm} \cdot g\right] \tag{2.59}$$

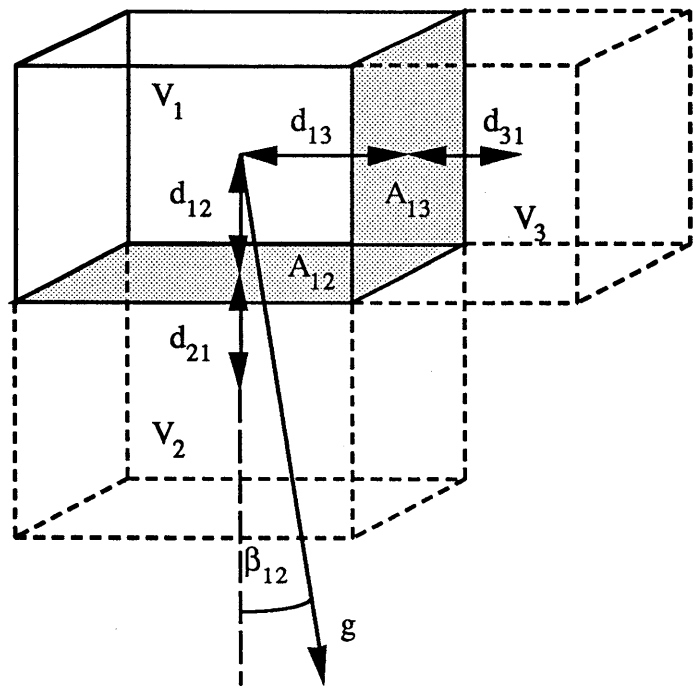
Der Index *nm* besagt, dass die entsprechenden Werte an der Schnittstelle zwischen den Elementen *n* und *m* bestimmt werden müssen, basierend auf den Mittelwerten in den

Elementen selbst. Dabei muss eine geeignete Gewichtung vorgenommen werden. Die in (2.59) eingehende Permeabilität z.B. ist wie folgt zu bestimmen:

$$k_{nm} = \lambda \cdot k_n + (1 - \lambda) \cdot k_m \qquad (2.60)$$

Dabei stellt λ ein Wichtungsfaktor dar. Beim sogenannten "*upstream weighting*" wird λ so gewählt, dass die in Strömungsrichtung oben liegende Permeabilität voll oder zumindest stärker gewichtet wird. PRUESS & NARASIMHAN (1985) diskutieren verschiedene Gewichtungsprozeduren (harmonische Mittelung, räumliche Interpolation, upstream weighting). Sie kommen zum Schluss, dass für verschiedene zu gewichtende Grössen unterschiedliche Verfahren zu verwenden sind. Für eine vollständige Erfassung der Geometrie sind also folgende Angaben nötig:

V_n	:	Volumen des Elementes n, Knoten n enthaltend	[m^3]
A_{nm}	:	Kontaktfläche zwischen Element n und m	[m^2]
D_{nm}	:	Abstand der Knoten n und m	[m]
		$D_{nm} = d_{nm} + d_{mn}$	
d_{nm}	:	senkrechter Abstand des Knotens n von der Kontaktfläche A_{nm}	[m]
d_m	:	senkrechter Abstand des Knotens m von der Kontaktfläche A_{nm}	[m]
B_{nm}	:	Kosinus des Winkels zwischen Erdbeschleunigungsvektor **g** und der Verbindungslinie zwischen Knoten n und m	[-]



Figur 2.13: Definition der Geometrie

Bei dieser Definition der Geometrie existiert kein Bezug zu einem globalen Koordinatensystem. Die Elemente werden nur in ihrer relativen Lage zueinander erfasst. Ein Vorteil dieser Darstellung besteht darin, dass die algebraischen Gleichungen in ihrer diskreten Form für ein-, zwei- und dreidimensionale Strömungen gelten. Die Gleichungen sind zudem in der Integralform sehr anschaulich: der Massenfluss hat eine ausgezeichnete Richtung und bezieht sich auf eine wohl definierte Querschnittsfläche; einem Knoten kann stets ein Volumen zugeordnet werden, in dem ein thermodynamisches Gleichgewicht herrscht; die räumlichen Gradienten werden aus einfachen Differenzen gebildet und beziehen sich auf die Verbindungslinie zweier Elemente. Als Nachteil ergibt sich, dass Interpolationsansätze höherer Ordnung nicht vorgesehen sind und somit feiner diskretisiert werden muss, um eine gewünschte Genauigkeit zu erreichen. Im weiteren können keine tensoriellen Grössen verarbeitet werden, da diese die Berechnung tangentialer Gradienten entlang einer Referenzfläche erfordern. Eine Anisotropie der Durchlässigkeit kann somit nur definiert werden, wenn die Richtung der Hauptachsen mit den Verbindungslinien zwischen den einzelnen Knoten übereinstimmt. Die Beschränkung der Fliessrichtung auf die Kontaktflächennormalen erzeugt zudem numerische Dispersion.

2.4.3 Zeitliche Diskretisierung

Die Zeit wird in TOUGH als voll implizite finite Differenz erster Ordnung diskretisiert, um ein Höchstmass an numerischer Stabilität zu erreichen. Die räumlich und zeitlich diskretisierten Bilanzgleichungen lassen sich nun wie folgt anschreiben:

$$R_n^{\kappa\,(k+1)} \equiv M_n^{\kappa\,(k+1)} - M_n^{\kappa\,(k)} - \frac{\Delta t}{V_n}\left[\sum_{m=1}^{M} A_{nm}\cdot F_{nm}^{\kappa\,(k+1)} + V_n\cdot q_{nm}^{\kappa\,(k+1)}\right] = 0 \qquad (2.61)$$

Dabei bezieht sich der Index k auf den Zeitschritt mit $\Delta t = t^{k+1} - t^k$. Die Residuen R_n^{κ} ergeben sich aus der Massenbilanz zwischen zwei Zeitpunkten k und (k+1). Dabei ist M_n^{κ} die Menge der Komponente κ, welche im Volumenelement *n* vorhanden ist. Wegen der Massenerhaltung müssen die Residuen verschwinden.

Für ein Gebiet, das in N Elemente aufgeteilt ist, erhält man pro Zeitschritt 3·N Gleichungen des Typs (2.61). Diese sind wegen der gegenseitigen Abhängigkeit von Massen- und Wärmefluss stark gekoppelt. Der (physikalischen) Kopplung wird dadurch Rechnung getragen, dass alle 3·N algebraischen Gleichungen simultan gelöst werden.

2.4.4 Behandlung der Nichtlinearität

Das Gleichungssystem (2.61) ist hochgradig nicht-linear. Einerseits sind die Kopplungsterme nicht-lineare Funktionen, andererseits findet bei einem Phasenübergang eine Änderung der primären Variablen (vgl. Tabelle 2.3) mit entsprechenden Sprüngen in den dazugehörigen Koeffizienten statt. Die Nichtlinearität wird mit Hilfe des Newton-Raphson-Verfahrens behandelt. Das Newton-Raphson-Verfahren zeichnet sich durch eine quadratische Konvergenzrate aus. Als Näherungslösung dient jeweils der Zustand des vorangegangenen Zeitschrittes; sie liegt im allgemeinen innerhalb des Konvergenzradius. Beim Newton-Raphson-Verfahren werden die Fehlergleichungen (2.61) in einer mehrdimensionalen Taylorreihe erster Ordnung entwickelt:

$$\mathbf{R}_{p+1} \approx \mathbf{R}_p + \mathbf{J}_p \cdot \Delta\mathbf{X} + \ldots \tag{2.62}$$

Dabei bezeichnet $\mathbf{X}$ den Vektor der primären Variablen mit den Komponenten x_i, wobei der Index i Werte von (i = 1,..., 3·N) durchläuft. $\Delta\mathbf{X}$ ist gleich $\mathbf{X}_{p+1} - \mathbf{X}_p$. Der Index p bezeichnet eine Iteration im Newton-Raphson Verfahren. Die Jacobimatrix $\mathbf{J}$ ist wie folgt definiert:

$$\mathbf{J}_p = \left(\frac{\partial \mathbf{R}}{\partial \mathbf{X}}\right)_p \tag{2.63}$$

Die Koeffizienten der Jacobimatrix $\partial R_i/\partial x_j$ werden durch numerische Differentiation bestimmt:

$$J_{ij} = \frac{\partial R_i}{\partial x_j} \approx \frac{R_i(x_j + \Delta x_j) - R_i(x_j)}{\Delta x_j} \tag{2.64}$$

wobei $\Delta x_j = x_j \cdot \delta$ mit $\delta \approx 10^{-8}$. Für die Fehlergleichung der Komponente κ im Element n zum Zeitschritt (k+1) ergibt sich folgender Ausdruck:

$$R_{n\,(p+1)}^{\kappa\,(k+1)} \approx R_{n\,(p)}^{\kappa\,(k+1)} + \sum_{i=1}^{3\cdot N} \frac{\partial R_n^{\kappa\,(k+1)}}{\partial x_i}\Big|_p \cdot (x_{i\,(p+1)} - x_{i\,(p)}) \tag{2.65}$$

Gleichung (2.65) repräsentiert ein lineares Gleichungssystem der Variable $x_{i\,(p+1)}$ bzw. Δx. Der Lösungsvektor berechnet sich aus:

$$\mathbf{X}_{p+1} = \mathbf{X}_p - \mathbf{J}(\mathbf{X}_p)^{-1} \cdot \mathbf{R}(\mathbf{X}_p) \tag{2.66}$$

Es muss also das Gleichungssystem

$$\mathbf{J}(\mathbf{X}_p)\cdot\Delta\mathbf{X}_p = -\mathbf{R}(\mathbf{X}_p) \tag{2.67}$$

für ΔX_p gelöst und abschliessend

$$\mathbf{X}_{p+1} = \mathbf{X}_p + \Delta\mathbf{X}_p \tag{2.68}$$

berechnet werden.

Das Gleichungssystem (2.67) wird mittels eines direkten Algorithmus gelöst. Als Abbruchkriterium für die Newton-Raphson Iterationen dient das Verhältnis der Residuen zu den Anreicherungstermen:

$$\left|\frac{R^{\kappa\,(k+1)}_{n\,(p+1)}}{M^{\kappa\,(k+1)}_{n\,(p+1)}}\right| \leq \varepsilon \approx 10^{-5} \tag{2.69}$$

2.4.5 Anfangs- und Randbedingungen

Bei einer instationären Simulation muss der Anfangszustand in jedem Berechnungspunkt durch die Angabe der drei primären Variablen definiert werden. Durch die Wahl der Variablen wird bestimmt, ob nur eine Phase oder zwei Phasen vorliegen. Bei Einphasenpunkten sind die Restriktionen hinsichtlich des maximal möglichen Massenanteils zu beachten, wie dies in Kapitel 2.2.3 erläutert wurde.

Das Konzept für die Definition der Randbedingungen basiert auf einer physikalischen Betrachtungsweise. Eine Dirichlet Randbedingung wird durch die Zuweisung eines sehr grossen Elementvolumens definiert. Dadurch wird sichergestellt, dass trotz Zuflüssen über den Elementrand der thermodynamische Zustand im Element selbst unverändert bleibt. Eine konstante Temperatur wird erreicht durch die Definition einer sehr grossen Dichte der Gesteinsmatrix. Das Wärmespeichervermögen des Elementes wird dabei im Verhältnis zu den Wärmeflüssen so gross, dass sich die Temperatur nicht ändert. Dieses Konzept bedingt natürlich, dass ausserhalb des eigentlichen Untersuchungsgebietes Elemente angeordnet werden, in denen der Zustand, wie er am Gebietsrand herrschen soll, vorgegeben wird.

2.5 Zusammenfassung Kapitel 2

Das Direkte Problem kann mit der Aufgabe gleichgesetzt werden, einen aktuellen oder künftigen Systemzustand mit Hilfe eines mathematisch-numerischen Modells zu berechnen. Zu diesem Zweck müssen die dem System zugrunde liegenden Prozesse erfasst und in mathematischer Form beschrieben werden. Im Kapitel 2 dieser Arbeit sind einige Grundbegriffe der nicht-isothermen Zweiphasenströmung im porösen Medium erläutert. In den ersten Kapiteln wird das Verhalten der beiden beteiligten Fluide näher untersucht. Es zeigt sich, dass deren Dichte, Viskosität und Zusammensetzung in komplizierter Weise vom thermodynamischen Zustand abhängen. Gase und Flüssigkeiten reagieren unterschiedlich sensitiv auf Änderungen des Druckes und der Temperatur. Als entscheidenden Faktor muss sicherlich die hohe Kompressibilität der Gasphase erachtet werden, führt sie doch zu einem grossen Speichervermögen des porösen Mediums. Die Abhängigkeit der Löslichkeit von Druck und Temperatur kann zu Phasenübergängen (Auftreten oder Verschwinden einer freien Gasphase) führen. Eine weitere wichtige Eigenschaft eines Zweiphasensystems ist das Vorhandensein von Kapillarkräften. Sie entstehen als Folge von Grenzfläschenspannungen zwischen der flüssigen, gasförmigen und festen Phase und bewirken unterschiedliche Druckverhältnisse im benetzenden und nicht-benetzenden Fluid. Parametrisierte Modelle beschreiben den Kapillardruck als Funktion der Sättigung. Der Fliesswiderstand einer Phase im porösen Medium ist ebenfalls eine Funktion der entsprechenden Sättigung. Das Konzept der relativen Permeabilitäten erlaubt es, das Fliessgesetz von Darcy auf Zweiphasenströmungen zu erweitern. Während die Herleitung der relativen Permeabilitätsfunktionen aus den Kapillardruckkurven das Verständnis für das Phänomen erhöht, ist für die praktische Anwendung eine mehr pragmatische Sichtweise vorzuziehen, welche die jeweiligen Kennwerte als Modellparameter auffasst, die es anhand von Messwerten zu schätzen gilt.

Kapitel 2.3 und 2.4 behandeln die Umsetzung obiger Konzepte in eine numerisch verarbeitbare Form, wie dies im Simulationsprogramm TOUGH realisiert ist. Die resultierenden Bilanzgleichungen für die Komponenten Wasser und Luft sowie für die Wärmeenergie (Gleichungen 2.56) werden mit Hilfe der *Integrated Finite Difference Method* numerisch für ein dreidimensionales Modellgebiet gelöst. Das Programm TOUGH bildet die Grundlage zur iterativen Lösung des Inversen Problems, wie dies im Kapitel 3 dieser Arbeit beschrieben wird.

3 DAS INVERSE PROBLEM

3.1 Vorbemerkungen

Soll ein aktueller oder künftiger Systemzustand mit Hilfe eines mathematisch-numerischen Modells berechnet werden, müssen Kenntnisse über die sogenannten Modellparameter vorliegen, welche in Form von Koeffizienten sowie Anfangs- und Randbedingungen in den entsprechenden Gleichungen erscheinen. Die Bestimmung hydrodynamischer Modellparameter kann auf unterschiedliche Weise erfolgen. Sie können der Erfahrung entnommen, mehr oder weniger direkt gemessen oder durch Inverse Modellierung geschätzt werden. Für jeden Parameter kann ein anderes Verfahren angemessen sein. Die direkte Messung von Parametern - oder zumindest von Grössen, die einem Parameter auf einfache Weise zugeordnet werden können - scheint am naheliegendsten zu sein. Bei der Interpretation dieser Messwerte muss jedoch berücksichtigt werden, dass sie sich auf eine bestimmte Dimension (z.B. Abmessung der Laboreinrichtung) beziehen, die mit derjenigen der Problemstellung bzw. der Diskretisierungseinheit des mathematisch-numerischen Modells (Knotenpunkt, Element oder Zone) oft nicht übereinstimmt. Das jeweilige Messverfahren schliesst zudem Anfangs- und Randbedingungen ein, die denjenigen der anschliessenden Simulationsrechnung nicht zu entsprechen brauchen. Umrechnungen, Mittelbildung und Massstabswechsel können mit einer Neuinterpretation der Parameter verbunden sein. Die Bestimmung sogenannt äquivalenter Parameter folgt aus dem Bemühen, gemessene Eigenschaften des Aquifers unter einen Modellparameter zu subsummieren. Die Schwierigkeit, den Bezug herzustellen zwischen den im Feld oder Labor gemessenen Grössen und den entsprechenden Parameter im mathematisch-numerischen Modell, darf nicht unterschätzt werden.

Das Thema der vorliegenden Arbeit ist die Schätzung der Parameter durch Inverse Modellierung. Das *Inverse Problem* kann beschrieben werden als die Quantifizierung der Modellparameter aufgrund von Messdaten, welche den Systemzustand an diskreten Punkten und zu bestimmten Zeiten wiedergeben. Zusätzlich sollen a priori vorhandene Informationen über die Modellparameter in die Schätzung miteinbezogen werden. Inverse Modellierung umfasst somit neben der Formulierung des Direkten Problems, wie dies im Kapitel 2 dieser Arbeit geschehen ist, auch die Charakterisierung des Systemzustandes mittels Messwerten sowie eine Rechenvorschrift, welche die Modellparameter zu den Beobachtungen in Beziehung setzt. Letztere kann entweder eine funktionale Beziehung zwischen den gegebenen Messwerten und den unbekannten Modellparametern sein (direkte Methode) oder ein Verfahren, das den gemessenen und gerechneten System-

zustand durch schrittweise Verbesserung der Modellparameter in möglichst gute Übereinstimmung bringt (indirekte Methode).

Die formale Analyse des Inversen Problems zeigt, dass dessen Lösung oft nicht eindeutig und nicht stabil ist. Sind Eindeutigkeit oder Stabilität der Lösung nicht gegeben, wird das Inverse Problem als schlecht gestellt bezeichnet. Die Frage, ob das Inverse Problem gut gestellt ist, kann a priori nur sehr schwer beantwortet werden, da sowohl Modellstruktur als auch die zur Verfügung stehenden Daten in der Analyse zu berücksichtigen sind. Die Herleitung mathematischer Bedingungen für die Eindeutigkeit und Stabilität ist komplex. Trotzdem lassen sich für die praktische Anwendung einige Regeln angeben, welche die Gefahr eines schlecht gestellten Inversen Problems reduzieren helfen (siehe Kapitel 3.7).

Aus dem Gesagten wird ersichtlich, dass sowohl der Wert als auch die statistischen Eigenschaften der geschätzten Parameter von der Modellstruktur, der Versuchsanordnung, dem Umfang und der Qualität der Messdaten sowie dem gewählten Schätzverfahren abhängen. Die Modellparameter stellen somit streng genommen keine Eigenschaft des Grundwasserleiters dar; sie sind im physikalischen Sinne demnach auch nicht messbar. Daraus folgt, dass die Prognosefähigkeit eines kalibrierten Modells nicht garantiert ist, da sich in einer anschliessenden Simulationsrechnung die Modellstruktur im allgemeinen ändert. Die Voraussagefähigkeit muss zuerst in einem Validierungsverfahren anhand unabhängiger Beobachtungen überprüft werden.

3.2 Klassifizierung der Verfahren

Es existieren zahlreiche Verfahren zur Lösung des Inversen Problems. Sie sind in Beiträgen von CARRERA (1984), YEH (1986), BECK (1987), KOOL ET AL. (1987), KUHLMANN (1992) und anderen zusammengefasst worden. Eine Klassifizierung der Verfahren wurde von NEUMAN (1973) vorgeschlagen. Er unterscheidet direkte und indirekte Lösungsansätze.

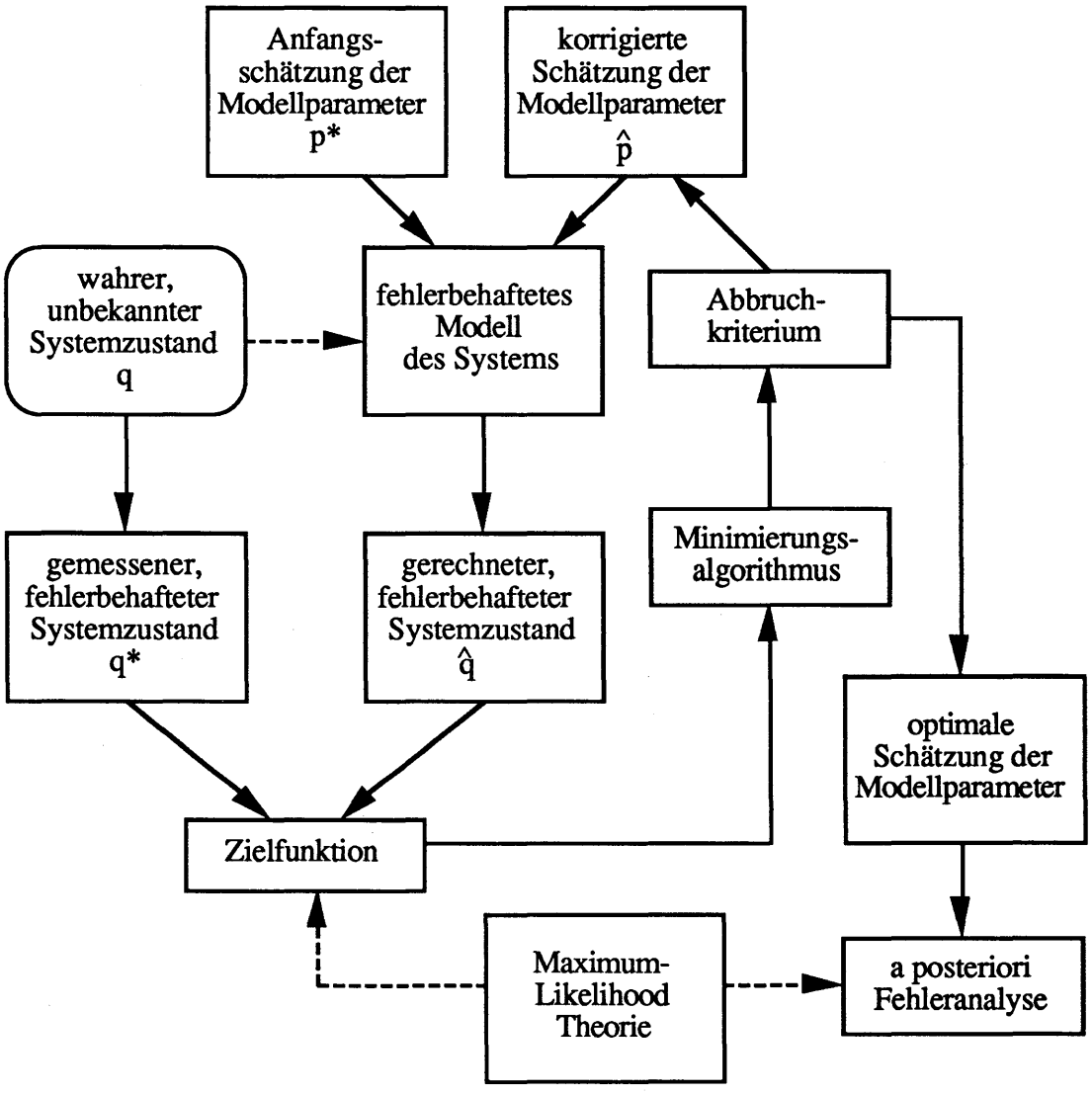
Die *direkte Methode* betrachtet die Modellparameter als abhängige Variablen, während der gemessene Systemzustand in Form bekannter Koeffizienten in der Berechnung auftritt. Die resultierenden Differentialgleichungen können für spezielle Anfangs- und Randbedingungen analytisch oder halbanalytisch gelöst werden. Diese Methode weist jedoch einige Nachteile auf. Die (semi-)analytische Bestimmung von Zweiphasenparametern z.B. verlangt Daten, die nur durch das wiederholte Erreichen eines stationären Zustandes unter geänderten Randbedingungen gewonnen werden können, was einen grossen expe-

rimentellen Aufwand bedeutet. Die entsprechenden Gleichungen müssen zudem linearisiert werden, um einer direkten Lösung zugänglich zu sein. Im weiteren können Heterogenitäten, Anisotropien und allgemeinere Fliessregimes, wie sie in natürlichen Aquiferen auftreten, meist nicht erfasst werden. Schliesslich sind die statistischen Eigenschaften der so geschätzten Parameter nur bedingt bestimmbar. Die direkte Lösung des Inversen Problems mittels numerischer Methoden stösst ebenfalls auf Schwierigkeiten grundsätzlicher Natur. Da Messwerte nur an diskreten Orten und zu bestimmten Zeiten vorliegen, müssen sie auf alle Berechnungspunkte des mathematisch-numerischen Modells interpoliert werden. Das Einsetzen interpolierter oder verrauschter Daten in das Gleichungssystem führt zu einem Fehler, der minimiert werden muss. Da die Gradienten aus fehlerbehafteten Messwerten ermittelt werden, ist die Lösung im allgemeinen instabil, d.h. die geschätzten Parameter sind stark von allfälligen Messfehlern abhängig und daher physikalisch oft nicht plausibel [für Details siehe (NEUMAN 1980)]. Trotz zahlreicher Versuche, die Stabilität der Lösung zu verbessern [für eine Zusammenfassung siehe unter anderem (CARRERA 1984)], soll die direkte Methode zur Lösung des Inversen Problems in dieser Arbeit nicht weiter untersucht werden.

Der *indirekte Ansatz* besteht darin, eine von den Modellparametern abhängige Zielfunktion zu definieren und diese durch ein geeignetes Verfahren zu minimieren. Der indirekte Ansatz formuliert also das Inverse Problem als eine Optimierungsaufgabe. Die Zielfunktion stellt im wesentlichen eine Norm der Differenz zwischen dem gerechneten und gemessenen Systemzustand dar. Derjenige Satz von Modellparametern, welcher die Zielfunktion minimiert, wird als optimale Lösung des Inversen Problems betrachtet. Der Vorteil des indirekten Ansatzes besteht darin, dass das Inverse Problem auch in Situationen gelöst werden kann, bei denen die Anzahl Beobachtungen kleiner ist als die Anzahl Berechnungspunkte. Es werden keine Ableitungen fehlerbehafteter und/oder interpolierter Messwerte benötigt. Im weiteren lassen sich unter gewissen Annahmen die statistischen Eigenschaften der geschätzten Modellparameter auf einfache Art berechnen. Die Nachteile des Verfahrens ergeben sich zum einen aus der Nichtlinearität der zu minimierenden Zielfunktion. Dies führt auf ein iteratives Lösungsverfahren, bei dem das Direkte Problem mehrmals gelöst werden muss. Ist die Zielfunktion nicht konvex, ergibt sich das Problem der Eindeutigkeit der Lösung, da mehrere lokale Minima existieren, deren Werte unter Umständen nahe beieinander liegen. Die Stabilität ist ebenfalls nicht gewährleistet.

Das Vorgehen bei der Parameterschätzung mittels eines indirekten Lösungsansatzes ist in Figur 3.1 schematisch dargestellt. Der wahre, aber unbekannte Systemzustand wird einerseits durch punktuelle Messungen zu erfassen versucht und andererseits in einem mathematisch-numerischen Modell abgebildet. Die Lösung des Direkten Problems ergibt

den berechneten Systemzustand. Aus der Maximum-Likelihood Theorie lässt sich eine Zielfunktion herleiten, welche gerechnete und gemessene Systemvariablen in Beziehung setzt. Ein Minimierungsalgorithmus liefert eine Schätzung der Modellparameter, welche das Modellresultat in bessere Übereinstimmung mit den gemessenen Daten bringt. Das iterative Verbessern der zu schätzenden Parameter wird durch ein Abbruchkriterium beendet. Unter bestimmten Bedingungen lässt sich eine Fehlerbetrachtung durchführen. In den folgenden Kapiteln werden die einzelnen Schritte (Beschreibung des Systemzustandes, Maximum-Likelihood, Zielfunktion, Optimierungsalgorithmus und Fehleranalyse) im Detail erläutert.



Figur 3.1: Indirekter Ansatz zur Lösung des Inversen Problems

3.3 Parameter- und Systemzustandsvektor

Das Inverse Problem besteht darin, Parameter des mathematisch-numerischen Modells anhand eines gemessenen Systemzustandes zu schätzen. Die Modellparameter sind die Variablen des Inversen Problems; sie werden im Parametervektor zusammengefasst. Der Systemzustandsvektor enthält Beobachtungen, die den Systemzustand beschreiben; er geht als bekannte Grösse in die Berechnung ein.

Als zu schätzende Parameter kommen all diejenigen in Frage, welche in den diskretisierten Bilanzgleichungen des mathematisch-numerischen Modells auftreten. Es sind dies im wesentlichen:

- absolute Permeabilität
- Parameter der relativen Permeabilitätsfunktionen
- Parameter der Kapillardruckkurve
- Porosität, Tortuosität
- Dichte, Kompressibilität, thermischer Ausdehnungskoeffizient der Gesteinsmatrix
- Wärmeleitfähigkeit, spezifische Wärmekapazität des porösen Mediums
- Diffusionskoeffizient

Zusätzlich werden die Anfangsbedingungen (Druck, Gassättigung, Temperatur) als zu schätzende Grössen betrachtet. Die Randbedingungen schliesslich können segmentweise mit einem zu bestimmenden Faktor multipliziert und so an die tatsächlichen Verhältnisse angepasst werden. Die Kontinuumsbetrachtung führt in einem heterogenen Aquifer dazu, dass theoretisch unendlich viele Werte geschätzt werden müssten. Im numerischen Modell wird die räumliche Variabilität der Aquifereigenschaften durch finite Volumenelemente approximiert, wobei jedem Element ein gemittelter, konstanter Wert zugeordnet ist. Mehrere Elemente können in Zonen gleicher Eigenschaften zusammengefasst werden. Diesen Vorgang nennt man Parametrisierung; er führt dazu, dass der Aquifer durch eine endliche Anzahl Parameter charakterisiert wird. Alle Parameter, die durch Inverse Modellierung bestimmt werden sollen, werden im Parametervektor $\mathbf{p}$ der Dimension n zusammengefasst. Der Zweck der Inversen Modellierung besteht nun darin, eine konsistente, erwartungstreue und robuste Schätzung $\hat{\mathbf{p}}$ des wahren, aber unbekannten Parametervektors $\mathbf{p}$ zu erhalten. A priori vorhandene Mess- oder Schätzwerte der Parameter, welche im allgemeinen zugleich die Anfangsschätzung im iterativen Optimierungsverfahren darstellen, seien mit $\mathbf{p}^*$ bezeichnet.

Das Systemverhalten wird durch den Vektor **q** beschrieben, der *m* messbare Grössen enthält, die den Systemzustand an diskreten Orten und zu bestimmten Zeiten charakterisieren. Mögliche Messgrössen sind:

- Gasdruck, Flüssigkeitsdruck, Kapillardruck
- Gassättigung, Flüssigkeitssättigung
- Gasfluss, Flüssigkeitsfluss, totaler Fluss, Entropiefluss
- Temperatur

Der Vektor der Beobachtungen - verstanden als die Realisierung einer Messung und Zuweisung des Messwertes an die entsprechende Variable - wird mit **q*** bezeichnet. Während der wahre Systemzustand **q** unbekannt bleibt, ergibt die numerische Modellierung des Direkten Problems eine Schätzung $\hat{\mathbf{q}}$, die vom Parametervektor $\hat{\mathbf{p}}$ abhängt.

Betrachtet man die Vorinformationen über die Modellparameter **p*** als fingierte oder tatsächliche Beobachtungen und führt sie im Sinne eines Plausibilitätskriteriums für die zu schätzenden Parameter in die Zielfunktion ein, kann man den unter Umständen transformierten Parameter- und Systemzustandsvektor in einem Vektor **z** der Dimension (n+m) zusammenfassen. Die Transformation der Parameter **p** hat den Zweck, den Fehlern eine vorgegebene Struktur zu geben (siehe Kapitel 3.4). Da der Vektor **z** sämtliche messbaren Grössen enthält, sei er Messgrössenvektor genannt. Jede seiner Komponenten hat einen wahren Wert z, einen beobachteten Wert (Messwert) z* und einen berechneten Wert $\hat{z}$.

3.4 Das Stochastische Modell

Das Stochastische Modell beschreibt das Verhalten aller an der Inversen Modellierung beteiligten Zufallsvariablen und enthält somit die statistischen Hypothesen hinsichtlich ihrer Wahrscheinlichkeitsverteilung. Diese können im allgemeinen durch Mittelwerte, Varianzen und Korrelationkoeffizienten beschrieben werden.

Die Fehler, welche bei der Inversen Modellierung von Bedeutung sind, lassen sich in Mess- und Modellfehler unterteilen. Die Diskrepanz zwischen gemessener und wahrer Grösse (z* - z) wird als Messfehler bezeichnet. Der Modellfehler ist definiert als die Differenz zwischen gerechnetem und wahrem Wert ($\hat{z}$ - z). Da der wahre Wert z im allgemeinen unbekannt ist, muss auf die Differenz zwischen gemessenen und gerechneten Grössen (z* - $\hat{z}$), die sogenannten Residuen ω, zurückgegriffen werden. Die Residuen können als eine Kombination aus Mess- und Modellfehler betrachtet werden.

Im folgenden wird der Versuch unternommen, die möglichen Fehler, die bei der Lösung des Inversen Problems eine Rolle spielen, hinsichtlich ihrer Fehlerquelle zu klassifizieren und - was von grösserer Bedeutung ist - die Eigenschaften der einzelnen Fehler zu charakterisieren (Tabelle 3.1). Die Charakterisierung erfolgt anhand zweier Kriterien. Zum einen soll zwischen groben, systematischen und zufälligen Fehleranteilen unterschieden werden:

- *Grobe Fehler* übersteigen die zu erwartende Genauigkeit um ein Vielfaches. Sie lassen sich durch einfache Plausibilitätstests und Kontrollmessungen erkennen und werden im folgenden als eliminiert betrachtet.

- *Systematische Fehler* kommen durch einen Fehler im Funktionalen Modell zustande, welches Systeminput und Systemoutput miteinander verknüpft. Ein systematischer Fehler führt dazu, dass eine Beobachtung oder Berechnung stets in demselben Sinne beeinflusst wird.

- *Zufällige Fehler* sind die nach der Elimination der groben und systematischen Fehler übrigbleibenden, nicht mehr einzeln erfassbaren Restfehler. Sie sind das Resultat eines Zufallsprozesses, d.h. es kann eine Wahrscheinlichkeit angegeben werden, mit der der Fehler einen diskreten Wert annimmt oder in einem bestimmten Intervall liegt. Der Erwartungswert der zufälligen Fehler ist Null.

Das Stochastische Modell enthält eine Hypothese hinsichtlich des statistischen Verhaltens der *zufälligen* Fehler. Es wird also angenommen, dass grobe Fehler eliminiert sind und allfällige systematische Fehler korrigiert werden können oder im Verhältnis zu den zufälligen Fehlern vernachlässigbar sind. Diese Feststellung ist wichtig im Hinblick auf die Beurteilung der nach der Optimierung verbleibenden Residuen.

Im weiteren soll unterschieden werden, ob die statistischen Eigenschaften (im wesentlichen die Varianzen) der Fehler a priori, d.h. *vor* der Inversen Modellierung, bekannt sind oder erst *a posteriori*, d.h. erst *nach* erfolgter Schätzung der Modellparameter bestimmt werden können. Es versteht sich, dass nur die zufälligen Fehleranteile statistisch beschrieben werden können.

Werte für die a priori bekannten Fehlervarianzen können aus unterschiedlichen Erkenntnisquellen stammen:

- *Bestimmung aus der Erfahrung:*
  Die Genauigkeit eines bestimmten Messgerätes lässt sich aus der Erfahrung a priori angeben. Der Begriff "Erfahrung" kann hier interpretiert werden als das Resultat eines Zufallsexperimentes mit sehr grossem Stichprobenumfang (Summe aller bisherigen, mit dem entsprechenden Messgerät ausgeführten Messungen), so dass die empirische Varianz mit deren Erwartungswert konsistent ist.

- *Bestimmung mittels Schätzung:*
  Die Varianz einer gemittelten oder interpolierten Beobachtung kann berechnet und als *a priori* bekannter Wert in die Inverse Modellierung eingeführt werden. Wird z.B. der Anfangszustand des Druck- oder Permeabilitätsfeldes mittels geostatistischer Methoden geschätzt, kann die daraus ermittelte Varianz zur Gewichtung der Vorinformation über die Modellparameter herangezogen werden. Die so geschätzten Varianzen sind also selber das Resultat einer *a posteriori* durchgeführten Fehlerbetrachtung.

- *Bestimmung durch theoretische Herleitung:*
  Wird z.B. eine hochfrequente, sinusförmige Fluktuation mit der Amplitude α durch deren Mittelwert ersetzt, entsteht ein Fehler, dessen Varianz mit $\alpha^2/8$ a priori angegeben werden kann.

Basiert die Inverse Modellierung auf einem statistischen Ansatz (z.B. Maximum-Likelihood), muss die Fehlerstruktur der beteiligten Zufallsvariablen *a priori* bekannt sein. Deshalb wird im allgemeinen die Varianz der Messfehler in die zu minimierende Zielfunktion eingeführt; sie kann aufgrund der Erfahrung oder a priori durchgeführten Fehlerbetrachtungen abgeschätzt werden. Es sollte dabei in Betracht gezogen werden, dass Messfehler nicht nur während des eigentlichen Messvorganges entstehen. Aufarbeitung und Interpretation der Messdaten können ebenfalls zu zufälligen oder systematischen Abweichungen führen. Im weiteren müssen sich gemessene und modellierte Grössen entsprechen; allenfalls notwendige Umrechnungen sowie Interpolationen verändern die ursprünglichen Fehlermasse, wie sie z.B. vom Hersteller eines Messgerätes angegeben werden. Ein weiteres Problem ergibt sich aus der Tatsache, dass der unbekannte, wahre Wert z durch dessen Schätzung $\hat{z}$ ersetzt wird, d.h. die Zielfunktion ist eine Funktion der Residuen und nicht der Messfehler, wie sie oben definiert sind. Da sich die Residuen aus einer Kombination von Mess- und Modellfehler ergeben, sollten beide Fehleranteile in die Betrachtung miteinbezogen werden. Der Modellfehler setzt sich im wesentlichen aus einer Summe systematischer (!) Fehler zusammen (unberücksichtigte oder falsch beschriebene Prozesse, Übervereinfachung im Modellaufbau, Diskretisierungsfehler). Wie bereits angedeutet, sind systematische Fehler nicht Bestandteil des Stochastischen Modells. Sind

sie trotzdem vorhanden, können sie allenfalls *aposteriori* erkannt werden. Die *a priori* identifizierbaren, zufälligen Fehleranteile (z.B. Rundungsfehler) sind jedoch im Vergleich zu den Messfehlern vernachlässigbar klein. Aus diesem Grund soll auch in der vorliegenden Arbeit von den Beobachtungs- oder Messfehlern ausgegangen werden; korrekter wäre es, von der Varianz der Residuen zu sprechen.

				Fehlerart		
			a priori	grob	systematisch	zufällig
Mess-fehler	Messvorgang	Gerätefehler	x	(x)	x	x
		Handhabungsfehler		x		
		Beobachtungsfehler	x	(x)		x
	Interpretation der Messresultate	Räumliche und zeitliche Interpolation	(x)		(x)	x
		Bearbeitungsfehler	(x)	(x)	x	(x)
		Falsche Beurteilung		(x)	(x)	
Modell-fehler	Konzeptualisierung	Unberücksichtigte oder falsch beschriebene Prozesse			x	
		Fehler in den konstituierenden Gleichungen		(x)	x	
		Übervereinfachung: - Geometrie - Dimensionalität - Zonierung - Diskretisierung - Anfangs-/ Randbedingungen	 (x) (x) (x)		 x x (x) (x) (x)	 (x) (x) (x)
	Berechnung	Fehler durch räumliche und zeitliche Diskretisierung der Differentialgleichungen			x	
		Rundungsfehler	x			x

Tabelle 3.1: Zusammenstellung der Fehlerquellen und ihre Charakterisierung

Aufgrund des zentralen Grenzwertsatzes der Statistik kann angenommen werden, dass die Summe aller Teilfehler zu Residuen führt, die normalverteilt sind.

$$\omega \sim N(\mathbf{0},\mathbf{C})$$

Die Hypothese, dass die Fehlerstruktur der Residuen durch eine Gaussverteilung beschrieben werden kann, ist aufgrund der Analyse empirischer Datensätze meist nicht gerechtfertigt und bedarf einiger kritischen Bemerkungen. Messwerte sind oft poissonverteilt, und der Stichprobenumfang ist im allgemeinen zu gering, um die Poissonverteilung durch eine Normalverteilung zu approximieren. Messdaten, welche stark vom Mittelwert abweichen, treten weitaus häufiger auf, als dies aufgrund der Normalverteilung vorausgesagt wird. Werden diese sogenannten Ausreisser nicht herausgefiltert, können sie die Parameterschätzung einseitig beeinflussen. Ein geeigneter statistischer Test muss überprüfen, ob die *a posteriori* ermittelte Verteilung der Residuen mit der *apriori* bestimmten Verteilung konsistent ist. Versagt der Test, muss nach Fehlern im Stochastischen Modell gesucht werden. Lassen sich solche nicht identifizieren, liegt ein systematischer Fehler im Funktionalen Modell vor, d.h. die Beschreibung der Fehler mittels statistischer Parameter war nicht zulässig. Die Prozedur wird in Kapitel 3.7.3 beschrieben.

Sind die Beobachtungen des Systemzustandes voneinander abhängige, normalverteilte Zufallsvariablen, so kann das Stochastische Modell in einer Kovarianzmatrix **C** formal zusammengefasst werden:

$$\mathbf{C} = \sigma_0^2 \cdot \mathbf{V} \qquad (3.1)$$

wobei

- $\mathbf{C}$: a priori Kovarianzmatrix
- σ_0^2 : a priori Varianz der Gewichtseinheit
- $\mathbf{V}$: a priori Kofaktorenmatrix

Dabei ist σ_0^2 eine skalare Grösse, die bekannt ist oder geschätzt werden muss. Die Kofaktorenmatrix **V** ist eine symmetrische, positiv-definite Matrix. Die Kovarianzmatrix aller Beobachtungen (inkl. Vorinformationen über die Modellparameter) hat eine Blockdiagonalstruktur:

$$\mathbf{C}_z = \begin{bmatrix} \mathbf{C}_p & 0 \\ 0 & \mathbf{C}_q \end{bmatrix} \qquad (3.2)$$

Dabei ist $\mathbf{C}_p$ die Kovarianzmatrix der Modellparameter und $\mathbf{C}_q$ die Kovarianzmatrix der Beobachtungen des Systemzustandes. Diese Definition setzt voraus, dass die Parameter **p**

durch eine Funktion $\phi(\mathbf{p})$ derart transformiert werden können, dass deren Fehler normalverteilt sind und mit Hilfe der Kovarianzmatrix $\mathbf{C_p}$ beschrieben werden können. So wird z.B. angenommen, dass die absolute Permeabilität log-normalverteilt ist und somit durch die Transformation $\phi(\mathbf{p}) = \log(\mathbf{p})$ die Fehler einer Normalverteilung folgen. Die Kovarianzmatrix der Beobachtungen $\mathbf{C_q}$ setzt sich ihrerseits aus Submatrizen zusammen, welche die Kovarianzen unterschiedlicher Beobachtungen repräsentieren:

$$\mathbf{C_q} = \begin{bmatrix} \mathbf{C_d} & 0 & 0 & 0 \\ 0 & \mathbf{C_f} & 0 & 0 \\ 0 & 0 & \mathbf{C_t} & 0 \\ 0 & 0 & 0 & \mathbf{C_s} \end{bmatrix} \tag{3.3}$$

Dabei sind $\mathbf{C_d}$, $\mathbf{C_f}$, $\mathbf{C_t}$ und $\mathbf{C_s}$ die Kovarianzmatrizen der Druck-, Fluss-, Temperatur- bzw. Sättigungsmessungen. Jede dieser Submatrizen enthält die Varianzen einer Beobachtung an einem bestimmten Ort und zu einem bestimmten Zeitpunkt sowie allfällige Kovarianzen. CARRERA (1984) untersuchte die einzelnen Faktoren, die zu den Beobachtungsfehlern beitragen. Er kommt zum Schluss, dass die Fehler an unterschiedlichen Beobachtungspunkten nur schwach korreliert sind und diese Korrelation mit der Zeit nur sehr wenig ändert. Andererseits können Messfehler an einem Punkt zeitlich relativ stark korreliert sein. Er schlägt deshalb eine weitere Aufteilung in eine örtliche und zeitliche Kovarianzmatrix vor, die aber hier nicht weiter diskutiert wird [für Details siehe (CARRERA & NEUMAN 1986a)]. Im allgemeinen sind die Korrelationen *a priori* nicht bekannt, so dass sich die Kovarianzmatrix auf eine Diagonalmatrix reduziert. Jeder Kovarianzmatrix kann nun eine Varianz der Gewichtseinheit $(\sigma_0^2)_i$, $i \in \{p,d,f,t,s\}$, zugeordnet werden. Während die entsprechenden Kofaktorenmatrizen $\mathbf{V_i}$ die relative Genauigkeit von Messungen gleichen Typs beinhalten, können Beobachtungen unterschiedlichen Typs durch die Wahl der $(\sigma_0^2)_i$ gegenseitig gewichtet werden. Insbesondere lässt sich durch das Verhältnis

$$\lambda_{qp} = \frac{(\sigma_0^2)_q}{(\sigma_0^2)_p} \tag{3.4}$$

die Vorinformation der Parameter gegenüber den eigentlichen Messungen des Systemzustandes gewichten. Sind a priori keine Schätz- oder Messwerte der Modellparameter vorhanden, wird λ=0 gesetzt. Da die Varianzen $(\sigma_0^2)_i$ als unbekannte Grössen betrachtet werden können, werden sie in einem Vektor θ zusammengefasst. Ein iteratives Verfahren zur Schätzung der optimalen Verhältnisse λ_{ij} wird in Kapitel 3.7.2 vorgestellt.

Für die Parameterschätzung durch Inverse Modellierung genügt es im allgemeinen, die relativen Genauigkeiten der Beobachtungen zu kennen. Eine a posteriori durchgeführte Fehleranalyse gibt einen Anhaltspunkt über die Varianzen der geschätzten Modellparameter $\hat{\mathbf{p}}$ sowie des berechneten Systemzustands $\hat{\mathbf{q}}$. Eine Überprüfung des Stochastischen Modells sowie der Vergleich verschiedener Modelle mit unterschiedlicher Modellstruktur bedingen jedoch, dass man sich Gedanken über die absolute Genauigkeit der beobachteten Grössen macht.

Die formale Beschreibung des Stochastischen Modells ist hiermit abgeschlossen. Probleme bei der Bestimmung der Kovarianzmatrix werden bei der Behandlung konkreter Fälle diskutiert.

3.5 Maximum-Likelihood-Schätzung

3.5.1 Ausgangslage

In den vorangegangenen Kapiteln wurde der Messgrössenvektor **z** eingeführt. Er enthält eine Beschreibung des Systemzustandes an diskreten Raum-Zeit-Punkten sowie allenfalls vorhandene Vorinformationen über die zu schätzenden Modellparameter, welche ihrerseits im Parametervektor **p** zusammengefasst sind. Im weiteren wurde das statistische Verhalten der Beobachtungsfehler mittels einer Kovarianzmatrix **C** beschrieben. Die Varianzen $(\sigma_0^2)_i$ können bekannt sein oder zusammen mit den Modellparametern geschätzt werden. Sie wurden im Vektor θ zusammengefasst. In diesem Kapitel soll nun auf der Basis der Maximum-Likelihood-Theorie eine Zielfunktion hergeleitet werden. Sie setzt berechnete und gemessene Systemvariablen in Beziehung und enthält ein Kriterium für die Schätzung der Modellparameter.

3.5.2 Betrachtungsweise nach Bayes und Fisher

Der Systemzustand **z** ist eine Funktion der Modellparameter **p** und wird als Zufallsvariable betrachtet. Die entsprechende Dichtefunktion sei mit $f(\mathbf{z},\mathbf{p})$ bezeichnet (vorläufig wird angenommen, dass die Komponenten des Vektors θ bekannt sind). Betrachtet man die Gleichung der Residuen

$$\mathbf{z}^* = \hat{\mathbf{z}}(\mathbf{p}) + \omega \qquad (3.5)$$

so lassen sich zwei verschiedene Standpunkte hinsichtlich der Dichtefunktion $f(\mathbf{z},\mathbf{p})$ einnehmen:

Der *Bayes'sche Ansatz* betrachtet neben den Residuen ω auch die Parameter $\mathbf{p}$ als Zufallsvariablen mit einer bestimmten, *a priori* bekannten Dichtefunktion. Dies bedingt, dass die Bilanzgleichungen als stochastische Differentialgleichungen aufzustellen sind, welche Mittelwert und Perturbation der Modellparameter enthalten (LOAICIGA & MARIÑO 1987). Man schätzt dann diejenigen Modellparameter, welche aufgrund der vorhandenen Messwerte am wahrscheinlichsten sind. Mit Hilfe der Bayes'schen Regel lässt sich die *aposteriori* bedingte Wahrscheinlichkeit von $\hat{\mathbf{p}}$ gegeben $\mathbf{z}^*$, $f(\hat{\mathbf{p}}|\mathbf{z}^*)$, berechnen und entsprechend optimieren; der Ansatz wird deshalb auch Maximum-a-posteriori-Schätzung genannt. Diese Betrachtungsweise hat den Vorteil, dass sämtliche Informationen über die Parameter - ausgedrückt durch eine entsprechende Verteilungsfunktion - in die Schätzung einfliessen können. Hier liegt jedoch auch eine der Hauptschwierigkeiten; sie besteht darin, *a priori* eine Schätzung der Verteilung der Parameter anzugeben und die vollständige Verteilungsfunktion zu berechnen, falls die Werte nicht normalverteilt und das Modell nicht-linear ist. Während der Bayes'sche Ansatz vom Konzept her überzeugend ist, kommt er in der Praxis nur selten zur Anwendung. Rekursive Schätzmethoden (z.B. Kalmanfilter) können als Bayes'sche Ansätze betrachtet werden. Einen guten Überblick geben NORTON (1986) und SCHWEPPE (1973).

Die *Fishersche* oder *klassische Betrachtungsweise* geht davon aus, dass die Parameter zwar unbekannte, aber feste Grössen darstellen, welche in *deterministischer* Weise mit den Systemvariablen verknüpft sind. Unsicherheit existiert deshalb, weil die Modellparameter unbekannt sind und somit aufgrund einer unvollständigen Beschreibung des Systemzustandes mittels verrauschter Daten geschätzt werden müssen - das Modell hingegen ist deterministisch. Der Fishersche Ansatz kann auch betrachtet werden als ein Spezialfall der Bayes'schen Betrachtungsweise, bei der keine Informationen über die Modellparameter existieren und deren Dichtefunktionen somit flach und unendlich ausgedehnt sind. Jeder Parameterwert hat somit die gleiche Wahrscheinlichkeit. Die im folgenden beschriebene Maximum-Likelihood-Schätzung basiert auf einer Fisherschen Betrachtungsweise.

3.5.3 Herleitung der Zielfunktion

Es sei f(**z***|**p**) definiert als die bedingte Wahrscheinlichkeit, den Systemzustand **z*** zu beobachten unter der Annahme, dass der Parametersatz **p** korrekt ist. Die Dichtefunktion f(**z***|**p**) wird auch Likelihood-Funktion genannt und mit L(**p**|**z***) bezeichnet. Die Likelihood-Funktion kann interpretiert werden als ein Mass dafür, wie sehr die vorhandenen Daten **z*** eine Hypothese hinsichtlich der Modellparameter **p** unterstützen. Als Schätzkriterium gilt, dass derjenige Satz von Modellparametern als optimal zu betrachten ist, welcher die Likelihood-Funktion maximiert. Dieser statistische Ansatz impliziert, dass das Modell nicht in der Lage sein muss, den wahren Systemzustand exakt zu reproduzieren. Maximum-Likelihood Schätzung liefert denjenigen Parametersatz, welcher *im Rahmen einer gegebenen Modellstruktur* den Systemzustand am ehesten (mit der grössten Wahrscheinlichkeit) wiederzugeben vermag. Aufgrund dieser Feststellung lassen sich Kriterien angeben, welche für den Vergleich verschiedener Modelle herangezogen werden können (siehe Kapitel 3.8.4).

Soll eine Zielfunktion auf der Basis der Likelihood-Funktion hergeleitet werden, müssen der Messgrössenvektor **z** und dessen statistische Eigenschaften bekannt sein. Der Aufbau des Messgrössenvektors und das entsprechende Stochastische Modell wurden in den Kapiteln 3.3 und 3.4 bereits diskutiert. Unter der Annahme, dass die Fehler von **z** einer mehrdimensionalen Gauss'schen Verteilung folgen mit Mittelwert Null und Kovarianzmatrix **C**, ergibt sich für die Likelihood von **p** gegeben **z*** folgender Ausdruck:

$$L(\mathbf{p}|\mathbf{z}^*) \sim f(\mathbf{z}^*|\mathbf{p}) = \frac{1}{\sqrt{(2\pi)^M \cdot |\mathbf{C}|}} \cdot e^{\left\{-\frac{1}{2}\left[(\mathbf{z}^* - \mathbf{z})^T \mathbf{C}^{-1} (\mathbf{z}^* - \mathbf{z})\right]\right\}} \qquad (3.6)$$

Die Bezeichnung | . | bedeutet Determinante der entsprechenden Matrix. Das Schätzkriterium verlangt die Maximierung von (3.6); dies ist gleichbedeutend mit der Minimierung des sogenannten Log-Likelihood Kriteriums:

$$S = -2 \cdot \ln(L(\mathbf{p}|\mathbf{z}^*)) \qquad (3.7)$$

Das Log-Likelihood Kriterium besitzt die Eigenschaft, dass, falls mehrere *voneinander unabhängige* Datensätze existieren (vgl. (3.2) und (3.3)), die Log-Likelihood aller Daten der Summe der Log-Likelihood der einzelnen Datensätze entspricht. Aufgrund dieser Eigenschaft sowie der Gleichungen (3.1), (3.6) und (3.7) ergibt sich:

$$S = \sum_i \frac{Z_i}{(\sigma_0^2)_i} + \sum_i \ln\left(|V_i|\right) + \sum_i M_i \cdot \ln\left((\sigma_0^2)_i\right) + M \cdot \ln(2\pi) \qquad (3.8)$$

wobei:

$$Z_i = (z^* - \hat{z}(p))_i^T \cdot V_i^{-1} \cdot (z^* - \hat{z}(p))_i \qquad (3.9)$$

Der Index i steht für Messgrössen verschiedenen Typs ($i \in \{p,d,f,t,s\}$ für Vorinformation über Modellparameter, Druck-, Fluss-, Temperatur- und Sättigungsbeobachtungen).

M_i ist die Anzahl Beobachtungen des Typs i, $i \in \{p,d,f,t,s\}$ und $M = \sum_i M_i$

Geht man davon aus, dass die Fehlerstrukturen - d.h. die Submatrizen V_i und die skalaren Grössen $(\sigma_0^2)_i$ - bekannt sind, ist die Minimierung von (3.8) gleichbedeutend mit der Minimierung der Zielfunktion:

$$\zeta(p) = \sum_i \frac{1}{(\sigma_0^2)_i} \cdot (z^* - \hat{z}(p))_i^T \cdot V_i^{-1} \cdot (z^* - \hat{z}(p))_i \qquad (3.10)$$

Die Zielfunktion (3.10) enthält eine Summe der gewichteten Fehlerquadrate. Als Wichtungsfaktoren dienen im einfachen Falle unkorrelierter Beobachtungen die Kehrwerte der Fehlervarianzen. Besitzt ein Messwert eine relativ hohe Genauigkeit, ist dessen Beitrag zur Zielfunktion entsprechend hoch, d.h. eine Verringerung der Abweichung zwischen gemessenem und berechnetem Wert führt zu einer starken Reduktion der Zielfunktion. Die Gewichtung anhand der Varianzen stellt zudem sicher, dass Beobachtungen verschiedenen Typs, die im allgemeinen unterschiedliche Einheiten besitzen, normiert werden. Während die Zielfunktion für $i \in \{d,f,t,s\}$ die Anpassung der Modellresultate an den gemessenen Systemzustand erstellt, dient die Vorinformation über die Modellparameter (i=p) gewissermassen als Plausibilitätskriterium für die geschätzten Parameter. Es wird sichergestellt, dass die aufgrund der Messdaten bestimmten Parameter nicht zu stark von einem plausibel erscheinenden, *apriori* bekannten Wert abweichen. Der Summand in (3.10) mit i=p kann auch benutzt werden, um Informationen von einem Modell in das andere zu transportieren und so zu konsistenten Parametersätzen für verschiedene Modelle zu gelangen. CARRERA (1984) hat im Detail nachgewiesen, dass das Einführen von A-priori-Informationen im allgemeinen zu stabileren und eindeutigeren Lösungen führt. Der gegenseitigen Gewichtung von Vorinformation und Systembeobachtung ist dabei besondere Beachtung zu schenken.

3.5.4 Eigenschaften der Maximum-Likelihood-Schätzung

Die Herleitung der Zielfunktion stellt sicher, dass diejenigen Parameter geschätzt werden, welche die Wahrscheinlichkeit maximieren, den gemessenen Systemzustand mit einem deterministischen Modell zu realisieren (Fishersche Betrachtungsweise). In diesem Sinne sind die geschätzten Parameter auch diejenigen, welche mit grösster Wahrscheinlichkeit dem wahren Wert entsprechen. Diese Aussage ist jedoch nur korrekt, falls die Fehler der Eingabedaten durch die angenommene Fehlerstruktur (z.B. Normalverteilung) korrekt wiedergegeben ist. Ist diese Bedingung nicht erfüllt, weisen die geschätzten Parameter einen Bias auf. Es lässt sich jedoch zeigen, dass mit zunehmendem Stichprobenumfang die Maximum-Likelihood-Schätzung zu normalverteilten, erwartungstreuen Schätzungen mit minimaler Varianz führt (CONZETT 1985). Normalverteilung der geschätzten Parameter resultiert aus der Tatsache, dass jede Verteilung mit abnehmender Varianz durch eine Normalverteilung approximiert werden kann. Da einige Verteilungen schneller konvergieren als andere, ist der geforderte Umfang der Stichprobe von der tatsächlichen, im allgemeinen unbekannten Verteilung der Schätzwerte abhängig. Die Annahme asymptotisch normalverteilter Modellparameter impliziert, dass die geschätzten Systemvariablen in der näheren Umgebung des optimalen Wertes - ausgedrückt durch ein Konfidenzintervall - durch eine lineare Funktion der Modellparameter genügend genau approximiert werden können. Für ein in den Parametern lineares Modell mit normalverteilten Fehlern in den Beobachtungen kann Erwartungstreue und minimale Kovarianz nachgewiesen werden. Die Eigenschaft der Erwartungstreue rechtfertigt im Nachhinein das Ersetzen des wahren, aber unbekannten Wertes z in (3.6) durch dessen Schätzwert $\hat{z}$ in Gleichung (3.9).

All diese Eigenschaften der Maximum-Likelihood-Schätzung basieren auf der Annahme, dass die Statistik genügend bekannt ist und sämtliche Informationen über die Parameter aus den vorliegenden Datensätzen gewonnen werden können. Es ist offensichtlich, dass diese Bedingung in den allermeisten Fällen nicht erfüllt ist. Daraus ergibt sich, dass die Erwartungstreue der geschätzten Parameter nicht mit Sicherheit festgestellt werden kann und dass die *aposteriori* geschätzte Varianz der Modellparameter - wird die Nichtlinearität nicht berücksichtigt - die untere Grenze, d.h. die optimistischste Schätzung der tatsächlichen Genauigkeit liefert. In Kapitel 3.7.4 wird die Fehleranalyse vorgestellt für den Fall, dass das Modell in der Nähe des optimalen Punktes linear ist. Der Einfluss der Nichtlinearität wird in Kapitel 3.7.8 untersucht.

3.6 Minimierungsalgorithmus

3.6.1 Klassifizierung der Verfahren

Im vorangegangenen Kapitel wurde das Problem der Parameterschätzung als Optimierungsaufgabe formuliert. Der statistische Ansatz besagt, dass diejenigen Parameter als optimal zu betrachten sind, welche die Wahrscheinlichkeit maximieren, den beobachteten Systemzustand zu realisieren; oder - mit Blick auf die Zielfunktion -, dass die gewichtete Abweichung zwischen Modellresultaten und Messdaten minimal ist. Die Formulierung des Schätzproblems als Optimierungsaufgabe hat den grossen Vorteil, dass auf zahlreiche Verfahren zurückgegriffen werden kann, welche eine beliebige Funktion unter Berücksichtigung gewisser Nebenbedingungen minimiert. Die Nebenbedingungen stellen sicher, dass die geschätzten Parameter physikalisch sinnvolle oder zumindest zulässige Werte annehmen; optimal bedeutet, dass die Werte im Verhältnis zu benachbarten Punkten ein bestimmtes Kriterium am besten erfüllen.

Die Literatur zum Thema Optimierung ist sehr umfangreich. Im stütze mich im wesentlichen auf GILL ET AL. (1981), SCALES (1985) und CONZETT (1985). Im folgenden soll der Gauss-Newton Ansatz sowie dessen Modifizierung nach Levenberg-Marquardt zur Minimierung der Zielfunktion (3.10) vorgestellt werden. Es ist also nicht das Ziel dieser Arbeit, die Optimierungsaufgabe in all ihren Details zu beleuchten, sondern ein Werkzeug zur Verfügung zu stellen, mit dessen Hilfe die Schätzung von Eingabeparametern des Zweiphasen-Simulationsprogramms TOUGH durchgeführt werden kann.

Aus der Vielzahl von Methoden zur Minimierung einer Zielfunktion wird ersichtlich, dass ein allgemeingültiger, problemunabhängiger Ansatz nicht existiert, der sowohl hinsichtlich Konvergenzeigenschaften als auch Effizienz und Robustheit befriedigen kann. Kenntnisse über die Eigenschaften der Zielfunktion erlauben es, ein möglichst gut geeignetes Verfahren zu wählen. GILL ET AL. (1981) klassifizieren die Verfahren hinsichtlich der Eigenschaften der zu minimierenden Zielfunktion und derjenigen der Nebenbedingungen. Betrachtet man die Zielfunktion (3.9) bzw. (3.10), besteht diese aus einer Summe von Quadraten einer Funktion, die nicht-linear in den Parametern ist, was auf Methoden führt, die mit *multivariate non-linear least squares* bezeichnet werden. Als Nebenbedingungen werden im folgenden nur einfache Grenzwerte zugelassen, um physikalisch sinnvolle Parameter zu erhalten. So muss z.B. die Porosität Werte zwischen Null und Eins annehmen. Kompliziertere Nebenbedingungen wären durchaus denkbar. Als Beispiel seien die Parameter der relativen Durchlässigkeitsfunktionen erwähnt. So darf z.B. die Summe der residualen Sättigungen den Wert Eins nicht überschreiten.

Obwohl die Berücksichtigung solcher Nebenbedingungen wünschenswert wäre, werden sie im folgenden nicht weiter behandelt. CARRERA (1984) unterteilt die Verfahren in solche, bei denen nur der Gradient der Zielfunktion benötigt wird (Quasi-Newton, Konjugierte Gradienten) und solche, bei denen die Jacobimatrix oder Ableitungen höherer Ordnung berechnet werden müssen (Gauss-Newton Verfahren). Der Vollständigkeit halber sei auch auf eine dritte Gruppe von Verfahren hingewiesen, welche ohne die Berechnung partieller Ableitungen auskommen (*function comparison methods, simplex algorithm, direct search methods)*. Durch Vergleich der Zielfunktion - ausgewertet für verschiedene Parametersätze - werden neue Parameterkombinationen hinzugefügt, bis das globale Minimum der Zielfunktion gefunden ist. Diese Verfahren sind somit auch bei schlecht gestellten Problemen und beliebigen Zielfunktionen anwendbar, sind aber im allgemeinen mit einem nicht akzeptierbaren Berechnungsaufwand verbunden.

Die Nichtlinearität der Zielfunktion hinsichtlich der Parameter führt dazu, dass der Optimierungsprozess iterativ durchgeführt werden muss. Dabei wird der Parametervektor $\mathbf{p}_k$ mit einem Schritt der Länge α_k in Richtung $\mathbf{b}_k$ derart verändert, dass eine neue, verbesserte Schätzung $\mathbf{p}_{k+1}$ entsteht.

$$\mathbf{p}_{k+1} = \mathbf{p}_k + \Delta\mathbf{p}_k = \mathbf{p}_k + \alpha_k \cdot \mathbf{b}_k \tag{3.11}$$

Der Vektor **b** und der Skalar α sind so zu wählen, dass die Zielfunktion (3.10) bei jedem Iterationsschritt vermindert wird:

$$\zeta(\mathbf{p}_{k+1}) < \zeta(\mathbf{p}_k) \tag{3.12}$$

Die spezielle Form der Zielfunktion (3.10) erlaubt es, einen effizienten Algorithmus zu entwickeln. Die Grundidee findet sich in Newton's Ansatz. Dessen Vereinfachung führt auf die Methode nach Gauss-Newton (siehe Kapitel 3.6.3). Probleme bei der Anwendung des Gauss-Newton-Verfahrens hat zu einer Modifikation geführt, welche nach Levenberg und Marquardt benannt ist. Allen Verfahren ist gemeinsam, dass sie sowohl Kenntnisse über den Gradienten der Zielfunktion als auch eine Schätzung der Hesseschen Matrix benötigen.

3.6.2 Gradient und Hessesche Matrix

In diesem Kapitel werden als Vorbereitung für die einzelnen Minimierungsverfahren die Ausdrücke für den Gradienten und die Hessesche Matrix der Zielfunktion zusammengestellt.

Aus Gründen der Übersichtlichkeit wird die Zielfunktion in Matrixschreibweise angegeben:

$$\zeta(\mathbf{p}) = \sum_{i=1}^{M} f_i^2(\mathbf{p}) = \mathbf{f}(\mathbf{p})^T \mathbf{f}(\mathbf{p}) \tag{3.13}$$

wobei M=n+m und f_i das i-te, mit dem Reziprokwert der Standardabweichung gewichtete Residuum darstellt:

$$f_i = \frac{1}{\sigma_i}(z_i^* - z_i(\mathbf{p})) \tag{3.14}$$

Im Falle korrelierter Beobachtungen muss die Kovarianzmatrix **C** zuerst in geeigneter Weise zerlegt werden:

$$\mathbf{C} = \sum_{i=1}^{M} \lambda_i \mathbf{e}_i \mathbf{e}_i^T \tag{3.15}$$

Dabei ist $\mathbf{e}_i$ der normierte i-te Eigenvektor der Matrix **C** und λ_i der dazugehörige Eigenwert. Da **C** eine positiv definite Matrix ist, sind deren Eigenwerte stets positiv und man kann schreiben:

$$f_i = \lambda_i^{-1/2} \cdot \sum_{j=1}^{M} (z_j^* - z_j(\mathbf{p})) \cdot e_{ji} \tag{3.16}$$

Die Schreibweise (3.13) führt zu einfacheren Ausdrücken bei der Behandlung des Minimierungsalgorithmus; bei der Fehleranalyse wird wieder auf die ursprüngliche Version (3.10) zurückgegriffen.

Die Zielfunktion ζ ist das Quadrat der gewichteten Residuen. Mit $\hat{\zeta}$ soll nun eine Zielfunktion bezeichnet werden, die ein Polynom zweiten Grades in den Parameter p_i darstellt:

$$\hat{\zeta}(\mathbf{p}) \equiv a + \mathbf{b}^T \cdot \mathbf{p} + \frac{1}{2} \mathbf{p}^T \mathbf{H}\, \mathbf{p} \tag{3.17}$$

Dies ist nicht gleichbedeutend mit der Aussage, dass das Modell f_i linear in den Parametern ist, obwohl ein lineares Modell auf eine Zielfunktion des Typs (3.17) führt.

Die Ableitung der Zielfunktion (3.13) hinsichtlich des Parameters p_j ergibt

$$g_j = 2 \sum_{i=1}^{M} f_i \frac{\partial f_i}{\partial p_j} \tag{3.18}$$

Definiert man die Jacobimatrix **J** als

$$\mathbf{J} = \begin{bmatrix} \frac{\partial f_1}{\partial p_1} & \cdots & \frac{\partial f_1}{\partial p_n} \\ \vdots & & \vdots \\ \frac{\partial f_M}{\partial p_1} & \cdots & \frac{\partial f_M}{\partial p_n} \end{bmatrix} \tag{3.19}$$

lässt sich der Gradientenvektor wie folgt angeben:

$$\mathbf{g(p)} = 2\,\mathbf{J}^T\mathbf{(p)}\,\mathbf{f(p)} \tag{3.20}$$

Der Gradientenvektor kann in der praktischen Anwendung auf unterschiedliche Weise berechnet werden. Die Herleitung analytischer Ausdrücke kann sich entweder auf die Bilanzgleichungen in ihrer ursprünglichen oder diskretisierten Form abstützen. Die numerische Berechnung des Gradienten bzw. der Jacobimatrix durch Perturbation der Parameter und Bildung finiter Differenzen hat den grossen Vorteil, dass Änderungen in den Bilanzgleichungen vorgenommen werden können, ohne auf die Formulierung des Inversen Problems Rücksicht nehmen zu müssen. Der Nachteil der Perturbationsmethode liegt im grossen Berechnungsaufwand, muss doch für die Bestimmung des Gradienten das Direkte Problem (n+1)-mal, bei der Verwendung zentrierter Differenzen sogar (2n+1)-mal gelöst werden. Eine elegante Lösung bietet die *Adjoint state method* dar. Dabei wird mittels eines neuen Gleichungssystems, bestehend aus den *Adjoint state equations*, der sogenannte adjungierte Systemzustand berechnet. Er enthält eine Information über das Systemverhalten und beschreibt für jeden Ort des Modellgebietes den Einfluss einer Injektion einer Volumeneinheit auf die Zielfunktion. Daraus lässt sich der Gradientenvektor ermitteln. Der Vorteil dieses Verfahrens besteht darin, dass der adjungierte Zustand nur einmal gelöst werden muss - unabhängig von der Anzahl der zu schätzenden Parameter - um den Gradienten der Zielfunktion bestimmen zu können. Ein Nachteil des Verfahrens liegt in der Tatsache, dass die Jacobimatrix, die für die anschliessende Fehleranalyse von Bedeutung ist, nicht berechnet wird. Die Adjoint state Methode wurde von NEUMAN (1980), CARRERA (1984) und KUHLMANN (1992) für die gesättigte Grundwasserströmung eingesetzt. Sie wird hier nicht weiter besprochen. Wegen der grossen Anzahl Parameter und der komplizierten Bilanzgleichungen, die dem Simulationsprogramm TOUGH zugrunde liegen, wird für das im Rahmen dieser

Arbeit entwickelte Computerprogramm ITOUGH die Perturbationsmethode verwendet, wobei zwischen einfachen und zentrierten finiten Differenzen gewählt werden kann.

Die zweite partielle Ableitung der Zielfunktion, $\nabla^2\zeta(\mathbf{p})$, ergibt die Hessesche Matrix **H**:

$$\mathbf{H} = \begin{bmatrix} \frac{\partial^2\zeta}{\partial p_1^{\,2}} & \cdots & \frac{\partial^2\zeta}{\partial p_1 \partial p_n} \\ \vdots & & \vdots \\ \frac{\partial^2\zeta}{\partial p_n \partial p_1} & \cdots & \frac{\partial^2\zeta}{\partial p_n^{\,2}} \end{bmatrix} \tag{3.21}$$

Die einzelnen Glieder erhält man durch Differenzieren der Gleichung (3.18):

$$H_{kj} = 2 \sum_{i=1}^{M} \left[\frac{\partial f_i}{\partial p_k} \frac{\partial f_i}{\partial p_j} + f_i \frac{\partial^2 f_i}{\partial p_k \partial p_j} \right] \tag{3.22}$$

Definiert man im weiteren die Hessesche Matrix der Funktionen f_i mit $\mathbf{G_i}$,

$$\mathbf{G_i(p)} = \nabla^2 f_i(\mathbf{p}) \tag{3.23}$$

kann die komplette Hessesche Matrix der Zielfunktion $\zeta(\mathbf{p})$ wie folgt geschrieben werden:

$$\mathbf{H(p)} = 2\,\mathbf{J^T(p)}\,\mathbf{J(p)} + 2 \sum_{i=1}^{M} f_i(\mathbf{p})\,\mathbf{G_i(p)} \tag{3.24}$$

Bezeichnet man den Summenterm in (3.24) mit $\mathbf{S(p)}$, erhält man folgende Gleichung:

$$\mathbf{H(p)} = 2\left[\mathbf{J^T(p)}\,\mathbf{J(p)} + \mathbf{S(p)}\right] \tag{3.25}$$

Hiermit sind die Ausdrücke für den Residuenvektor **f** (3.14, 3.16), den Gradientenvektor **g** (3.20) und die Hessesche Matrix **H** (3.25), die sich aus der quadrierten Jacobimatrix **J** und dem Term **S** zusammensetzt, eingeführt, sodass nun auf die Unterschiede in den einzelnen Optimierungsverfahren eingegangen werden kann.

3.6.3 Methode nach Newton

Die Methode nach Newton ist bekannt aus der Nullstellenbestimmung beliebiger konvexer Funktionen. Im Falle der Minimumsbestimmung muss der Gradient der Zielfunktion $\hat{\zeta}$ am Minimum verschwinden. Der Gradient am Minimum lässt sich als Taylorreihe aus dem Gradienten an einem beliebigen Punkt $\mathbf{p_k}$ wie folgt entwickeln:

$$\mathbf{g(p_{k+1}) = g(p_k) + H \cdot \Delta p_k} \tag{3.26}$$

Durch Nullsetzen erhält man:

$$\mathbf{H(p_k) \cdot \Delta p_k = -g(p_k)} \tag{3.27}$$

Mit $\mathbf{f_k = f(p_k)}$, $\mathbf{J_k = J(p_k)}$ und $\mathbf{S_k = S(p_k)}$ ergibt sich aus (3.11), (3.20), (3.25) und (3.27) eine Anweisung für den k-ten Iterationsschritt nach Newton wie folgt:

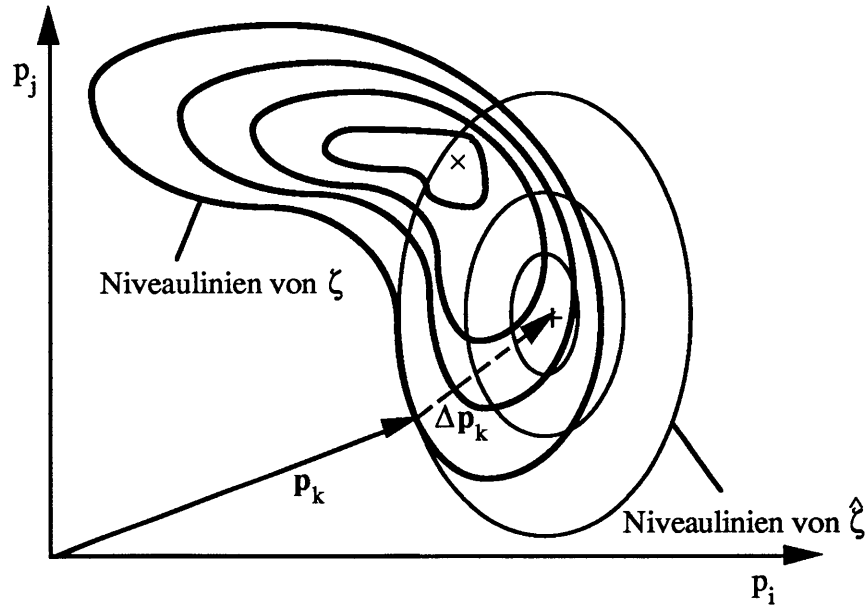
$$\mathbf{(J_k^T J_k + S_k) \cdot \Delta p_k = - J_k^T f_k} \tag{3.28}$$

$$\mathbf{p_{k+1} = p_k + \Delta p_k} \tag{3.29}$$

Im einfachen Falle linearer Funktionen $\mathbf{f(p)}$ bzw. $\mathbf{z(p)}$ führt Newtons Methode unabhängig vom Startwert $\mathbf{p_k}$ in einem einzigen Schritt zum Minimum. Bei nicht-linearen Funktionen - und im Falle von TOUGH sind die Bilanzgleichungen nicht-linear in den Modellparametern - bzw. einer Zielfunktion, welche eine höhere Ordnung als (3.17) aufweist, sind mehrere Iterationen notwendig. Die Grundidee des Minimierungsalgorithmus kann nun folgendermassen wiedergegeben werden:

Die aktuelle Zielfunktion wird im Punkt $\mathbf{p_k}$ durch ein Hyperellipsoid im n-dimensionalen Parameterraum approximiert und durch Ausführen eines Iterationsschrittes nach Newton dessen Minimum bestimmt. Der neue Parametersatz $\mathbf{p_{k+1}}$ wird als Ausgangspunkt für den nächsten Iterationsschritt gewählt. Das Verfahren wird solange fortgeführt, bis das lokale Minimum aufgrund eines Abbruchkriteriums genügend genau detektiert ist. Das Verfahren ist also nur für - zumindest lokal - konvexe Funktionen mit einer positivdefiniten Hesseschen Matrix anwendbar. Dies bedeutet, dass die Anfangsschätzung der Modellparameter nicht zu weit vom optimalen Wert entfernt sein darf. Der Algorithmus findet das nächstliegende, unter Umständen nur lokale Minimum. Im weiteren ist der Newtonschritt nur akzeptabel, wenn das Modell in der Umgebung des Punktes $\mathbf{p_{k+1}}$ annähernd linear ist bzw. die Zielfunktion (3.13) durch das Polynom (3.17) approximiert werden kann. Diese Bedingung ist im allgemeinen nur bei sehr kleinen Residuen, also in der Nähe des optimalen Punktes, erfüllt.

Im Falle zweier Parameter lässt sich das Verfahren graphisch darstellen (Figur 3.2). Die Niveaulinien der linearen Approximation des Modells $\hat{\zeta}$ bilden Ellipsen, welche sich an die tatsächlichen, aufgrund des nicht-linearen Modells berechneten Niveaulinien der Zielfunktion ζ anschmiegen. Der Newtonschritt errechnet das Minimum der linearen Approximation. Aus dem gezeigten Beispiel wird ersichtlich, dass die Annahme der Linearität zu einer ungenügenden Schätzung des optimalen Parametervektors führt und deshalb weitere Iterationsschritte notwendig sind.



Figur 3.2: Iterationsschritt nach Newton im nicht-linearen Modell

3.6.4 Methode nach Gauss-Newton

Die Schwierigkeit der Newton-Methode liegt in der Berechnung der Matrix $\mathbf{S(p)}$ in (3.25), müssen doch $M \cdot n \cdot (n+1)/2$ zweite Ableitungen bestimmt werden. Eine Möglichkeit besteht darin, den Term $\mathbf{S(p)}$ vollständig zu vernachlässigen; man erhält dann folgendes lineare Gleichungssystem:

$$\mathbf{J_k}^T \mathbf{J_k} \cdot \Delta \mathbf{p_k} = - \mathbf{J_k}^T \mathbf{f_k} \tag{3.30}$$

welches zusammen mit (3.29) die Gauss-Newton Methode definiert. Es stellt sich die Frage, inwieweit die vorgenommene Vereinfachung zulässig ist. Für lineare Modelle verschwinden die zweiten Ableitungen ($\mathbf{G_i(p)} = \mathbf{0}$, siehe (3.23)), so dass der Gauss-Newton Ansatz mit Newtons Methode identisch ist. Der Term $\mathbf{S(p)}$ ist zudem nahe bei $\mathbf{0}$, falls die Residuen ω_i bzw. $f_i(\mathbf{p})$ klein sind, was in unmittelbarer Nähe des Minimums

zutrifft. Sind die Residuen gross - entweder aufgrund eines schlechten Startwertes $\mathbf{p_k}$ oder stark streuender Messwerte $\mathbf{z^*}$ - wird das Matrixprodukt $\mathbf{J^TJ}$ schlecht konditioniert. Die Schrittlänge entlang des Vektors $\Delta\mathbf{p_k}$ ist im allgemeinen zu gross, so dass eine Verminderung der Zielfunktion nicht garantiert werden kann. Im nächsten Kapitel wird eine Modifikation des Gauss-Newton Ansatzes nach Levenberg-Marquardt vorgestellt, welche die auftretenden Schwierigkeiten zu überwinden sucht.

3.6.5 Die Modifikation nach Levenberg-Marquardt

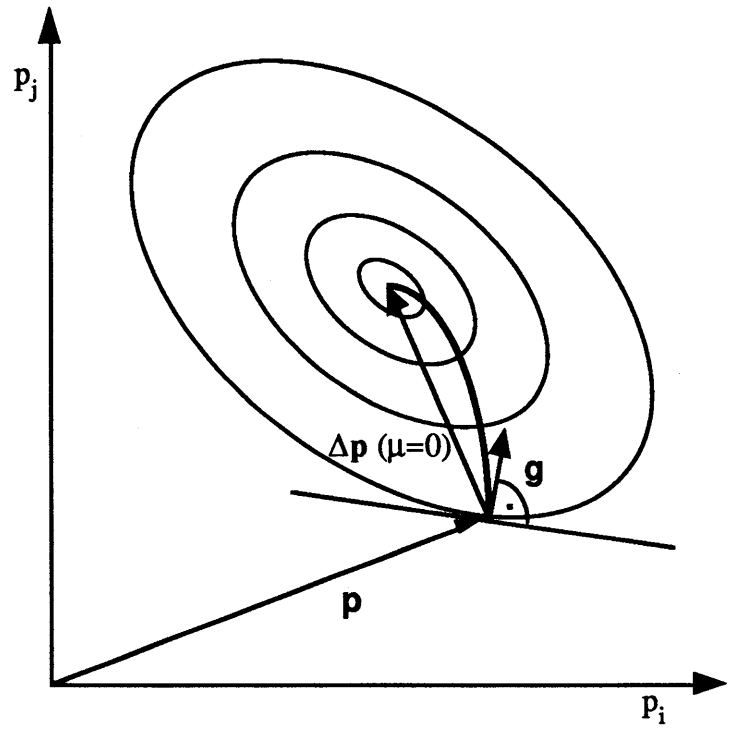
Die Gleichung (3.30) wird folgendermassen modifiziert:

$$(\mathbf{J_k}^T\mathbf{J_k} + \mu_k\cdot\mathbf{I})\cdot\Delta\mathbf{p_k} = -\mathbf{J_k}^T\mathbf{f_k} \qquad (3.31)$$

Dabei ist der Levenberg-Parameter $\mu_k \geq 0$ eine skalare Grösse und $\mathbf{I}$ die Einheitsmatrix mit der Dimension n×n. Für $\mu_k = 0$ entspricht $\Delta\mathbf{p_k}$ einem Gauss-Newton Schritt. Mit steigendem μ_k wird die Matrix $(\mathbf{J^TJ} + \mu\mathbf{I})$ zunehmend positiv-definit, die Diagonale überwiegt und man erhält für $\mu_k \to \infty$ einen infinitesimalen Schritt entlang des Gradienten der Zielfunktion: $\Delta\mathbf{p_k} \to -\mu_k^{-1}\,\mathbf{J_k}^T\,\mathbf{f_k}$. Durch die Wahl des Parameters μ_k kann zwischen einem stets erfolgreichen, aber kleinen Schritt entlang des Gradienten $\mathbf{g}$ und einem Gauss-Newton Schritt $\Delta\mathbf{p}$ (μ=0) mit einer quadratischen Konvergenzrate gewählt werden. Dieses Verhalten ist in Figur 3.3 - wiederum für n=2 - anschaulich dargestellt. Die Endpunkte des Vektors $\Delta\mathbf{p_k}$ durchlaufen die fett gezeichnete Linie für $\infty \geq \mu_k \geq 0$.

LEVENBERG (1944) schlägt vor, den Faktor μ_k so zu wählen, dass $\zeta(\mathbf{p_k} + \Delta\mathbf{p_k})$ minimiert wird. Das iterative Suchen dieses Minimums durch Variieren des Parameters μ_k und Lösen des Gleichungssystems (3.31) ist aufwendig. MARQUARDT (1963) verbesserte die Effizienz des Verfahrens, indem er einen Anfangswert für μ_k vorgibt und diesen um einen Faktor $\nu \geq 1$ erhöht, falls der Iterationsschritt nicht erfolgreich war, d.h. wenn $\zeta(\mathbf{p_{k+1}}) > \zeta(\mathbf{p_k})$; umgekehrt wird μ_k um den Faktorer $\nu < 1$ niedrigt, falls der Wert der Zielfunktion abnimmt. Dies bewirkt, dass das Verfahren näher an die Methode von Gauss-Newton herangebracht wird. Zu Beginn des Iterationsverfahrens empfiehlt es sich jedoch, mit einem relativ grossen Wert für μ_k einen Schritt entlang des Gradienten durchzuführen. Mit abnehmendem Abstand des Vektors $\mathbf{p_k}$ vom Minimum $\mathbf{p_{opt}}$ wird die Approximation der Zielfunktion durch ein Polynom zweiten Grades (3.17) immer besser, was eine Erniedrigung des Parameters μ_k und somit die Annäherung an einen Gauss-Newton Schritt rechtfertigt. Obwohl weitere Verfeinerungen des hier vorgeführten

Ansatzes existieren [siehe z.B. SCALES (1985)], soll die Diskussion des Minimierungsalgorithmus hier abgebrochen werden.



Figur 3.3: Einfluss des Levenberg-Parameters auf den Optimierungsschritt

3.7 Fehleranalyse

3.7.1 Vorbemerkungen

Die Schätzung von Modellparametern ist mit Unsicherheit verbunden, da sie aufgrund einer fehlerbehafteten Beschreibung des Systemzustandes erfolgt. In Kapitel 3.5.4 wurde festgehalten, dass Maximum-Likelihood-Schätzung zu erwartungstreuen, normalverteilten Parametern mit minimaler Varianz führt. In diesem Kapitel soll eine Schätzung dieses Genauigkeitsmasses gegeben werden. Dabei wird von der Voraussetzung ausgegangen, dass der Systemzustand in der unmittelbaren Umgebung des optimalen Parametersatzes durch eine lineare Funktion approximiert werden kann. Man muss sich der Tatsache bewusst sein, dass bei starken Nichtlinearitäten die Genauigkeit der Parameter überschätzt wird. Eine mögliche Überprüfung dieser Annahme wird in Kapitel 3.7.8 kurz angesprochen. Ist die Genauigkeit der geschätzten Parameter bekannt, kann mit Hilfe des Fehlerfortpflanzungsgesetzes deren Einfluss auf eine Prognoseberechnung untersucht werden.

3.7.2 Empirische Varianz

Bei der Beschreibung des Stochastischen Modells wurde die a priori Varianz der Gewichtseinheit σ_0^2 eingeführt. Gesucht ist nun eine Schätzung $\hat{\sigma}_0^2$ für σ_0^2 auf der Basis der vorhandenen Messdaten. CONZETT (1985) zeigt, dass

$$\hat{\sigma}_0^2 = \frac{\omega^T \mathbf{V}^{-1} \omega}{M - n} \tag{3.32}$$

eine erwartungstreue Schätzung für σ_0^2 darstellt. Dabei ist ω der Vektor der Residuen, berechnet mit dem optimalen Parametersatz; $\mathbf{V}$ ist die a priori bestimmte Kofaktorenmatrix gemäss (3.1). M ist die totale Anzahl Beobachtungen und n die Anzahl der geschätzten Parameter. Die Differenz (M-n) wird als Freiheitsgrad bezeichnet. $\hat{\sigma}_0^2$ wird *a posteriori Varianz der Gewichtseinheit* oder kürzer *empirische Varianz* genannt.

An dieser Stelle sei auf eine iterative Schätzung der $(\sigma_0^2)_i$, $i \in \{p,d,f,t,s\}$, bzw. von λ_{jk} eingegangen, welche Beobachtungen verschiedenen Typs gegenseitig gewichten. In Analogie zu (3.32) erhält man (CARRERA & NEUMAN 1986a):

$$\left(\hat{\sigma}_0^2\right)_i = \frac{\omega_i^T \mathbf{V}_i^{-1} \omega_i}{m_i} \tag{3.33}$$

und eingesetzt in (3.4)

$$\hat{\lambda}_{jk} = \frac{(\hat{\sigma}_0^2)_j}{(\hat{\sigma}_0^2)_k} \tag{3.34}$$

Durch mehrfaches Neubestimmen der $(\hat{\sigma}_0^2)_i$ im Laufe des Optimierungsverfahrens kann eine allenfalls ungünstige gegenseitige Gewichtung korrigiert werden. Sind z.B. Beobachtungen des Druckes und gleichzeitig Fliessraten vorhanden, deren Fehlerstruktur unbekannt ist, können durch eine falsche Annahme hinsichtlich des Wertes von $(\sigma_0^2)_f$ die Beiträge der Druckmessungen zur Zielfunktion teilweise oder vollständig unterdrückt werden. Eine Schätzung der Genauigkeit der Fliessraten durch Berechnung des Faktors $\hat{\lambda}_{df}$ beseitigt diesen Mangel. Da die Formeln (3.33) bzw. (3.34) Approximationen darstellen, deren Qualität in der Nähe des Optimums zunimmt, ist ein iteratives Vorgehen mit mehrmaligem Anpassen der Gewichtung notwendig.

Als weiterer Hinweis sei die Parameterschätzung mit Hilfe des Kalmanfilters erwähnt. Bei diesem Verfahren werden im Verlaufe der Beobachtung eines (hoch)dynamischen Systemverhaltens (z.B. während eines Grosspumpversuches) der erwartete und gemessene Wert miteinander verglichen und durch permanente Anpassung des Stochastischen

Modells gegenseitig gewichtet. Auf diese Weise können stark streuende Beobachtungen gefiltert und zugleich die Schätzung der Parameter verbessert und beurteilt werden. Eine gute Einführung in die Theorie findet sich bei NEBIKER (1987); Anwendungsbeispiele im Rahmen der Hydrogeologie finden sich bei GEER ET AL. (1991) und SACHER (1983).

Das hier gezeigte Verfahren widerspricht der im Kapitel 3.4 aufgestellten Forderung, dass man sich *a priori* Gedanken über die Fehlerstruktur zu machen hat. Definiert man das Stochastische Modell auf der Basis der aktuellen Messdaten, vergibt man sich die Chance, durch einen Modelltest (siehe Kapitel 3.7.3) allfällige Fehler im Stochastischen oder Funktionalen Modell zu entdecken. Im allgemeinen sind jedoch die statistischen Eigenschaften der Beobachtungen bzw. der Residuen zuwenig bekannt, und man muss sich auf eine *ad hoc* durchgeführte Schätzung abstützen.

3.7.3 Modelltest

Betrachtet man die Schätzung (3.32) als Zufallsvariable, kann anhand einer Teststatistik abgeklärt werden, ob die empirische Varianz $\hat{\sigma}_0^2$ signifikant von der a priori bestimmten Varianz σ_0^2 abweicht. Ist dies der Fall, muss davon ausgegangen werden, dass entweder die Genauigkeit der Residuen falsch eingeschätzt wurde (Fehler im Stochastischen Modell), oder dass die Annahme rein zufällig verteilter Residuen nicht statthaft war. Letzteres führt zur Schlussfolgerung, dass eine systematische Abweichung zwischen berechnetem und beobachtetem Systemzustand und somit ein Fehler im Funktionalen Modell vorliegt.

Es lässt sich zeigen, dass die Summe aus k quadrierten, standardnormalverteilten Zufallsvariablen χ_k^2-verteilt ist. Aus (3.32) ergibt sich (MAURER 1980):

$$(M - n)\cdot\hat{\sigma}_0^{\,2} = \sigma_0^{\,2}\,\chi^2_{M-n} \tag{3.35}$$

und somit

$$\frac{\hat{\sigma}_0^{\,2}}{\sigma_0^{\,2}} = \frac{\chi^2_{M-n}}{(M-n)} \tag{3.36}$$

Es sei eine Hypothese H_0 formuliert, die besagt, dass der Quotient (3.36) den Wert Eins annehme. Die Teststatistik soll überprüfen, ob diese Hypothese anzunehmen oder zu verwerfen ist, mit anderen Worten, ob $(\hat{\sigma}_0^2/\sigma_0^2)$ signifikant vom Wert Eins abweicht oder nicht. Es gilt, dass ein Quotient zweier χ^2-verteilter Zufallsvariablen eine Zufallsvariable

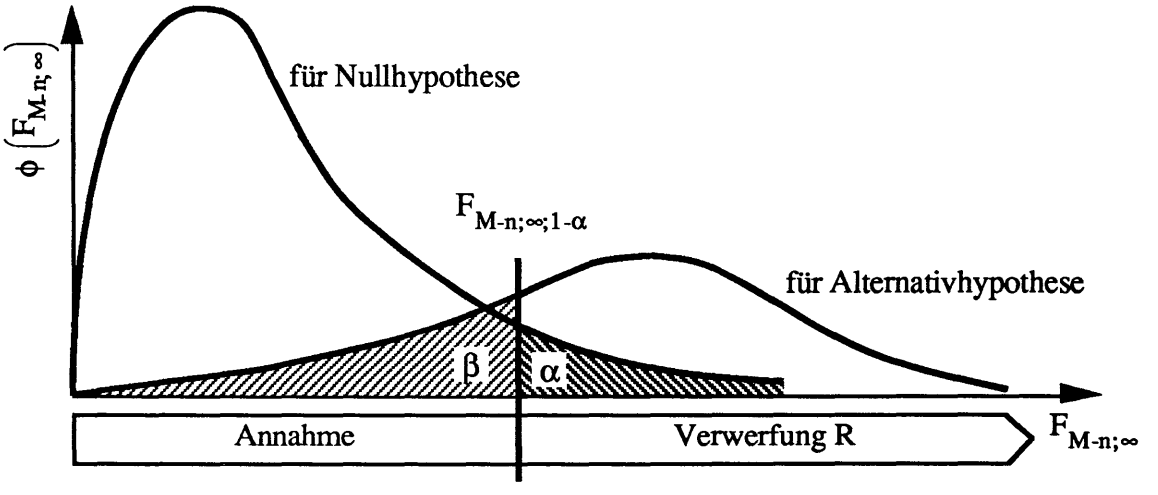
ergibt, deren Dichte man als F-Verteilung mit den Freiheitsgraden f_1 und f_2 bezeichnet. Betrachtet man die σ_0^2 als eine empirische Varianz mit dem Freiheitsgrad $f_2 \rightarrow \infty$, ergibt sich folgende Teststatistik:

$$\frac{\hat{\sigma}_0^2}{\sigma_0^2} = F_{M-n;\infty} \tag{3.36a}$$

Ferner wird eine Verwerfungsregion R gewählt. Die Wahrscheinlichkeit, dass die Teststatistik $F_{M-n;\infty}$ in R zu liegen kommt, beträgt α und ist identisch mit der Wahrscheinlichkeit, die Hypothese H_0 zu verwerfen, obwohl sie korrekt ist (Fehler 1. Art):

$$P\left(\frac{\hat{\sigma}_0^2}{\sigma_0^2} \in R \mid H_0\right) = \alpha \tag{3.37}$$

Figur 3.4 zeigt schematisch die Dichte ϕ der Zufallsvariable $F_{M-n;\infty}$ sowie den Verwerfungsbereich R mit der Irrtumswahrscheinlichkeit α.



Figur 3.4: F-Verteilung, Verwerfungsbereich, Irrtumsrisiko erster und zweiter Art

Liegt die Realisierung $(\hat{\sigma}_0^2/\sigma_0^2)$ links des Wertes $F_{M-n;\infty;1-\alpha}$, so besteht kein Grund, das Mathematische Modell zu verwerfen. Dieser Grenzwert ist durch die Wahl des Irrtumrisikos α festgelegt. Aus der Figur 3.4 wird ersichtlich, dass die Hypothese H_0 eher verworfen wird, wenn α zunimmt. Ebenso leuchtet ein, dass mit zunehmendem Freiheitsgrad der realisierte Quotient (3.35) eher in den Verwerfungsbereich zu liegen kommt als bei geringerem Freiheitsgrad. Im weiteren sei die wichtige Feststellung angebracht,

dass der hier vorgestellte Test nicht vollständig ist. Über die Irrtumswahrscheinlichkeit, dass die Nullhypothese angenommen wird, obwohl eine Alternativhypothese H_i korrekt wäre (Fehler 2. Art mit Irrtumsrisiko β), kann jedoch nur dann eine Aussage gemacht werden, wenn die Dichte der Teststatistik unter den in Frage kommenden Alternativen bekannt ist. Details über die Berechnung der Zuverlässigkeit finden sich bei CAROSIO (1990). Für den hier behandelten Modelltest ist die Bemerkung von Bedeutung, dass bei Annahme des Modelltests die Nullhypothese nicht verifiziert ist; es kann lediglich ausgesagt werden, dass keine Hinweise für eine Ablehnung der Nullhypothese vorliegen.

Für die folgenden Fehlerbetrachtungen muss die Entscheidung gefällt werden, ob mit der *a priori* oder *a posteriori* Varianz gerechnet werden soll. Tabelle 3.2 enthält als Anhaltspunkte die Konsequenzen, die es aus dem Resultat des Modelltests zu ziehen gilt.

	Modelltest	Konsequenz
(a)	$(\hat{\sigma}_0^2/\sigma_0^2) > F_{M-n;\infty;1-\alpha}$	nach Fehlern im Modell suchen
(b)	$1 < (\hat{\sigma}_0^2/\sigma_0^2) < F_{M-n;\infty;1-\alpha}$	mit $\hat{\sigma}_0^2$ weiterrechnen
(c)	$(\hat{\sigma}_0^2/\sigma_0^2) < 1$	Beurteilung auf σ_0^2 stützen, allenfalls Stochastisches Modell überprüfen

Tabelle 3.2: Konsequenzen aus Modelltest

Es sei nochmals darauf hingewiesen, dass die Durchführung des Testes Hinweise auf systematische Fehler geben kann, falls die zufälligen Fehler der Residuen *a priori* zuverlässig bestimmt werden. Die Schwierigkeit, Beobachtungs- und insbesondere Modellfehler quantitativ zu beschreiben, dürfte ein Grund dafür sein, warum der Modelltest in der Hydrogeologie selten zur Anwendung kommt, während er in anderen Anwendungsgebieten (z.B. Geodäsie) ein fester Bestandteil jeder seriös durchgeführten Parameterschätzung darstellt.

3.7.4 Kovarianzmatrix der geschätzten Parameter

Die Wahrscheinlichkeitsdichte der geschätzten Parameter ist bei Normalverteilung durch deren Mittelwert und Kovarianzmatrix vollständig beschrieben:

$$\hat{\mathbf{p}} \sim N(\tilde{\mathbf{p}}, \mathbf{C}_p)$$

Wegen der Erwartungstreue der Maximum-Likelihood-Schätzung entspricht der Mittelwert dem geschätzten Wert $\hat{\mathbf{p}}$. Aus dem Fehlerfortpflanzungsgesetz für zufällige Fehler ergibt sich für die Kofaktorenmatrix:

$$\mathbf{V}_p = (\mathbf{J}^T \mathbf{V}^{-1} \mathbf{J})^{-1} \tag{3.38}$$

und analog zu (3.1) für die Kovarianzmatrix:

$$\mathbf{C}_p = s_0^2 \mathbf{V}_p \tag{3.39}$$

Der Faktor s_0^2 steht entweder für die a priori Varianz der Gewichtseinheit σ_0^2 oder die empirische Varianz $\hat{\sigma}_0^2$ gemäss (3.32) (siehe Tabelle 3.2). Der Klammerausdruck in (3.38) wird *Fisher information matrix* oder Normalgleichungsmatrix genannt; sie kann interpretiert werden als ein Mass für den Informationsgehalt der Messdaten hinsichtlich der gesuchten Parameter. Die Jacobimatrix **J** in (3.38) enthält folgende Submatrizen:

$$\mathbf{J} = \begin{bmatrix} \mathbf{J}_p \\ \mathbf{J}_q \end{bmatrix} \tag{3.40}$$

Dabei ist $\mathbf{J}_p$ eine Einheitsmatrix der Dimension n×n; sie bezieht sich auf die ersten n (fingierten oder tatsächlichen) Beobachtungen der Parameter (A-priori-Information). Die Komponenten der Submatrix $\mathbf{J}_q$ beschreiben die Sensitivität des Systemzustands z_i (i=n+1...M) hinsichtlich einer Änderung des Parameters p_j (j=1...n):

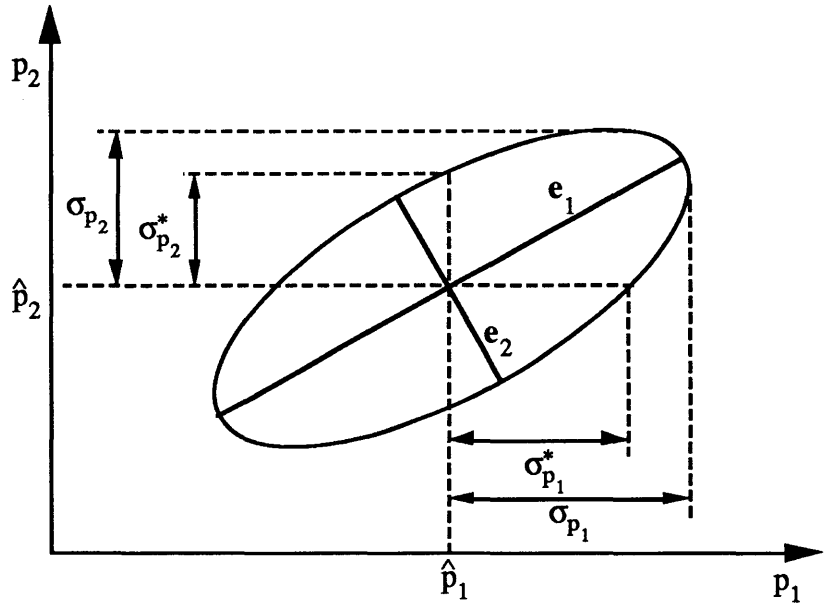
$$\mathbf{J}_q = \begin{bmatrix} \frac{\partial z_{n+1}}{\partial p_1} & \cdots & \frac{\partial z_{n+1}}{\partial p_n} \\ \vdots & & \vdots \\ \frac{\partial z_M}{\partial p_1} & \cdots & \frac{\partial z_M}{\partial p_n} \end{bmatrix} \tag{3.41}$$

Die Matrix **V** schliesslich ist die a priori definierte Kofaktorenmatrix der Beobachtungen (siehe (3.1) - (3.3)).

Die Kovarianzmatrix der geschätzten Parameter C_p enthält eine Information über die Genauigkeit und Korrelation der geschätzten Parameter. Ein Diagonalelement c_{ii} enthält die Varianz eines Parameters, d.h. das Konfidenzintervall dieses Parameters ist proportional zur Standardabweichung $\hat{\sigma}_i$:

$$\hat{\sigma}_i = \sqrt{c_{ii}} \tag{3.42}$$

Dies entspricht der Projektion einer n-dimensionalen Verteilung auf eine Achse und beschreibt somit die eindimensionale *Randverteilung* des i-ten Parameters. Der erwähnte Proportionalitätsfaktor hängt vom Signifikanzniveau α und vom Freiheitsgrad f=M-n ab (siehe Kapitel 3.7.7). Im Gegensatz dazu beschreibt die sogenannte *bedingte Verteilung* mit $\hat{\sigma}_i^*$ die Variabilität des Parameters i unter der Voraussetzung, dass alle übrigen Parameter exakt bekannt sind. Dieses Fehlermass ist im allgemeinen von geringerem Interesse [Details finden sich in CONZETT (1985)]. Der Sachverhalt ist in Figur 3.5 für zwei relativ stark korrelierte Parameter p_1 und p_2 dargestellt. Die Fehlerellipse in Figur 3.5 kann auch als die zweidimensionale Randverteilung eines mehrdimensionalen Konfidenzellipsoides betrachtet werden.



Figur 3.5: Zweidimensionale Konfidenzregion

Die Elemente des n-dimensionalen Fehlerellipsoides berechnen sich über eine Eigenwertanalyse der Matrix C_p. Die Längen der Halbachsen sind proportional zur Wurzel der Eigenwerte λ_i; die Richtung derselben erhält man aus den zugeordneten Eigenvektoren $\mathbf{e}_i$. Grosse Eigenwerte verweisen auf eine Linearkombination schlecht bestimmter Parameter. Die Komponenten des dazugehörigen Eigenvektors enthalten die relativen Beiträge der einzelnen Parameter. Parameterkombinationen entlang dieser Hauptachse

ergeben ähnliche Werte für die Zielfunktion und sind somit schlecht bestimmbar. Diese negative Eigenschaft ist meist verantwortlich für ein instabiles Verhalten; das Inverse Problem ist schlecht gestellt (siehe Kapitel 3.8). Die sogenannte Konditionszahl, definiert als der Quotient aus dem grössten und dem kleinsten Eigenwert (vorzugsweise berechnet anhand einer Kofaktorenmatrix, deren Elemente durch das Abspalten der Faktoren $(\sigma_0^2)_i$ normiert sind), ist ein Indikator für die Ausgestaltung der Zielfunktion in der Nähe des Minimums. Ist die Konditionszahl nahe bei Eins, deutet dies auf eine gleichmässige, parabolische Form der Zielfunktion und somit gleiche Schätzunsicherheit für alle Parameter hin. Grosse Konditionszahlen verweisen auf lange, enge Täler der Zielfunktion. Das Problem ist in diesem Falle schlecht konditioniert. Sind die Parameter nicht oder nur schwach korreliert, ist einer der Koeffizienten des Eigenvektors nahe bei Eins; die jeweilige Hauptachse des Fehlerellipsoides verläuft annähernd parallel zur entsprechenden Koordinatenachse. Der Korrelationsfaktor r_{ij} zweier Parameter ($-1 < r_{ij} < 1$) berechnet sich wie folgt:

$$r_{ij} = \frac{c_{ij}}{c_{ii} \cdot c_{jj}} \tag{3.43}$$

Die hier vorgestellte Interpretation einer Kovarianzmatrix lässt sich auch auf die Kovarianzmatrix des geschätzten Systemzustandes (Kapitel 3.7.5) und die Beurteilung einer Prognoseberechnung (Kapitel 3.7.6) anwenden.

3.7.5 Kovarianzmatrix des berechneten Systemzustandes

Aus dem Fehlerfortpflanzungsgesetz für zufällige Fehler kann die Kovarianzmatrix des berechneten Systemzustand $\hat{\mathbf{z}}$ wie folgt angegeben werden:

$$\mathbf{C_z} = \mathbf{J}\,\mathbf{C_p}\,\mathbf{J}^T \tag{3.44}$$

mit der Jacobimatrix $\mathbf{J}$ gemäss (3.40). Es lässt sich zeigen (CONZETT 1985), dass die *a posteriori* Kofaktorenmatrix des Systemzustandes kleinere Varianzen enthält als die *a priori* Kofaktorenmatrix der Beobachtungen. Eine grosse Differenz der beiden Matrizen lässt auf eine gute Disposition der Beobachtungspunkte sowie genügende Überbestimmung schliessen. Im weiteren lassen sich aus $\mathbf{C_z}$ allfällig stark korrelierte Beobachtungen sofort erkennen.

3.7.6 Fortpflanzung von Unsicherheit

In diesem Kapitel wird die Frage behandelt, wie sich die Unsicherheiten der geschätzten Modellparameter auf das Resultat einer Prognoseberechnung auswirken. Für die Bestimmung der Verteilungsfunktion eines Resultates existieren zahlreiche Verfahren, deren Wahl von den Eigenschaften des Modells (linear oder nicht-linear), der Verteilung der Eingabeparameter (normalverteilt oder nicht normalverteilt) sowie der zur Verfügung stehenden Rechnerkapazität abhängt. Tabelle 3.3 gibt einen (unvollständigen) Überblick möglicher Verfahren.

Methode	Voraussetzung	Bemerkungen
Spektralanalyse	Stationarität der Parameter analytische Lösung	Formulierung als stochastische partielle Differentialgleichung (GELHAR 1990; DE MARSILY 1986)
Perturbationsmethode, lineare Fehleranalyse	kleine Varianzen, lineares Modell, Normalverteilung der Residuen	Gauss'sches Fehlerfort-pflanzungsgesetz für zufällige Fehler
Monte Carlo Simulationen sowie abgeleitete Verfahren (z.B. Latin Hypercube, turning band method etc.)	hohe Rechnerkapazität	keine Einschränkungen hinsichtlich Verteilung der Parameter, nicht-lineare Modelle zugelassen, ergibt vollständige Verteilungs-funktion der Resultate
Sensitivitätsanalyse, worst case analysis		deterministische Bestimmung des Resultates für bestimmte Parameter-kombinationen, keine Verteilungsfunktionen

Tabelle 3.3: Verfahren zur Schätzung der Unsicherheit einer Prognoseberechnung

Der allgemeinste Fall, nämlich ein nicht-lineares Modell, dessen Parameter unterschiedliche Verteilungen aufweisen, kann nur mittels einer Monte Carlo Simulation untersucht werden. Das Prinzip der Monte Carlo Methode besteht darin, die Eigenschaften der stochastischen partiellen Differentialgleichung durch zahlreiches Bestimmen der deterministischen Lösung mit verschiedenen Parametersätzen zu ermitteln und den resultierenden Systemzustand seinerseits einer statistischen Auswertung zu unterziehen. Der Hauptnachteil liegt im grossen Rechenbedarf, muss doch das Direkte Problem für eine grosse Anzahl stochastisch generierter Parametersätze gelöst werden, um eine Statistik der Resultate anfertigen zu können. Monte Carlo Simulationen zeigen, dass bei stark nichtlinearen Modellen und relativ grossen Varianzen die Resultate meist schiefe Verteilungen aufweisen. Der wahrscheinlichste Wert liegt nicht in der Mitte eines Konfidenzintervalles. Die im allgemeinen getroffene Annahme, dass die Resultate normalverteilt sind, bedarf deswegen einer kritischen Überprüfung. Normalverteilung darf angenommen werden, falls die Varianzen genügend klein sind, oder das Modell linear in den Parametern ist (siehe Bemerkungen unter Punkt 3.5.4.). Können diese Annahmen getroffen werden, ergibt sich die Kovarianzmatrix $\mathbf{C}_{z'}$ eines künftigen Systemzustandes z' aus dem Gauss'schen Fehlerfortpflanzungsgesetz analog zu (3.44)

$$\mathbf{C}_{z'} = \mathbf{J}' \, \mathbf{C}_{p'} \, \mathbf{J}'^{T} \tag{3.45}$$

Dabei ist $\mathbf{C}_{p'}$ die Kovarianzmatrix aller unsicheren Parameter. Der aus der Inversen Modellierung berechneten Kovarianzmatrix $\mathbf{C}_{p}$ (siehe Kapitel 3.7.4) können zusätzliche Parameter mit ihren Unsicherheiten hinzugefügt werden. Im weiteren bezeichnet $\mathbf{J}'$ die Jacobimatrix, welche die Sensitivität des künftigen Systemzustandes hinsichtlich der Parameter $\mathbf{p}'$ enthält. Da $\mathbf{J}'$ das erste Glied einer Taylorreihenentwicklung darstellt und mit (3.45) das zweite Moment (Varianz) berechnet werden kann, wird die Methode auch als *first order - second moment uncertainty analysis* bezeichnet. Für die Berechnung der Jacobimatrix mittels numerischer Methoden muss das Direkte Problem - bei Verwendung eines einfachen Differenzenquotienten - (n+1)-mal gelöst werden, was die Methode im Vergleich zu Monte Carlo Simulationen sehr attraktiv macht. Es empfiehlt sich jedoch, die Annahme einer symmetrischen Verteilung der Resultate zu überprüfen, z.B. indem man die Parameter um einen gewissen Betrag symmetrisch um ihren Mittelwert verändert und den Einfluss dieser Variation auf das Simulationsergebnis untersucht. Weisen die Abweichungen der Resultate von ihrem Mittelwert auf eine schiefe Verteilung hin, muss gegebenenfalls auf ein anderes Verfahren ausgewichen werden.

3.7.7 Intervallschätzung

Ist die Kovarianzmatrix eines geschätzten Parameters bekannt, kann ein Intervall angegeben werden, das den wahren Wert des Parameters p_i mit einer vorgegebenen Wahrscheinlichkeit $(1-\alpha)$ enthält. Für den Fall, dass die Varianz nicht bekannt ist, sondern empirisch geschätzt werden muss, ist das Konfidenzintervall für den Erwartungswert einer Normalverteilung t - verteilt mit f=M-n Freiheitsgraden:

$$P\left(\hat{p}_i - t_{f;1-\alpha/2} \cdot \hat{\sigma}_i < p_i < \hat{p}_i + t_{f;1-\alpha/2} \cdot \hat{\sigma}_i\right) = 1 - \alpha \qquad (3.46)$$

Mit zunehmendem Freiheitsgrad entsprechen die Quantile denjenigen der Normalverteilung mit $u_{95\%} \approx 2$.

Bei gleichzeitiger Schätzung mehrerer Parameter ist die Wahrscheinlichkeit, dass der wahre Parametersatz innerhalb der n-dimensionalen Konfidenzregion liegt, χ^2-verteilt mit n Freiheitsgraden. Die entsprechenden Quantile entnehme man z.B. MAURER (1980).

3.7.8 Einfluss der Nichtlinearität auf die Fehleranalyse

Wie bereits mehrmals erwähnt, enthält die Kovarianzmatrix C_p eine optimistische Schätzung der Unsicherheiten. Wegen allfälliger Nichtlinearitäten sind die tatsächlichen Varianzen stets grösser als die mittels einer linearer Approximation berechneten. Kann die Verteilung der geschätzten Parameter nicht durch eine Normalverteilung approximiert werden, d.h. ist die Varianz zu gross, der Stichprobenumfang zu klein und das Modell nicht-linear, müssen andere Statistiken herangezogen werden. Der Parameterwert kann zudem vom Erwartungswert abweichen, was den Modellannahmen der Inversen Modellierung (Maximum Likelihood bei Normalverteilung) widerspricht. In diesem Kapitel sollen ein paar Hinweise gegeben werden, wie eine allfällige Abweichung der tatsächlichen Verteilung von der Kovarianzmatrix C_p erkannt und die Schätzung gegebenenfalls verbessert werden kann.

Bereits erwähnt wurde die Möglichkeit, einzelne Parameter derart zu transformieren (z.B. durch Logarithmieren der Permeabilitätswerte), dass das Modell linearer wird. Die Konturlinien der Zielfunktion ζ, wie sie z.B. in Figur 3.2 abgebildet sind, erhalten so die Form eines (Hyper)ellipsoides, welches durch die Tangentialfläche $\hat{\zeta}$ gut approximiert wird.

Eine andere, allerdings ziemlich aufwendige Möglichkeit besteht darin, die Konturlinien in der Umgebung des optimalen Parametersatzes zu ermitteln, indem man den Wert der Zielfunktion für zahlreiche Punkte im n-dimensionalen Parameterraum berechnet und ein Bild der Konturlinien bzw. -flächen mit ζ=konstant erstellt. Ein Vergleich mit den genäherten Ellipsoiden auf demselben Niveau zeigt, ob die lineare Approximation gerechtfertigt ist oder nicht. Es sei $\mathbf{p}_{opt}$ der optimale Parametersatz beim Minimum $\hat{\zeta}_{opt}$. Die Eigenwertanalyse der Matrix $\mathbf{C}_p$ liefert die Elemente des mittleren Fehlerellipsoides (Länge und Orientierung der Hauptachsen, siehe Kapitel 3.7.4). Ein proportionales Vergrössern oder Verkleinern dieses Ellipsoides um k Standardabweichungen (Multiplizieren der Halbachsen mit dem Faktor k) ergibt folgenden Wert für die Niveaufläche der Zielfunktion:

$$\hat{\zeta}|_{s=k\cdot\sigma} = \hat{\zeta}(\mathbf{p}_{opt}) + k^2 \qquad (3.47)$$

Das Fehlerellipsoid lässt sich nun für verschiedene Werte für k einzeichnen und mit den dazugehörigen Konturflächen ζ=const gemäss (3.47) vergleichen. Weichen die beiden Flächen (bzw. Gebiete im n-dimensionalen Parameterraum) signifikant voneinander ab, ist die lineare Approximation nicht mehr zulässig. Es versteht sich, dass sich das hier gezeigte Verfahren nur für zwei-, allenfalls dreidimensionale Parameterräume eignet, da die Ermittlung der wahren Niveauflächen der Zielfunktion sehr aufwendig und ein graphisches Darstellen für n>3 unmöglich ist. Aus diesen Gründen schlägt CARRERA (1984) vor, den Vergleich der wahren und genäherten Werte auf n Punkte zu beschränken. Er schlägt eine Parameterkombination $\mathbf{p}_{Test,i}=\mathbf{p}_{opt}+\Delta\mathbf{p}_i$ vor, die jeweils auf einer Halbachse des Fehlerellipsoides (Eigenvektor $\mathbf{e}_i$) liegt, wobei:

$$\Delta\mathbf{p}_i = k\cdot\sqrt{\lambda_i}\cdot\mathbf{e}_i \qquad (3.48)$$

Man berechne nun $\zeta(\mathbf{p}_{Test,i})$ und vergleiche den Wert mit $\hat{\zeta}$ gemäss (3.47). Die Halbachse des ursprünglichen Ellipsoides kann sodann um einen berechenbaren Faktor vergrössert und eine neue Kovarianzmatrix ermittelt werden [für Details siehe CARRERA (1984)]. Das Verfahren hat den grossen Vorteil, dass es auch für Parameterräume der Dimension n>3 anwendbar ist, wobei das Direkte Problem nur n-mal zusätzlich gelöst werden muss zur Bestimmung der $\zeta(\mathbf{p}_{Test,i})$. Die Methode liefert einen symmetrischen Konfidenzbereich, dessen Grösse anhand der Zielfunktion in n Punkten bestimmt wird. Allfällige Asymmetrien können also nicht berücksichtigt werden. Trotzdem gibt dieses Verfahren eine Abschätzung des Einflusses nicht-linearer Effekte. Erste Erfahrungen mit dem Verfahren werden in Kapitel 4.2.7.3 diskutiert.

Im weiteren lassen sich durch das Einführen geeigneter Korrekturterme die nicht-linearen Effekte teilweise berücksichtigen. Ein Ansatz besteht darin, den quadratischen Term bei der Berechnung der Hesseschen Matrix auszuwerten [siehe z.B. CARRERA ET AL. (1990)], oder zusätzliche Maxima in der Umgebung des optimalen Punktes zu detektieren (VECCHIA & COOLEY 1987). Diese Ansätze werden hier jedoch nicht weiter erläutert.

Abschliessend sei nochmals darauf hingewiesen, dass die Gültigkeit einer linearen Abhängigkeit des Systemzustandes von den Modellparametern in der näheren Umgebung des optimalen Parametersatzes - ausgedrückt durch eine Varianz oder ein Konfidenzintervall - und somit die Annahme normalverteilter Schätzungen nicht immer gerechtfertigt ist. Insbesondere bei der Verwendung stark nicht-linearer Modelle zur Simulation von Zweiphasenströmungen muss diese Annahme überprüft werden. Eine ähnliche Schlussfolgerung gilt für die Abschätzung der Fortpflanzung von Unsicherheiten bei der Modellvoraussage.

3.8 Identifizierbarkeit, Eindeutigkeit und Stabilität

3.8.1 Vorbemerkungen

Eine der Hauptschwierigkeiten der Inversen Modellierung folgt aus dem Bestreben, anhand einer unsicheren und unvollständigen Beschreibung des Systemzustandes Informationen über das gesamte System (Modellstruktur inkl. Modellparameter) und dessen Verhalten zu gewinnen. Die pessimistische Aussage, dass das Inverse Problem meist schlecht gestellt ist, die gewählten Hypothesen demzufolge weder verifizierbar noch falsifizierbar sind, soll die praktische Relevanz, Nützlichkeit und auch den Erfolg von Modellberechnungen nicht in Abrede stellen - wichtig bleibt jedoch, dass man sich der Unsicherheiten bewusst ist und die Resultate entsprechend interpretiert.

Ziel dieses Kapitels ist es, durch die Diskussion der Begriffe Identifizierbarkeit, Eindeutigkeit und Stabilität auf die Problematik ungenügend oder schlecht gestellter Schätzaufgaben hinzuweisen. Daraus ergeben sich einige Regeln, die es beim Design eines Experimentes zu beachten gilt, sowie Hinweise für die Beurteilung allfälliger Schwierigkeiten bei der Parameterschätzung durch Inverse Modellierung. Diese Angaben werden nur von qualitativer Art sein, da sich mathematische Stabilitätskriterien meist auf Spezialfälle beziehen [für Details siehe CARRERA (1984); CHAVENT (1991)], welche für die praktische Anwendung von geringerer Bedeutung sind.

3.8.2 Definitionen

Ein Problem gilt als gut gestellt, falls (i) eine Lösung existiert, (ii) die Lösung eindeutig und (iii) stabil ist. Bei der Inversen Modellierung ist die Existenz einer Lösung im engeren Sinne gegeben. Diese Feststellung klammert jedoch die Frage aus, ob der gefundene Parametersatz physikalisch sinnvoll bzw. der gemessene Systemzustand genügend genau reproduziert wird. Die Existenz einer mathematischen Lösung garantiert nicht die Lösung der anstehenden Simulationsaufgabe, womit gleichzeitig ausgesagt ist, dass externe Informationen zur Beurteilung des gefundenen Parametersatzes beigezogen werden müssen. Die Frage, welche Modellstruktur aus einer Menge von Alternativen ausgewählt werden soll, wird kurz in Kapitel 3.8.4 behandelt. Hier wird also nur die Lösung des Inversen Problems beurteilt, das sich stets auf eine gegebene Modellstruktur bezieht.

Die Lösung ist *eindeutig*, falls aus einem gegebenen Systemzustand ein und nur ein Parametersatz abgeleitet werden kann. Im Unterschied dazu befasst sich der Begriff der *Identifizierbarkeit* mit der Frage, ob verschiedene Parametersätze zu demselben Systemzustand führen können; ist dies der Fall, gelten die Parameter als nicht identifizierbar. Identifizierbarkeit bezieht sich also ausschliesslich auf das Direkte Problem und kann - zumindest theoretisch - durch Betrachtung des Funktionalen Modells *a priori* untersucht werden. Im Gegensatz dazu bezieht sich der Begriff der Eindeutigkeit auf das Inverse Problem und umfasst somit neben der Modellstruktur auch die Beobachtungen sowie das Schätzkriterium. Identifizierbarkeit ist eine notwendige, aber nicht hinreichende Bedingung für die Eindeutigkeit der Lösung des Inversen Problems.

Die *Stabilität* der Lösung ist gegeben, falls kleine Änderungen der Eingabedaten nicht zu grossen Änderungen in den Resultaten führen. Die Eindeutigkeit befasst sich mit der Existenz und Anzahl der Minima der Zielfunktion, während die Stabilität davon abhängt, wie dieses Minimum ausgebildet ist. In der praktischen Anwendung lassen sich die beiden Probleme zuweilen nicht unterscheiden, da keine Kenntnisse über die genaue Form der Zielfunktion vorliegen. Eindeutigkeit ist gegeben, falls die Hyperfläche der Zielfunktion über den gesamten Parameterbereich betrachtet konvex ist. Informationen darüber erhält man bei der Betrachtung der Hesseschen Matrix (3.21); sie muss positivdefinit sein. Diese Bedingung ist wegen des Termes $\mathbf{S(p)}$ in (3.25) nicht automatisch erfüllt. CARRERA (1984) diskutiert verschiedene Möglichkeiten, die Konvexität der Hesseschen Matrix zu erhöhen, um Eindeutigkeit zu gewährleisten und die Stabilität zu verbessern. Ohne auf seine formale Analyse näher einzugehen, seien die qualitativen Schlussfolgerungen zusammen mit weiteren Hinweisen im folgenden Kapitel zusammengefasst.

3.8.3 Diskussion

Allfällige Probleme im Zusammenhang mit der Eindeutigkeit und Stabilität der Lösung offenbaren sich bei der Inversen Modellierung durch schlechte Konvergenzeigenschaften des Minimierungsalgorithmus, unterschiedliche Lösungen für verschiedene Anfangsschätzungen sowie ungenügende Genauigkeit der geschätzten Parameter. Die Ursachen sind in der Quantität und Qualität der zur Verfügung stehenden Messdaten, in der Modellstruktur und schliesslich im gewählten Schätzkriterium zu suchen. Eine Verbesserung der Situation kann also bei der Planung eines Experimentes (Lage, Quantität und Qualität der Beobachtungen), beim Modellaufbau (Definition des Parameterraums) sowie bei der Wahl des Schätzverfahrens herbeigeführt werden. Dabei lassen sich einige allgemeinen Regeln angeben. Für das Design eines Experimentes gilt:

- Die zu beobachtenden Messgrössen sollten möglichst sensitiv auf Änderungen der zu schätzenden Modellparameter reagieren. Je grösser die Koeffizienten der Jacobimatrix (3.19), desto genauer können die entsprechenden Parameter geschätzt werden. Es sei darauf aufmerksam gemacht, dass eine Untersuchung dieser Sensitivität *a priori*, d.h. ohne Vorhandensein von Beobachtungen, durchgeführt werden kann. Zahlreiche Arbeiten befassen sich mit der optimalen Anlage von Beobachtungspunkten [siehe z.B. (SUN & YEH 1990; BECK 1987) sowie Referenzangaben in CARRERA (1988)]. Oft genügt eine qualitative Beurteilung des hydraulischen Verhaltens des Systems, um sensitive Bereiche ausfindig zu machen. So ist z.B. eine Druckmessung in der unmittelbaren Nähe eines Randes mit konstantem Potential wenig sinnvoll, während die Beobachtung des Druckes in einem Bohrloch, in dem ein Injektionstest mit konstanter Fliessrate durchgeführt wird, ein Maximum an Sensitivität hinsichtlich der Durchlässigkeit des umgebenden Gesteins ergibt.

- Der Datenumfang sollte möglichst gross sein (Erhöhung des Freiheitsgrades).

- Die Daten sollten möglichst voneinander unabhängig sein. Das Hinzufügen stark korrelierter Beobachtungen erhöht den Informationsgehalt hinsichtlich der zu schätzenden Parameter nur unwesentlich. Diese Eigenschaft kann wiederum a priori abgeklärt werden.

- Mess- und Modellfehler sollten minimiert werden. Die Stabilität der Lösung hängt vom statistischen Verhalten der Residuen ab. Dies verlangt unter Umständen nach einer Vorbehandlung der Messwerte. Filterung, Glättung und Interpolation von Messwerten werden zu Verbesserung der Eigenschaften der Zielfunktion empfohlen. Man versucht

also, eine verbesserte Schätzung des Systemzustandes vorzugeben. Dabei ist zu berücksichtigen, dass die Fehlerstruktur der Residuen beeinflusst wird (siehe Tabelle 3.1), und so die Genauigkeit der geschätzten Parameter allenfalls überschätzt wird. Das Stochastische Modell sollte deshalb die Varianzen der ursprünglichen Daten enthalten.

Beim Modellaufbau sind folgende Punkte zu beachten:

- Die Dimension des Parameterraumes sollte möglichst klein sein. Eine Erhöhung der Anzahl Modellparameter verringert nicht nur die relative Sensitivität der Zielfunktion hinsichtlich der einzelnen Parameter, sie erhöht auch den Grad der Korrelation unter den Parametern. Bei zu starker Korrelation lassen sich die einzelnen Parameter nicht mehr unabhängig voneinander bestimmen. Folgende Prozedur sei deshalb vorgeschlagen: Man schätze die Kovarianzmatrix der Parameter anhand der Formeln von Kapitel 3.7. Diejenigen Parameter, welche eine unverhältnismässig grosse Varianz aufweisen, werden aus dem weiteren Optimierungsverfahren ausgeschlossen, indem ihnen ein fester Wert zugeordnet wird. Dies scheint ein Widerspruch zu sein, ist doch die Fixierung eines Parameters gleichbedeutend mit der Aussage, dass er überaus gut bekannt ist. Man kann jedoch argumentieren, dass eine a priori vorhandene Schätzung dieses Parameters weitaus genauer ist als dessen Bestimmbarkeit durch Inverse Modellierung auf der Basis der vorhandene Beobachtungen. Die Zielfunktion reagiert nicht sensitiv auf eine allenfalls falsche Schätzung des entsprechenden Parameters. Wird das Systemverhalten als ganzes vom Wert des Parameters beeinflusst, müssen zusätzliche Beobachtungen aus dem sensitiven Bereich des Modellgebietes hinzugefügt werden. Ähnlich ist mit stark korrelierten Parametern vorzugehen. Der Wert des einen Parameters kann dann geschätzt werden unter der Annahme, dass der andere, mit ihm stark korrelierte Parameter, korrekt ist. Überparametrisierung führt zwar zu einer genaueren Reproduzierung des gemessenen Systemzustandes, verringert aber die Zuverlässigkeit der gefundenen Lösung. Die zentrale Forderung nach minimaler Anzahl Modellparameter wird im nächsten Kapitel nochmals von Bedeutung sein.

Für die Definition der Schätzfunktion gilt:

- Das Einführen a priori vorhandener Informationen über die Modellparameter als fiktive Beobachtungen erhöht im allgemeinen die Stabilität und führt zu eindeutigen Parametersätzen. In Kapitel 3.7.2 wurde die gegenseitige Gewichtung der Vorinformation und der eigentlichen Systembeobachtung besprochen. Das Einführen von Vorinformation wirft jedoch ein Problem grundsätzlicher Natur auf. Da sich die Parameterwerte der Vorinformation nicht auf das aktuell zu untersuchende Modell beziehen, sondern z.B.

aus Laboruntersuchungen stammen, stimmt deren Interpretation mit den zu schätzenden Modellparametern unter Umständen nicht überein, sodass ein ungewollter Einfluss auf das Resultat der Inversen Modellierung entsteht.

- Die Reduzierung von Nichtlinearitäten hilft, den Term $\mathbf{S(p)}$ in (3.25) und somit die Gefahr einer negativ-definiten Hesseschen Matrix klein zu halten. Eine bereits angesprochene Möglichkeit besteht darin, den Logarithmus anstelle des Wertes selbst zu schätzen.

- Eine möglichst exakte Beschreibung des Stochastischen Modells und allenfalls eine rekursive Anpassung durch Schätzung der $(\sigma_0^2)_i$ kann die Eigenschaften der Zielfunktion verbessern, indem zuverlässige und sensitive Beobachtungen stärker gewichtet werden.

- Man wiederhole den Optimierungsvorgang für verschiedene Startpunkte im Parameterraum. Konvergiert der Algorithmus zu unterschiedlichen Lösungen, deutet dies auf das Vorhandensein lokaler Minima hin. Lässt sich kein eindeutiges globales Minimum identifizieren, ist davon auszugehen, dass das Problem schlecht gestellt ist.

- In der Geodäsie existieren Verfahren, welche den Beitrag grosser Residuen zur Zielfunktion vermindern und somit die Stabilität der Schätzung erhöhen. Die Übertragung dieser Methoden auf die Hydrogeologie ist prüfenswert. ITOUGH bietet die Möglichkeit, dass gewichtete Residuen nicht quadratisch, sondern ab einem gewissen Betrag lediglich linear in die Berechnung eingehen; da diese Methode in der vorliegenden Arbeit nicht zur Anwendung kommt, wird hier nicht näher darauf eingegangen [für Details siehe FINSTERLE (1993)].

FINSTERLE ET AL. (1991) untersuchen die Identifizierbarkeit der Gassättigung einer Mergelformation anhand eines Wasserinjektionstests mit anschliessender Beobachtung der Druckerholung. Es wird gezeigt, dass durch die Analyse der Injektionsperiode alleine keine Aussage über die anfängliche Gassättigung gemacht werden kann; der Minimierungsalgorithmus führt folgerichtig zu unterschiedlichen Parametersätzen; die Eigenwertanalyse liefert eine überaus schlechte Konditionszahl. Durch Hinzufügen der Druckerholungsdaten bildet die Zielfunktion schliesslich ein relativ stark ausgeprägtes Minimum, das vom Levenberg-Marquardt Algorithmus problemlos identifiziert werden kann. Die Parameter können so mit akzeptabler Genauigkeit bestimmt werden.

3.8.4 Vergleich von Modellstrukturen

Es sei nochmals darauf hingewiesen, dass Inverse Modellierung diejenigen Parameter schätzt, welche *im Rahmen einer gegebenen Modellstruktur* als optimal betrachtet werden. Diese Tatsache führte bereits im einleitenden Kapitel 1.3 zur Feststellung, dass die geschätzten Parameter stets *Modell*grössen sind, welche sich auf ein bestimmtes Konzept beziehen. Dies hat zur Folge, dass bei geänderter Modellstruktur die Prognosefähigkeit des neuen Modells zuerst validiert werden muss. Die im vorangegangenen Kapitel vorgestellte Fehleranalyse gibt Hinweise auf die Unsicherheiten der geschätzten Modellparameter unter der impliziten Annahme, dass das zugrunde liegende konzeptionelle Modell korrekt ist. Schätzt man dieselben Parameter aufgrund einer anderen Modellstruktur, ergeben sich unter Umständen Werte, die weit ausserhalb der angegebenen Konfidenzregion liegen. Dieser scheinbare Widerspruch geht auf die Tatsache zurück, dass sich bei einer Änderung der Modellstruktur auch der Charakter der zu schätzenden Parameter ändert und somit ein direkter Vergleich nicht zulässig ist. Die Übertragung von geschätzten Parameterwerten auf andere Modelle ist vor dem Hintergrund des eben Gesagten nicht zulässig oder zumindest nicht unproblematisch.

Die Frage nach der optimalen Modellstruktur kann somit nur unter Beizug zusätzlicher Informationen beantwortet werden. In diesem Kapitel soll ein Kriterium angegeben werden, das es erlaubt zu entscheiden, welches Modell aus einer Menge alternativer Modelle zu bevorzugen ist. Dieses Kriterium, das der Arbeit von CARRERA (1984) entnommen ist, liefert jedoch keine absolute Entscheidungshilfe, da es sich ausschliesslich auf die vorhandenen Beobachtungen abstützt und somit qualitative Informationen nicht mit einbeziehen kann.

Es sei dasjenige Modell einer Alternative vorzuziehen, bei dem das Kriterium d_M minimal ist, wobei (ohne Herleitung):

$$d_M = S(\mathbf{p}_{opt}) + n \ln(M/2\pi) + \ln |\mathbf{F}| \qquad (3.49)$$

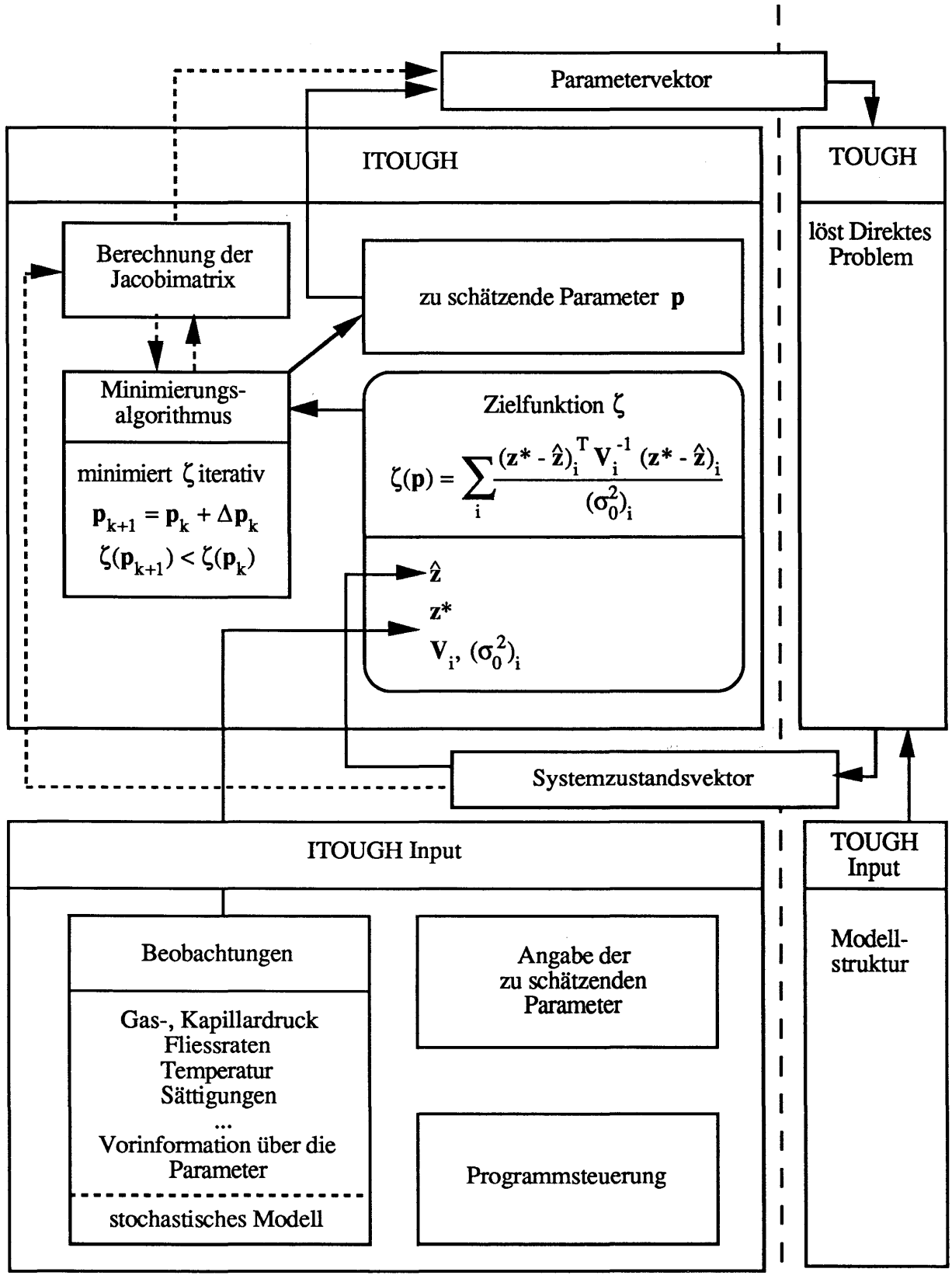
Dabei ist S das Log-Likelihoodkriterium (3.7), n die Anzahl geschätzter Parameter, M die Anzahl Beobachtungen, und |F| die Determinante der Normalgleichungsmatrix. Das Kriterium geht auf KASHYAP (1982) zurück und minimiert die Wahrscheinlichkeit, das falsche Modell zu wählen. Der erste Term in (3.49) stellt ein Mass für die Fähigkeit des Modells dar, den gemessenen Systemzustand zu repräsentieren. Mit zunehmendem Datenumfang nimmt der Beitrag von S (mit negativem Vorzeichen) stark zu, abgeschwächt durch den zweiten Term, der die Anzahl Modellparameter enthält. Zusammen

mit dem dritten Term führt dies dazu, dass bei gleich guter Abbildung des Systemzustandes dasjenige Modell gewählt wird, welches die einfachste Struktur mit der geringsten Anzahl von Parametern aufweist. Je grösser der Datenumfang ist, desto komplexer darf das Modell sein, ohne dass es bei einem Leistungsvergleich mit alternativen Modellen benachteiligt wird. Dieses intuitiv richtige Verhalten des Kriteriums (3.49) sollte durch den Einbezug eines Kriteriums ergänzt werden, das den qualitativen Informationen (z.B. strukturgeologische oder morphologische Argumente) Rechnung trägt.

CARRERA & NEUMAN (1986c) zeigen anhand eines synthetischen Beispiels, dass das Kashyap-Kriterium tatsächlich dasjenige Modell selektiert, welches der vorgegebenen Modellstruktur am nächsten kommt und auf eine Überparametrisierung verzichtet.

3.9 Implementierung

Das im Kapitel 3 vorgestellte Konzept wurde in einem Computerprogramm mit dem Namen ITOUGH implementiert. ITOUGH erlaubt die Schätzung zahlreicher Eingabeparameter des Zweiphasen-Zweikomponenten-Programms TOUGH, das im Kapitel 2 dieser Arbeit beschrieben ist. Die Programmstruktur von ITOUGH ist in Figur 3.6 grob skizziert. Bei der Strukturierung wurde darauf geachtet, dass eine weitgehende Trennung zwischen der Lösung des Direkten und des Inversen Problems eingehalten wird. Dies hat den Vorteil, dass Änderungen in einem der beiden Programmteile unabhängig vom jeweils anderen durchgeführt werden können. Als Schnittstelle dient ein gemeinsamer Speicherbereich, in dem die Variablen der zu schätzenden Parameter sowie des berechneten Systemzustandes abgelegt sind. Das Einführen neuer Parameter bzw. neuer Beobachtungstypen kann einfach realisiert werden. Das Programm TOUGH ist ein Unterprogramm des Programms ITOUGH und erfüllt die Aufgabe, den Systemzustand als Funktion beliebiger Parameterkombinationen zu ermitteln. Neben der Definition der Modellstruktur im TOUGH-Format sind für die Inverse Modellierung zusätzliche Eingaben nötig, die sich im wesentlichen in drei Teile gliedern lassen. So müssen zum einen die zu schätzenden Modellparameter gewählt, deren Geltungsbereich abgesteckt sowie eine Gewichtung der Anfangsschätzung vorgenommen werden. Unter einem zweiten Schlüsselwort werden sämtliche Beobachtungsdaten $\mathbf{q}^*$ eingelesen und dem Systemzustandsvektor hinzugefügt. Deren Fehlerstruktur (*a priori* Kovarianzmatrix) muss ebenfalls vorgegeben werden. Schliesslich gilt es, den Berechnungsgang zu steuern. Dazu stehen dem Benutzer zahlreiche Steuerparameter und Optionen zur Verfügung, die durch einfache Angabe eines Schlüsselwortes gewählt werden können.



Figur 3.6: Programmstruktur ITOUGH

Die Handhabung des Programms TOUGH ist in PRUESS (1987) beschrieben; die ergänzenden Angaben für die Inverse Modellierung finden sich in der Benutzeranleitung für das Programm ITOUGH (FINSTERLE 1993).

3.10 Zusammenfassung Kapitel 3

Es seien Messwerte des Systemzustandes (Druck, Temperatur, Fliessrate oder Sättigung) an diskreten Raum-Zeit-Punkten gegeben. Die Bestimmung der Modellparameter aufgrund dieser Beobachtungen bezeichnet man als die Lösung des Inversen Problems. Der in dieser Arbeit gewählte indirekte Ansatz formuliert das Inverse Problem als Optimierungsaufgabe, bei der diejenigen Parameter gesucht werden, welche die Wahrscheinlichkeit maximieren, den gemessenen Systemzustand zu realisieren (Maximum-Likelihood). Unter der Annahme normalverteilter Residuen, deren statistische Eigenschaften im Stochastischen Modell zusammengefasst sind, führt dies auf die bekannte Kleinst-Quadrate-Schätzung. Es gilt, die Zielfunktion (3.10) - sie enthält eine Summe der gewichteten und quadrierten Residuen - unter Verwendung eines geeigneten Algorithmus zu minimieren. Im Kapitel 3.6 ist die Levenberg-Marquardt-Modifikation des Gauss-Newton-Verfahrens beschrieben.

Eine *a posteriori* durchgeführte Fehleranalyse ergibt Hinweise auf die Unsicherheiten der geschätzten Parameter, wobei angenommen wird, dass das Modell in der näheren Umgebung des optimalen Parametersatzes durch eine lineare Funktion approximiert werden kann. Das Problem der Nichtlinearität wird im Kapitel 3.7.8 kurz angesprochen. Ist die Fehlerstruktur der Beobachtungen *a priori* genügend genau bekannt, kann ein Modelltest durchgeführt werden, welcher Aufschluss über allfällige Fehler im Stochastischen oder Funktionalen Modell gibt.

Die durch Inverse Modellierung geschätzten Parameter beziehen sich immer auf die gegebene Modellstruktur. Im Kapitel 3.8.4 wird ein Kriterium vorgestellt, das einen Leistungsvergleich unter alternativen Modellen erlaubt.

Das hier beschriebene Konzept der Inversen Modellierung ist in einem Computerprogramm realisiert, basierend auf dem im Kapitel 2 vorgestellten Code TOUGH. Anwendungen des Programms ITOUGH werden im Kapitel 4 dieser Arbeit vorgestellt.

4 ANWENDUNGSBEISPIELE

4.1 Überblick

Im Kapitel 4 werden zwei Anwendungsbeispiele im Detail diskutiert:

- Das erste Beispiel - ein *synthetisches Experiment* - hat zum Ziel, die im Kapitel 3 dieser Arbeit vorgestellte Methode Schritt für Schritt anschaulich darzustellen. Zudem dient es der Verifizierung des Programms ITOUGH (siehe Kapitel 3.9).

- Das zweite Beispiel - ein *Wasser- und Gasinjektionstest im Felslabor Grimsel* - soll die Anwendbarkeit der gezeigten Verfahren auf Felddaten demonstrieren. Der sogenannte *Gastest* wurde von der Nagra geplant und durchgeführt in der Absicht, den Einfluss der Gasphase auf die Interpretation hydraulischer Tests zu untersuchen. Als Resultat der Inversen Modellierung sind zudem erste Abschätzungen einzelner Parameter für die Simulation von Zweiphasenströmungen in schwach durchlässigen Gesteinen zu erwarten.

4.2 Synthetisches Experiment

4.2.1 Vorbemerkungen

Ein synthetisches Experiment ist ein Experiment, das vollständig auf dem Computer durchgeführt wird. Dies bedeutet, dass die Daten für die Inverse Modellierung nicht durch Messungen im Labor oder Feld gewonnen, sondern auf dem Rechner generiert werden. Dies hat den Vorteil, dass die wahre Modellstruktur vollständig bekannt ist. Es existieren somit keine Modellfehler, welche durch unberücksichtigte physikalische Prozesse, durch schwer definierbare Randbedingungen oder Diskretisierungsfehler entstehen (siehe Kapitel 3.4). Von besonderer Bedeutung ist zudem die Tatsache, dass die Fehlerstruktur der "Beobachtungen" vorgegeben werden kann und die wahren Werte der gesuchten Modellparameter bekannt sind. Dies erlaubt es, die Implementierung der Verfahren im Programm ITOUGH zu verfizieren, indem allfällige Abweichungen der geschätzten Parameter von den Sollwerten sofort erkennbar sind.

4.2.2 Vorgehen

Der Zweck des synthetischen Experimentes besteht darin, in einer Folge wohldefinierter Berechnungen die einzelnen Aspekte der Inversen Modellierung zu untersuchen. Gleichzeitig werden die dazugehörigen Programmteile getestet. Das Vorgehen umfasst folgende Schritte:

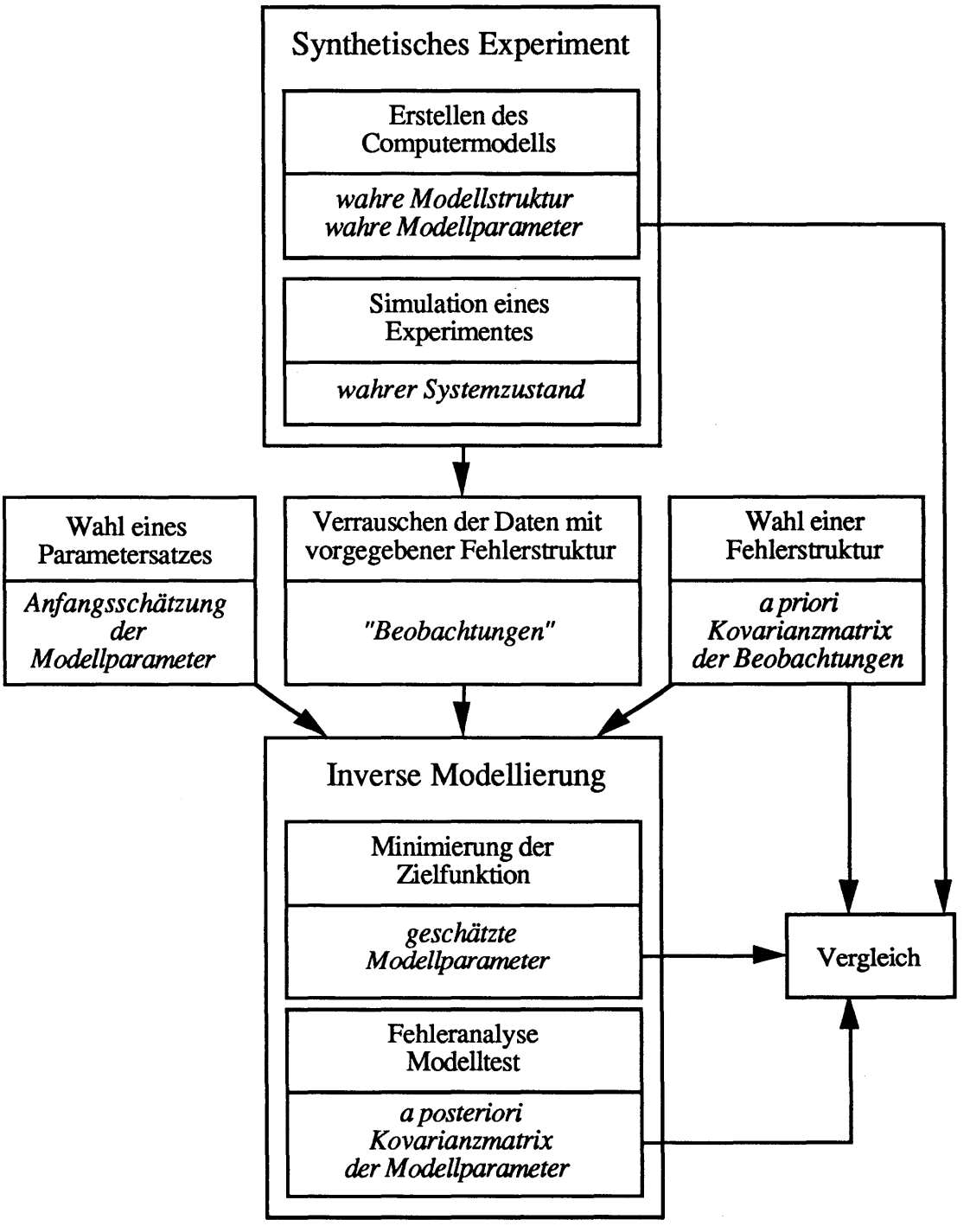
- Auf dem Computer wird ein numerisches Modell des zu simulierenden Laborexperimentes erstellt. Dies bedeutet, dass die Eigenschaften des beprobten Gesteins gewählt und durch einen Satz von Parametern - den "wahren" Modellparametern - dargestellt werden. Im weiteren ist die Laboreinrichtung zu diskretisieren. Da das Experiment mit Hilfe von TOUGH durchgeführt wird, sind die beteiligten physikalischen Prozesse in Form der implementierten Bilanzgleichungen ebenfalls gegeben; die gesamte Modellstruktur ist somit bekannt. Der Vorteil eines synthetischen Experimentes ist offensichtlich: Durch kontrollierte Abänderung der Modellstruktur kann der Einfluss systematischer Fehler auf die Parameterschätzung untersucht werden.

- Anschliessend wird durch die Vorgabe von Randbedingungen ein möglicher Versuchsablauf (z.B. Injektion von Gas bei konstantem Druck) simuliert - das Direkte Problem wird für den wahren Parametersatz gelöst. Die an ausgewählten Punkten berechneten Werte (z.B. Kapillarkräfte oder Fliessraten) repräsentieren den wahren, *per definitionem* fehlerfreien Systemzustand.

- Um eine realistischere Situation zu erhalten, werden die Daten verrauscht, d.h. die berechneten Werte werden um einen zufälligen Betrag erhöht bzw. erniedrigt. Entscheidend ist dabei, dass die vorgegebene Fehlerstruktur dieses Rauschens bekannt ist. Mit diesem Schritt wird der Messfehler simuliert; die so generierten Daten stellen die "fehlerbehafteten Beobachtungen des Systemzustandes" (siehe Figur 3.1) dar. Da das Modell selber fehlerfrei ist, entspricht der Messfehler dem Fehler der Residuen.

- Die im vorhergehenden Schritt generierten Daten dienen als Eingabe für die Inverse Modellierung. Wie im Kapitel 3 ausgeführt, besteht Inverse Modellierung darin, eine Modellstruktur zu entwerfen, eine Anfangsschätzung für die Modellparameter vorzunehmen und die Kovarianzmatrix der Beobachtungen zu definieren. Der Minimierungsalgorithmus liefert dann den optimalen Parametersatz für die gegebene Modellstruktur. Da die Modellstruktur des synthetischen Experimentes vollständig bekannt ist, lassen sich die Auswirkungen einzelner Fehlbeurteilungen des Modellierers untersuchen, indem der geschätzte Parametersatz mit dem wahren Parametersatz bzw. der berechnete Systemzustand mit dem wahren Systemzustand verglichen werden.

Das Vorgehen ist in Figur 4.1 schematisch dargestellt. Im folgenden Kapitel wird das synthetische Experiment - Modellaufbau, Parametersatz und Systemverhalten - vorgestellt. Anschliessend soll die Lösung des Inversen Problems anhand ausgesuchter Beispiele behandelt werden.



Figur 4.1: Konzept des synthetischen Experimentes und Vorgehen

4.2.3 Beschreibung des Experimentes

Das gewählte synthetische Experiment beschreibt einen Laborversuch, bei dem Gas in eine wassergesättigte Gesteinsprobe injiziert wird. Dieser Verdrängungsprozess wird aus folgenden Gründen als Demonstrationsbeispiel gewählt:

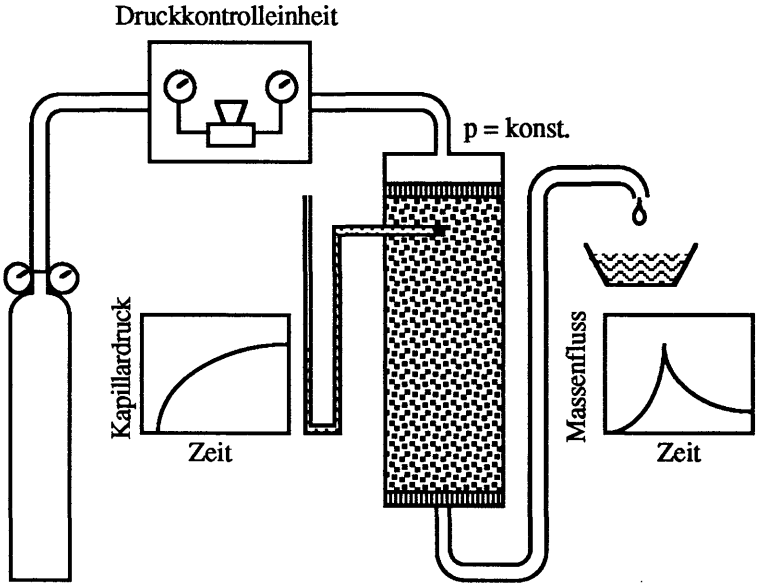
- Die Verdrängung von Wasser durch Gas entspricht dem Vorgang, wie er bei der Gasproduktion (durch Korrosion, biologischen Abbau und Hydrolyse) in einem Endlager für radioaktive Abfälle auftreten könnte.

- Derselbe Verdrängungsprozess ist auch beim Gastest im Felslabor Grimsel massgebend, wenn zur Erzeugung eines Zweiphasensystems Gas mit hohem Druck in eine anfänglich wassergesättigte Kluftzone injiziert wird (siehe Kapitel 4.3).

- Die Anfangsbedingungen - der Porenraum ist vollständig mit Wasser gefüllt - scheint für ein Laborexperiment eher realisierbar zu sein als eine teilweise gesättige Gesteinsprobe mit homogen verteilter Gassättigung.

Es bleibt kritisch anzumerken, dass die Verdrängung einer Flüssigkeit durch ein weniger viskoses Fluid zu einer instabilen Front führen kann, die in der Formulierung von TOUGH nicht berücksichtigt ist. Der umgekehrte Vorgang - Verdrängung von Gas durch Wasser - wäre stabiler mit einer schärfer ausgeprägten Front zwischen den beiden Phasen. Für das synthetische Experiment spielt dieser Umstand jedoch keine Rolle, da die Daten von TOUGH generiert werden - bei der Interpretation von Felddaten muss jedoch mit einem diesbezüglichen Modellfehler gerechnet werden.

Figur 4.2 zeigt einen möglichen Versuchsaufbau für das Laborexperiment. In der Mitte befindet sich eine Gesteinsprobe, die in einem zylinderförmigen Druckgefäss von 50 cm Länge eingebaut ist. Die Probe ist anfänglich vollständig mit Wasser gesättigt, das unter hydrostatischem Druck steht. Über eine Leitung wird am oberen Ende des Zylinders Gas zugeführt. Eine Druckkontrolleinheit stellt sicher, dass der Injektionsdruck konstant bleibt. Durch die Injektion von Gas wird Porenwasser verdrängt und am unteren Ende des Gefässes über eine zweite Leitung auf eine sehr exakte Waage geführt. Die zeitliche Änderung der Anzeige wird als Fliessrate registriert. Im weiteren befindet sich in der Gesteinsprobe 5 cm unterhalb der Injektionsstelle ein Tensiometer (oder analoges Instrument), das den Kapillardruck als Funktion der Zeit misst. Die Versuchsdauer beträgt 6000 Sekunden, wobei alle 300 Sekunden ein Wert registriert wird.



Figur 4.2: Synthetisches Experiment: Versuchsaufbau

Die Eigenschaften der Gesteinsprobe werden im synthetischen Experiment durch eine beschränkte Anzahl von Parametern beschrieben. Die gewählten Parameterwerte sind in Tabelle 4.1 zusammengefasst. Sie charakterisieren - in Anlehnung an RESELE & ILLI (1991) - ein relativ schwer durchlässiges, kalkiges Mergelgestein aus dem Oxford.

Parameter	Wert
absolute Permeabilität	$k = 1.00 \cdot 10^{-15}$ [m^2]
Porosität	$\phi = 10.00$ [%]
Matrixkompressibilität	$c_\phi = 1.00 \cdot 10^{-9}$ [Pa^{-1}]
Kapillarkurve: van Genuchten (Gleichung 2.30)	
residuale Flüssigkeitssättigung	$S_{fr} = 30.00$ [%]
residuale Gassättigung	$S_{gr} = 0.00$ [%]
van Genuchten Parameter *n*	$n = 2.50$ [-]
van Genuchten Parameter *1/α*	$1/\alpha = 5000.00$ [Pa]
Relative Permeabilitätsfunktion: van Genuchten (Gleichungen 2.39 und 2.40)	
Formparameter ε	$\varepsilon = 0.50$ [-]
Formparameter γ	$\gamma = 0.33$ [-]

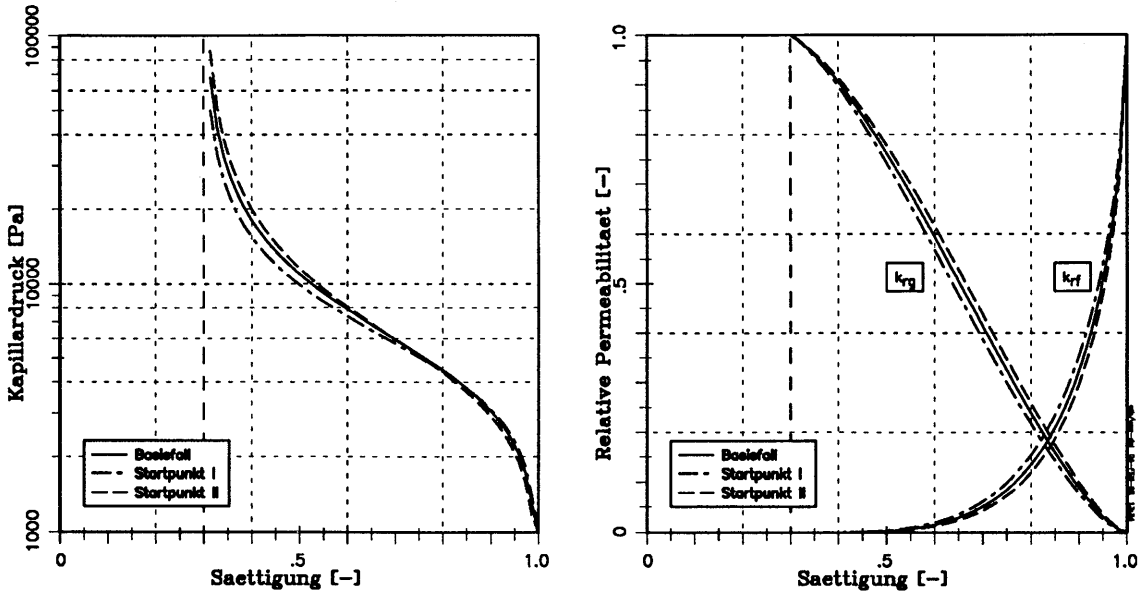
Tabelle 4.1: Wahrer Parametersatz des synthetischen Experimentes

Die Untersuchung des synthetischen Experimentes beschränkt sich aus praktischen Gründen (Darstellbarkeit, Rechenzeit) auf die Bestimmung von lediglich zwei Parametern, ausgehend von zwei verschiedenen Anfangsschätzungen. Die zu bestimmenden Parameter sind der Porengrössenverteilungsindex n und der Lufteintrittswert $1/\alpha$, wie sie im Modell von van Genuchten verwendet werden (siehe Kapitel 2.2.7 und 2.2.8). Die Startwerte für den Minimierungsalgorithmus (Tabelle 4.2) liegen - ebenfalls aus Gründen der besseren Darstellbarkeit - relativ nahe bei den wahren Werten.

Parameter	n	1/α
wahrer Wert (Basisfall)	2.50	5000
Startpunkt I	2.70	5200
Startpunkt II	2.35	4800

Tabelle 4.2: Anfangswerte der zu schätzenden Parameter

Figur 4.3 zeigt die charakteristischen Kurven für den wahren Parametersatz und für die Anfangsschätzungen.



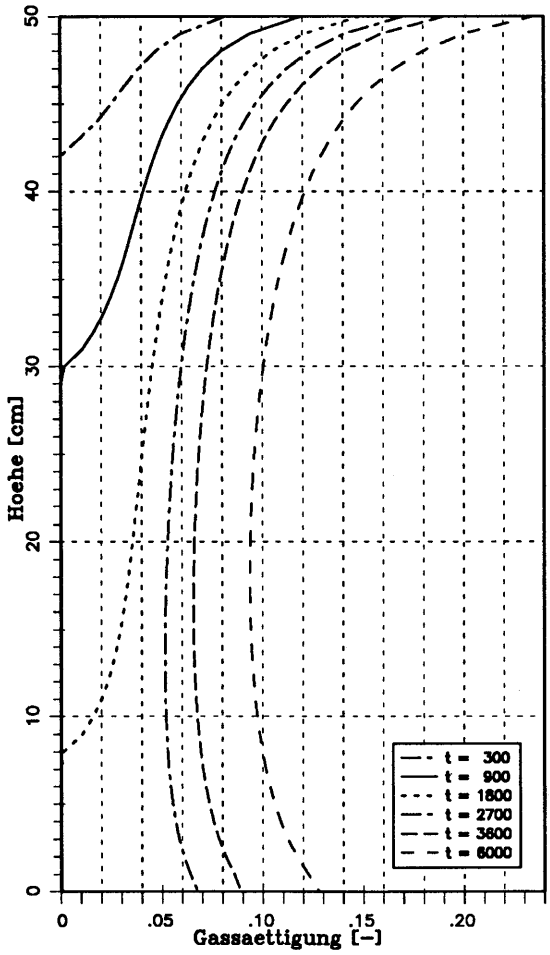
Figur 4.3: Synthetisches Experiment: Charakteristische Kurven

Van Genuchtens Modell geht davon aus, dass sich die Phasen beim Fliessvorgang gegenseitig relativ stark behindern. Bereits bei einer Gassättigung von 5 % reduziert sich die Permeabilität der flüssigen Phase auf die Hälfte.

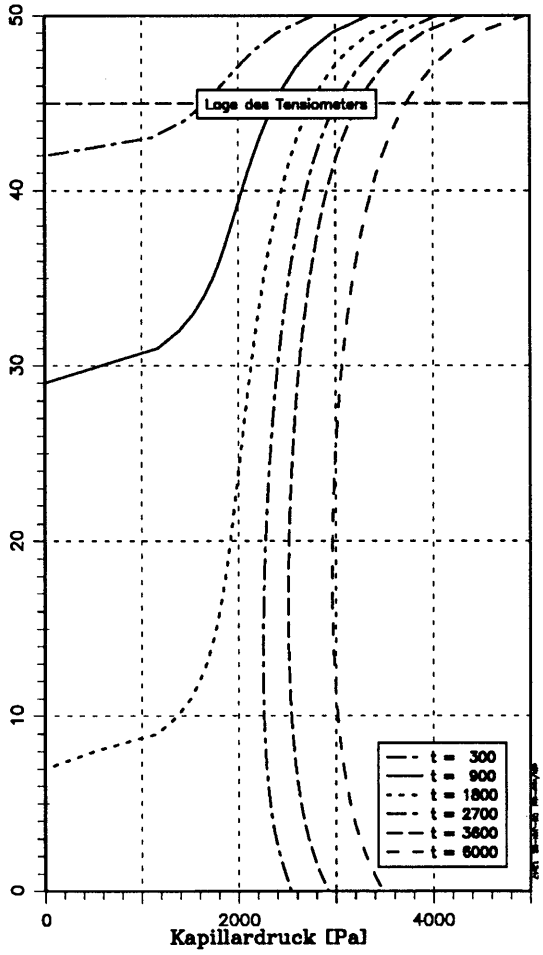
Der Vergleich zwischen den charakteristischen Kurven des Basisfalles (durchgezogene Linien) mit denjenigen des Startpunktes I (strichpunktierte Linien) lässt sich folgendermassen kommentieren: Eine Erhöhung des Parameters n besagt, dass die Verteilung der Porengrössen gleichmässiger, das Material also schlechter sortiert ist. Dies äussert sich in einer - wenn auch nur geringen - Abflachung der relativen Permeabilitätskurven. Auch die Kapillardruckkurve verflacht sich, wird aber zugleich durch die Erhöhung des Parameters $1/\alpha$ angehoben, sodass die Kurve des Basisfalles und diejenige des Startpunktes I einen Schnittpunkt aufweist. Analoge Aussagen mit umgekehrten Vorzeichen lassen sich für den Startpunkt II formulieren. Es wird sich zeigen, dass diese relativ geringen Unterschiede in den charakteristischen Kurven zu beachtlichen Änderungen im berechneten Systemverhalten führen.

Die Eigenschaften des Materials (Tabelle 4.1), der Versuchsaufbau (Figur 4.2) und die Anfangsbedingungen (wassergesättigt, hydrostatische Druckverteilung) sind somit vollständig gegeben. Der nächste Schritt besteht darin, den Injektionstest durchzuführen und den wahren Systemzustand zu ermitteln. Am oberen Ende des Zylinders wird der Gasdruck sprunghaft auf 6 bar erhöht und anschliessend konstant gehalten. Das injizierte Gas verdrängt das Porenwasser; es bildet sich eine fortschreitende Gas-Wasser-Front, deren Form von den charakteristischen Kurven abhängt. Figur 4.4a zeigt Profile der Gassättigung zu verschiedenen Zeitpunkten. Daneben (Figur 4.4b) sind die dazugehörigen Kapillarkräfte für den Basisfall dargestellt.

Von besonderem Interesse ist der Systemzustand an den beiden Beobachtungspunkten. Die Lage des Tensiometers ist in Figur 4.4b eingezeichnet. Figur 4.5 zeigt den Anstieg der Kapillarkräfte als Funktion der Zeit; die durchgezogene Linie repräsentiert den wahren Verlauf, den es mittels Inverser Modellierung nachzuvollziehen gilt. Der Tensiometer liefert alle 300 Sekunden einen Messwert, der künstlich verrauscht wird (Symbole). Der mittlere Messfehler beträgt 50 Pa; er ist zeitlich nicht korreliert. Der berechnete Systemzustand für die Parameterkombination beim Startpunkt I (strichpunktierte Linie) zeigt einen erhöhten Kapillardruck, der auf einen schnelleren Anstieg der Kapillarkräfte bei niedrigen Gassättigungen zurückzuführen ist. Die Gas-Wasser-Front ist schärfer ausgebildet. Die umgekehrte Aussage gilt für den Startpunkt II.



Figur 4.4a: Gassättigung



Figur 4.4b: Kapillardruck

Die Fliessraten am unteren Ende des Zylinders (Figur 4.6) zeigen ein recht kompliziertes Verhalten, das sich jedoch mit Blick auf die charakteristischen Kurven leicht erklären lässt. Während der ersten Periode des Tests steigen die Fliessraten in zunehmendem Masse an. Der Grund dafür liegt in der Tatsache, dass der Druckabbau in der Säule umgekehrt proportional zu einer totalen Mobilität des Gas-Wasser-Gemisches ist [für Details siehe FINSTERLE ET AL. (1990b)]:

$$(k/\mu)_{tot} = k \cdot \left((k_r/\mu)_f + (k_r/\mu)_g \right) \qquad (4.1)$$

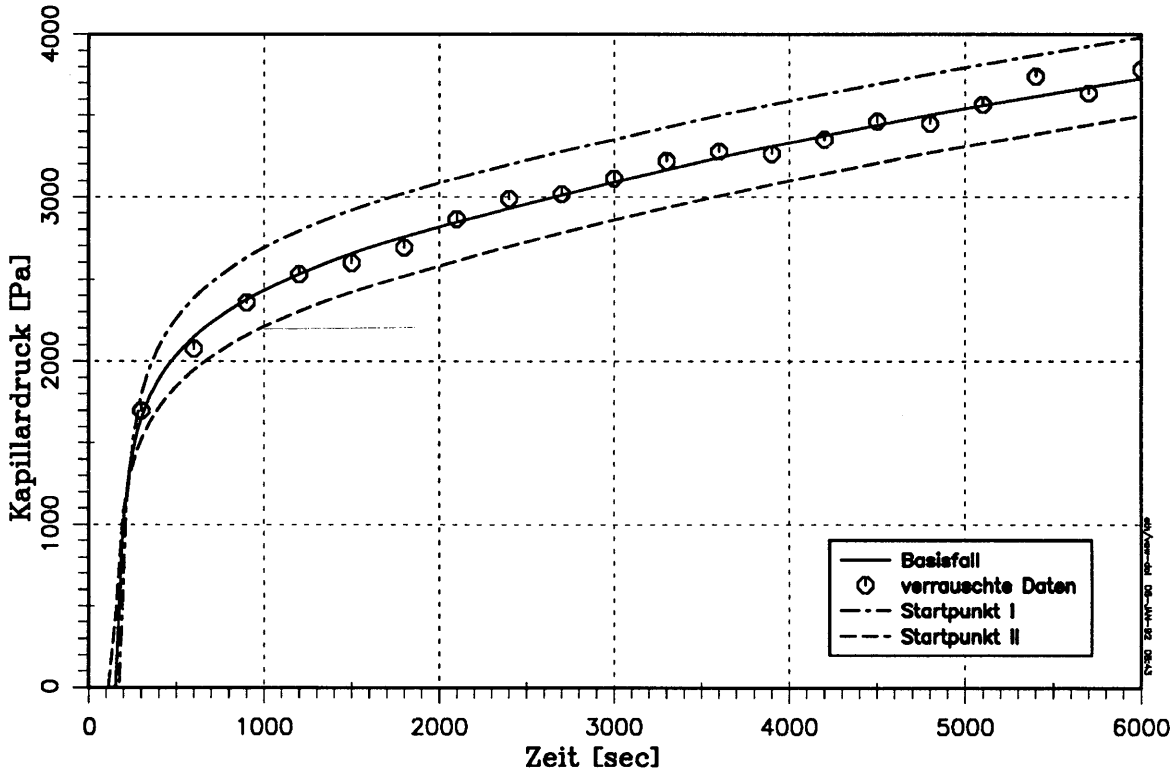
Wegen der geringeren Viskosität des Gases und der relativ rasch ansteigenden relativen Permeabilität findet der Druckabbau im Zylinder vorwiegend im wassergesättigten Teil der Probe statt, d.h. der Druckgradient am unteren Ende der Säule nimmt mit fortschreitender Gas-Wasser-Front beständig zu. Nach ca. 2000 Sekunden erreicht die Gasfront das untere Ende der Säule. Die relative Permeabilität der flüssigen Phase, welche den

Ausfluss von Wasser bestimmt, nimmt innert kürzester Zeit rapide ab. Gleichzeitig verringert sich der Druckgradient in der flüssigen Phase durch das Auftreten von Kapillarkräften. Das System strebt asymptotisch einem stationären Zustand zu: Nach langer Zeit erreicht die Sättigung ihren residualen Wert, während der Ausfluss von Wasser versiegt. Der Durchfluss von Gas, der in diesem Beispiel nicht registriert wird, nimmt einen konstanten Wert an. Es fällt auf, wie exakt das Durchbrechen des Gases anhand der Fliessraten detektiert werden kann. Das Beispiel zeigt zudem das stark nicht-lineare Verhalten eines Zweiphasensystems, das zu markanten Änderungen der beobachteten Fliessrate führt.

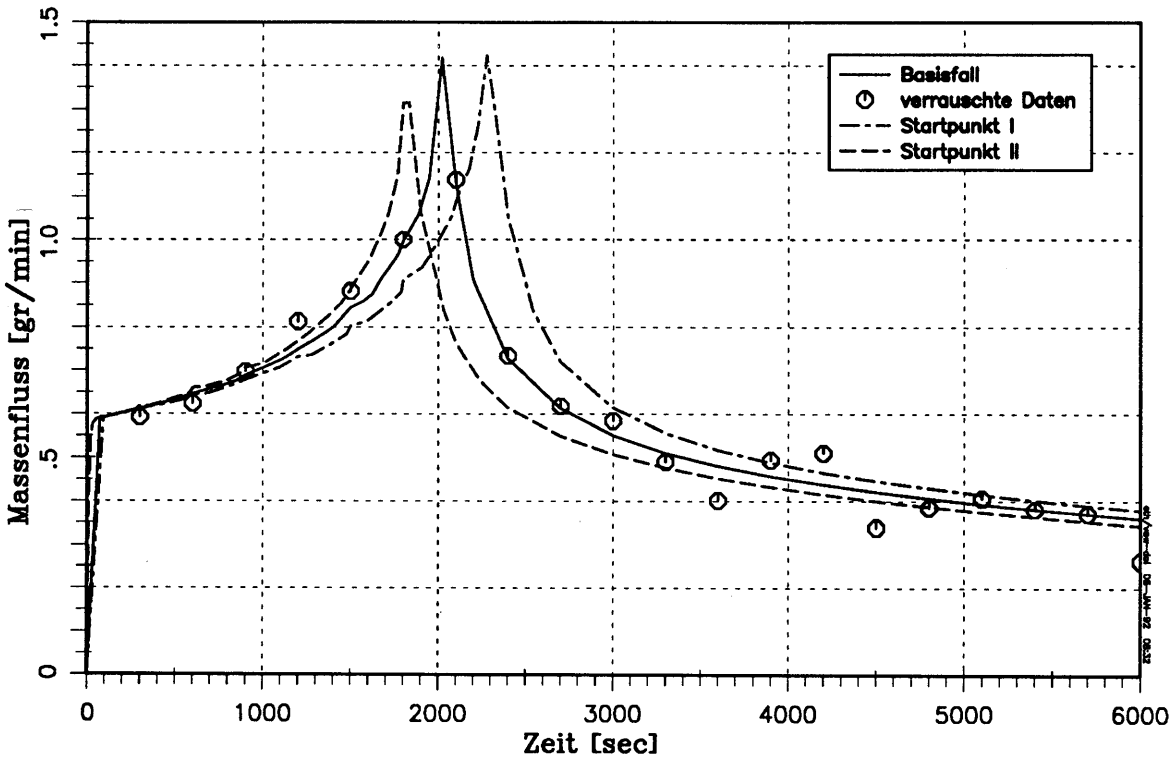
Eine relativ geringe Veränderung der charakteristischen Kurven führt zu beachtlichen Unterschieden im Systemverhalten. Der Gasdurchbruch erfolgt mit zunehmendem Porengrössenverteilungsindex n zu einem späteren Zeitpunkt aufgrund der abnehmenden Permeabilität des injizierten Gases sowie der schärfer ausgebildeten Front. Umgekehrt könnte das Ausbilden bevorzugter Fliesswege für Gas am besten mit einem kleinen Wert für n nachgebildet werden, wie dies das Systemverhalten beim Startpunkt II tendenziell anzeigt.

Als nächstes werden die Fliessraten des Basisfalles mit einem Zufallsbeitrag verrauscht. Basierend auf den Angaben von WYSS (1989) wird eine Standardabweichung des Messfehlers von 0.04 gr/min angenommen, wobei sich diese Angabe auf eine gemittelte Rate über eine Zeitdauer von 5 Minuten bezieht. Die Fehler sind wiederum zeitlich nicht korreliert. Die so generierten Beobachtungen der Fliessrate sind als Symbole in Figur 4.6 eingezeichnet.

Hiermit ist die Besprechung des Direkten Problems - der Simulation eines Systemzustandes für einen gegebenen Parametersatz - sowie die Generierung der Beobachtungen für das synthetische Experiment abgeschlossen. Kapillardruck und Fliessrate stellen die Beobachtungen des Systemzustandes dar, und zwar an zwei diskreten Stellen zu je 20 Zeitpunkten. Aufgrund dieser 40 Beobachtungen sollen die beiden Modellparameter n und $1/\alpha$ geschätzt werden, ausgehend von zwei Anfangsschätzungen.



Figur 4.5: Kapillardruck: Systemverhalten und Beobachtungspunkte



Figur 4.6: Fliessraten: Systemverhalten und Beobachtungspunkte

4.2.4 Berechnungsfälle: Überblick

Tabelle 4.3 gibt einen Überblick über die untersuchten Fälle. Sie unterscheiden sich in Art und Umfang der verwendeten Daten sowie in der Korrektheit der zugrunde gelegten Stochastischen und Funktionalen Modelle. Jeder Berechnungsfall beleuchtet einen besonderen Aspekt der Inversen Modellierung; der jeweilige Zweck wird zu Beginn der entsprechenden Kapitel formuliert.

Fall	Daten		Stochastisches Modell	Funktionales Modell	Bemerkungen
Ad	exakt	d	-	korrekt	Verifikation
Af	exakt	f	-	korrekt	Minimierungs-
A	exakt	d+f	-	korrekt	algorithmus
Bd	verrauscht	d	korrekt	korrekt	realistischer Fall
Bf	verrauscht	f	korrekt	korrekt	bei guter Kenntnis
B	verrauscht	d+f	korrekt	korrekt	des Systems
C	verrauscht	d+f	falsch	korrekt	Modelltest
D	verrauscht	d+f	korrekt	falsch	Modelltest

Tabelle 4.3: Berechnungsfälle (verwendete Daten: d=Kapillardruckdaten, f=Fliessraten)

4.2.5 Bemerkung zu den Abbildungen

Die folgenden Figuren zeigen die Konturlinien der Zielfunktion im zweidimensionalen Parameterraum. Sie geben Aufschluss über das Vorhandensein mehrerer Minima, über die Form und Konvexität der Zielfunktion und somit über die Identifizierbarkeit einzelner Parameter oder Parameterkombinationen. Die Bilder werden erzeugt, indem über das untersuchte Gebiet des Parameterraums ein Gitter mit 15×15 Punkten gelegt wird. Anschliessend kann das Direkte Problem für die jeweilige Parameterkombination gelöst, die Zielfunktion ausgewertet und das Resultat dem entsprechenden Gitterpunkt zugeordnet werden. Ein Interpolationsprogramm berechnet die Konturlinien, welche die Orte gleicher Zielfunktion miteinander verbindet. Es versteht sich, dass die in diesen Abbildungen enthaltene Information im allgemeinen nicht verfügbar ist. Der Minimierungsalgorithmus muss - ausgehend von einem Startpunkt - das Minimum identifizieren, wobei ihm nur der Wert und die Ableitung der Zielfunktion entlang seines Suchpfades bekannt sind. Analog dazu beruht die Fehleranalyse auf der Schätzung der Hesseschen Matrix

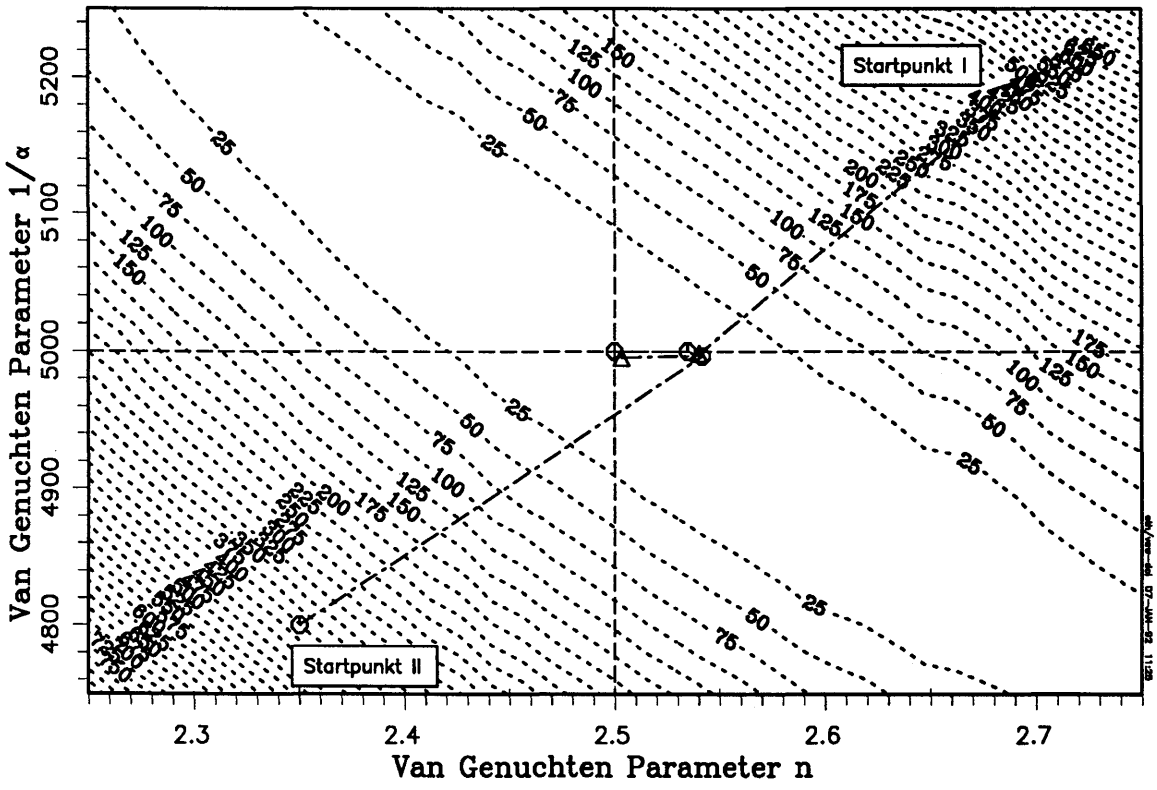
beim Optimum - der exakte Konfidenzbereich ist unbekannt. Anhand der Abbildungen kann somit abgeklärt werden, wie gut das Verfahren die wahren Verhältnisse erkennt, bzw. wie zulässig die Interpretation der Zielfunktion im zweidimensionalen Parameterraum durchgeführt wird. Es wird nun auch verständlich, warum sich dieser Teil der Arbeit auf die Untersuchung von lediglich zwei Parametern beschränken muss, soll eine gewisse Anschaulichkeit gewahrt bleiben. Ist die Problematik erkannt, kann die Leistungsfähigkeit des Verfahrens in höherdimensionalen Parameterräumen untersucht werden (siehe dazu Kapitel 4.3).

4.2.6 Fall A: exakte Daten

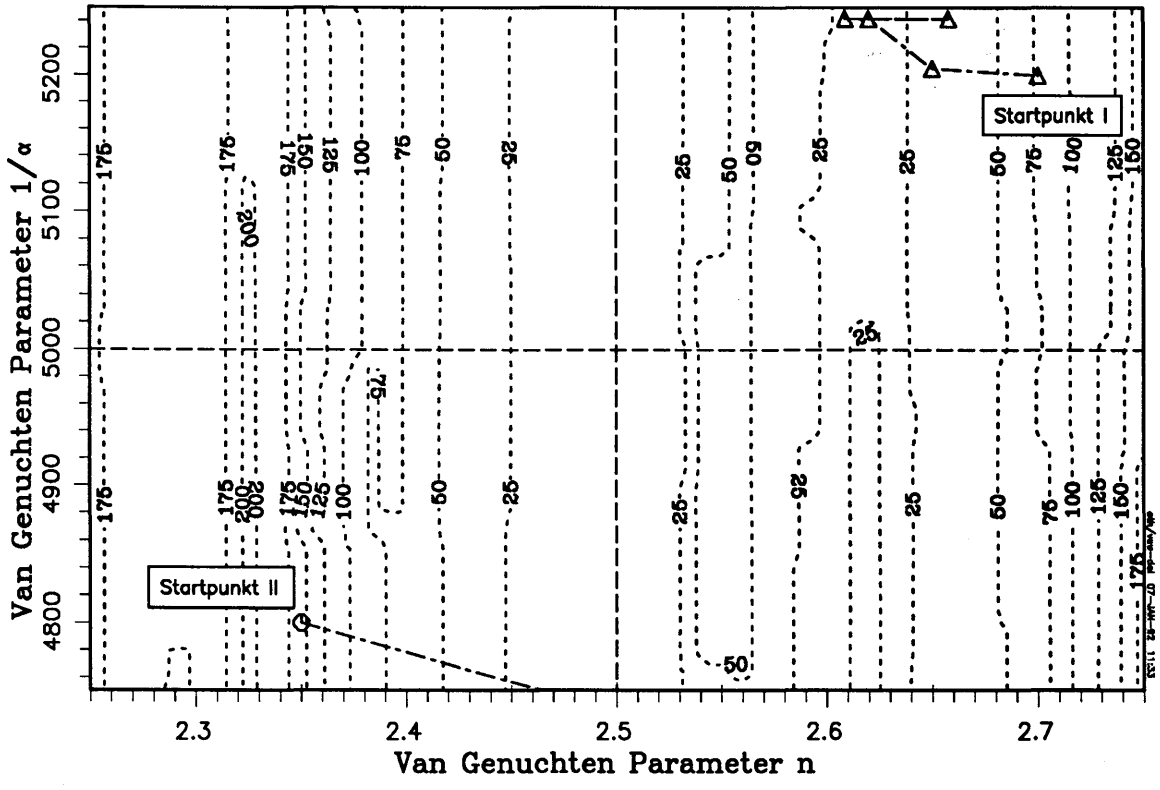
Man nehme an, dass der wahre Systemzustand exakt, d.h. ohne Messfehler, beobachtet werden kann. Im weiteren seien alle Modellfehler eliminiert. Sind diese beiden Bedingungen erfüllt - was nur in einem synthetischen Experiment möglich ist - muss der wahre Systemzustand nach erfolgter Parameterschätzung im Prinzip exakt reproduziert werden. Die Strenge dieser Aussage erlaubt es, den Minimierungsalgorithmus zu verifizieren. Ein zweiter Zweck dieser Untersuchung besteht darin, Eigenschaften der Zielfunktion festzustellen, wie sie sich alleine aufgrund des Modells ausbilden - unabhängig von der Fehlerstruktur der Beobachtungen. Eine prinzipielle Nichtidentifizierbarkeit gewisser Parameter kann so erkannt werden.

Figur 4.7 zeigt die Konturlinien der Zielfunktion für den Fall, dass nur die Daten des Tensiometers für die Inverse Modellierung Verwendung finden. Die Abbildung zeigt eine schön ausgebildete, konvexe Struktur der Zielfunktion. Es existiert nur ein Minimum beim wahren Wertepaar (2.5,5000), das vom Minimierungsalgorithmus ohne Schwierigkeiten identifiziert wird - unabhängig vom gewählten Startwert.

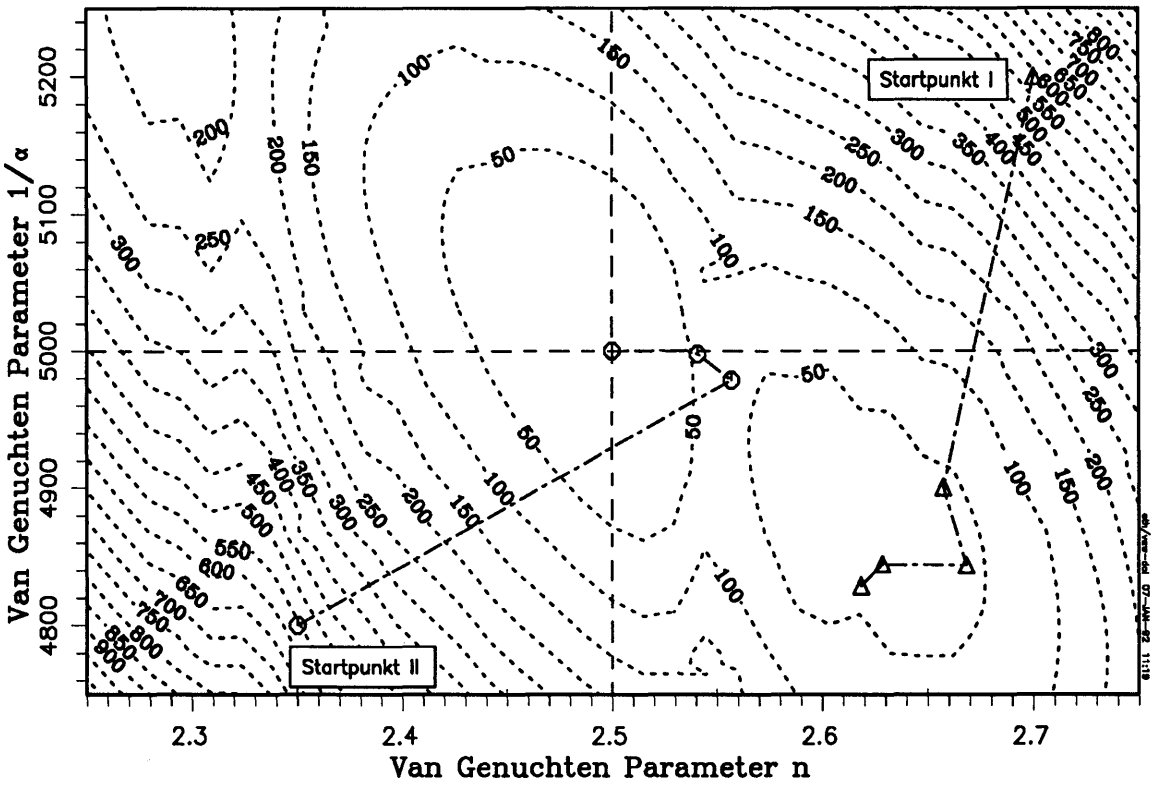
Anders sieht sie Situation für den Fall Af aus, bei dem nur die Daten der Durchflussmessung verwendet werden. Figur 4.8 zeigt eine überaus komplexe Struktur der Zielfunktion. Sie zeichnet sich durch mehrere langgezogene, senkrecht verlaufende Täler aus. Die Fliessrate am unteren Ende der Säule reagiert zwar sehr sensitiv auf Änderungen des van Genuchten Parameters n - eine Folge der relativen Permeabilität, die eine Funktion von n ist - doch bilden sich mehrere lokale Minima der Zielfunktion aus; der als optimal bezeichnete Punkt ist somit vom jeweiligen Startwert abhängig - die Lösung ist nicht eindeutig. Der Parameter $1/\alpha$, der nur in der Kapillardruckkurve auftritt, ist offensichtlich aufgrund der Fliessraten allein nicht identifizierbar.



Figur 4.7: Fall Ad: Zielfunktion und Suchpfade



Figur 4.8: Fall Af: Zielfunktion und Suchpfade



Figur 4.9: Fall A: Zielfunktion und Suchpfade

Die Superposition der beiden Abbildungen 4.7 und 4.8 führt zu Figur 4.9; sie repräsentiert die Zielfunktion bei gleichzeitiger Verwendung der Daten des Tensiometers und der Durchflussmessung. Die Kombination ergibt ein schön ausgebildetes globales Minimum beim wahren Parametersatz sowie ein Nebenminimum, das durch die Addition des lokalen Minimums bei $n \approx 2.62$ aus Abbildung 4.7 zustande kommt. Ausgehend von Startpunkt I verfehlt der Minimierungsalgorithmus den optimalen Parametersatz und kommt im lokalen Minimum zum Stillstand. Der Wert der Zielfunktion an diesem Minimum ist von Null verschieden. Startpunkt II als Anfangsschätzung führt mit hoher Genauigkeit zu den wahren Werten. Die Zielfunktion beim Optimum hat bei fehlerfreien Beobachtungen definitionsgemäss den Wert Null; dieser Sollwert wird vom Minimierungsalgorithmus annähernd erreicht.

Tabelle 4.4 fasst die Ergebnisse der Fallstudie A zusammen. Da keine Annahmen über die Genauigkeit der Beobachtungen vorliegen - ausser einer gegenseitigen Gewichtung, um die unterschiedlichen Einheiten der Druck- und Durchflussmessung auszugleichen - wird auf eine Fehleranalyse erst bei der Diskussion des realistischeren Falles B eingegangen.

	Startpunkt I		Startpunkt II	
Parameter	n	1/α	n	1/α
wahrer Wert	2.5000	5000.0	2.5000	5000.0
Startwert	2.7000	5200.0	2.3500	4800.0
Schätzwert Fall Ad	2.5034	4995.4	2.5001	5000.0
Schätzwert Fall Af	2.6200	5313.0	2.4976	2463.2
Schätzwert Fall A	2.6189	4828.7	2.5000	5000.0
Wert der Zielfunktion beim Schätzwert Fall A	107.8		$6.1 \cdot 10^{-11}$	

Tabelle 4.4: Resultate Fall A

Aus der Untersuchung des Falles A lassen sich zwei Schlussfolgerungen ziehen:

- Der im Programm ITOUGH implementierte Suchalgorithmus besitzt die Fähigkeit, ein Minimum bei genügender Konvexität der Zielfunktion mit grosser Genauigkeit zu detektieren (siehe Fall Ad und A, Startpunkt II). Das Programm verhält sich wie vorgesehen und kann als verifiziert betrachtet werden.

- Die starke Nichtlinearität der Resultate hinsichtlich der Modellparameter kann zu komplexen Strukturen der Zielfunktion führen. Dies erschwert einerseits die Aufgabe des Minimierungsverfahrens. Gravierender ist die Tatsache, dass das Auftreten zahlreicher lokaler Minima sowie von Zonen mit geringer Konvexität Fehlinterpretationen nicht auszuschliessen sind. Es sind somit weitere Kriterien für die Beurteilung der geschätzten Parameter heranzuziehen.

4.2.7 Fall B: verrauschte Daten

4.2.7.1 Ziele

Nachdem im Fall A der Minimierungsalgorithmus verifiziert und einige Erkenntnisse über die Natur der Zielfunktion gewonnen werden konnten, soll die Inverse Modellierung anhand eines realistischeren Beispiels im Detail vorgeführt werden. Der Fall B zeichnet sich dadurch aus, dass sowohl das Funktionale als auch das Stochastische Modell bekannt sind. Diese optimistische Annahme wird deshalb gemacht, weil sich die im

Kapitel 3 dieser Arbeit vorgestellte Theorie darauf abstützt. Von dieser Voraussetzung abweichende Modelle werden später diskutiert.

4.2.7.2 Fallbeschreibung und Annahmen

Im Fall B werden die mit einem Beobachtungsfehler behafteten Daten verwendet; sie sind in den Figuren 4.5 und 4.6 durch Kreissymbole dargestellt. Das verwendete Modell stimmt mit dem in Kapitel 4.2.3 beschriebenen überein. Insbesondere wird davon ausgegangen, dass der Typ der charakteristischen Kurven - in diesem Falle das Modell von van Genuchten - bekannt ist. Im weiteren werden allen Modellparametern die wahren Werte zugewiesen - davon ausgenommen sind die beiden zu bestimmenden Parameter n und $1/\alpha$, welche die Werte aus Tabelle 4.2 erhalten. Es sei nochmals darauf hingewiesen, dass die Annahme vollständig eliminierter Modellfehler einem Idealfall entspricht. Auf den Einfluss gewisser Modellfehler wird bei der Besprechung der Fälle C und D eingegangen.

Als erstes gilt es, die Kovarianzmatrix der Beobachtungen aufzustellen. Die Annahme unkorrelierter Beobachtungsfehler führt auf eine Diagonalmatrix. Da keine Vorinformationen über die zu schätzenden Parameter vorhanden sind, wird den beiden ersten Diagonalelementen, welche der Submatrix $\mathbf{C}_p$ in (3.2) entsprechen, eine sehr grosse Varianz (z.B. 1000.0) zugewiesen. Auf diese Weise wird das Gewicht der Anfangsschätzung gegenüber den Beobachtungen des Systemzustandes vernachlässigbar klein. Die Varianzen der Kapillardruckbeobachtungen erhalten den Wert $(c_d)_i = 2500\ Pa^2$, während den Diagonalelementen der Submatrix $\mathbf{C}_f$ der Wert $(c_f)_i = 5.0 \cdot 10^{-13}\ kg^2/s^2$ zugewiesen wird. Der Index i steht für eine der Einzelbeobachtungen an den 20 Zeitpunkten. Da das Experiment exakt modelliert werden kann, ist durch die Wahl dieser Kovarianzmatrix die Fehlerstruktur der Residuen beim optimalen Parametersatz korrekt wiedergegeben.

Als nächstes ist eine Anfangsschätzung für die beiden Modellparameter vorzunehmen (siehe Tabelle 4.2) und der Optimierungsalgorithmus zu starten. Es werden wiederum die drei Fälle Bd, Bf und B untersucht; sie unterscheiden sich im Umfang der benutzten Daten.

4.2.7.3 Resultate der Parameterschätzung

Fall Bd: nur Kapillardruckdaten

Das Verrauschen der Kapillardruckdaten führt zu einer Verschiebung des Optimums (Figur 4.10). Dies ist eine Folge des ungenügend grossen Stichprobenumfangs; der Mittelwert aller Abweichungen vom Sollwert ist ungleich Null. Abgesehen davon zeigt die Zielfunktion dieselbe Struktur wie bei Fall Ad: Das Minimum ist schön ausgebildet und wird vom Suchalgorithmus von beiden Startpunkten aus problemlos identifiziert. Die Fehleranalyse beim Optimum ergibt die Kovarianzmatrix der geschätzten Parameter. Aus der Eigenwertanalyse dieser Matrix lassen sich die Elemente der Fehlerellipse berechnen. Die Quadratwurzeln der Eigenwerte ergeben die Längen der Halbachsen. Der in Tabelle 4.5 angegebene Eigenvektor zeigt in die Richtung des Halbachse mit dem ersten Eigenwert. Die andere Halbachse steht definitionsgemäss senkrecht dazu (die Verzerrung in den Abbildungen ist eine Folge der ungleichen Massstäbe für die n- bzw. $1/\alpha$-Achse). Dargestellt in Figur 4.10 ist die Fehlerellipse auf einem Signifikanzniveau von 95%. Die Übereinstimmung in Orientierung und Grösse mit der tatsächlichen Konfidenzregion ist überaus gut. Die Fehleranalyse wird am Ende dieses Kapitels für den Fall B im Detail besprochen.

Tabelle 4.5 fasst die Resultate zusammen. Die Konditionszahl ist mit dem Reziprokwert der quadrierten Parameterwerte normiert, um die unterschiedlichen Grössenordnungen der beiden Parameter zu berücksichtigen.

Parameter	n	1/α
wahrer Wert	2.50	5000
Startwert	2.35 / 2.70	4800 / 5200
geschätzter Wert	2.42	5095
Zielfunktion	16.8	
Varianz	$1.45 \cdot 10^{-3}$	1757
Kovarianz	-2.266	
Korrelationsfaktor	-0.945	
Eigenwert	$2.23 \cdot 10^{-4}$	2708
Eigenvektor	1.00	$8.37 \cdot 10^{-4}$
Konditionszahl	3.00	

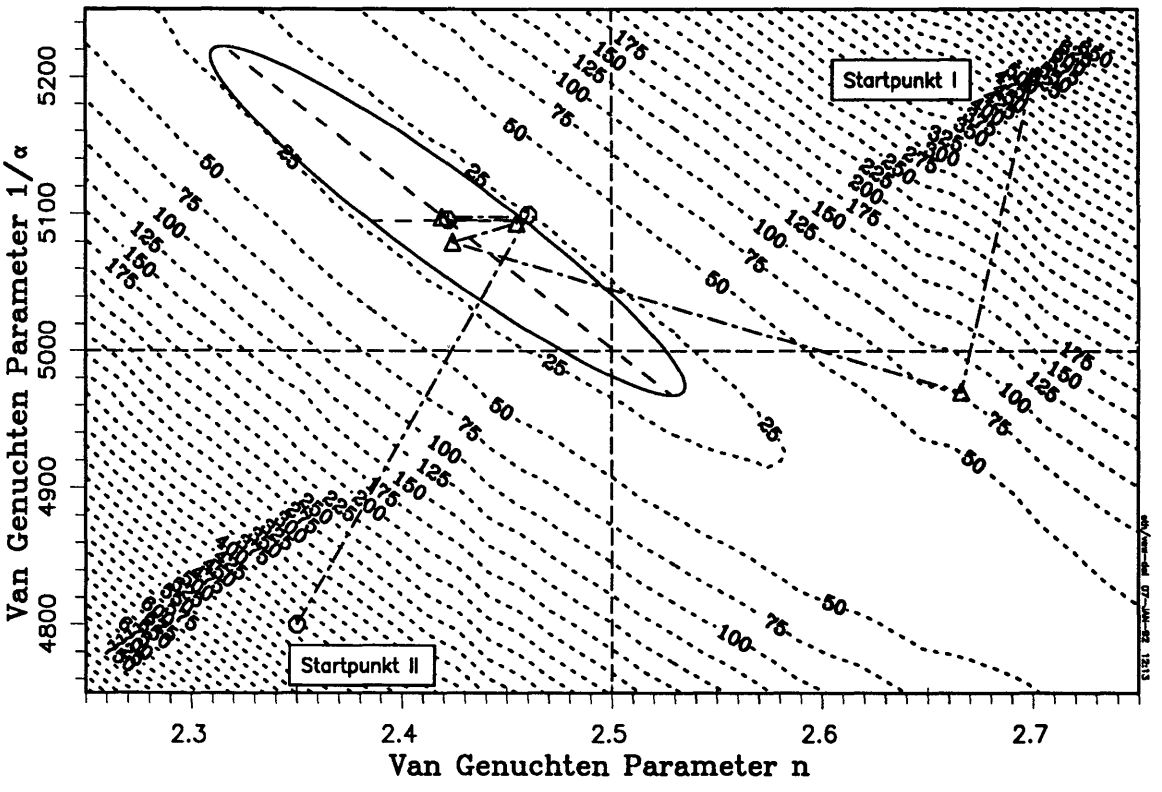
Tabelle 4.5: Resultate Fall Bd

Fall Bf: nur Fliessraten

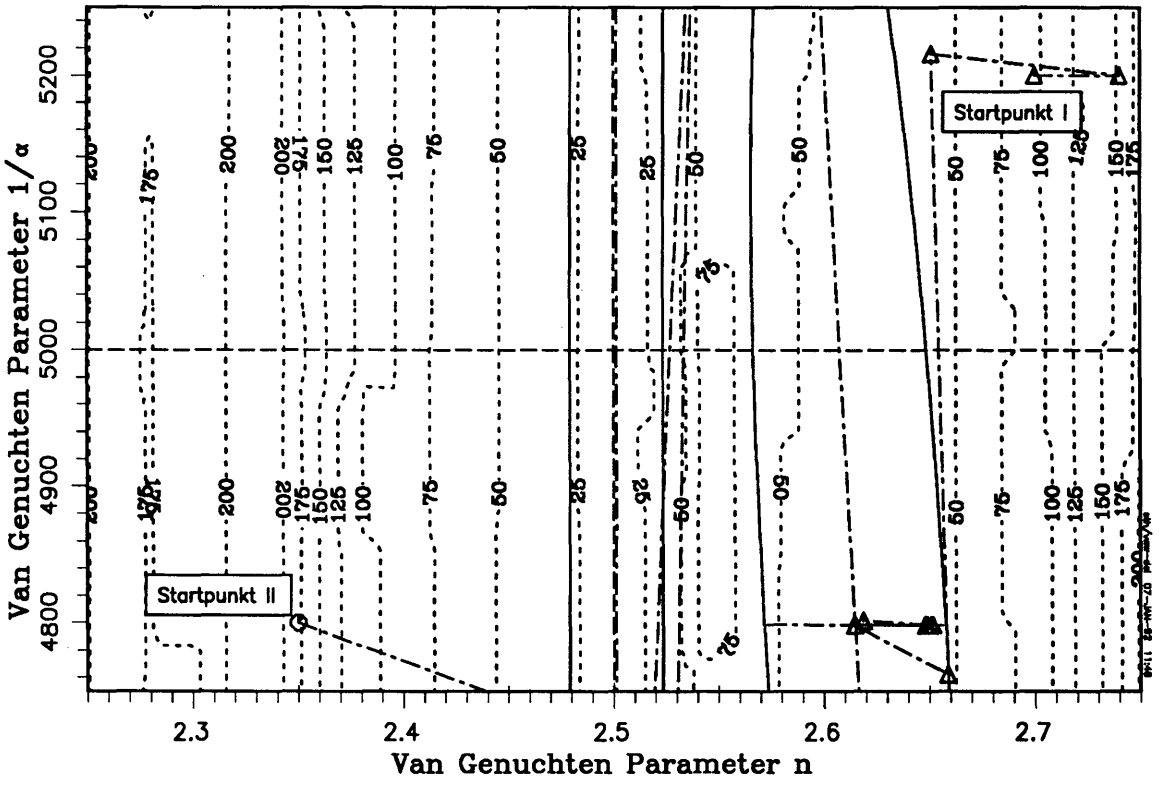
Wie bereits aus der Behandlung des Falles Af ersichtlich, führt die Nichtlinearität des Funktionalen Modells auf eine komplizierte Form der Zielfunktion, falls ausschliesslich Fliessraten für die Parameterschätzung herangezogen werden. Diese Struktur offenbart sich auch im Falle Bf (Figur 4.11). Die erste Anfangsschätzung der Parameter führt in ein Nebenminimum und somit zu einer falschen Schätzung der Modellparameter. Eine Fehleranalyse ist zwar möglich, sie berücksichtigt aber nur die Eigenschaften der Zielfunktion in der Umgebung des Nebenminimums. Die daraus errechneten Varianzen und Konfidenzbereiche führen somit zu falschen Schlussfolgerungen. Ausgehend von Startpunkt II wird das globale Minimum detektiert; der Wert der Zielfunktion ist geringer - die vorher gefundene Lösung ist nun klar als ein bloss lokales Minimum erkennbar. Während der Parameter n korrekt bestimmt wird, ist der Parameter $1/\alpha$ nur sehr schlecht identifizierbar. Dies ist anhand der grossen Konditionszahl sowie der Orientierung der Fehlerellipse auch ohne Kenntnis der Abbildung 4.11 sofort ersichtlich: die Konvexität der Zielfunktion lässt sich in Richtung der grösseren Halbachse nur sehr schwer bestimmen. Die geschätzte Varianz ist numerisch instabil - sie ist angesichts der Nichtidentifizierbarkeit des Parameters ohnehin von geringem Interesse. Trotz dieser schlechten Ausgangslage liegt der wahre Wert des Parameters $1/\alpha$ innerhalb des errechneten Konfidenzbereiches - eine Fehlaussage hinsichtlich des Parameters $1/\alpha$ ist trotz geringem Informationsgehalt des Resultates nicht entstanden.

	Startpunkt I		Startpunkt II	
Parameter	n	1/α	n	1/α
wahrer Wert	2.50	5000	2.50	5000
Startwert	2.70	5200	2.35	4800
geschätzter Wert	2.62	4798	2.50	4564
Zielfunktion	39.79		19.78	
Varianz	$2.02 \cdot 10^{-4}$	$3.76 \cdot 10^{4}$	$2.34 \cdot 10^{-4}$	$2.31 \cdot 10^{8}$
Kovarianz	-1.32		187.1	
Korrelationsfaktor	-0.479		0.806	
Eigenwert	$1.56 \cdot 10^{-4}$	$3.76 \cdot 10^{4}$	$8.20 \cdot 10^{-5}$	$2.31 \cdot 10^{8}$
Eigenvektor	1.00	$3.51 \cdot 10^{-5}$	1.00	$-8.12 \cdot 10^{-7}$
Konditionszahl	60.4		$6.98 \cdot 10^{5}$	

Tabelle 4.6: Resultate Fall Bf



Figur 4.10: Fall Bd: Zielfunktion, Suchpfade, 95%-Fehlerellipse



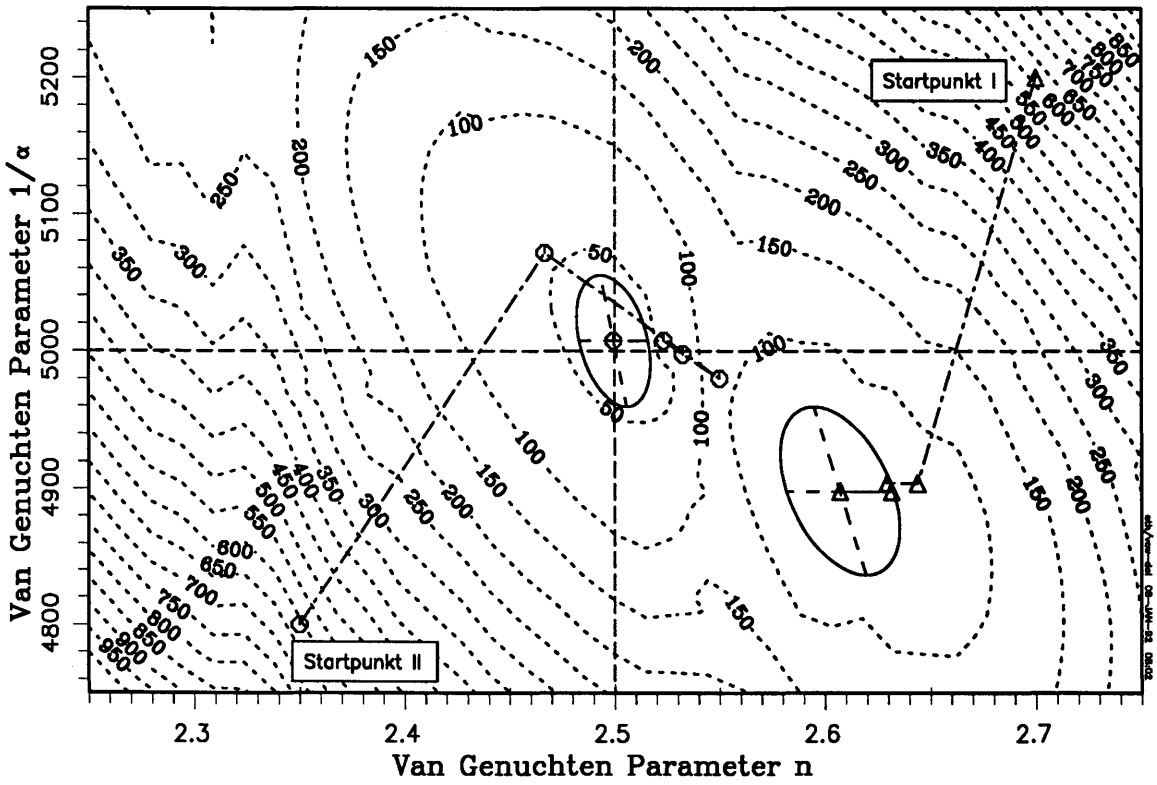
Figur 4.11: Fall Bf: Zielfunktion, Suchpfade, 95%-Fehlerellipsen

Fall B: Kapillardruckdaten und Fliessraten

Im Fall B werden sämtliche zur Verfügung stehenden Messdaten (20 Kapillardruckdaten und 20 Fliessraten) zur Bestimmung der beiden Modellparameter verwendet. Die in Figur 4.12 dargestellte Struktur der Zielfunktion sowie die in Tabelle 4.6 zusammengefassten Resultate können wie folgt kommentiert werden:

Ausgehend von Startpunkt I detektiert der Suchalgorithmus das nächstliegende Minimum; der Wert des Parameters n wird zu 2.61, derjenige des Parameters $1/\alpha$ zu 4898 Pa geschätzt. Die Zielfunktion bei diesem Minimum beträgt 64.62; 41.9 % davon stammen von den Residuen der Kapillardruckbeobachtungen, 58.1 % von den Fliessraten. Die empirische Varianz berechnet sich nach Gleichung (3.32) zu $\hat{\sigma}_0^2 = 1.62$.

Als nächstes ist der Modelltest (siehe Kapitel 3.7.3) durchzuführen. Es gilt die Frage zu beantworten, ob die empirische Varianz $\hat{\sigma}_0^2$ signifikant von der a priori festgelegten Varianz der Gewichtseinheit $\sigma_0^2 = 1.0$ abweicht oder nicht. Bei einem Irrtumsrisiko von $\alpha = 5\%$ beträgt die Teststatistik $F_{40;\infty;95\%} = 1.39$; die Realisierung $\hat{\sigma}_0^2/\sigma_0^2 = 1.62$ fällt somit in den Verwerfungsbereich R der Figur 3.4. Gemäss dem Entscheidungsschema (Tabelle 3.2) muss demzufolge die Hypothese H_0 einer rein zufälligen Abweichung verworfen werden, d.h. es ist nach einem Modellfehler zu suchen oder anzunehmen, dass das gefundene Minimum nicht dem Optimum entspricht. Diese Interpretation des Modelltests ist durch die Wahl des Irrtumsrisikos α festgelegt. Auf dem Signifikanzniveau $S = 1-\alpha = 99.5\%$ verläuft der Test positiv, da $F_{40;\infty;99.5\%} = 1.67 > 1.62 = \hat{\sigma}_0^2/\sigma_0^2$. Gleichzeitig nimmt aber die Wahrscheinlichkeit, einen Fehler zweiter Art zu begehen (nämlich die Hypothese H_0 anzunehmen, obwohl sie falsch ist) stark zu - und genau dieser Fehler wäre dem Modellierer unterlaufen. Der Modelltest gibt also Hinweise auf mögliche Ungereimtheiten der vorgeschlagenen Lösung. Die Durchführung des Modelltests setzt jedoch voraus, dass die Fehlerstruktur der Residuen - ausgedrückt durch σ_0^2 - *a priori* gut bekannt ist, was im allgemeinen nicht der Fall ist. Führt man trotz negativem Modelltest eine Fehleranalyse durch, ergibt sich eine relativ optimistische Schätzung der erzielten Genauigkeit. Figur 4.12 zeigt, dass der wahre Parametersatz ausserhalb der 95%-Fehlerellipse liegt. Die sich daraus ergebenden Fehlinterpretationen sind eine Folge der Tatsache, dass das gefundene Minimum bloss ein lokales ist.



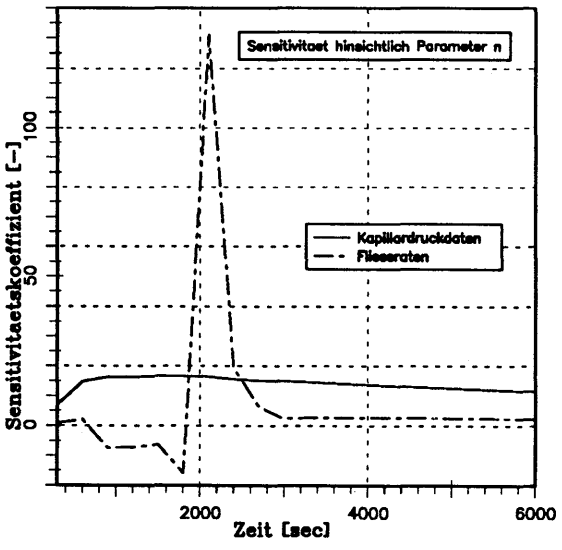
Figur 4.12: Fall B: Zielfunktion, Suchpfade, 95%-Fehlerellipsen

	Startpunkt I		Startpunkt II	
Parameter	n	1/α	n	1/α
wahrer Wert	2.50	5000	2.50	5000
Startwert	2.70	5200	2.35	4800
geschätzter Wert	2.61	4898	2.50	5007
Zielfunktion	64.62		39.72	
$\hat{\sigma}_0^2$	1.62		0.99	
Varianz	$1.34 \cdot 10^{-4}$	632.7	$5.20 \cdot 10^{-5}$	382.3
Kovarianz	-0.128		-0.051	
Korrelationsfaktor	-0.440		-0.358	
Eigenwert	$1.56 \cdot 10^{-4}$	$3.76 \cdot 10^{4}$	$4.53 \cdot 10^{-5}$	382.3
Eigenvektor	1.00	$2.02 \cdot 10^{-4}$	1.00	$1.32 \cdot 10^{-4}$
Konditionszahl	1.664		2.102	

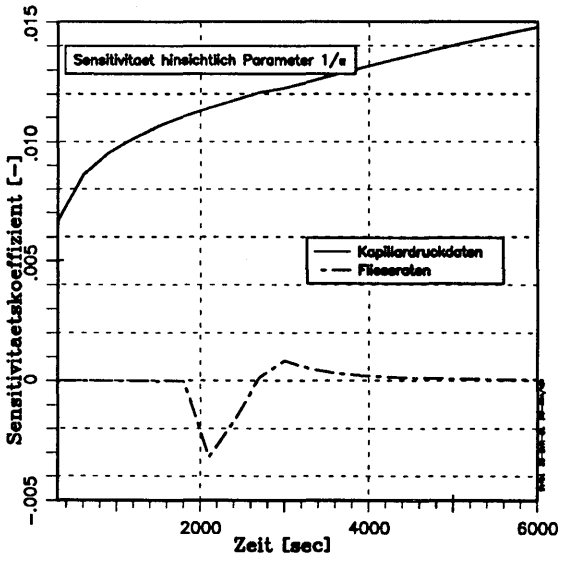
Tabelle 4.7: Resultate Fall B

Eine naheliegende Möglichkeit zur Überprüfung des bis anhin gefundenen Parametersatzes besteht darin, die Inverse Modellierung von verschiedenen Startpunkten aus durchzuführen und die jeweiligen Lösungen miteinander zu vergleichen. Ausgehend von Startpunkt II führt der Minimierungsalgorithmus zum globalen Minimum und bestimmt so einen Parametersatz, der den wahren Begebenheiten sehr nahe kommt (siehe Tabelle 4.7). Der Wert der Zielfunktion beim globalen Minimum beträgt 39.72, 47.7% entfallen auf die Kapillardruckdaten, 52.3% auf die Durchflussmessungen. Diese gute Aufteilung der Beiträge zur Zielfunktion deutet darauf hin, dass die gegenseitige Gewichtung der beiden Beobachtungsarten korrekt ist.

Zusätzliche Informationen liefert die mit $(\sigma_0)_i$ skalierte Jacobi-Matrix. Sie enthält die Sensitivitäten der einzelnen gewichteten Residuen hinsichtlich der geschätzten Parameter. In Figur 4.13a ist die Sensitivität des Systemzustandes hinsichtlich des Parameters *n* als Funktion der Zeit dargestellt. Es zeigt sich, dass die Fliessraten im Moment des Gasdurchbruches am unteren Ende der Versuchseinrichtung überaus sensitiv auf Änderungen des Porengrössenverteilungsindexes *n* reagieren. Eine gute zeitliche Auflösung dieser Versuchsperiode ergäbe ein Maximum an Information über den Parameter *n*, die Konvexität der Zielfunktion verbesserte sich. Andererseits kann ein Messfehler im sensitiven Zeitbereich die Parameterschätzung einseitig beeinflussen; der Mittelwert aller mit den Sensitivitätskoeffizienten gewichteten Fehler muss verschwinden, um eine erwartungstreue Schätzung der Modellparameter zu erreichen. Die Kapillardruckdaten zeigen eine mehr oder weniger konstante Sensitivität über die gesamte Versuchsdauer hinweg.



Figur 4.13a: Sensitivität hinsichtlich Parameter *n*

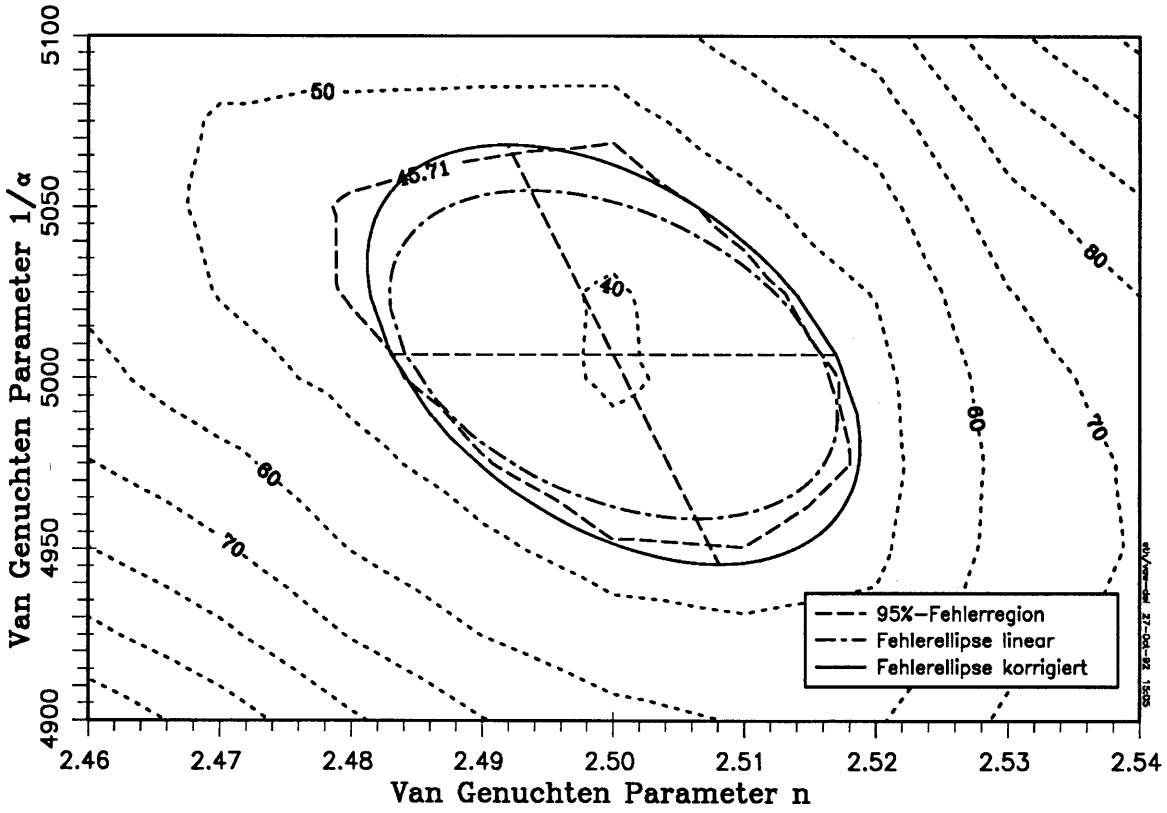


Figur 4.13b: Sensitivität hinsichtlich Parameter $1/\alpha$

Figur 4.13b enthält die Sensitivität hinsichtlich des Parameters $1/\alpha$. Während die Kapillardruckdaten mit zunehmender Gassättigung sensitiver auf $1/\alpha$ reagieren, sind die Sensitivitätskoeffizienten der Fliessraten - mit Ausnahme der Periode des Gasdurchbruches - annähernd Null. Mit anderen Worten: Die Beobachtungen des Durchflusses enthalten keine Information über den van Genuchten Parameter $1/\alpha$ - er ist aufgrund der Fliessraten nicht identifizierbar; Figur 4.13b bestätigt somit das bei der Diskussion der Fälle Af und Bf gefundene Resultat.

Als nächstes sei die Fehleranalyse im Detail besprochen. Die empirische Varianz beträgt $\hat{\sigma}_0^2 = 0.99$; der Modelltest ist erfüllt, wobei die Genauigkeit der Beobachtungen ganz leicht unterschätzt wurde. Die nun folgende Fehleranalyse stützt sich auf $\sigma_0^2 = 1.0$. Die Inverse der Fisherschen Informationsmatrix ergibt die Kovarianzmatrix $\mathbf{C_p}$ der geschätzten Parameter unter der Annahme, dass der Systemzustand linear in den Parametern ist (siehe Kapitel 3.7.4). Mittels einer Eigenwertanalyse der Matrix $\mathbf{C_p}$ lassen sich wiederum die Elemente der mittleren Fehlerellipse errechnen. Sie enthält den wahren Parametersatz mit einer Wahrscheinlichkeit von lediglich 39.35%. Um die 95%-Fehlerellipse zu erhalten, müssen die Halbachsen der mittleren Fehlerellipse mit dem $\chi^2_{2,95\%}$-Quantil $k = 2.448$ multipliziert werden. Für höherdimensionale Parameterräume nimmt dieser Faktor rasch zu. Die skalierte Konditionszahl von 2.1 weist zudem darauf hin, dass kein langgezogenes Tal vorliegt; die Zielfunktion steigt - vom Minimum ausgehend - in allen Richtungen gleichmässig an.

Die Zulässigkeit der Annahme, dass sich das Modell in der näheren Umgebung des optimalen Parametersatzes linear verhält, soll nun überprüft werden. CARRERA (1984) schlägt vor, die theoretischen Werte der Zielfunktion entlang den beiden Halbachsen mit den tatsächlichen Werten zu vergleichen, um so die Längen der Halbachsen allenfalls korrigieren zu können (siehe Kapitel 3.7.8). Die Konturlinie auf dem Niveau $\hat{\zeta} = 39.72 + (2.448)^2 = 45.71$ (Gleichung (3.47), Figur 4.14) begrenzt die tatsächliche 95%-Konfidenzregion. Diese Region wird unter der Linearitätsannahme, die der Matrix $\mathbf{C_p}$ zugrunde liegt, durch eine Ellipse approximiert. Die Linearitätsannahme unterschätzt die tatsächliche Grösse der Konfidenzregion, d.h. die Wahrscheinlichkeit, dass der wahre Parametersatz innerhalb dieser Fehlerellipse liegt, ist geringer als 95%. Mit dem von Carrera vorgeschlagenen Verfahren lässt sich eine korrigierte Fehlerellipse berechnen. Im vorliegenden Fall ist die Korrektur jedoch gering, die Standardabweichungen erhöhen sich lediglich um etwa 20%. Die Figur 4.14 zeigt, dass die tatsächliche Fehlerregion sowohl in der Grösse als auch in der Orientierung recht zuverlässig geschätzt werden kann.



Figur 4.14: Fall B: Überprüfung der 95%-Fehlerellipse

Als letztes wird kurz auf die Kovarianzmatrix des berechneten Systemzustandes eingegangen. Sie berechnet sich nach Formel (3.44). Es stellt sich heraus, dass die *a posteriori* Varianz eines Berechnungspunktes im Vergleich zur *a priori* Varianz einer Beobachtung um eine bis zwei Grössenordnungen geringer ist. Dieses Resultat überrascht nicht, steckt doch in einer mit dem optimalen Parametersatz berechneten Fliessrate oder Kapillarkraft die Information aus sämtlichen 40 Beobachtungen. Dementsprechend hoch sind auch die Korrelationskoeffizienten zweier aufeinanderfolgenden Berechnungspunkte. Sie liegen bei Beobachtungen des gleichen Typs z.T. über 95%. Interessant ist zudem die Tatsache, dass die Fliessraten vor dem Gasdurchbruch eine starke positive Korrelation aufweisen. Die maximale Fliessrate bei $t \approx 2000$ Sekunden besitzt wegen der grossen Sensitivitätskoeffizienten eine entsprechend grosse Varianz. Die Fliessraten nach dem Gasdurchbruch sind mit denjenigen zu Beginn des Versuchs negativ korreliert, was bei der Betrachtung der Figur 4.6 leicht einsehbar ist. Kapillardrücke sind untereinander durchgehend positiv korreliert. Die Korrelation zwischen den Fliessraten und Kapillardrücken nimmt mit zunehmender zeitlicher Distanz ab und wechselt im Bereiche des Gasdurchbruches ebenfalls das Vorzeichen.

Bei der Interpretation der mit dem Modell erzielten Genauigkeit muss also die starke Korrelation zwischen den einzelnen Berechnungspunkten berücksichtigt werden.

Aus der Diskussion des Falles B folgt:

- Der Minimierungsalgorithmus besitzt die Fähigkeit, auch unter ungünstigen Bedingungen ein Minimum zu identifizieren. Er tut dies jedoch nur lokal, sodass bei komplizierter Struktur der Zielfunktion mit mehreren Minima keine Gewissheit besteht, ob der gefundene Parametersatz dem optimalen entspricht. Eine Wiederholung der Parameterbestimmung - ausgehend von verschiedenen Startwerten - stellt eine einfache Möglichkeit dar, ein lokales Minimum als solches zu erkennen.

- Der Modelltest erlaubt es, eine wahrscheinlichkeitstheoretische Aussage über die Korrektheit der gefundenen Lösung zu machen. Während der Modelltest in anderen Gebieten der Parameterschätzung (z.B. Ausgleichsrechnung) konsequent durchgeführt wird, scheitert dessen Anwendung in der Hydrogeologie an den mangelnden Vorkenntnissen über die statistischen Eigenschaften der Residuen. Diese enthalten oft einen beträchtlichen, sich systematisch auswirkenden Modellfehler, der sich statistisch nicht erfassen lässt.

- Die tatsächliche Form der Zielfunktion ist im allgemeinen nicht bekannt. Eine einfache lineare Fehlerbetrachtung gibt einen Einblick in deren Konvexität in der Umgebung des Minimums. Daraus lassen sich zahlreiche Erkenntnisse über die Genauigkeit und Identifizierbarkeit einzelner Parameter oder Parameterkombinationen gewinnen. Einschränkend ist jedoch festzuhalten, dass sich diese Analyse auf die Verhältnisse an einem einzigen Punkt im Parameterraum abstützt. Wird die Gültigkeit dieser Lösung nicht überprüft, kann die Fehlerbetrachtung zu falschen Schlussfolgerungen führen.

- Die Linearitätsannahme ist bei der Simulation von Zweiphasenströmungen nicht immer gerechtfertigt. Das Verfahren von Carrera gibt einen Hinweis auf die Zulässigkeit der getroffenen Annahme. Wird der Einfluss der Nichtlinearität signifikant, kann eine korrigierte Schätzung der Varianzen vorgenommen werden. Es empfiehlt sich dann aber, die Resultate vorsichtig zu interpretieren, da weitere Voraussetzungen (z.B. die der Normalverteilung) verletzt sein könnten.

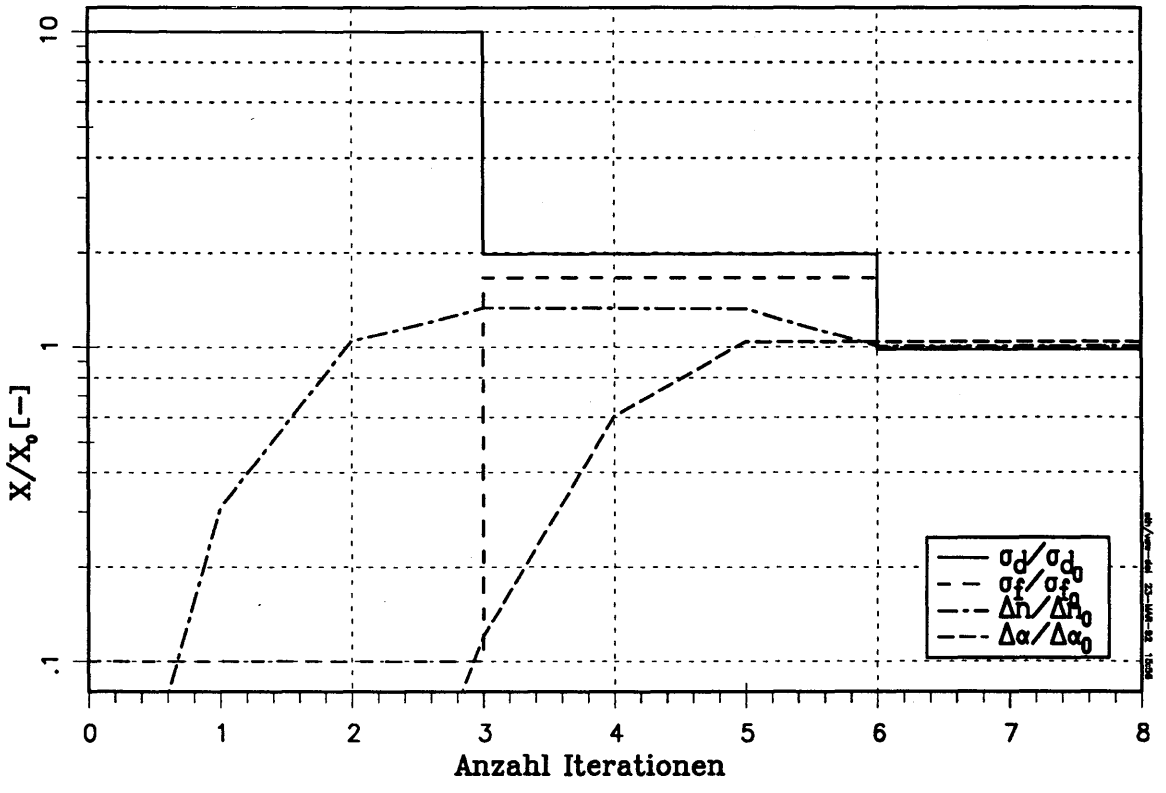
- Der Fall B untersucht das Schätzverfahren unter der Annahme, dass der Systemzustand vom Modell bis auf zufällige Abweichungen nachvollzogen werden kann. Die im Kapitel 3 vorgeführte Theorie stützt sich ebenfalls auf diese Annahme. Die Resultate zeigen, dass das Verfahren unter diesen optimistischen Bedingungen erfolgreich ist.

4.2.8 Fall C: Fehler im Stochastischen Modell

Das Stochastische Modell beschreibt das statistische Verhalten der Residuen, zusammengefasst in der Matrix C. Die Quantifizierung der einzelnen Elemente dieser Matrix stellt eine schwierige Aufgabe dar, da die Beobachtungs- und die Modellfehler oft nicht bekannt sind. Fall C beschreibt ein Verfahren, bei dem die $(\hat{\sigma}_0^2)_i$, $i \in \{p,d,f,t,s\}$, bzw. λ_{jk} während der Parameterschätzung iterativ bestimmt werden (siehe Kapitel 3.7.2), um allfällige Fehler im Stochastischen Modell ausgleichen zu können.

Im Beispiel wird davon ausgegangen, dass die Standardabweichung der Kapillardruckbeobachtung um einen Faktor 10 überschätzt, diejenige der Fliessraten um einen Faktor 10 unterschätzt werden. Die a priori vorgegebenen Varianzen betragen demzufolge $(\sigma_0^2)_d = 2.5 \cdot 10^5$ Pa^2 und $(\sigma_0^2)_f = 5.0 \cdot 10^{-15}$ kg^2/s^2. Dieser Fehler im Stochastischen Modell bewirkt, dass das Gewicht einer Durchflussbeobachtung 10'000-mal grösser ist als dasjenige einer Kapillardruckbeobachtung - die Struktur der Zielfunktion gleicht derjenigen des Falles B_f mit der bereits festgestellten Nichtidentifizierbarkeit des Parameters $1/\alpha$. Die Information, welche in den Kapillardruckdaten enthalten ist - und welche zur Identifizierung des Lufteintrittsbeiwertes benötigt wird - ist wegen des Fehlers im Stochastischen Modell nicht zugänglich. Das Programm ITOUGH bietet nun die Möglichkeit, nach einer bestimmten Anzahl von Iterationen die einzelnen Beobachtungsarten gegenseitig neu zu gewichten, indem der aktuelle Wert der Zielfunktion zur Schätzung der $(\hat{\sigma}_0^2)_i$ herangezogen wird. Für den Fall C wird nach jeweils drei Iterationen der Faktor λ_{df} (3.34) neu bestimmt. Die Resultate sind in Figur 4.15 zusammengefasst. Dargestellt ist die relative Differenz der Standardabweichungen vom jeweiligen Sollwert sowie die relativen Korrekturschritte, welche die Parameter n und $1/\alpha$ vom Startwert zum wahren Parametersatz hin durchzuführen haben. Während der ersten drei Iterationen ist die Standardabweichung der Kapillardruckdaten (durchgezogene Linie) um den Faktor 10 über dem Sollwert, diejenige der Fliessraten (weit gestrichelte Linie) um eine Grössenordnung darunter. Trotz dieser ungünstigen Gewichtung erfährt der Parameter n eine Korrektur (strichpunktierte Linie) hin zum wahren Wert. Der Parameter $1/\alpha$ hingegen bleibt annähernd auf seinem Anfangswert stehen. Dieses Verhalten entspricht demjenigen des Falles B_f. Nach drei Iterationen wird eine Neubestimmung der Varianzen gemäss Gleichung (3.33) vorgenommen. Die Standardabweichung sowohl der Kapillardruckdaten als auch der Fliessraten wird nur noch geringfügig überschätzt. Die Überschätzung ist eine Folge der Tatsache, dass die Gleichung (3.33) nicht am optimalen Punkt mit minimaler Zielfunktion ausgewertet werden kann, sondern beim geschätzten Parametersatz nach lediglich drei Iterationsschritten. Auffallend ist die plötzliche Verbesserung des Parameters $1/\alpha$ beim vierten Iterationsschritt, zustande gekommen durch die höhere

Gewichtung der Kapillardruckdaten und somit deren Einbezug in die Inverse Modellierung. Nach sechs Iterationen ist der wahre Parametersatz hinreichend detektiert. Eine weitere Neubestimmung der $(\hat{\sigma}_0^2)_i$ führt auf die empirisch festgestellten Varianzen der Residuen, die wegen des fehlerfreien funktionalen Modells den Varianzen der Beobachtungen entsprechen. Die Zielfunktion hat den Wert 40, wobei jede Beobachtungsart exakt 50% dazu beiträgt. Die *a posteriori* Varianz der Gewichtseinheit hat definitionsgemäss den Wert 1.0. Der Modelltest ist nicht durchführbar, da keine *a priori* Kenntnisse der Varianzen vorliegen, diese vielmehr im Laufe des Verfahrens empirisch ermittelt wurden.



Figur 4.15: Fall C: Verhalten der Parameterschätzung bei gleichzeitiger Bestimmung der Varianzen einzelner Beobachtungsarten

Zusammengefasst lässt sich feststellen:

- Das hier gezeigte Verfahren zur iterativen Schätzung der Faktoren $(\hat{\sigma}_0^2)_i$ stellt für die praktische Anwendung eine willkommene Möglichkeit dar, Fehler im Stochastischen Modell teilweise auszugleichen.

- Durch eine automatische Korrektur der relativen Gewichtung einzelner Beobachtungsarten kann die Identifizierbarkeit gewisser Parameter erhöht werden, indem anfänglich unterdrückte Information einen Beitrag zur Zielfunktion liefert.

- Die Anwendung dieses Verfahrens verunmöglicht die Durchführung eines Modelltests nach erfolgter Parameterschätzung. Dem praktischen Nutzen einer automatischen Korrektur allfälliger Modellfehler steht somit der Nachteil gegenüber, die im Modell eingeführten Hypothesen nicht mehr objektiv überprüfen zu können.

4.2.9 Fall D: Fehler im Funktionalen Modell

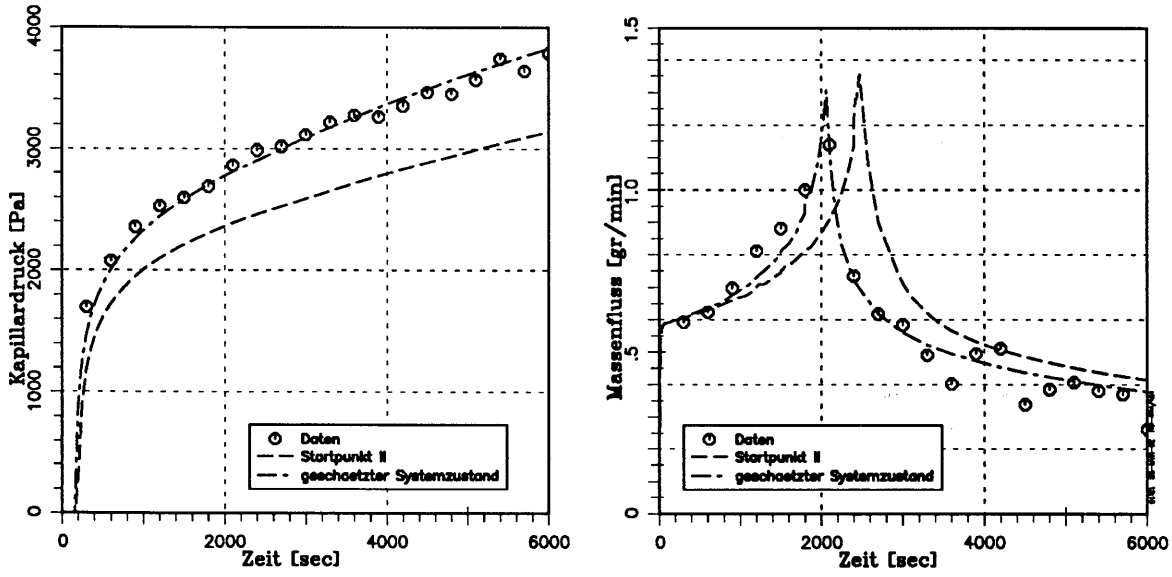
Die optimistische Annahme einer fehlerfreien Modellstruktur soll im Fall D aufgegeben werden, indem bewusst ein Fehler im Funktionalen Modell eingeführt wird. Es stellt sich sodann die Frage, ob und aufgrund welcher Daten dieser Modellfehler erkannt werden kann.

Ein Fehler im Funktionalen Modell entsteht auf unterschiedliche Weise: Vernachlässigte physikalische Prozesse, falsche Randbedingungen, ungenügend genaue Nachbildung der geometrischen Verhältnisse etc. können zu einer systematischen Abweichung zwischen dem gemessenen und berechneten Systemzustand führen. Als Beispiel sei hier ein Fehler in den charakteristischen Kurven, nämlich die Vernachlässigung der residualen Flüssigkeitssättigung, betrachtet. Die relative Permeabilität der Gasphase nimmt im Laufe des Verdrängungsprozesse für $S_{fr}=0$ bedeutend langsamer zu, und das asymptotische Verhalten der Kapillarkräfte erfolgt erst viel später bei geringen Wassergehalten (siehe Figur 4.3). Unter diesen Bedingungen führt die Inverse Modellierung zu einer - vom wahren Parametersatz abweichenden - Lösung: dem Parameter n wird der Wert 2.13, dem Parameter $1/\alpha$ der Wert 6170 Pa zugewiesen. Die Abweichung von den Sollwerten kann nicht überraschen, ergibt die Maximum-Likelihood Methode doch definitionsgemäss diejenige Schätzung, welche *für eine gegebene Modellstruktur* als optimal zu betrachten ist. Eine Änderung in der Modellstruktur führt also zu verschiedenen optimalen Parametersätzen.

Figur 4.16 zeigt den Systemzustand beim Startwert II und beim optimalen Parametersatz. Es zeigt sich, dass die Beobachtungen auch unter der Annahme verschwindender residualer Flüssigkeitssättigung - also mit einem fehlerbehafteten Modell - nachvollzogen werden können. Rein optisch scheint die Übereinstimmung zwischen gemessenem und berechnetem Systemzustand überaus gut. Eine genauere Analyse bestätigt diese Beurteilung bezüglich der Fliessraten. Die verbleibenden Abweichungen sind - bezogen auf die

vorgegebene Varianz der Daten - durchaus akzeptabel. Die Betrachtung der Fliessraten ergibt somit keinen Hinweis, ob Modell B oder Modell D vorzuziehen ist. Die Kapillardruckdaten hingegen werden im Fall D nur ungenügend genau modelliert. Rein optisch ist ein leichter Trend der Residuen auszumachen. Der Sachverhalt ungenügender Übereinstimmung lässt sich anhand des Modelltests bestätigen: die empirische Varianz beträgt $\hat{\sigma}_0^2 = 2.00$ und weicht bei einer Irrtumswahrscheinlichkeit von 5% signifikant vom a priori gewählten Wert ab. Es ist somit nach einem Modellfehler zu suchen, der sich bei gutem Verständnis des Systemverhaltens finden lässt.

Einen weiteren Hinweis ergibt das Modellstrukturkriterium nach Kashyap (siehe Gleichung (3.49), Kapitel 3.8.4). Nach diesem Kriterium ist das Modell B dem Modell D vorzuziehen wegen $(d_M)_{\text{Fall B}} = -224 < -175 = (d_M)_{\text{Fall D}}$.



Figur 4.16: Fall D: Geschätzter Systemzustand

Die Erkenntnisse aus der Analyse des Falles D lassen sich wie folgt zusammenfassen:

- Die geschätzten Parameterwerte beziehen sich immer auf die vorgegebene Modellstruktur. Gewisse Daten werden unter Umständen mit unterschiedlichen Modellen gleich gut erklärt - die jeweils optimalen Parametersätze können jedoch stark voneinander abweichen.

- Ein Fehler im Funktionalen Modell kann aufgrund des Modelltests detektiert werden - Voraussetzung ist eine gute Kenntnis des Stochastischen Modells.

- Die im Kapitel 3 dieser Arbeit vorgestellte Theorie basiert auf der Annahme statistisch beschreibbarer Fehler. Systematische Abweichungen, wie sie als Folge eines Fehlers im Funktionalen Modell auftreten können, überschreiten somit den Gültigkeitsbereich der Theorie. Trotzdem liefert das gezeigte Verfahren eine vernünftige Schätzung der Modellparameter. Die Möglichkeit der automatischen Parameterbestimmung sollte jedoch das Bemühen um ein möglichst gutes Verständnis des Systemverhaltens nicht ersetzen.

- Modellstrukturkriterien wie dasjenige von Kashyap erlauben es, die Bevorzugung eines Modells gegenüber einem anderen zu begründen.

4.2.10 Fall E: Prognoseberechnung und Fehlerfortpflanzung

Nachdem die Parameter und deren Kovarianzmatrix geschätzt sind, stellt sich abschliessend die Frage, wie sich die Unsicherheiten der Modellparameter in einer Prognoseberechnung fortpflanzen. Zu prognostizieren sei ein Wasserinjektionstest in das teilweise gasgesättigte poröse Medium, wie es am Ende des oben beschriebenen Laborexperimentes in der Versuchseinrichtung vorgefunden wird.

Das Ziel für den Fall E besteht darin, jedem Berechnungspunkt - z.B. der vorausgesagten Fliessrate am unteren Ende der Versuchseinrichtung - eine Dichtefunktion zuzuordnen, um eine Aussage über die Wahrscheinlichkeit eines bestimmten Resultates machen zu können. Diese Information ist Bestandteil jeder seriös durchgeführten Prognoseberechnung und Voraussetzung für die sogenannte Validierung, bei der die Modellvoraussagen mit unabhängigen Daten aufgrund vorgängig festzulegender Genauigkeitsanforderungen zu vergleichen sind. Die in diesem Kapitel zu berechnenden Wahrscheinlichkeiten besagen jedoch nicht, dass allenfalls in Zukunft gemessene Daten mit einer Wahrscheinlichkeit von z.B. 95% in das entsprechende Fehlerband zu liegen kommen. Die Resultate der hier vorgestellten Fehlerbetrachtung geben lediglich die Voraussagegenauigkeit des mathematisch-numerischen Modells wieder. Diese Genauigkeit hängt ab von der Qualität der Daten, welche bei der Kalibrierung des Modells zur Verfügung stehen, der Modellstruktur bei der Inversen Modellierung sowie der Modellstruktur bei der Prognoseberechnung. Alle diese Einflüsse sind mehr oder weniger unabhängig von den Eigenschaften des tatsächlichen Grundwassersystems und der Genauigkeit der Messeinrichtung, welche für die Überprüfung der Prognose eingesetzt wird. Die Validierung eines Modells ist umfassender und bedarf somit weiterer Überlegungen, die hier aber nicht ausgeführt werden.

Mögliche Verfahren zur Bestimmung der Dichtefunktion eines Berechnungspunktes sind bereits früher in Tabelle 3.3 zusammengestellt worden. Im Rahmen dieser Studie werden lediglich zwei Methoden vorgestellt, wobei davon ausgegangen wird, dass die geschätzten Parameter normalverteilt sind:

- Das *Gauss'sche Fehlerfortpflanzungsgesetz für zufällige Fehler* berechnet die Varianz der Resultate unter der Annahme, dass sich das Modell bezüglich der Parameter linear verhält bzw. die Varianzen der Parameter so gering sind, dass eine Linearisierung zu keinen signifikanten Fehlern führt. Der Einfachheit halber wird zudem von einer diagonalen Kovarianzmatrix ausgegangen; dies entspricht der Annahme, dass die Parameter voneinander unabhängig sind. Die Resultate dieser Fehlerbetrachtung sind definitionsgemäss normalverteilt, d.h. es müssen lediglich Erwartungswert und Varianz jedes einzelnen Berechnungspunktes ermittelt werden.

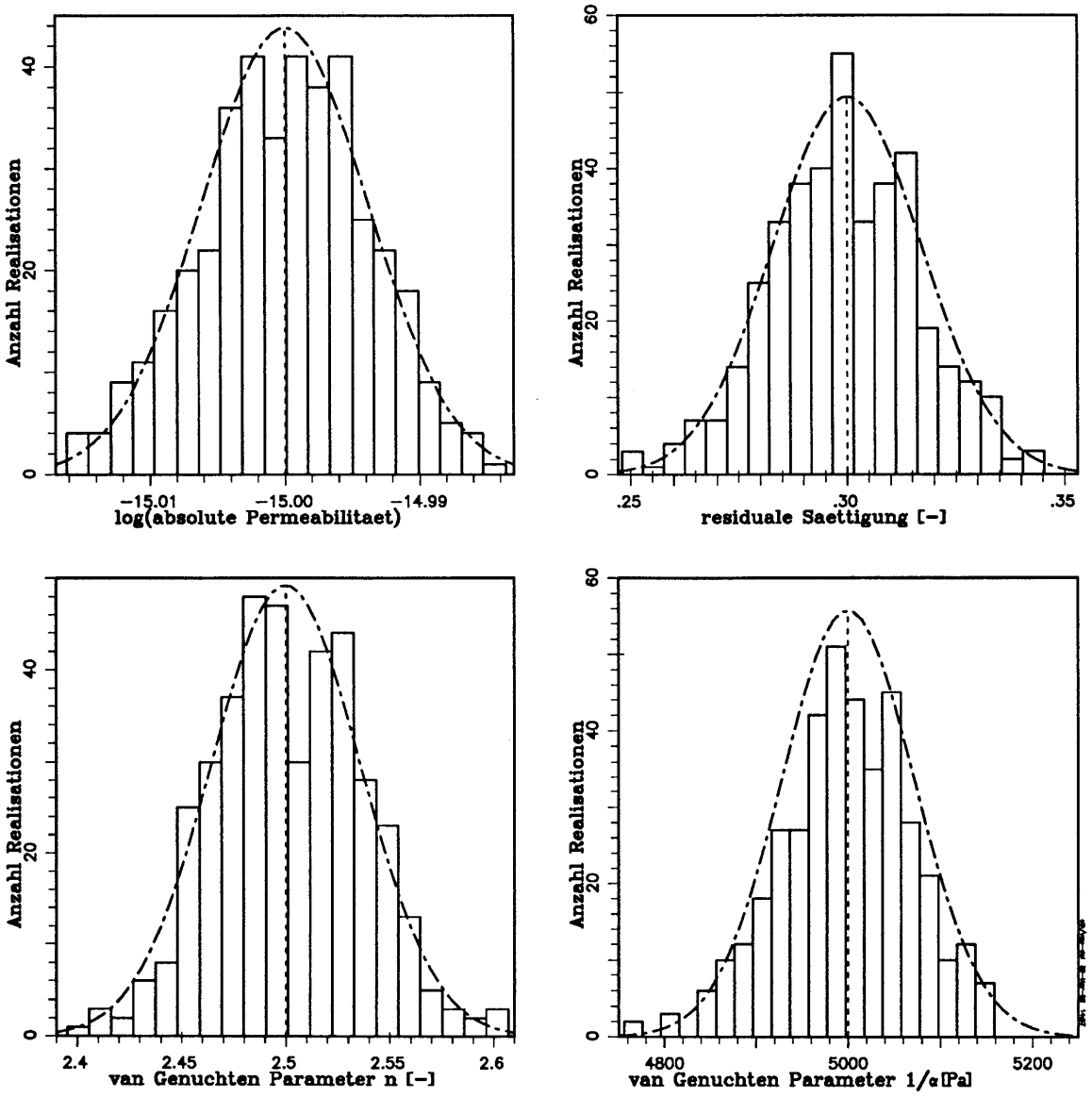
- Um obige Annahmen zu überprüfen, werden zusätzlich *Monte Carlo Simulationen* durchgeführt. Wiederum ausgehend von unkorrelierten, normalverteilten Parametern werden mit Hilfe eines Zufallsgenerators 400 Parametersätze zusammengestellt. Jedem Berechnungspunkt der Prognose können nun 400 Realisationen zugewiesen und statistisch ausgewertet werden. Wie bereits in Kapitel 3.7.6 angedeutet, sind in der Monte Carlo Methode die Nichtlinearitäten des Modells automatisch berücksichtigt, sodass deren Einfluss auf die Fortpflanzung der Unsicherheiten untersucht werden kann. Die Resultate sind im allgemeinen nicht mehr normalverteilt.

Die Inverse Modellierung zur Bestimmung der Parameter sei hier nicht mehr diskutiert. Basierend auf den Daten des Falles B wurde die Kovarianzmatrix von vier Parametern beim optimalen Parametersatz bestimmt. Die vier untersuchten Parameter mit ihren Varianzen sind (Tabelle 4.8):

Parameter		Wert	Varianz
log(absolute Permeabilität)	log(k)	-15.00	$3.81 \cdot 10^{-5}$
residuale Flüssigkeitssättigung	S_{fr}	0.30	$2.91 \cdot 10^{-4}$
Porengrössenverteilungsindex	n	2.50	$1.27 \cdot 10^{-3}$
Lufteintrittsbeiwert	$1/\alpha$	5000.00	$5.12 \cdot 10^{3}$

Tabelle 4.8: Fall E: Mittelwert und Varianzen der Parameter

Die Matrix $C_{p'}$ in Gleichung (3.45) ist somit eine 4×4 Matrix mit obigen Varianzen als Diagonalelemente. Für die Monte Carlo Simulationen müssen für jeden der vier Parameter 400 Werte generiert werden, deren Histogramme durch eine Normalverteilung mit den optimalen Parametern als Mittelwerte und den Varianzen gemäss Tabelle 4.8 approximiert werden. Figur 4.17 zeigt die statistische Auswertung der generierten Werte für jeden der vier Parameter. Aus dieser Datenmenge werden durch zufällige Kombination 400 Parametersätze zusammengestellt und der dazugehörige Systemzustand berechnet.



Figur 4.17: Fall E: Histogramme und Dichtefunktion der vier Parameter

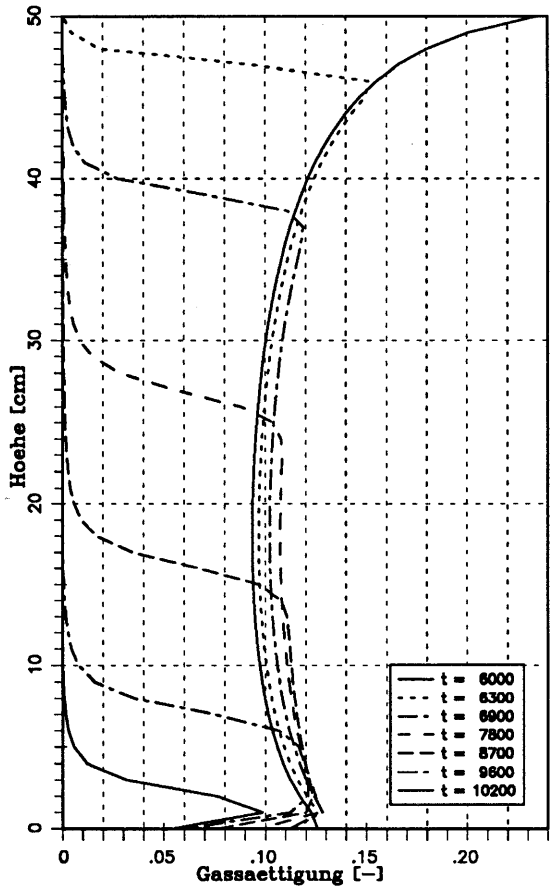
Der Versuchsablauf des synthetischen Experimentes mit anschliessender Prognoseberechnung präsentiert sich wie folgt:

Kalibrierungsphase:
In einer ersten Versuchsphase wird Gas während 6000 Sekunden mit einem konstanten Druck von 6 bar in die anfänglich wassergesättigte Gesteinsprobe injiziert (siehe Kapitel 4.2.3). Durch die Verdrängung des Porenwassers entsteht ein Zweiphasensystem mit tiefenabhängiger Gassättigung (siehe Figur 4.4a). Die beobachteten Kapillardruckdaten und Fliessraten der ersten Versuchsphase dienen der Bestimmung der vier Modellparameter; sie sind somit nicht Bestandteil der Prognoseberechnung.

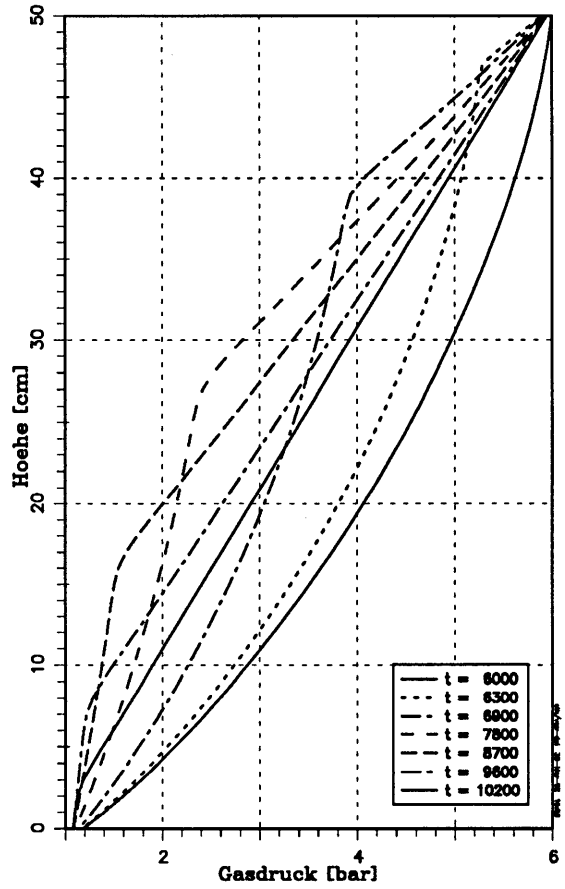
Prognosephase:
In der zweiten Versuchsphase wird unmittelbar anschliessend Wasser mit einem konstanten Druck von 6 bar in die teilweise gasgesättigte Probe injiziert. Das Wasser verdrängt die Gasphase. Zum Zeitpunkt $t \approx 10'000$ Sekunden erreicht die Wasser-Gas Front das untere Ende der Versuchseinrichtung - die Gesteinsprobe ist wiederum vollständig wassergesättigt. Das Systemverhalten lässt sich anhand der Sättigungsprofile in Figur 4.18a ablesen. Es versteht sich, dass die Gassättigung zu Beginn der Prognosephase ebenfalls mit Unsicherheit behaftet ist. Dieser Einfluss wird im folgenden jedoch nicht weiter untersucht; er liesse sich durch den Einbezug eines weiteren Parameters - eines Faktors, mit dem die Anfangssättigung skaliert wird - näherungsweise berücksichtigen. Die Druckprofile (Figur 4.18b) zeigen qualitativ das mit Gleichung (4.1) angedeutete Verhalten. Das anfänglich leicht konkav gekrümmte Druckprofil geht gegen Ende des Versuchs bei vollständiger Wassersättigung in die wohlbekannte Gerade des Darcy-Experimentes über.

Der Ausfluss von Wasser am unteren Ende der Probe ist diejenige Grösse, welche mit dem kalibrierten Modell prognostiziert werden soll.

Figur 4.19 zeigt die Resultate der Prognoseberechnung. Dargestellt sind die Fliessraten am unteren Ende der Versuchseinrichtung für den optimalen Parametersatz (durchgezogene Linie). Zu Beginn der zweiten Versuchsphase nimmt der Durchfluss ab, da vorerst das Porengas aus der Gesteinsprobe verdrängt werden muss. Die erhöhte Gassättigung im unteren Bereich der Gesteinsprobe führt zu einer reduzierten relativen Permeabilität der flüssigen Phase. Nach ca. 10'000 Sekunden erreicht die Wasser-Gas Front die Messstelle; die Fliessrate steigt sprunghaft an und stabilisiert sich nach kurzer Zeit - der stationäre Zustand eines herkömmlichen Darcy-Experimentes ist erreicht; aus der stationären Durchflussrate liesse sich die absolute Permeabilität von $k = 1 \cdot 10^{-15}$ m^2 mit grosser Genauigkeit ermitteln.



Figur 4.18a: Fall E: Gassättigungsprofile



Figur 4.18b: Fall E: Gasdruckprofile

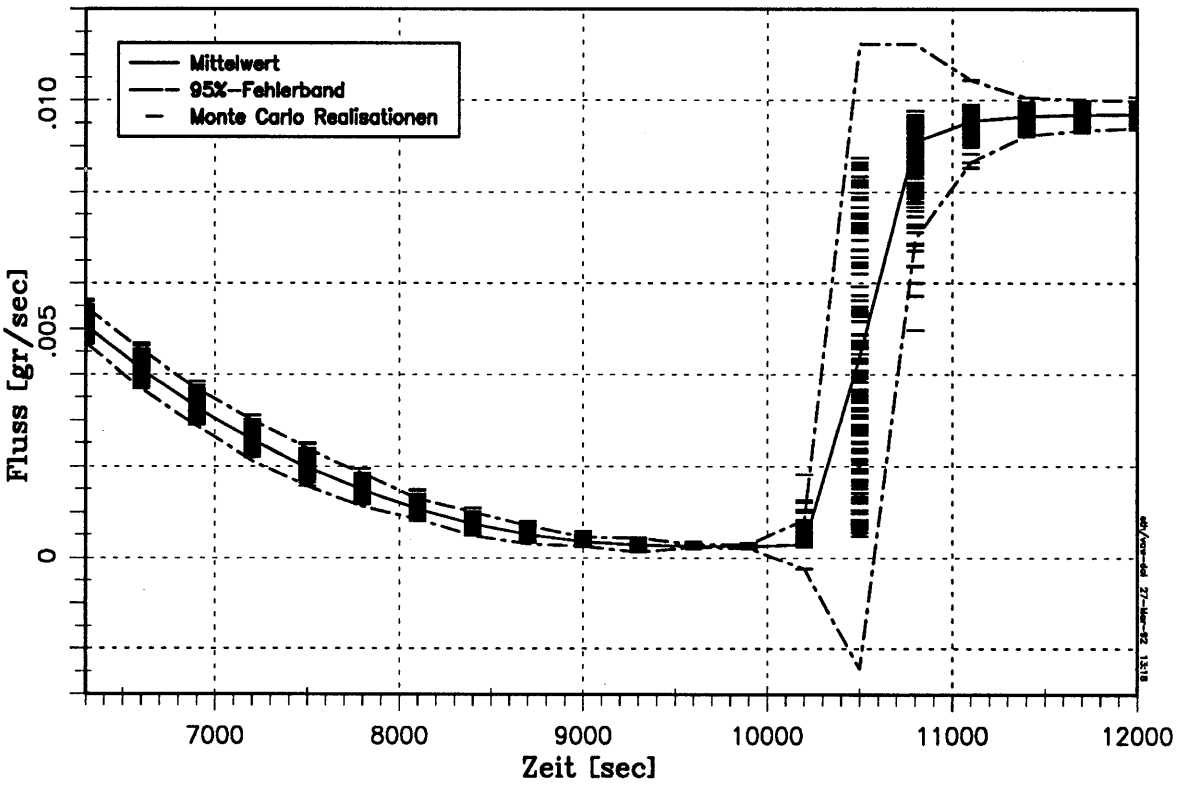
Die Sensitivitätskoeffizienten der Fliessraten hinsichtlich der vier Parameter ergeben die Jacobimatrix **J'**, aus der sich mit Hilfe der Gleichung (3.46) die Varianzen der einzelnen Fliessraten berechnen lassen. In Figur 4.19 ist das 95%-Fehlerband eingezeichnet; es umfasst sämtliche Punkte im Bereich der doppelten Standardabweichung um den Mittelwert. Die Fliessraten zum Zeitpunkt des Wasserdurchbruches scheinen sensitiver auf Unsicherheiten in den Parametern zu reagieren als vor und nach diesem Ereignis. Die Annahme linearer Verhältnisse führt im weiteren dazu, dass auch negative Fliessraten mit einer gewissen Wahrscheinlichkeit vorausgesagt werden, was in Anbetracht der physikalischen Verhältnisse unmöglich ist.

Interessant sind nun im Vergleich dazu die Ergebnisse der Monte Carlo Simulationen. Aus Darstellungsgründen ist nur die Hälfte der Realisationen als kleine, waagrechte Striche in Figur 4.19 eingezeichnet. Sie liegen während eines grossen Teils des Versuchs innerhalb des 95%-Fehlerbandes - die Linearitätsannahme scheint zulässig zu sein. Unterschiedliche Resultate ergeben die beiden Methoden im Bereich des starken Anstiegs der Fliessraten. Die Monte Carlo Simulation führt selbstverständlich zu keinen negativen Werten. Die Wahrscheinlichkeit eines bestimmten Resultates scheint zudem nicht sym-

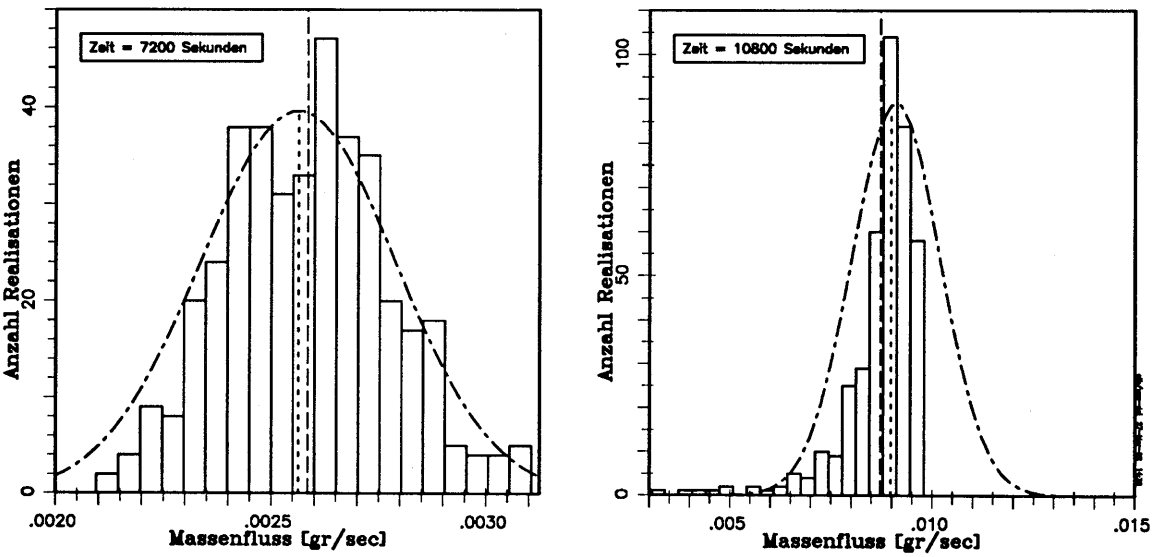
metrisch um den Mittelwert verteilt zu sein. Exemplarisch werden im folgenden die Dichtefunktionen beim Zeitpunkt t=7200 Sekunden und t=10800 Sekunden näher untersucht.

Figur 4.20 enthält einerseits das Histogramm der Monte Carlo Simulationen und andererseits die Dichtefunktion, wie sie sich aus dem Gauss'schen Fehlerfortpflanzungsgesetz ergibt. Zum Zeitpunkt t=7200 Sekunden führt die Linearitätsannahme zu einem befriedigenden Resultat. Sowohl die Charakteristik der Symmetrie als auch der Wert der Standardabweichung werden von einer einfachen, linearen Betrachtung mit genügender Genauigkeit wiedergegeben.

Ein anderes Bild zeigt sich zum Zeitpunkt t = 10'800 Sekunden. Die Fliessraten sind nicht mehr symmetrisch verteilt, d.h. Werte $q_f > 0.01$ gr/s werden von keiner der 400 Monte Carlo Simulationen realisiert, während ihnen der Gauss'sche Ansatz eine recht grosse Wahrscheinlichkeit zuordnet. Andererseits treten Fliessraten $q_f < 0.005$ gr/s weitaus häufiger auf, als dies aufgrund der linearen Betrachtungsweise zu erwarten ist. Das Beispiel bestätigt die Beobachtung von SCHLATTER (1991), dass mit zunehmender Nichtlinearität des Modells die Resultate zu einer log-Normalverteilung hin tendieren, unabhängig von der Verteilung der Modellparameter. Dieser Sachverhalt ist besonders dann von Bedeutung, wenn die Wahrscheinlichkeit extremaler Ereignisse von Interesse ist, wie dies bei einer Sicherheitsanalyse oft der Fall ist.



Figur 4.19: Fall E: Fliessraten, 95%-Fehlerband und Monte Carlo Realisationen



Figur 4.20: Fall E: Verteilung der Fliessraten zum Zeitpunkt t=7200 und t=10800 Sekunden

Fall E lässt sich wie folgt zusammenfassen:

- Die Inverse Modellierung liefert eine Schätzung der Kovarianzmatrix der Modellparameter. Es stellt sich die Frage, wie sich die Unsicherheiten in den Parametern auf die Resultate einer Prognoseberechnung auswirken. Fall E vergleicht den linearen Ansatz des Gauss'schen Fehlerfortpflanzungsgesetzes mit den Resultaten einer Monte Carlo Simulation.

- Die Linearitätsannahme liefert bei genügend kleiner Varianz der Modellparameter im allgemeinen eine gute Schätzung der Voraussageunsicherheit.

- Bei stark nicht-linearem Systemverhalten weist die Dichtefunktion der Resultate eine Schiefe auf, welche nur mittels Monte Carlo Simulationen nachvollzogen werden kann. Eine lineare Fehlerbetrachtung unterschätzt in einem solchen Fall die Auftretenswahrscheinlichkeit extremaler Ereignisse.

- Die berechneten Varianzen beziehen sich auf die Voraussageunsicherheit des numerischen Modells, basierend auf dem zuvor durchgeführten Kalibrierungsprozess. Ist das Modell nicht validiert, sagen diese Resultate somit nichts aus über die Eintretenswahrscheinlichkeit einer bestimmten Beobachtung des natürlichen Systemzustandes.

4.2.11 Zusammenfassung synthetisches Experiment

Anhand synthetisch generierter Daten konnten Teile des Programms ITOUGH verifiziert, sowie das Verfahren der Inversen Modellierung im Detail aufgezeigt werden. Parameterbestimmung und Fehleranalyse können bei gutem Verständnis des Systemverhaltens zuverlässig durchgeführt werden. Der wahrscheinlichkeitstheoretische Hintergrund des Verfahrens liefert zusätzliche Kriterien zur Beurteilung der gefundenen Lösungen. Die im allgemeinen grossen Unsicherheiten in der Modellstruktur (ungenügende Kenntnisse der massgebenden Prozesse, Heterogenitäten, Randbedingungen etc.) zwingen jedoch zu einer mehr pragmatischen Sichtweise. Inverse Modellierung liefert sodann eine vernünftige Schätzung der Modellparameter sowie ein kalibriertes Modell mit erhöhter Aussagekraft für die anschliessende Prognoseberechnung.

4.3 GASTEST FELSLABOR GRIMSEL

4.3.1 Zielsetzungen

Das zweite Anwendungsbeispiel befasst sich mit der Auswertung der Daten des sogenannten Gastests, der von der Nagra geplant und unter Beizug einer Spezialfirma im Felslabor Grimsel (FLG) durchgeführt wurde. Dieser Teil der Arbeit hat sich somit nach mehreren, hierarchisch gegliederten Zielvorgaben zu richten:

Zielsetzungen Felslabor Grimsel:
Die generelle Zielsetzung für die Arbeiten im Felslabor Grimsel, das seit Mai 1984 in internationaler Zusammenarbeit von der Nagra betrieben wird, umfasst

- den Aufbau von Know-how in der Planung, Ausführung und Interpretation von Untergrundversuchen;

- den Erwerb praktischer Erfahrung in der Entwicklung, Erprobung und dem Einsatz von Testapparaturen und Messverfahren, welche für die später durchzuführende Charakterisierung eines realen Endlagerstandortes eingesetzt werden können (LIEB 1988).

Zielsetzungen Gastest:
An zwei der potentiellen Standorte eines Endlagers für schwach- und mittelradioaktive Abfälle wurde das Vorhandensein von Naturgas im Wirtgestein festgestellt (ANDREWS 1988; VINARD & MCCORD 1991). Die Tatsache, dass die hydraulischen Tests zur Charakterisierung des Gesteins unter Zweiphasenbedingungen durchzuführen sind, veranlasste die Nagra, im Rahmen eines FLG-Projektes folgende Fragestellungen zu untersuchen:

- Wie werden die gängigen Interpretationen hydraulischer Tests, welche auf der Annahme vollständiger Wassersättigung beruhen, durch das Vorhandensein einer Gasphase beeinflusst?

- Welche Testabfolge liefert bei ungenügender Kenntnis der Phasenverhältnisse eine konsistente Schätzung der wesentlichen Parameter, insbesondere der hydraulischen Leitfähigkeit?

- Welche Parameter zur Beschreibung eines Zweiphasensystems können allenfalls anhand eines hydraulischen Tests identifiziert werden?

Zur Beantwortung dieser Fragen wurde ein dreistufiges Testprogramm entworfen (siehe Kapitel 4.3.2.1). Vor dessen Ausführung galt es, mittels Modellrechnungen die prinzipielle Durchführbarkeit des geplanten Versuchs nachzuweisen (FINSTERLE 1989) (siehe Kapitel 4.3.3). Nach einem Vorversuch zur Überprüfung des Instrumentariums konnte das eigentliche Experiment in der Zeit vom 26.6. bis 21.7.1989 erfolgreich durchgeführt werden. Die gesammelten Daten sowie erste Auswertungen sind in WYSS (1989) dokumentiert. Die detaillierte Analyse der Daten ist Bestandteil der vorliegenden Arbeit.

Zielsetzungen der Datenauswertung mittels Inverser Modellierung:
Die Auswertung der Daten des Gastests hat folgende Ziele zu erfüllen:

- Es soll gezeigt werden, dass sich die im Kapitel 2 und 3 vorgestellten und im Programm ITOUGH implementierten Konzepte bei der Auswertung von Felddaten bewähren.

- Die Fragen des Gastests (siehe oben) gilt es zu beantworten oder allenfalls das weitere Vorgehen aufzuzeigen.

4.3.2 Beschreibung des Gastests

4.3.2.1 Grundidee und Testaufbau

Um den Einfluss einer freien Gasphase auf die Interpretation hydraulischer Tests untersuchen zu können, muss zum Vergleich das Systemverhalten unter vollständiger Wassersättigung bekannt sein. Diese Bedingung führt zu einem dreistufigen Testaufbau:

- *Testphase I:*
  Man führe eine Serie standardisierter Hydrotests in einer vollständig wassergesättigten Kluftzone durch und bestimme die entsprechenden Parameter.

- *Testphase II:*
  Durch Injektion von Gas soll künstlich eine ungesättigte Zone in der Umgebung eines Bohrlochs kreiert werden.

- *Testphase III:*
  Man wiederhole die Testserie der Phase I - nun ausgeführt unter Zweiphasenbedingungen - und vergleiche die geschätzten Parameter mit den Resultaten der Testphase I.

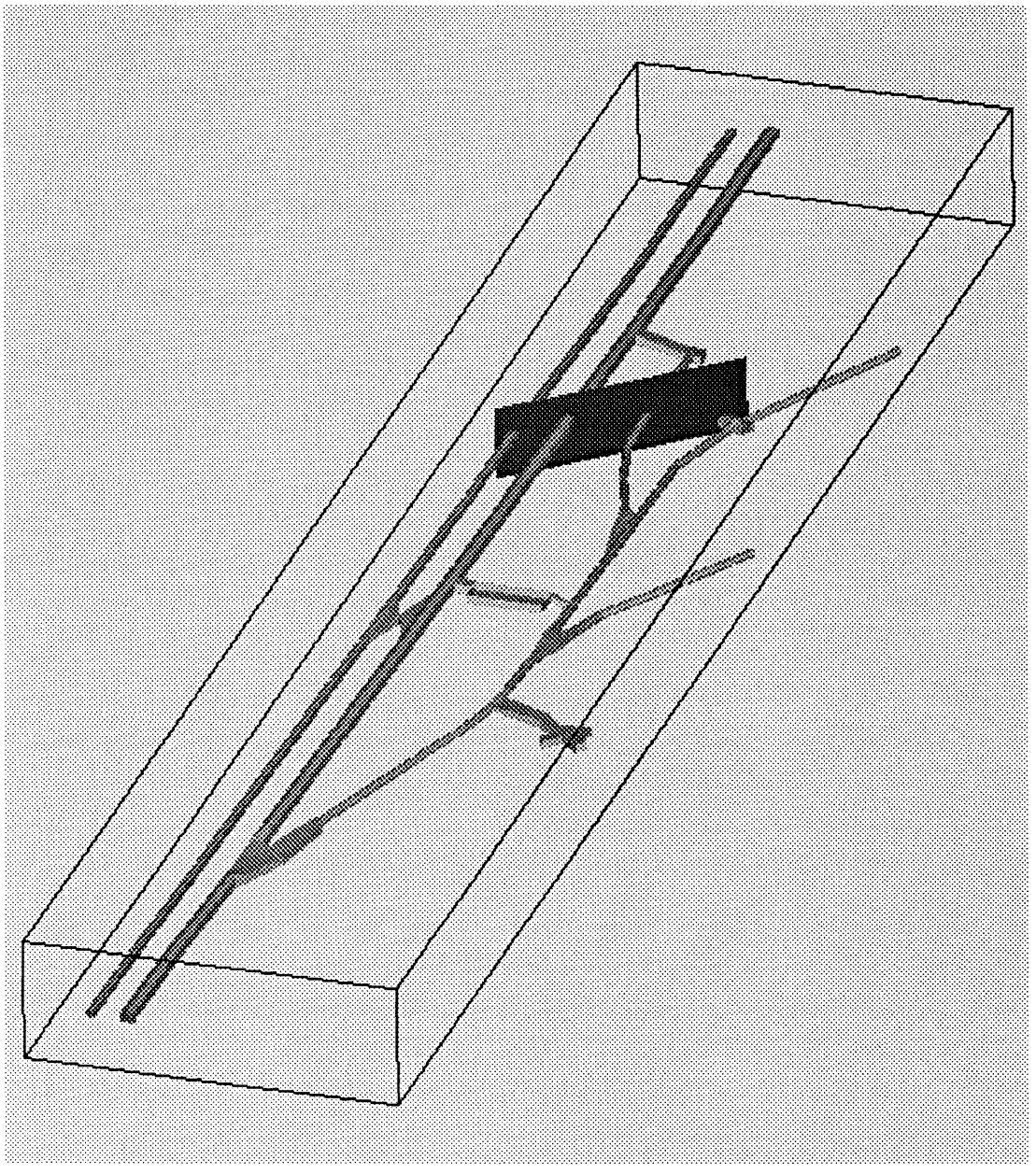
Mit der gewählten Testabfolge sollen kontrollierte Versuchsbedingungen geschaffen werden, um aus dem Vergleich der Testphasen I und III Schlussfolgerungen hinsichtlich des Gaseinflusses ziehen zu können. Testphase II hat vordergründig lediglich den Zweck, eine Gasblase einer bestimmten Ausdehnung zu erzeugen. Allenfalls lassen sich jedoch zusätzliche Erkenntnisse über den Verdrängungsprozess sowie über einzelne, gasbezogene Gesteinseigenschaften gewinnen.

Das detaillierte Untersuchungsprogramm umfasst mehrere standardisierte hydraulische Tests (Pulse-, Slug- und Constant-Head-Tests). Die Auswertung mittels ITOUGH wird sich auf eine Auswahl beschränken müssen. Sämtliche durchgeführten Arbeiten im Rahmen des Gastests sind in WYSS (1989) sowie zahlreichen Arbeitsprotokollen dokumentiert.

Die Durchführung des Gastests stellt gewisse Anforderungen an Lage, Ausdehnung und die hydrogeologischen Eigenschaften des zu untersuchenden Gesteins. Eine genügend durchlässige, geometrisch gut erfassbare Kluftzone erfüllt die gestellten Bedingungen; im Felslabor Grimsel konnte eine entsprechende Zone, welche zudem bereits bohrtechnisch erschlossen ist, gefunden werden.

4.3.2.2 Lage

Das Felslabor Grimsel (FLG) befindet sich im südlichen Teil des Zentralen Aare-Massivs und liegt auf ca. 1730 m.ü.M., rund 450 m unter dem Juchlistock. Über einen Kraftwerkstollen erreichbar, umfasst das Felslabor ein verästeltes Stollensystem von beinahe 1000 Metern Länge und einem zentralen Bereich mit Infrastrukturanlagen. Für die Durchführung des Gastests wurde eine diskrete Kluft in der sogenannten FRI-Zone (Fracture Rock Investigation) gewählt. Figur 4.21 zeigt einen Ausschnitt aus einem Finite Elemente Modell des Felslabors. Die Dimensionen der Referenzbox betragen 800×150×50 m. Neben dem verzweigten Stollensystem ist die untersuchte Scherfläche in der FRI-Zone - als Ebene dargestellt - im hinteren Teil des Labors erkennbar. Die Kluft schneidet den Laborstollen sowie den Hauptzugangsstollen und einen Kabelstollen des Kraftwerks.



Figur 4.21: Felslabor Grimsel, Scherfläche in FRI-Zone

4.3.2.3 Geologie

Die geologischen Verhältnisse im Bereich des Felslabors Grimsel sind in einem Bericht von KEUSEN ET AL. (1989) beschrieben. Die FRI-Zone liegt im Grimsel-Granodiorit, welcher von Lamprophyren und wenigen Apliten durchschlagen ist. Das gleichzeitige Auftreten tektonischer, metamorpher und hydrothermaler Überprägungen des Aare-

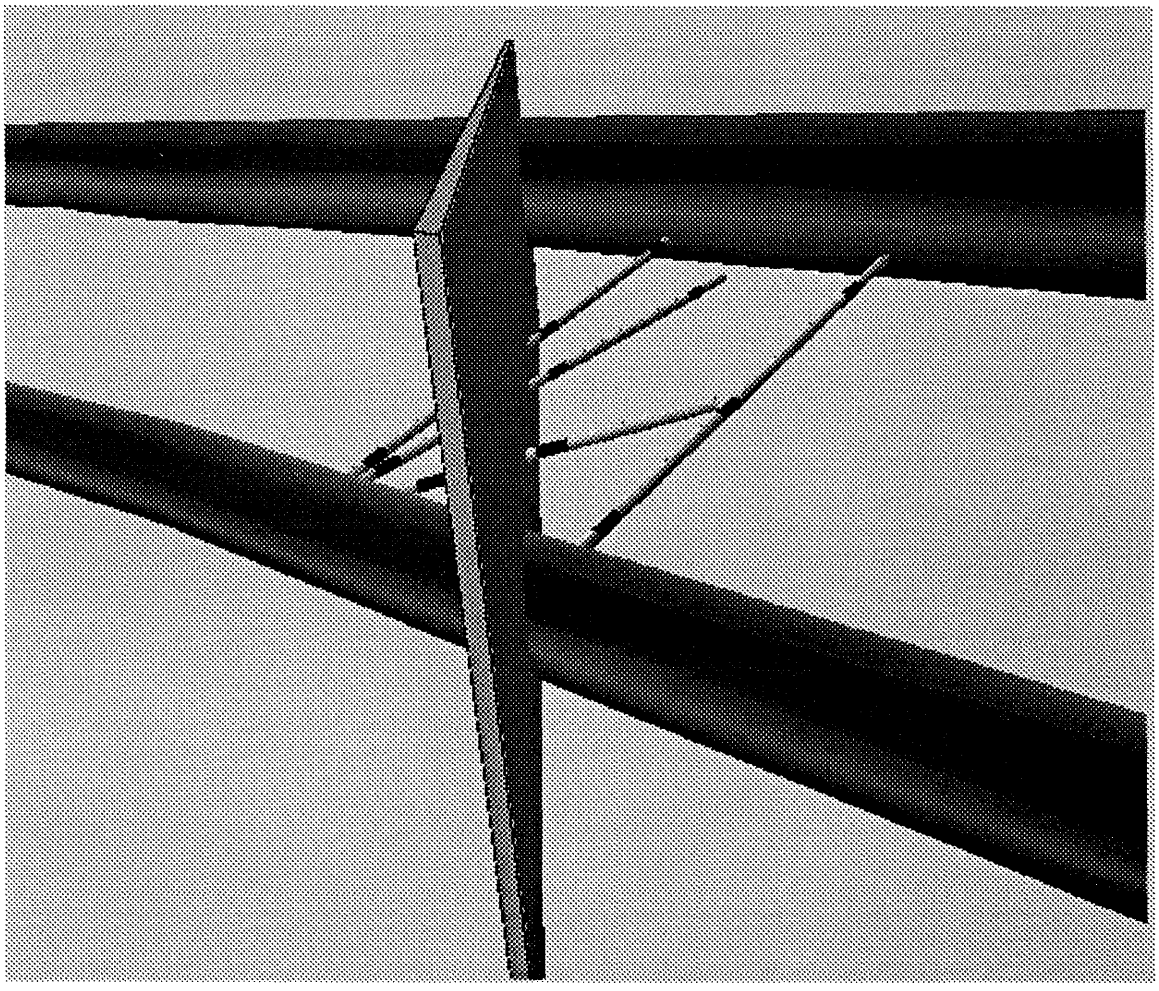
Massivs führte zur Bildung sekundärer Diskontinuitäten sowie zu mineralogischen Umwandlungen. Strukturgeologisch gehört die Scherzone, welche im Rahmen des FRI-Projektes untersucht wurde, zum sogenannten S1-Trennflächensystem. S1-Diskontinuitäten sind steil SE-fallende, NE-SW streichende Kluftzonen, welche duktil entstanden sind und sich durch eine bevorzugte Mineraleinregelung auszeichnen.

Gemäss der geologischen Aufnahme des Bohrkerns BoGA 89.001 besteht die für die Durchführung des Gastest ausgesuchte Struktur aus einer stark geklüfteten, 10 bis 80 Zentimeter mächtigen, mehrfach verzweigten Scherzone. Die 1 bis 15 mm dicken Einzelklüfte sind durchsetzt von einer feinen, bis zur Tonfraktion zerriebenen Kluftfüllung, bestehend aus Biotit, Chlorit, Muskovit und diversen Tonmineralien. Eine detaillierte Beschreibung einer S1-Scherzone findet sich bei BOSSART & MAZUREK (1991). Deren Untersuchungen mikroskopisch-geometrischer Parameter weist auf ein komplizierte Struktur möglicher Wasserfliesswege innerhalb der Scherzone. Die zu schätzenden Modellparameter werden sich jedoch auf ein äquivalent poröses Medium beziehen; die Gültigkeit dieses Ansatzes lässt sich mit dem Hinweis auf den grösseren Untersuchungsmassstab begründen.

Im folgenden sei die als äquivalent poröses Medium modellierte Scherzone - nicht ganz korrekt - als *Kluft* bezeichnet, während das umliegende Hauptgestein, der stark verschieferte Grimsel-Granodiorit, kurz *Matrix* genannt wird.

4.3.2.4 Instrumentierung

Die zu untersuchende Zone wurde bereits 1987 im Rahmen des FRI-Projektes durch mehrere Bohrlöcher des Durchmessers 8.6 cm erschlossen. Die für den Gastest wichtige Bohrung BoFR 87.001 verläuft senkrecht zum Laborstollen, ist leicht aufwärts geneigt, durchstösst nach ca. 10 m die schräg einfallende S1-Scherfläche und erreicht nach einer Bohrlänge von 21.2 m den Hauptzugangsstollen des Kraftwerks. Speziell für den Gastest wurde - basierend auf den Ergebnissen der Design-Berechnungen (siehe Kapitel 4.3.3) - eine zusätzliche Bohrung mit der Bezeichnung BoGA 89.001 erstellt, welche in einem horizontalen Abstand von knapp 1 m parallel zur Bohrung BoFR 87.001 verläuft, jedoch eine geringere Neigung aufweist, sodass der räumliche Abstand der beiden Durchstosspunkte durch die Scherzone ca. 2 m beträgt. Die Kluft wird zudem von der schräg verlaufenden Bohrung BoFR 87.003 durchstossen; der Schnittpunkt liegt relativ nahe beim Laborstollen.

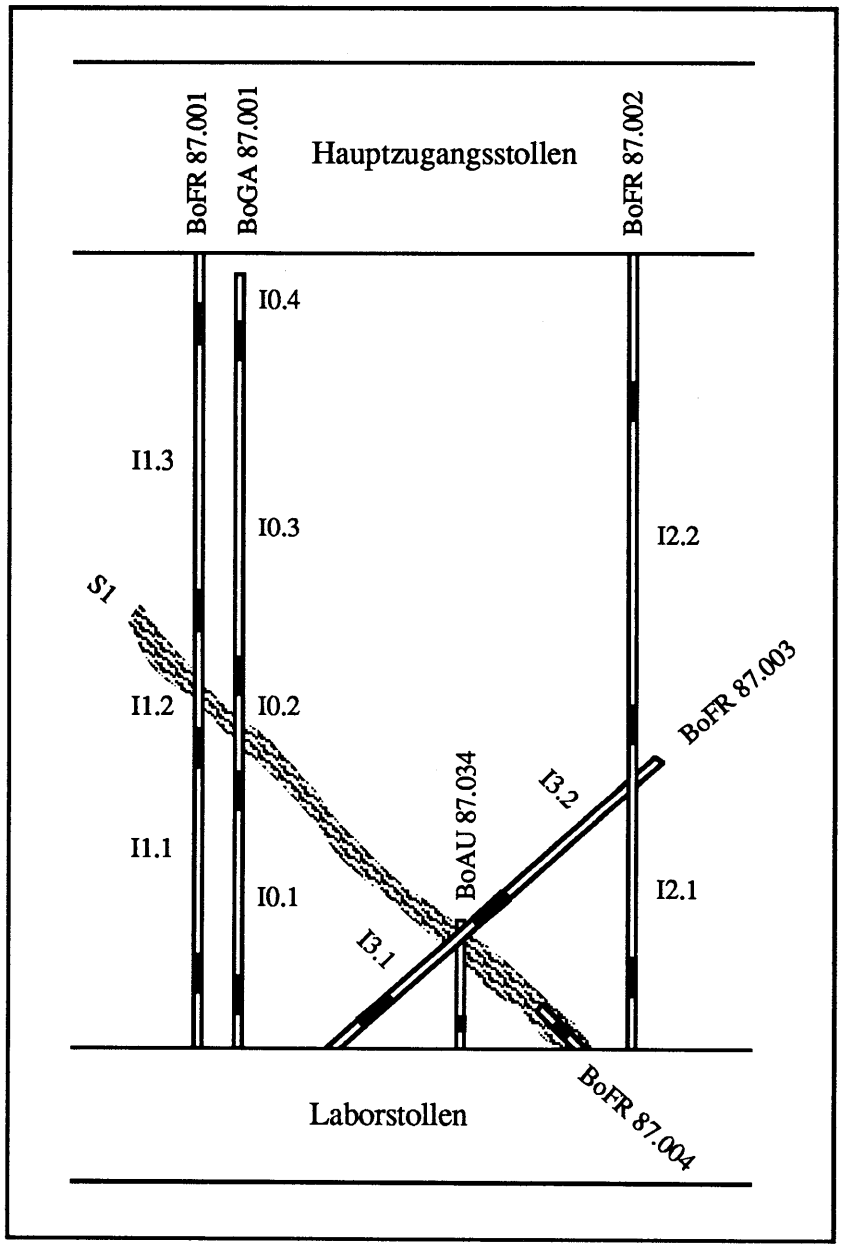


Figur 4.22: Laborstollen, Hauptzugangsstollen, Kluft, Bohrlöcher und Packeranordnung

Sämtliche Bohrlöcher sind mit einem Multipackersystem instrumentiert, welches die Bohrungen in einzelne Intervalle unterteilt. Jedes Intervall ist mit einer Injektionsleitung sowie einem Drucksensor ausgerüstet. Zusätzlich führen Druckleitungen zu den einzelnen Packern. Die Injektionsraten werden mit Hilfe einer Präzisionswaage gemessen; deren Genauigkeit beträgt 0.2 gr. Die Drucksensoren messen den Absolutdruck bis maximal 25 bar mit einer Genauigkeit von 2500 Pa. Intervalldruck und Fliessraten werden automatisch registriert; für die Überprüfung des Packerdruckes sind Manometer installiert. Figur 4.22 soll eine räumliche Vorstellung der Versuchsanordnung vermitteln.

Figur 4.23 enthält die Bezeichnungen der Bohrlöcher und Intervalle. Die Kluft schneidet das Intervall I1.2 der Bohrung BoFR 87.001 sowie das Intervall I0.2 der Bohrung BoGA 89.001. Das Intervall I1.2 wurde als eigentliches Testintervall gewählt, während

Intervall I0.2 der Beobachtung der Druckfortpflanzung in der Kluft dient. Die Druckverhältnisse im Intervall I3.1 der Bohrung BoFR 87.003 sind weitgehend vom naheliegenden Stollen dominiert; sie werden deshalb nicht weiter verwendet. Die Resultate der 1988 durchgeführten Hydrotests (HEINIGER & WYSS 1988) deuten darauf hin, dass weitaus kompliziertere Fliessverbindungen zwischen den einzelnen Intervallen bestehen, welche nicht durch eine einzige, zweidimensionale Kluft repräsentiert werden können. Bei der Interpretation der Modellresultate muss diesem Umstand Rechnung getragen werden.



Figur 4.23: Versuchslayout, Bezeichnung der Bohrungen und Intervalle

4.3.3 Resultate der Design-Berechnungen

Bei der Planung eines Gastests gilt es, die prinzipielle Machbarkeit einer Gasinjektion in ein derart dichtes Gestein zu überprüfen sowie die zu erwartenden Fliessraten und Druckreaktionen abzuschätzen, um die Anforderungen an das Instrumentarium formulieren zu können. Sodann muss die Reihenfolge und Zeitdauer einzelner Testsequenzen festgelegt werden um sicherzustellen, dass eine ungesättigte Zone genügender Ausdehnung und Gassättigung kreiert wird. Die Vorhersagen sind abschliessend einer Sensitivitätsanalyse zu unterziehen, da die exakten Gesteinseigenschaften vorgängig nicht bekannt sind. Die Design-Berechnungen für den Gastest im Felslabor Grimsel wurden mit dem Programm TOUGH durchgeführt; die Resultate sind in FINSTERLE (1989) zusammengestellt. Hier sollen nur die wesentlichen Schlussfolgerungen wiedergegeben werden:

- Es sollte möglich sein, durch Gasinjektion eine ungesättigte Zone in der näheren Umgebung eines Bohrlochs zu kreieren. Die geringe Durchlässigkeit des Gesteins erfordert einen hohen Injektionsdruck von ca. 20 bar und eine Versuchsdauer von mehreren Stunden bis ein paar Tage.

- Die zu erwartenden Fliessraten und Druckreaktionen sollten mit der zur Verfügung stehenden Ausrüstung messbar sein.

- Die Ausdehnung der ungesättigten Zone sowie der maximal zu erreichende Sättigungsgrad hängen stark von den Gesteinseigenschaften ab, insbesondere von der absoluten Permeabilität, den relativen Permeabilitätsfunktionen, aber auch von der Porosität. Wegen der Unsicherheiten in der Voraussage ist die Installation eines Beobachtungspunktes relativ nahe beim Injektionsbohrloch zu empfehlen.

- Die Kapillarkräfte spielen unter den gegebenen Druckverhältnissen und dem vorherrschenden Verdrängungsvorgang eine untergeordnete Rolle.

Die TOUGH-Simulationen ergaben zudem ein erstes Verständnis des Systemverhaltens unter Zweiphasenbedingungen. Im weiteren wurde vorausgesagt, dass die Schätzung der Transmissivität mittels eines Jacob-Lohman-Plots nur geringfügig von der Gasphase beeinflusst wird.

4.3.4 Testphase I: Hydraulische Tests unter Einphasenbedingungen

Anhand der hydraulischen Experimente der Testphase I sollen die hydrogeologischen Eigenschaften der Kluft unter vollständiger Wassersättigung ermittelt werden. Die gewählten Tests laufen unter standardisierten Bedingungen ab, um sie mit Hilfe einfacher Formeln bzw. halbgraphischer Auswertemethoden interpretieren zu können. Von den zahlreich durchgeführten Tests werden die folgenden vier auf dem Computer nachvollzogen:

Bezeichnung	Testart	Testdauer [hh:mm]	Daten / Intervall	Bemerkungen
P2012-1	Pulstest	3:00	Druck / I1.2	20 bar 94% Druckerholung
P2012T-2	Pulstest	2:50	Druck / I1.2	20 bar, 87% Druckerholung; Tank angeschlossen
QCH12-1	Constant Head Test	4:50	Fliessrate / I1.2 Druck / I0.2	Wasserinjektion 20 bar
PRQCH12-1	Pressure Recovery	18:00	Druck / I1.2 Druck / I0.2	Shut-in 96% Druckerholung

Tabelle 4.9: Testphase I: Überblick über die modellierten Tests

Im Hinblick auf die in Testphase II vorzunehmende Gasinjektion werden lediglich die im Intervall I1.2 der Bohrung BoFR 87.001 durchgeführten Tests untersucht.

Als erstes seien die beiden Pulstests besprochen. Bei einem Pulstest wird der Druck im Testintervall schlagartig erhöht (z.B. auf 20 bar) und nach Verschluss des Injektionsventils der anschliessende Druckabfall im Intervall beobachtet. Dieser ist von der Speicherkapazität des Bohrlochs (*wellbore storage*), dem Übergangsbereich zwischen Bohrloch und Gestein (*skin effect*) und schliesslich den Gesteinseigenschaften abhängig. Da nur eine sehr geringe Wassermenge in die Formation eindringt, ist die Aussagekraft der so geschätzten Parameter auf die unmittelbare Umgebung des Bohrlochs beschränkt. Um die Injektionsmenge und somit den Einflussradius des Tests zu erhöhen, wurde beim zweiten Pulstest mit der Bezeichnung P2012T-2 ein 200 Liter fassender Drucktank vorgeschaltet. Dies entspricht einer künstlichen Vergrösserung der Bohrlochkapazität; die total injizierte Wassermenge konnte so um den Faktor 8 auf ca. 250 ml erhöht werden.

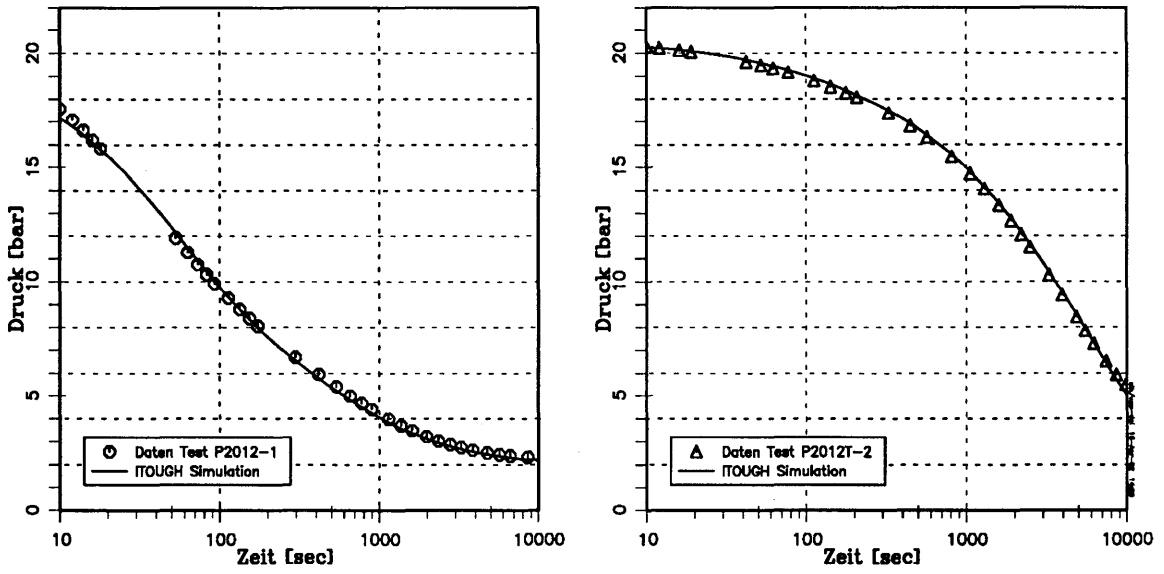
Pulstests können z.B. mittels Typkurven halbgraphisch ausgewertet werden. Dominieren jedoch *Wellbore Storage* und *Skin Effects*, ist die Bestimmung der Gesteinseigenschaften mit grosser Unsicherheit verbunden. In dieser Arbeit sollen deshalb die beiden Pulstests lediglich grobe Abschätzungen der zu erwartenden Permeabilitäten liefern, welche dann als Vorinformationen in die Kalibrierung der nachfolgenden Testsequenz eingeführt werden; auf eine detaillierte Fehlerbetrachtung wird somit verzichtet.

Das erstellte Simulationsmodell basiert auf der Annahme, dass ein eindimensionales, radialsymmetrisches Fliessregime vorherrscht, wobei lediglich die Kluftzone wirksam ist, der Einfluss der Matrix somit vernachlässigt werden kann. Zudem wird aufgrund der Typkurvenauswertung davon ausgegangen, dass zwei Zonen unterschiedlicher Gesteinseigenschaften vorliegen. Für jede dieser Zonen ist eine Permeabilität und eine Kompressibilität der Gesteinsmatrix zu ermitteln. Letztere ergibt zusammen mit der Kompressibilität des Wassers und der Porosität eine Abschätzung des Speicherkoeffizienten. Die Bohrlochkapazität wird anhand der Wassermenge, welche zum Aufbringen der Druckpulses benötigt wurde, errechnet.

Parameter	Einheit	Wert	Bemerkung
Diskretisierung			
Bohrlochradius	[m]	0.043	
Radius innere Zone 1	[m]	0.30	
Radius äussere Zone 2	[m]	10.0	
Mächtigkeit	[m]	0.1	
Anzahl Elemente	[-]	100	logarithmische Abstände
Bohrlochvolumen	[m^3]	0.007 0.207	Test P2012-1 Test P2012T-2
Bohrlochkapazität	[m^3/Pa]	$1.66 \cdot 10^{-11}$ $1.40 \cdot 10^{-10}$	Test P2012-1 Test P2012T-2
Anfangsbedingungen			
Druck in Bohrloch	[bar]	20.06	Puls
Druck in Formation	[bar]	2.14	
Gassättigung	[-]	0.0	
Gesteinseigenschaften			
Porosität	[-]	0.04	
Permeabilität	[m^2]	$1.00 \cdot 10^{-16}$	Anfangsschätzung
Matrixkompressibilität	[Pa^{-1}]	$1.00 \cdot 10^{-9}$	Anfangsschätzung

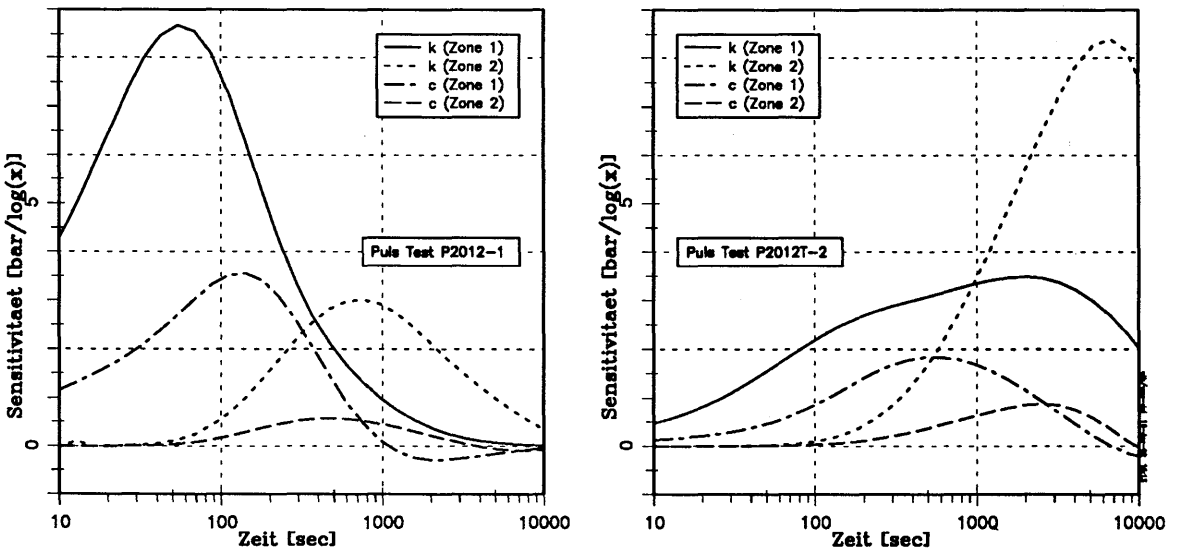
Tabelle 4.10: Testphase I: Modellgrössen für Pulstests P2012-1 und P2012T-2

In Tabelle 4.10 sind die vorgegebenen Modellgrössen zusammengefasst. Mit dem Ziel, einen konsistenten Parametersatz zu erhalten, wird die Inverse Modellierung für beide Tests simultan durchgeführt, wobei je 30 Druckdaten zwischen 10 und 10'000 Sekunden als Kalibrierungspunkte herangezogen werden. Figur 4.24 zeigt in halblogarithmischer Darstellung die erzielte Übereinstimmung zwischen dem beobachteten und berechneten Druckverlauf.



Figur 4.24: Testphase I: Vergleich zwischen beobachtetem und berechnetem Druckverlauf für Pulstest P2012-1 und P2012T-2

Während der Druck beim Test P2012-1 sehr rasch zusammenfällt, bewirkt das durch den Tank vergrösserte Bohrlochvolumen bei Test P2012T-2 eine bedeutend langsamere Druckabnahme. Betrachtet man die Sensitivität des Druckverlaufs hinsichtlich der zu schätzenden Parameter als Funktion der Zeit (Figur 4.25), erkennt man, dass Test P2012-1 vor allem die Parameter der inneren Zone 1 identifiziert, während der Test P2012T-2 gegen Ende des Versuchs stärker auf die Permeabilität der äusseren Zone 2 reagiert. Zudem zeigt sich die relativ geringere Sensitivität der Kompressibilität im Vergleich zur Permeabilität. Die Kombination beider Tests in einer einzigen Kalibrierungsberechnung erhöht somit die Identifizierbarkeit der Parameter, indem gering sensitive Daten des einen Tests im jeweils anderen Test sehr sensitiv auf eine Änderung der zu schätzenden Parameter reagieren. Die a posteriori durchgeführte Fehleranalyse reflektiert die aus Figur 4.25 ersichtliche Situation, bei der die Permeabilitäten und die Kompressibilität in der Zone 1 befriedigend, die Kompressibilität der Zone 2 jedoch nur ungenügend genau geschätzt werden können. Tabelle 4.11 fasst die Resultate zusammen und vergleicht sie mit den in WYSS (1989) publizierten Werten.



Figur 4.25: Testphase I: Sensitivitätskoeffizienten für Pulstest P2012-1 und P2012T-2

Parameter	Simultane Inverse Modellierung	Typkurvenverfahren WYSS (1989)	
	P2012-1 / P2012T-2	P2012-1	P2012T-2
$\log (k_{Zone\ 1}) \pm \sigma$	-14.9 ± 0.04	-	-
$\log (k_{Zone\ 2}) \pm \sigma$	-15.4 ± 0.07	-	-
$\log (c_{Zone\ 1}) \pm \sigma$	-8.1 ± 0.07	-	-
$\log (c_{Zone\ 2}) \pm \sigma$	-9.3 ± 0.53	-	-
$T_{Zone\ 1}$ [m^2/s]	$8.5 \cdot 10^{-10}$	$8.7 \cdot 10^{-10}$	$2.3 \cdot 10^{-10}$
$T_{Zone\ 2}$ [m^2/s]	$2.8 \cdot 10^{-10}$	$1.6 \cdot 10^{-10}$	$2.3 \cdot 10^{-10}$
$S_{Zone\ 1}$ [-]	$2.9 \cdot 10^{-7}$	$3.0 \cdot 10^{-7}$	$2.0 \cdot 10^{-6}$
$S_{Zone\ 2}$ [-]	$2.2 \cdot 10^{-8}$	$3.0 \cdot 10^{-6}$	$2.0 \cdot 10^{-7}$

Tabelle 4.11: Testphase I: Resultate der Pulstest Auswertung und Vergleich mit Typkurvenverfahren

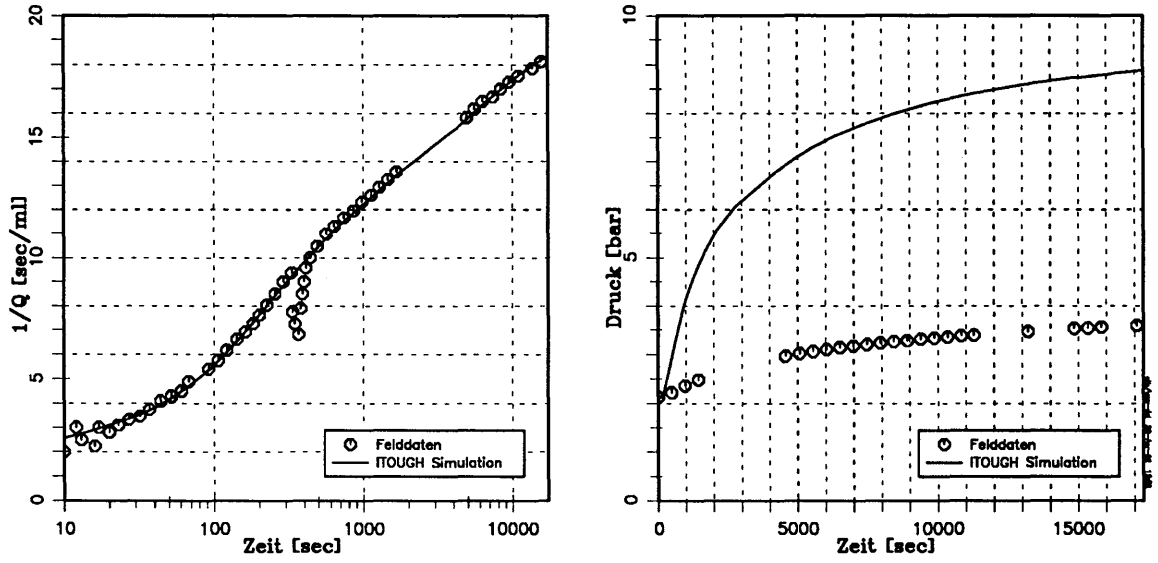
Die mit dem numerischen Modell geschätzten Transmissivitäten stimmen mit den Ergebnissen der Typkurvenanalyse weitgehend überein. Die bereits angesprochenen Schwierigkeiten bei der Schätzung der Speicherkoeffizienten äussert sich bei der Typkurvenanalyse in einer Inkonsistenz der Resultate; immerhin liegen sämtliche geschätzten Werte innerhalb einer Grössenordnung, womit das erklärte Ziel dieser Analyse erreicht ist.

Die Grössenordnungen einiger wesentlichen Parameter sind somit bekannt und dienen im folgenden als Anfangsschätzungen.

Im Intervall I1.2 wurde am 28.6.1989 ein knapp 5-stündiger Wasserinjektionstest bei einem konstanten Druck von 20 bar durchgeführt (Constant Head Test QCH12-1), gefolgt von einer 18-stündigen Druckerholungsphase (Pressure Recovery PRQCH12-1) nach Verschluss des Injektionsventils. Die Daten des Tests QCH12-1 werden für die Parameterschätzung verwendet, während die Druckerholung im Sinne einer Prognoseberechnung simuliert und mit den gemessenen Werten verglichen werden soll.

Wird Wasser mit einem konstanten Injektionsdruck in die Formation gepresst, ergeben die beobachteten Fliessraten Aufschluss über die Gesteinseigenschaften in der Umgebung des Bohrlochs. LOHMAN (1972) präsentierte eine halbgraphische Methode zur Auswertung von Constant Head Tests. Trägt man den Kehrwert der Fliessrate gegen den Logarithmus der Zeit auf (sogenannter Jacob-Lohman-Plot), lässt sich die Transmissivität der Formation aus der Steigung einer Regressionsgeraden berechnen; der Speicherkoeffizient ergibt sich sodann aus dem Schnittpunkt dieser Geraden mit der Zeitachse. Das Geradensteigungsverfahren nach Jacob-Lohman wertet nur die Daten eines einzigen Bohrlochs aus.

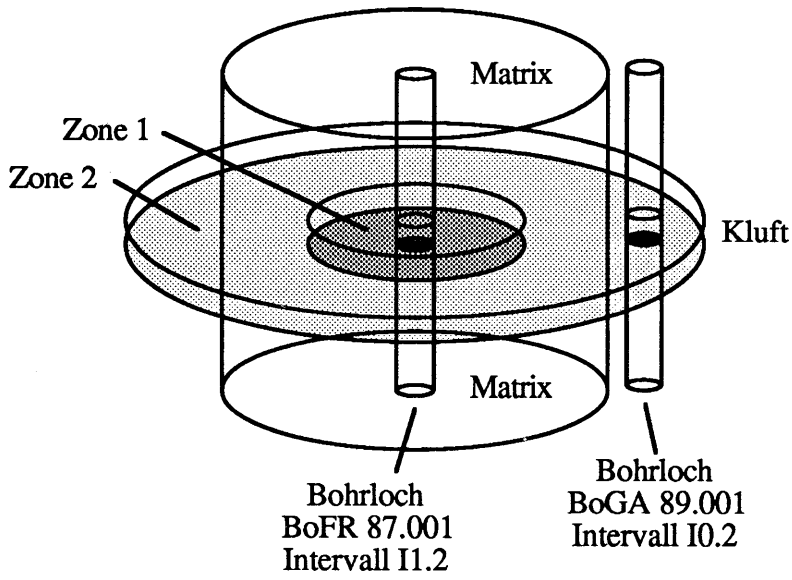
Um die Resultate von WYSS (1989) mit der ITOUGH-Kalibrierung vergleichen zu können, wird in einem ersten Auswerteschritt auf die vorhandenen Druckdaten im Intervall I0.2 vollständig verzichtet. Figur 4.26 zeigt, dass die gemessenen Fliessraten - dargestellt als Jacob-Lohman-Plot - vom Simulationsmodell sehr genau nachvollzogen werden können. Die geschätzten Parameterwerte stimmen mit den Angaben von WYSS (1989) weitgehend überein. Die beschränkte Aussagekraft eines Einbohrlochversuches wird jedoch offensichtlich, wenn man die Druckreaktion im 2 Meter entfernten Intervall I0.2 betrachtet. Die Annahme eines eindimensionalen, radialsymmetrischen Fliessregimes führt im Modell zu einem Druckanstieg im Intervall I0.2, wie er in seiner Unmittelbarkeit und Intensität nicht beobachtet werden konnte. Es stellt sich somit die Frage, ob das Systemverhalten mit dem vorliegenden Modell reproduziert werden kann, oder ob ein neuer Modellentwurf angezeigt ist. Mit Blick auf die rechte Abbildung der Figur 4.26 und in Anbetracht der Erkenntnisse des FRI-Projektes scheint es offensichtlich, dass ein differenzierteres Modell herangezogen werden muss. Der Rest des Kapitels befasst sich mit diesem zweiten Modellentwurf.



Figur 4.26: Testphase I: Auswertung von Test QCH12-1 unter alleiniger Verwendung der Fliessraten (Jacob-Lohman-Plot); Druckreaktion in Intervall I0.2

Die Tatsache, dass eine relativ grosse Wassermenge injiziert werden kann, ohne dass im benachbarten Bohrlochintervall eine starke Druckreaktion zu beobachten ist, weist auf das Vorhandensein zusätzlicher Fliesswege hin, welche nicht mit dem Intervall I0.2 in Verbindung stehen. Eine Analyse der Druckreaktionen in sämtlichen Intervallen der Bohrungen BoFR 87.001 - 87.004 und BoGA 89.001 bestätigen diesen Sachverhalt. Es kann nicht Ziel dieser Arbeit sein, diese Fliesswege einzeln zu identifizieren. Vereinfachend seien sie in einem einzigen zusätzlichen Gesteinstyp zusammengefasst. Bedenkt man zudem, dass der Packerabstand des Injektionsintervalls 2.7 Meter beträgt, die Kluft jedoch nur einige wenige Dezimeter mächtig ist, kann der Einfluss der Matrix wohl nicht vernachlässigt werden. Das einfachste Modell, das obige Feststellungen berücksichtigt, ist in Figur 4.27 skizziert. Das Intervall I1.2 der Bohrung BoFR 87.001 durchstösst die Kluft S1 und steht in Kontakt mit einem als Matrix bezeichneten Gesteinskörper, der auch sämtliche Strukturen umfasst, welche keine direkte Fliessverbindung mit dem Intervall I0.2 der Bohrung BoGA 89.001 aufweisen. Die Kluft besteht aus einer dünnen Skin-Zone (nicht eingezeichnet) und zwei Zonen unterschiedlicher Eigenschaften, wie dies aufgrund des Jacob-Lohman-Plots (zwei Geraden unterschiedlicher Steigungen) sowie der Testresultate im Intervall I0.2 nahegelegt wird. Das Beobachtungsintervall I0.2 ist über die Kluft mit dem Injektionsintervall I1.2 hydraulisch verbunden; es besteht jedoch keine Verbindung mit dem als Matrix bezeichneten Gesteinskörper. Es resultiert ein radialsymmetrisches Kluft-Matrix Modell, das mit einem Injektions- und einem Beob-

achtungsbohrloch versehen ist. Die Mächtigkeit der Kluft betrage 0.1 Meter, diejenige der Matrix 1.0 Meter.



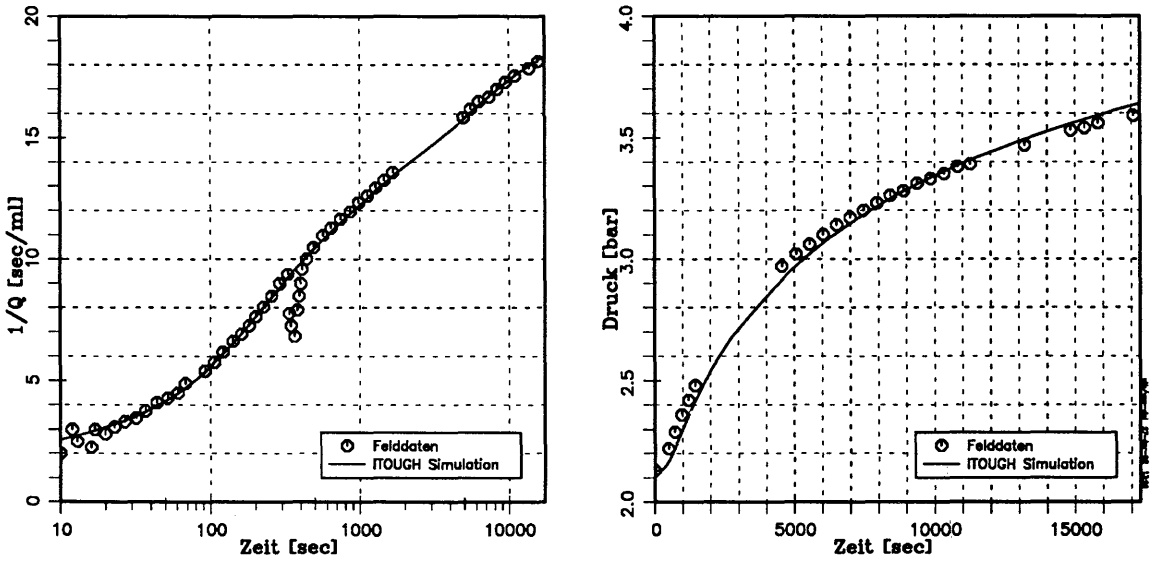
Figur 4.27: Testphase I: Radialsymmetrisches Kluft-Matrix Modell

Basierend auf diesem Konzept soll nun die Inverse Modellierung durchgeführt werden, wobei sowohl die Fliessraten im Intervall I1.2 als auch der Druckanstieg im Intervall I0.2 den beobachteten Systemzustand während des Tests QCH12-1 an zwei Punkten repräsentieren.

Das Stochastische Modell verlangt a priori eine Angabe der Varianzen der Residuen. Neben der Beobachtungsungenauigkeit muss sicher mit einem Modellfehler gerechnet werden, der aus den vereinfachenden Annahmen - insbesondere der Beschränkung auf zwei radialsymmetrisch angeordnete Zonen - folgt. Die Fliessraten ergeben sich aus der Differenz zweier Ablesungen der Präzisionswaage, wobei zu Beginn des Tests bei höheren Injektionsraten kürzere Zeitintervalle gewählt wurden. Gegen Ende des Versuchs stabilisieren sich die beobachteten Werte. Für die Fliessraten wird somit eine relative Genauigkeit von 5 % des gemessenen Wertes angenommen. Die Standardabweichung der Druckdaten beträgt 2500 Pa über den gesamten Messbereich. Durch eine Verdoppelung dieses Wertes auf 5000 Pa sollen die Modellfehler berücksichtigt werden. Die a posteriori durchzuführende Fehlerbetrachtung wird Hinweise auf die Gültigkeit dieser Annahmen geben.

Ausgehend von den Resultaten der Pulstestauswertung werden insgesamt 6 Parameter - je Permeabilität und Kompressibilität der Zone 1, Zone 2 und der Matrix - durch Inverse

Modellierung geschätzt. Figur 4.28 zeigt die mit dem optimalen Parametersatz erzielte Nachbildung des gemessenen Systemzustandes.



Figur 4.28: Testphase I: Gemessener und gerechneter Systemzustand Test QCH12-1

Die Übereinstimmung darf rein optisch als gut bezeichnet werden, wenn auch bei der Druckreaktion im Intervall I0.2 eine leicht unterschiedliche Krümmung auszumachen ist. Die empirische Varianz bestätigt den optischen Eindruck: Sie beträgt $\hat{\sigma}_0^2 = 0.63$ und besagt, dass die Genauigkeit der Residuen unterschätzt wurde. Sicherheitshalber wird im folgenden mit der a priori festgelegten Varianz der Gewichtseinheit gerechnet. Der geschätzte Parametersatz ist in Tabelle 4.12 zusammengestellt. Im Vergleich dazu sind die Resultate der Jacob-Lohman-Auswertungen angegeben, wobei für die Zone 1 der Test QCH12-1 und für die Zone 2 der Test QCH02-1 im Intervall I0.2 massgebend ist. Die geschätzten Transmissivitäten stimmen überraschend gut überein, insbesondere wenn man den Wert der Zone 1 und der Matrix zu einer Gesamttransmissivität von $1.1 \cdot 10^{-10}$ m^2/s addiert und sie mit dem Resultat der halbgraphischen Auswertung vergleicht, bei der nicht zwischen Kluft und Matrix unterschieden werden kann. Die Transmissivität der Zone 2 ist im wesentlichen aufgrund der Druckbeobachtungen im Intervall I0.2 identifizierbar (siehe Diskussion der Sensitivitäten weiter unten); der geschätzte Wert stimmt mit dem Resultat des im Bohrloch BoGA 89.001 durchgeführten Tests QCH02-1 gut überein. Die Schätzungen der Speicherkoeffizienten sind mit grösseren Unsicherheiten verbunden; eine exakte Übereinstimmung kann somit nicht erwartet werden. Da der als Matrix bezeichnete Gesteinstyp weitgehend Modellcharakter aufweist, kommt den entsprechenden Parameterwerten nicht unbedingt eine physikalische Bedeutung zu, die

sich mit den Eigenschaften des Granodiorits direkt vergleichen liessen. Die gewünschte Speicherfunktion kommt jedoch in den Resultaten deutlich zum Ausdruck.

Parameter	ITOUGH Inverse Modellierung	Jacob-Lohman Auswertung WYSS (1989)	
	QCH12-1	QCH12-1	QCH02-1
$\log (k_{Zone\ 1}) \pm \sigma$	-15.9 ± 0.12	-	-
$\log (k_{Zone\ 2}) \pm \sigma$	-15.1 ± 0.09	-	-
$\log (k_{Matrix}) \pm \sigma$	-17.4 ± 0.55	-	-
$\log (c_{Zone\ 1}) \pm \sigma$	-7.8 ± 0.21	-	-
$\log (c_{Zone\ 2}) \pm \sigma$	-7.8 ± 0.15	-	-
$\log (c_{Matrix}) \pm \sigma$	-7.0 ± 0.51	-	-
$T_{Zone\ 1}$ [m^2/s]	$8.2 \cdot 10^{-11}$	$1.2 \cdot 10^{-10}$	-
$T_{Zone\ 2}$ [m^2/s]	$5.2 \cdot 10^{-10}$	-	$7.8 \cdot 10^{-10}$
T_{Matrix} [m^2/s]	$3.0 \cdot 10^{-11}$	-	-
$S_{Zone\ 1}$ [-]	$6.7 \cdot 10^{-7}$	$2.8 \cdot 10^{-6}$	-
$S_{Zone\ 2}$ [-]	$5.6 \cdot 10^{-7}$	-	$1.4 \cdot 10^{-5}$
S_{Matrix} [-]	$9.3 \cdot 10^{-6}$	-	-

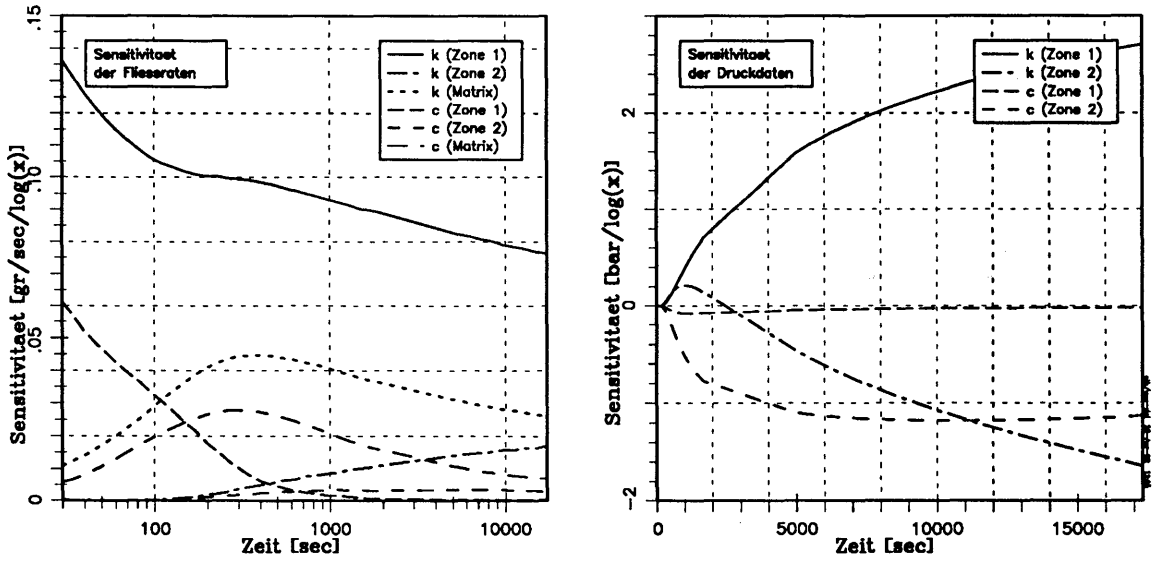
Tabelle 4.12: Testphase I: Resultate Test QCH12-1 und Vergleich mit Jacob-Lohman Auswertung

Tabelle 4.13 enthält die Kovarianzmatrix der 6 geschätzten Parameter. Die Diagonalelemente enthalten die Varianzen, die untere Dreiecksmatrix die Kovarianzen, und die obere Dreiecksmatrix die entsprechenden Korrelationskoeffizienten. Die relativ grosse Unsicherheit der gefundenen Lösung ist auf starke Korrelationen unter den Parametern zurückzuführen, wobei sowohl positive als auch negative Koeffizienten auftreten.

Parameter	$\log (k_{Z1})$	$\log (k_{Z2})$	$\log (k_{M})$	$\log (c_{Z1})$	$\log (c_{Z2})$	$\log (c_{M})$
$\log (k_{Z1})$	0.015	0.967	-0.990	-0.922	0.989	0.944
$\log (k_{Z2})$	0.011	0.009	-0.964	-0.867	0.928	0.919
$\log (k_{M})$	-0.066	-0.051	0.307	0.929	-0.979	-0.979
$\log (c_{Z1})$	-0.024	-0.018	0.110	0.046	-0.932	-0.925
$\log (c_{Z2})$	0.018	0.013	-0.083	-0.030	0.023	0.936
$\log (c_{M})$	0.058	0.044	-0.276	-0.100	0.729	0.259

Tabelle 4.13: Testphase I: Kovarianz-/Korrelationsmatrix der geschätzten Parameter

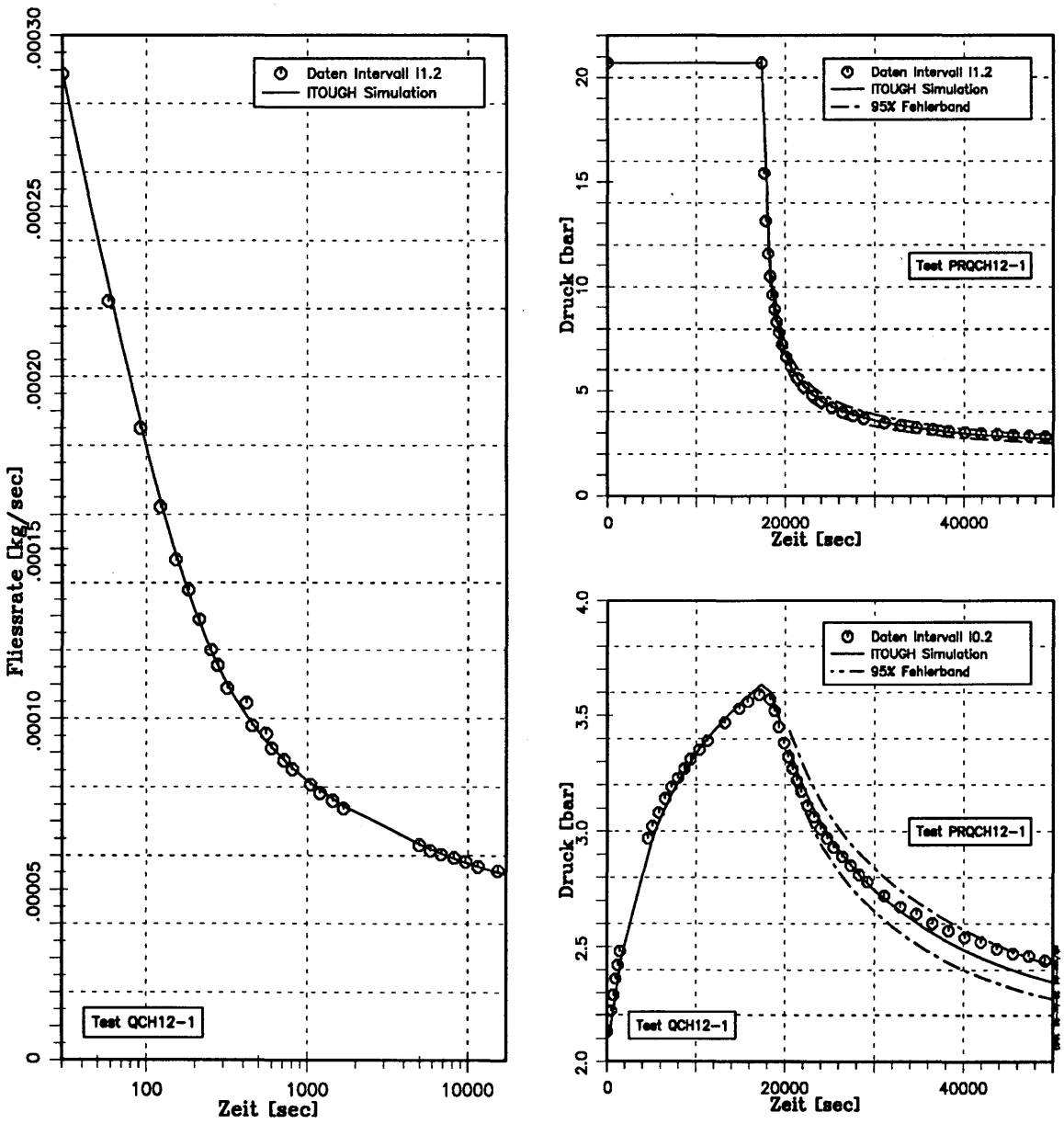
Betrachtet man die Sensitivität der Beobachtungen hinsichtlich der einzelnen Parameter (Figur 4.29), so zeigt sich, dass die Permeabilität der Zone 1 am sensitivsten reagiert. Die Eigenschaften der Zone 2 sind vorwiegend aufgrund der Druckdaten bestimmbar, während Permeabilität und Kompressibilität der Matrix ausschliesslich anhand der beobachteten Fliessraten identifiziert werden. Das schwierig zu erklärende Phänomen einer grossen Injektionsrate bei gleichzeitig geringem Druckanstieg im Beobachtungsintervall (siehe Figur 4.26) konnte gelöst werden, indem die Klufteigenschaften zwischen den beiden Bohrlöchern sowohl aufgrund der Fliessraten als auch der Druckdaten bestimmt und die überschüssige Wassermenge sodann den Fliesswegen und dem Speichervermögen der Matrix zugewiesen wurden. Dieses Vorgehen birgt die Gefahr, dass durch Überparametrisierung eine gute Übereinstimmung zwischen Beobachtung und Berechnung erzwungen wird, ohne dass in der Natur ein entsprechender Mechanismus vorzuliegen braucht. Das gewählte Modellkonzept bedarf jedenfalls einer sorgfältigen Begründung; sie konnte in diesem Falle mit Verweis auf die geologischen Untersuchungen geliefert werden.



Figur 4.29: Testphase I: Sensitivitäten der Fliessraten und Druckdaten hinsichtlich der geschätzten Parameter

Die Auswertung der Testphase I schliesst mit einer Simulation der Druckerholung PRQCH12-1 nach beendeter Injektion und dem Vergleich des berechneten Druckverlaufes mit den tatsächlich beobachteten Werten. Die erzielte Übereinstimmung soll aufgrund der zu erwartenden Voraussagegenauigkeit des Modells beurteilt werden. Diese wird mit dem Gauss'schen Fehlerfortpflanzungsgesetz berechnet, basierend auf der Kovarianzmatrix der geschätzten Parameter (Tabelle 4.13) unter Berücksichtigung der Korrelationen. Figur 4.30 fasst sämtliche ausgewerteten Daten der Tests QCH12-1 und

PRQCH12-1 und die dazugehörigen ITOUGH-Simulationsresultate zusammen. In der linken Bildhälfte sind die Injektionsraten dargestellt, welche zur Kalibrierung des Modells benutzt werden. Oben rechts ist der Druckverlauf im Intervall I1.2 dargestellt. Die Phase konstanten Injektionsdruckes liefert keine Information über die Formationseigenschaften. Die anschliessende Druckerholung wird vom Modell mit dem optimalen Parametersatz sehr genau vorausgesagt - die beobachteten Werte liegen durchwegs innerhalb des 95% Fehlerbandes. Unten rechts schliesslich ist der Druckverlauf im Beobachtungsintervall dargestellt. Die Daten des Tests QCH12-1 dienen wiederum der Modellkalibrierung. Die Reaktion auf den Druckabfall kann zu Beginn recht gut simuliert werden. Gegen Ende des Versuchs zeigt sich jedoch eine systematische Unterschätzung des Druckes, welche die Grenzen des gewählten Modells aufzeigt.



Figur 4.30: Testphase I: Test QCH12-1 (Kalibrierung) und PRQCH12-1 (Prognose)

Die Auswertung der Testphase I lässt sich zusammenfassend wie folgt kommentieren:

- Basierend auf den Erkenntnissen früherer Untersuchungen sowie dem vorhandenen Datenmaterial wird in einem iterativen Verfahren ein Modellkonzept für den Gastest entworfen. Das resultierende radialsymmetrische Kluft-Matrix-Modell erscheint mit Blick auf die geologischen Verhältnisse plausibel und für den beabsichtigten Modelleinsatz geeignet zu sein; die vorgenommenen Vereinfachungen gilt es bei der Beurteilung der Resultate zu berücksichtigen.

- Durch Inverse Modellierung kann ein Parametersatz bestimmt werden, mit dem das beobachtete Systemverhalten genügend genau nachvollzogen wird. Die Gültigkeit der gefundenen Lösung ist auf obige Modellstruktur beschränkt.

- Die geschätzten Parameter beschreiben die hydraulischen Eigenschaften des Gesteins unter vollständiger Wassersättigung. Die Werte der absoluten Permeabilität und Kompressibilität sind somit bekannt und brauchen bei der nachfolgenden Auswertung der Testphase II nicht mehr verändert zu werden.

4.3.5 Testphase II: Gasinjektion

Das primäre Ziel der Gasinjektion besteht darin, in der Umgebung des Intervalls I1.2 eine ungesättigte Zone zu kreieren, um anschliessend in der Testphase III deren Einfluss auf hydraulische Tests untersuchen zu können. Hier soll jedoch die Gelegenheit genutzt werden, aufgrund der gesammelten Daten Aufschluss über den Verdrängungsprozess zu erhalten sowie Ausdehnung und Sättigungsverteilung der Gasblase abzuschätzen. Die Testphase II umfasst mehrere Gasinjektions-, Druckerholungs- und Extraktionsperioden. Es ist wohl unmöglich, mit dem Kluft-Matrix-Modell die gesamte Testabfolge befriedigend zu simulieren, da die einfachen Modellannahmen dem zunehmend komplizierter werdenden Zweiphasensystem nicht mehr genügen. Einige gasbezogene Modellparameter sollen durch Kalibrierung der ersten Gasinjektion (QCHG-1) geschätzt werden. Die anschliessende Druckerholungsphase (PRG-1) und Extraktionsphase (EXTR-1) dienen wiederum der Überprüfung der gefundenen Lösung (Tabelle 4.14).

Unvorhergesehene Effekte (Kondensation der Luftfeuchtigkeit im Labortunnel) beeinträchtigten die Messung der Gasinjektionsrate, sodass während des Tests QCHG-1 lediglich die Druckbeobachtungen im Intervall I0.2 für die Inverse Modellierung zur Verfügung stehen.

Bezeichnung	Testart	Testdauer [hh:mm]	Daten / Intervall	Bemerkungen
QCHG-1	Constant Head Test	8:15	Druck / I0.2	Gasinjektion 20 bar
PRG-1	Pressure Recovery	10:40	Druck / I1.2 Druck / I0.2	Injektionsventil geschlossen (Shut-in)
EXTR-1	Constant Head Test	4:10	Druck / I0.2	Auslaufversuch

Tabelle 4.14: Testphase II: Überblick über die modellierten Tests

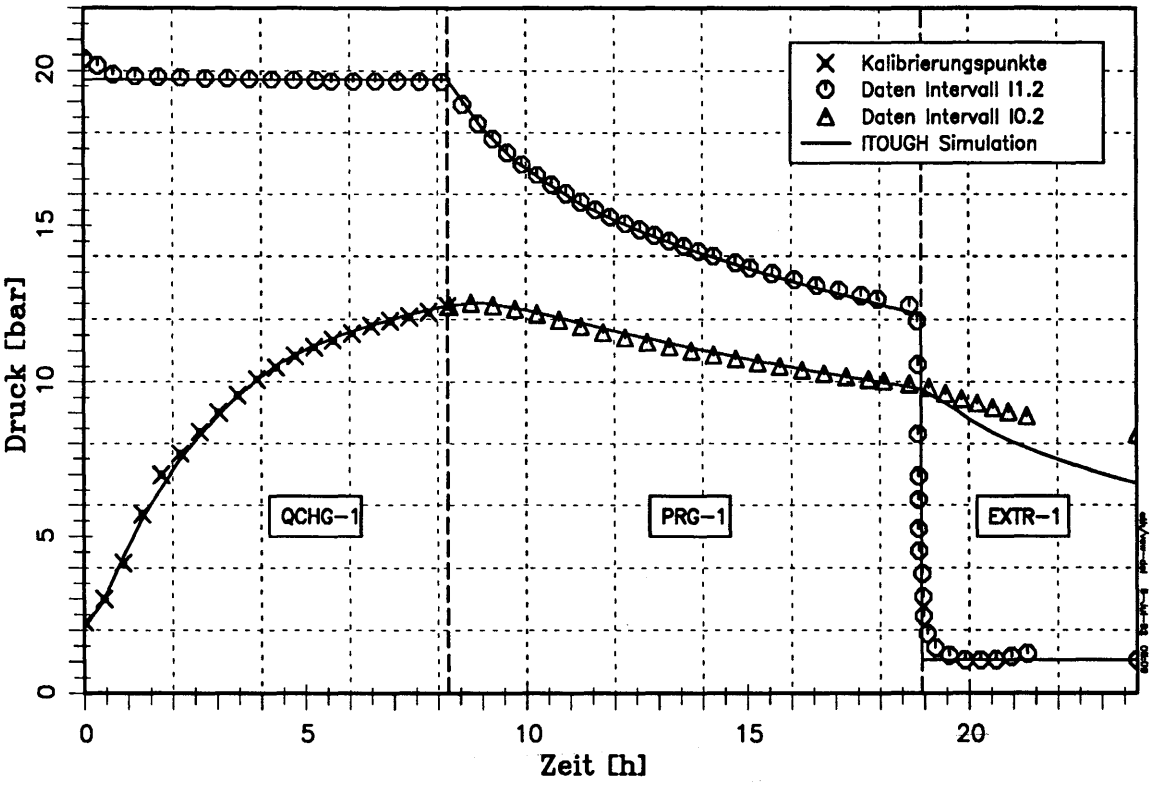
Es stellt sich die Frage, welche gasbezogenen Parameter geschätzt werden sollen. Eine erste Beurteilung ergibt sich aus der qualitativen Ermittlung der Sensitivitätskoeffizienten (Tabelle 4.15). Diese Auswertung bezieht sich auf einen einzigen Punkt im 15-dimensionalen Parameterraum. Nach erfolgter Parameterschätzung muss die Gültigkeit dieses Auswahlkriteriums nochmals überprüft werden.

Parameter	Zone	Startwert	Sensitivität
Porosität [-]	Zone 1	0.04	+++
	Zone 2	0.04	+++
	Matrix	0.01	-
Residuale Flüssigkeits-sättigung S_{rf} [-]	Zone 1	0.10	++
	Zone 2	0.10	++
	Matrix	0.30	-
Residuale Gassättigung S_{rg} [-]	Zone 1	0.05	-
	Zone 2	0.05	-
	Matrix	0.05	-
n [-]	Zone 1	3.0	+
	Zone 2	3.0	+
	Matrix	3.0	-
$1/\alpha$ [Pa]	Zone 1	10000.0	-
	Zone 2	10000.0	-
	Matrix	100000.0	-

Tabelle 4.15: Testphase II: Sensitivitäten gasbezogener Modellparameter

Die Porosität der Kluft erweist sich als ein überaus sensitiver Parameter, bestimmt sie doch die relative Ausbreitungsgeschwindigkeit der Gasphase sowie das totale Gasvolumen in den einzelnen Zonen. Für die charakteristischen Kurven wurde das Modell von van Genuchten gewählt. Die residuale Flüssigkeitssättigung S_{rf} und der Parameter n treten sowohl in den relativen Permeabilitätsfunktionen als auch in der Kapillardruckkurve auf; deren Einfluss auf das Systemverhalten ist entsprechend gross. Auffallend ist die geringe Sensitivität der residualen Gassättigung S_{rg} und des Lufteintrittsbeiwertes $1/\alpha$. Da keine direkte Verbindung der Matrix mit dem Intervall I0.2 besteht, reagieren die beobachteten Druckdaten zu wenig sensitiv, um daraus die Matrixeigenschaften zuverlässig bestimmen zu können.

Basierend auf den Erkenntnissen aus Tabelle 4.15 werden im folgenden die mit einem oder mehreren Pluszeichen versehenen Parameter simultan geschätzt, wobei lediglich die Druckdaten im Intervall I0.2 während des Testabschnittes QCHG-1 als Kalibrierungspunkte zur Verfügung stehen. Als erstes soll der resultierende Systemzustand, wie er sich aufgrund des optimalen Parametersatzes ergibt, kommentiert werden. Figur 4.31 zeigt den Vergleich zwischen dem gemessenen und berechneten Druckverlauf im Injektions- und Beobachtungsbohrloch während der drei Testabschnitte.

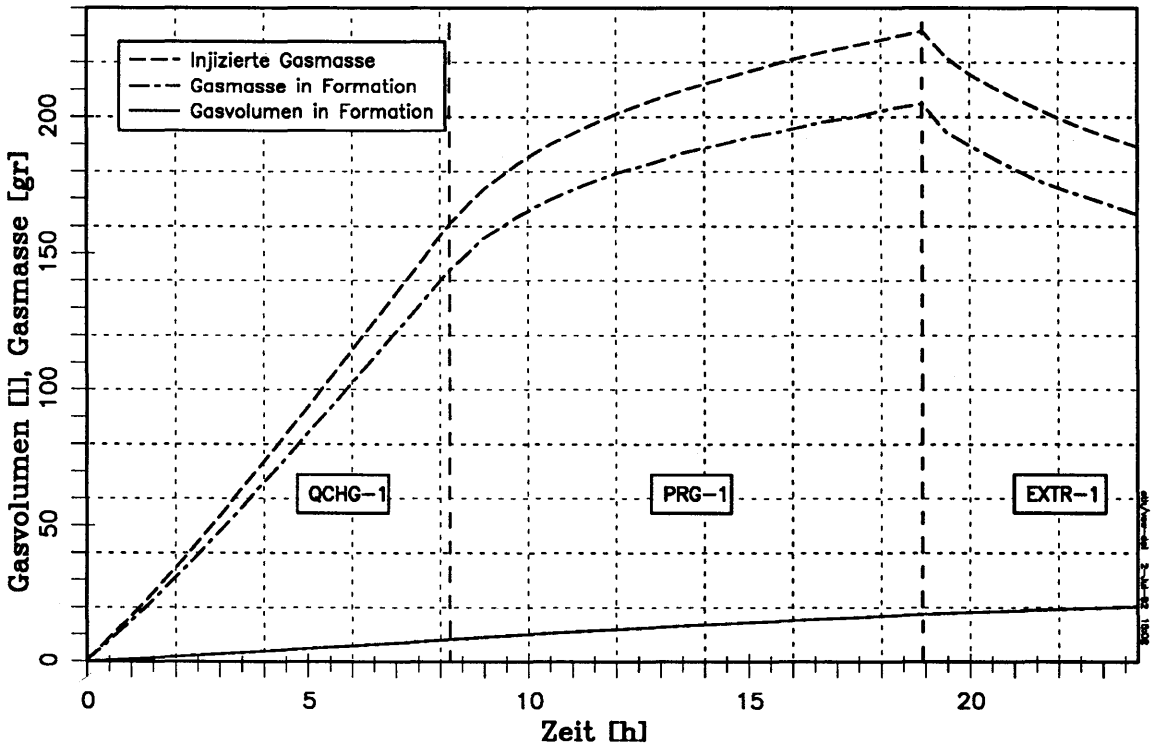


Figur 4.31: Testphase II: Vergleich des Druckverlaufs in Intervall I1.2 und I0.2, Testabschnitt QCHG-1 (Kalibrierung), PRG-1 und EXTR-1 (Prognose)

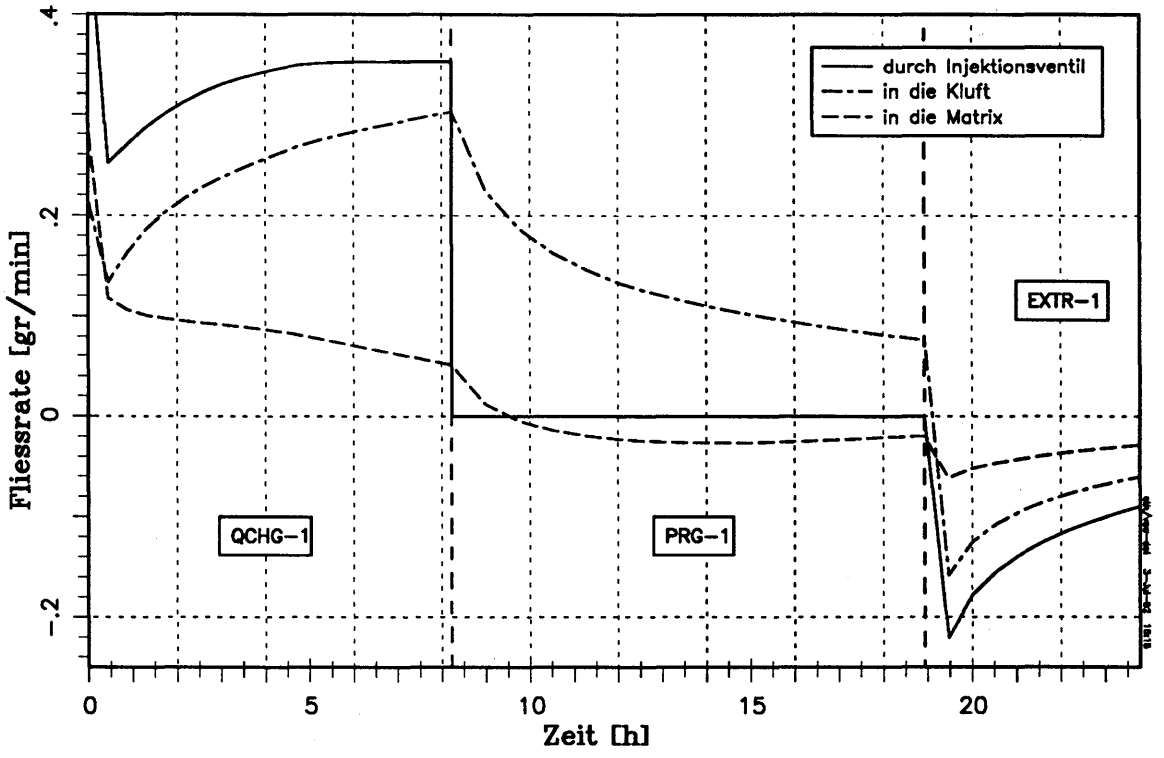
Die Druckreaktion im Intervall I0.2 als Folge der Gasinjektion unterscheidet sich wesentlich von derjenigen des Wasserinjektionstests QCH12-1 (siehe Figur 4.30). Die höhere Mobilität der Gasphase führt zu einem weitaus stärkeren Druckanstieg im Beobachtungsbohrloch (bei der Injektion von Gas beträgt der Druckanstieg im Intervall I0.2 nach 5 Stunden ca. 9 bar, bei der Injektion von Wasser lediglich 1.5 bar). Der beobachtete Druckverlauf wird vom Berechnungsmodell exakt nachvollzogen. Die knapp elfstündige Druckerholungsphase PRG-1 nach Verschluss des Injektionsventils kann vom Modell für beide Intervalle sehr gut vorausgesagt werden. Der langsame Druckabfall im Intervall I1.2 ist auf die hohe Speicherkapazität des gasgefüllten Bohrlochs zurückzuführen - man vergleiche dazu wiederum das Systemverhalten während des Abschnittes PRQCH12-1 (Figur 4.30). Die Extraktion von Gas durch Öffnen des Bohrlochs BoFR 87.001 (Testabschnitt EXTR-1) bedeutet eine Umkehr der Fliessrichtung. Das Modell mit dem unter Injektionsbedingungen geschätzten Parametersatz ist nicht in der Lage, den Systemzustand unter stark veränderten Randbedingungen zu prognostizieren - der Druckabfall im Intervall I0.2 wird signifikant überschätzt. Das der Berechnung zugrunde liegende Funktionale Modell kann allfällige Hysteresiseffekte nicht berücksichtigen; diese dürften jedoch bei Umkehr der Fliessverhältnisse von grosser Bedeutung sein, so dass deren Vernachlässigung zu einem nicht akzeptablen Modellfehler führt. Die sich daraus ergebende Folgerung sei noch einmal hervorgehoben: Die Prognosefähigkeit kalibrierter Modelle ist nur bei weitgehender Beibehaltung der Modellstruktur gewährleistet.

Als weitere Kontrollgrösse lässt sich die total injizierte Gasmenge heranziehen. Figur 4.32 zeigt die kumulierte Gasmenge in der Formation, das dazugehörige Gasvolumen unter den gegebenen Druckverhältnissen sowie die total injizierte Luftmasse. Die Differenz zwischen den beiden Mengenangaben entspricht der im Porenwasser gelösten Luftmasse; der Anteil gelöster Luft beträgt immerhin etwa 10 % der total injizierten Menge. Am Ende des ersten Testabschnittes sind gemäss Berechnung ca. 160 gr Gas in die Formation verpresst worden; im Felslabor gemessen wurde ein Wert > 147 gr. Das unter Druck stehende Gas im Intervall I1.2 führt auch nach Verschluss des Injektionsventils zu einem kontinuierlichen Gasfluss in die Formation. Beim Öffnen des Bohrlochs im Testabschnitt EXTR-1 wird schlagartig das im Intervall übriggebliebene Gas freigesetzt (nicht dargestellt in Figur 4.32). Anschliessend strömt ein Gemisch aus Gas und Porenwasser zurück ins Bohrloch. Die im Experiment total extrahierte Gasmenge wird mit 120 gr, die Wassermenge mit 46 gr angegeben; die entsprechenden Werte der TOUGH Simulation betragen 129 und 59 gr - die Übereinstimmung darf als sehr gut bezeichnet werden, die leichte Überschätzung der Werte konnte aufgrund des ebenfalls überschätzten Druckabfalles erwartet werden. Trotz abnehmender Gasmenge in der Formation nimmt das

totale Gasvolumen auch während der Extraktionsphase stetig zu als Folge der Druckabnahme und gleichzeitiger Expansion der Gasphase.



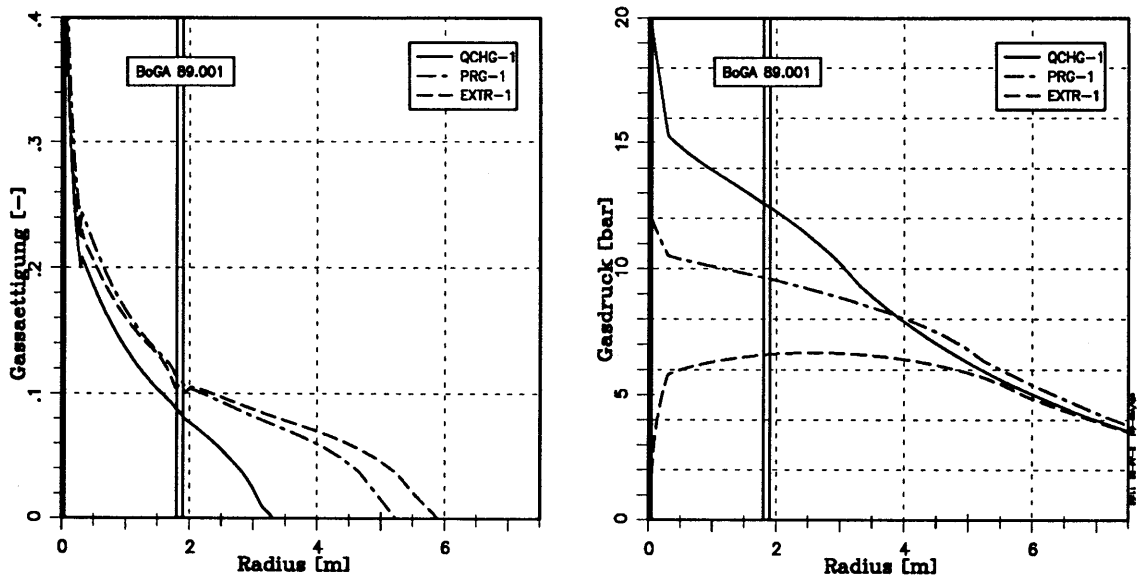
Figur 4.32: Testphase II: Gasmasse und Gasvolumen



Figur 4.33: Testphase II: Fliessraten

Die Fliessraten zeigen im Vergleich zu herkömmlichen Wasserinjektionstests ein aussergewöhnliches Verhalten. Dargestellt in Figur 4.33 ist die (registrierbare) Fliessrate durch das Injektionsventil. Die in das Intervall eingeleitete Gasmenge dringt anschliessend zum einen Teil in die Kluft, zum anderen Teil in die Matrix. Auffallend ist nun die Tatsache, dass die Fliessrate nach dem erwarteten Abfall kurz nach Aufbringen des konstanten Injektionsdruckes von 20 bar nach ca. 45 Minuten wieder anzusteigen beginnt, ausgelöst durch die zunehmende Ausbildung von Fliesswegen für die Gasphase. Die Front zwischen dem Injektionsgas und dem zu verdrängenden Porenwasser entfernt sich vom Bohrloch, in dessen unmittelbaren Umgebung sich eine Zone erhöhter totaler Mobilität ausbildet. Die quasi-stationäre Fliessrate wird von WYSS (1989) mit 0.35 gr/min angegeben; der errechnete Wert beträgt 0.36 gr/min. Nach Verschluss des Injektionsventils strömt weiterhin Gas in die Formation; der Druck im Intervall nimmt ab. Wegen der geringeren Durchlässigkeit der Matrix entsteht bereits nach kurzer Zeit ein Druckgradient in Richtung Bohrloch, sodass das in der Matrix gespeicherte Gas ins Intervall zurückfliesst, während gleichzeitig Gas vom Intervall in die Kluft strömt. Das Rückströmen von Gas in der Extraktionsphase folgt qualitativ dem klassischen Verhalten mit exponentiell abnehmender Fliessrate.

Abschliessend seien die Druck- und Sättigungsverteilungen dargestellt, wie sie sich aus der Simulationsberechnung ergeben. Figur 4.34 zeigt Profile jeweils am Ende der drei untersuchten Testabschnitte.



Figur 4.34 Testphase II: Sättigungs- und Druckprofile am Ende der Testabschnitte

Die Graphik auf der linken Seite der Figur 4.34 lässt erkennen, dass die Gasblase nach eintägiger Versuchsdauer einen Radius von ca. 6 m aufweist. Die ungesättigte Zone breitet sich beständig aus - auch während der Extraktionsphase. Die Zone mit einer Gassättigung grösser als 10 % beschränkt sich jedoch auf die unmittelbare Umgebung des Injektionsbohrlochs. Diese Resultate sind stark vom gewählten Typ der charakteristischen Kurven (hier das Modell von van Genuchten) abhängig. Ohne direkte Beobachtung der Gassättigung oder der Kapillarkräfte dürfte es schwierig sein, die hier berechnete Sättigungsverteilung zu verifizieren. Zudem ist die Modellannahme eines äquivalent porösen Mediums sowie radial-symmetrischer Fliessverhältnisse mit weitgehend homogenen Gesteinseigenschaften zu einfach, um die allfällige Ausbildung bevorzugter Fliesswege für die Gasphase zu berücksichtigen. Die totale Gasmenge, welche sich in der Formation befindet, dürfte relativ gut wiedergegeben sein; die berechnete örtliche Verteilung der Gasphase ist hingegen als eine Schätzung mit grossen Unsicherheiten zu betrachten.

Die Druckprofile schliesslich sind weitgehend bestimmt von den Randbedingungen während der Testabschnitte QCHG-1 und EXTR-1. Die bereits in der Testphase I festgelegte Zonierung äussert sich anhand höherer Druckgradienten in der inneren, geringer durchlässigen Zone. Schwach erkennbar ist zudem der Einfluss der Gasphase, zeigt sich doch eine leichte Unstetigkeit im Druckprofil beim Übergang vom gasführenden zum rein wassergesättigten Bereich.

Hiermit ist die Diskussion des errechneten Systemzustandes während der Testphase II abgeschlossen. Als nächstes soll der optimale Parametersatz erörtert werden.

Es sei in Erinnerung gerufen, dass die Werte der absoluten Permeabilität und Kompressibilität in den drei Zonen aufgrund der Daten der Testphase I geschätzt wurden; sie werden in der Testphase II als bekannt und fehlerfrei vorausgesetzt. Ebenso werden die in Tabelle 4.15 mit einem Minuszeichen versehenen Parameter als unveränderbare Grössen eingeführt; sie sind somit Bestandteil des Funktionalen Modells. Die Fehleranalyse basiert also auf der Annahme, dass diese Parameter entweder fehlerfrei bekannt oder mit den neu zu schätzenden Parametern nicht korreliert sind. Diese Annahme führt zu einer unter Umständen starken Überschätzung der erzielten Genauigkeit.

Tabelle 4.16 fasst die Resultate der Inversen Modellierung zusammen. Sie enthält die Schätzwerte, einige Fehlerangaben, die Kovarianzmatrix mit den entsprechenden Korrelationskoeffizienten in der oberen Dreiecksmatrix sowie die dazugehörigen Eigenwerte und Eigenvektoren der Länge Eins.

Parameter	geschätzter Wert ± σ	
	Zone 1	Zone 2
residuale Flüssigkeitssättigung S_{rf}	0.21 ± 0.03	0.36 ± 0.05
van Genuchten Parameter n	2.66 ± 0.27	2.18 ± 0.30
Porosität ϕ	0.08 ± 0.01	0.04 ± 0.01

Wert der Zielfunktion beim Minimum	138.4	(= 100.0 %)
Beitrag der Vorinformation	23.8	(= 17.2 %)
Beitrag der Druckresiduen	114.6	(= 82.8 %)
mittlerer Fehler der Gewichtseinheit s_0^2	6.9	(Modelltest negativ)
Mittel der Residuen	11173.5	[Pa]
Kashyap Kriterium	263.1	
Konditionszahl (skaliert)	80.7	

Kovarianz-/Korrelationsmatrix der geschätzten Parameter						
	$S_{rf,Zone\ 1}$	$S_{rf,Zone\ 2}$	$n_{Zone\ 1}$	$n_{Zone\ 2}$	$\phi_{Zone\ 1}$	$\phi_{Zone\ 2}$
$S_{rf,Zone\ 1}$	$7.2 \cdot 10^{-4}$	0.77	0.13	0.26	0.40	-0.12
$S_{rf,Zone\ 2}$	$1.0 \cdot 10^{-3}$	$2.5 \cdot 10^{-3}$	0.05	0.13	0.20	0.02
$n_{Zone\ 1}$	$1.0 \cdot 10^{-3}$	$7.2 \cdot 10^{-4}$	$7.5 \cdot 10^{-2}$	0.39	0.35	-0.74
$n_{Zone\ 2}$	$2.1 \cdot 10^{-3}$	$2.0 \cdot 10^{-3}$	$3.3 \cdot 10^{-2}$	$9.2 \cdot 10^{-2}$	0.95	-0.85
$\phi_{Zone\ 1}$	$1.5 \cdot 10^{-4}$	$1.4 \cdot 10^{-4}$	$1.3 \cdot 10^{-3}$	$4.0 \cdot 10^{-3}$	$1.9 \cdot 10^{-4}$	-0.84
$\phi_{Zone\ 2}$	$-2.4 \cdot 10^{-5}$	$8.5 \cdot 10^{-6}$	$-1.4 \cdot 10^{-3}$	$-1.8 \cdot 10^{-3}$	$-8.2 \cdot 10^{-5}$	$5.0 \cdot 10^{-5}$

Eigenvektoren und Eigenwerte						
	$S_{rf,Zone\ 1}$	$S_{rf,Zone\ 2}$	$n_{Zone\ 1}$	$n_{Zone\ 2}$	$\phi_{Zone\ 1}$	$\phi_{Zone\ 2}$
$S_{rf,Zone\ 1}$	0.904	0.403	-0.011	0.020	-0.128	-0.060
$S_{rf,Zone\ 2}$	-0.403	0.914	-0.014	0.018	0.040	-0.003
$n_{Zone\ 1}$	-0.003	-0.001	0.788	0.615	-0.003	0.012
$n_{Zone\ 2}$	-0.017	-0.031	-0.614	0.787	-0.044	-0.002
$\phi_{Zone\ 1}$	0.143	0.024	-0.028	0.034	0.907	0.393
$\phi_{Zone\ 2}$	-0.004	0.019	-0.001	-0.020	-0.397	0.917
Eigenwert	$2.4 \cdot 10^{-4}$	$2.9 \cdot 10^{-3}$	$5.0 \cdot 10^{-2}$	$1.2 \cdot 10^{-1}$	$1.7 \cdot 10^{-5}$	$4.9 \cdot 10^{-7}$

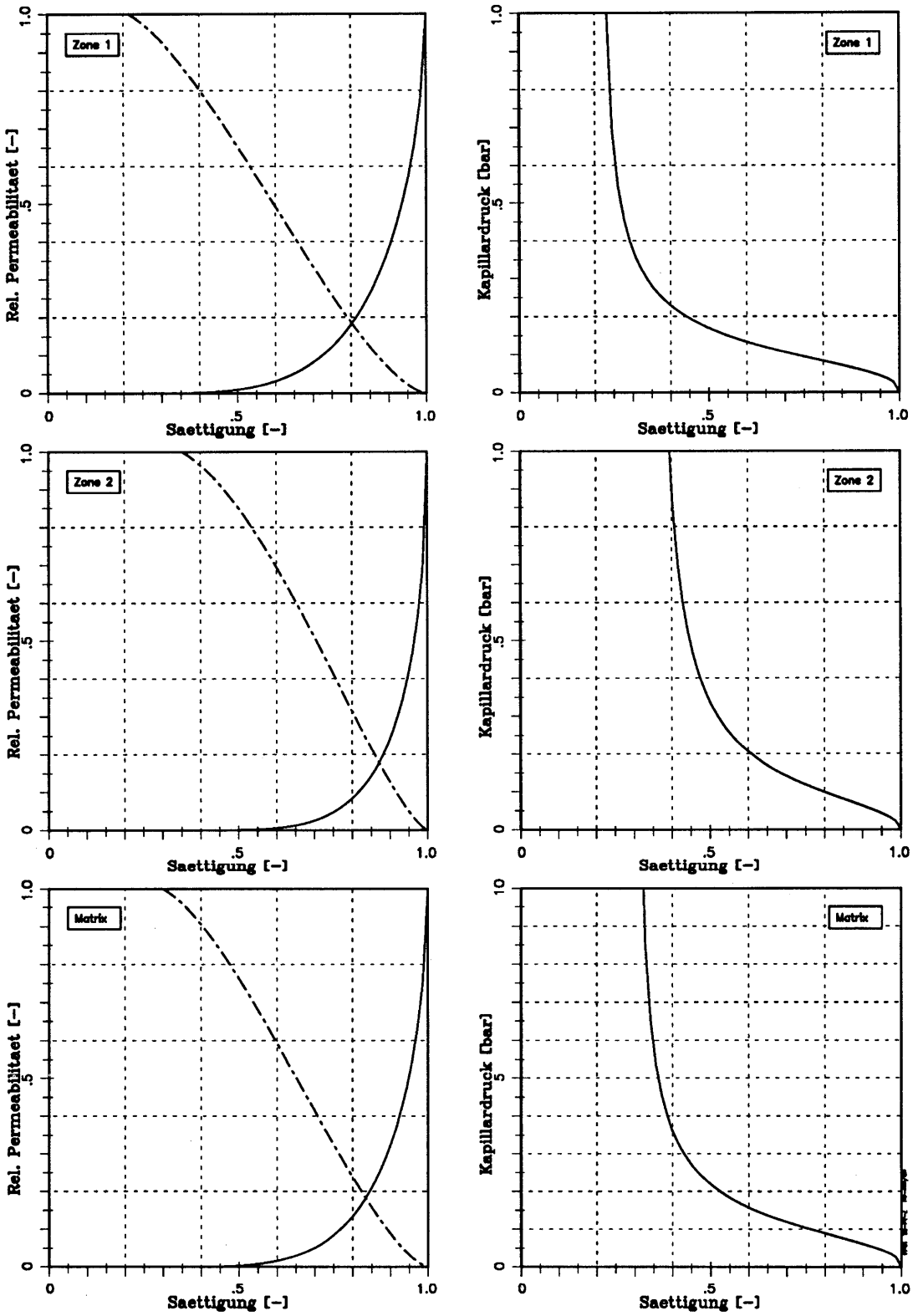
Tabelle 4.16: Testphase II: Zusammenstellung der Resultate

Bevor auf die Qualität der Resultate eingegangen wird, sollen zuerst die geschätzten Werte der einzelnen Parameter kurz besprochen werden. Die Porosität der Zone 1 hat sich gegenüber der Anfangsschätzung auf 8% verdoppelt - ein Wert, der sich aufgrund der Kluftbeschreibung von BOSSART & MAZUREK (1991) durchaus rechtfertigen lässt. Die Parameter S_{fr} und n definieren die Form der charakteristischen Kurven (siehe Figur 4.35), deren grundsätzlicher Verlauf durch das gewählte Modell von van Genuchten gegeben ist. Versuchsweise wurde durch das Einfügen der Brooks-Corey-Funktionen eine Änderung im Funktionalen Modell vorgenommen; die damit erzielten Resultate ergaben jedoch eine signifikant schlechtere Reproduktion des Testverlaufes (Kashyap Kriterium = 1427). Trotzdem bleibt die Wahl des van Genuchten Modells weitgehend unbegründet. Im weiteren ist zu beachten, dass die Parameter lediglich aufgrund einiger weniger Druckdaten im Intervall I0.2 bestimmt worden sind. Aus Figur 4.34 wird zudem ersichtlich, dass z.B. in Zone 2 die maximale Gassättigung 20 % beträgt; die charakteristischen Kurven im Bereich $0.0 < S_f < 0.8$ stellen somit Extrapolationen dar, deren Aussagekraft beschränkt ist. Allein aus dieser Tatsache wird deutlich, dass eine Anwendung des auf diese Weise kalibrierten Modells auf Fälle mit erhöhter Gassättigung trotz guter Reproduktion des beobachteten Systemzustandes fragwürdig bleiben muss.

Die mittlere Abweichung zwischen gemessenen und gerechneten Druckdaten liegt leicht über 10000 Pa. Der Wert $\hat{\sigma}_0^2$ unterscheidet sich signifikant von $\sigma_0^2=1.0$, wie dies das negative Ergebnis des Modelltestes nahelegt. Die a priori angenommene Standardabweichung der Residuen von 5000 Pa war offensichtlich zu optimistisch; der zu erwartende Modellfehler wurde unterschätzt. Die Kofaktorenmatrix der geschätzten Parameter ist deshalb mit dem höheren Wert $\hat{\sigma}_0^2$ multipliziert worden, um diesem Umstand Rechnung zu tragen.

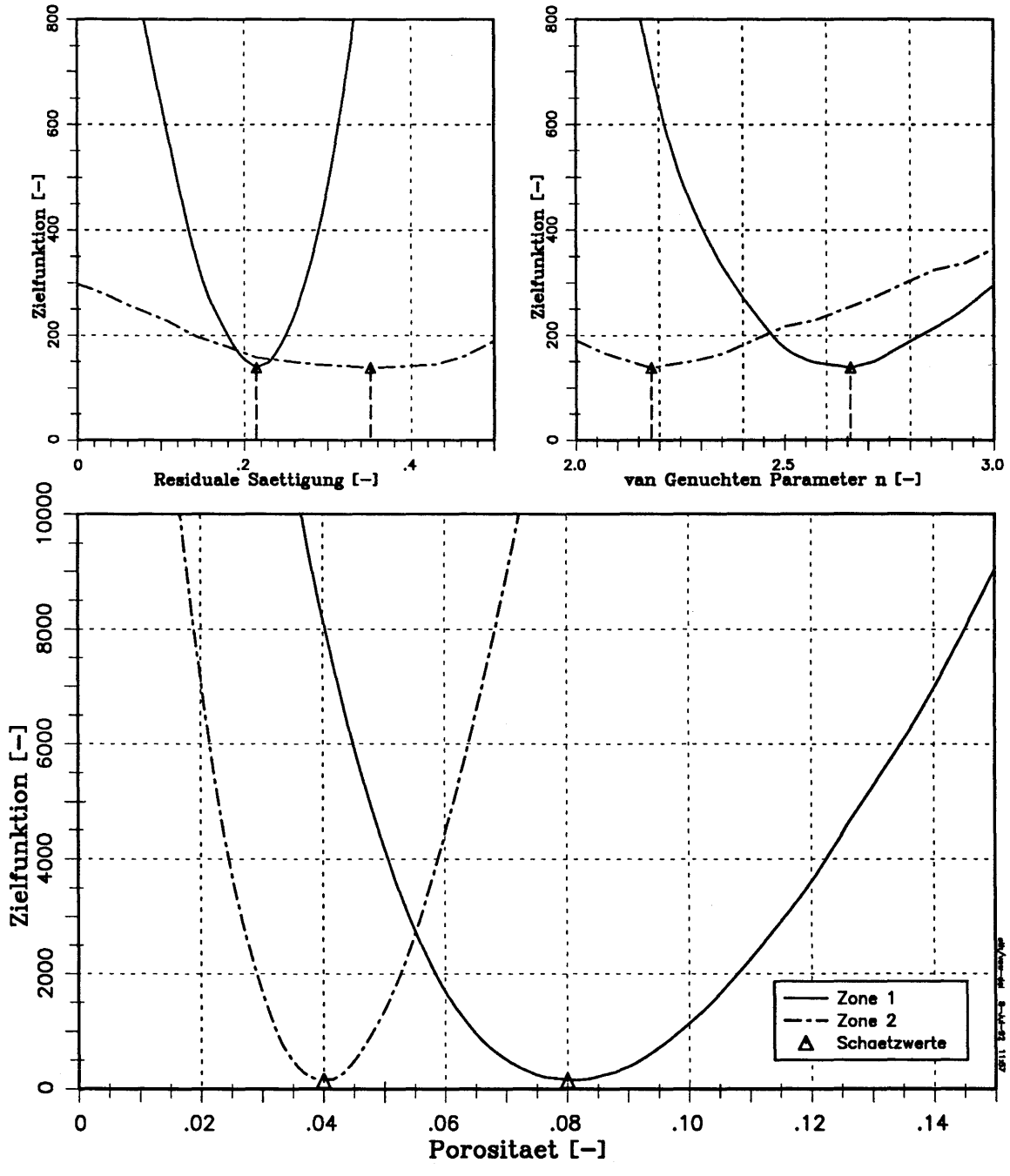
Bei der Interpretation der Eigenwerte und Eigenvektoren ist zu beachten, dass die einzelnen Parametertypen unterschiedliche Grössenordnungen aufweisen. Ein erster Hinweis über die Qualität der Resultate gibt die mit dem Kehrwert des quadrierten Parameterwertes skalierte Konditionszahl. Der grösste Eigenwert ist dem Parameter $n_{Zone\,2}$ zugeordnet. Parameterkombinationen entlang des dazugehörigen Eigenvektors sind somit schlecht bestimmt. Die Unsicherheit in der Bestimmung der Porosität in der Zone 2 - dem Parameter mit dem kleinsten Eigenwert - führt wegen der vorhandenen starken Korrelation zu einer grossen Unbestimmtheit des Parameters $n_{Zone\,2}$. Analoge Aussagen können für andere Parameterkombinationen hergeleitet werden. Die gefundene Lösung ist somit relativ stark vom Schätzwert der Porosität abhängig. Die Fixierung der Porosität bei einem Wert, der sich nur geringfügig vom optimalen Schätzwert unterscheidet, führt

zu stark abweichenden Schätzungen für die übrigen Parameter. In diesem Sinne ist die gefundene Lösung kritisch zu beurteilen.



Figur 4.35: Charakteristische Kurven für Zone 1, Zone 2 und Matrix

Die Fehleranalyse soll durch eine Sensitivitätsanalyse ergänzt werden. Figur 4.36 zeigt die Zielfunktion in Abhängigkeit einzelner Parameter. Da jeweils nur ein Parameter variiert wird - alle übrigen sind bei ihrem optimalen Wert fixiert - repräsentiert die Konvexität der parabelförmigen Kurven die bedingte Verteilung des jeweiligen Parameters; dies entspricht der Schätzgenauigkeit des jeweiligen Parameters unter der Annahme, dass alle übrigen Modellgrössen fehlerfrei bekannt sind. Wegen der zum Teil starken Korrelationen und grossen Unsicherheiten der übrigen Parameter wäre die so bestimmte Genauigkeit zu optimistisch.



Figur 4.36: Testphase II: Sensitivität der Zielfunktion

Die starke Sensitivität der Zielfunktion hinsichtlich der Porosität ist gut erkennbar (man beachte den Massstab der y-Achse). Die Kurven sind zudem annähernd parabelförmig; es ist deshalb zu erwarten, dass die lineare Fehlerbetrachtung zufriedenstellende Resultate liefert. Die Situation ist deutlich ungünstiger für die Parameter S_{fr} und n, insbesondere in der Zone 2. Die Minima sind flach ausgebildet, der Anstieg links und rechts vom Minimum ist asymmetrisch und zeigt gewisse Instabilitäten. Die Überprüfung der Linearitätsannahme bei der Berechnung der bedingten Wahrscheinlichkeiten erfolgte mit Hilfe des in Kapitel 3.7.8 beschriebenen Verfahrens von Carrera. Sie wurde an zwei Punkten rechts des Minimums in einem Abstand von $k\cdot\sigma$ (k=1,2) durchgeführt, wobei σ die anhand der Gleichung (3.38) berechnete Standardabweichung darstellt. In Tabelle 4.17 sind die Ergebnisse zusammengefasst:

Parameter	Standardabweichung	korrigierte Standardabweichung	
	linear	k = 1	k = 2
$S_{rf,Zone\ 1}$	0.007	0.013	0.023
$S_{rf,Zone\ 2}$	0.024	0.053	0.056
$n_{Zone\ 1}$	0.056	0.162	0.194
$n_{Zone\ 2}$	0.067	0.229	0.209
$\phi_{Zone\ 1}$	0.0015	0.0031	0.0047
$\phi_{Zone\ 2}$	0.0009	0.0009	0.0015

Tabelle 4.17: Testphase II: Überprüfung der Linearitätsannahme

Die im Optimum durch Differenzenbildung berechnete Jacobimatrix stellt eine Linearisierung dar, deren Extrapolation zu den Punkten $p_{k=1} = p_{opt} + \sigma$ bzw. $p_{k=2} = p_{opt} + 2\cdot\sigma$ bei einem nicht-linearen Modell zu einem Fehler führt, dessen Grösse von der tatsächlichen Form der Zielfunktion abhängt. Im allgemeinen wird die erzielte Genauigkeit durch die Linearisierung überschätzt. Mit zunehmendem k steigt der Einfluss der bei der Linearisierung vernachlässigten Terme höherer Ordnung - die notwendige Korrektur kann unter Umständen wieder abnehmen, wie dies beim Parameter $n_{Zone\ 2}$ der Fall ist. Beim Parameter $\phi_{Zone\ 2}$ war die Linearisierung für k = 1 offensichtlich zulässig. Im weiteren interessiert der Vergleich zwischen den Standardabweichungen der bedingten Verteilung (Tabelle 4.17) und den Standardabweichungen der Randverteilungen (Tabelle 4.16). Die relativ grossen Differenzen sind eine Folge der vorhandenen Korrelationen, welche bewirken, dass sich die Unsicherheit in der Schätzung des einen Parameters auf die Genauigkeit der anderen Parameter auswirkt. Die Interpretation der Eigenvektoren ist somit zumindest qualitativ bestätigt.

4.3.6 Testphase III: Hydraulische Tests unter Zweiphasenbedingungen

In der FRI-Zone ist durch das Injizieren von Gas während der Testphase II ein Zweiphasensystem entstanden. Eine Wiederholung der in Testphase I durchgeführten hydraulischen Tests soll nun Aufschluss geben über den Einfluss der Gasphase auf die Interpretation der Testresultate. In Analogie zur Sequenz QCH12-1 und PRQCH12-1 (siehe Tabelle 4.8) wurde in der Testphase III folgendes Experiment durchgeführt:

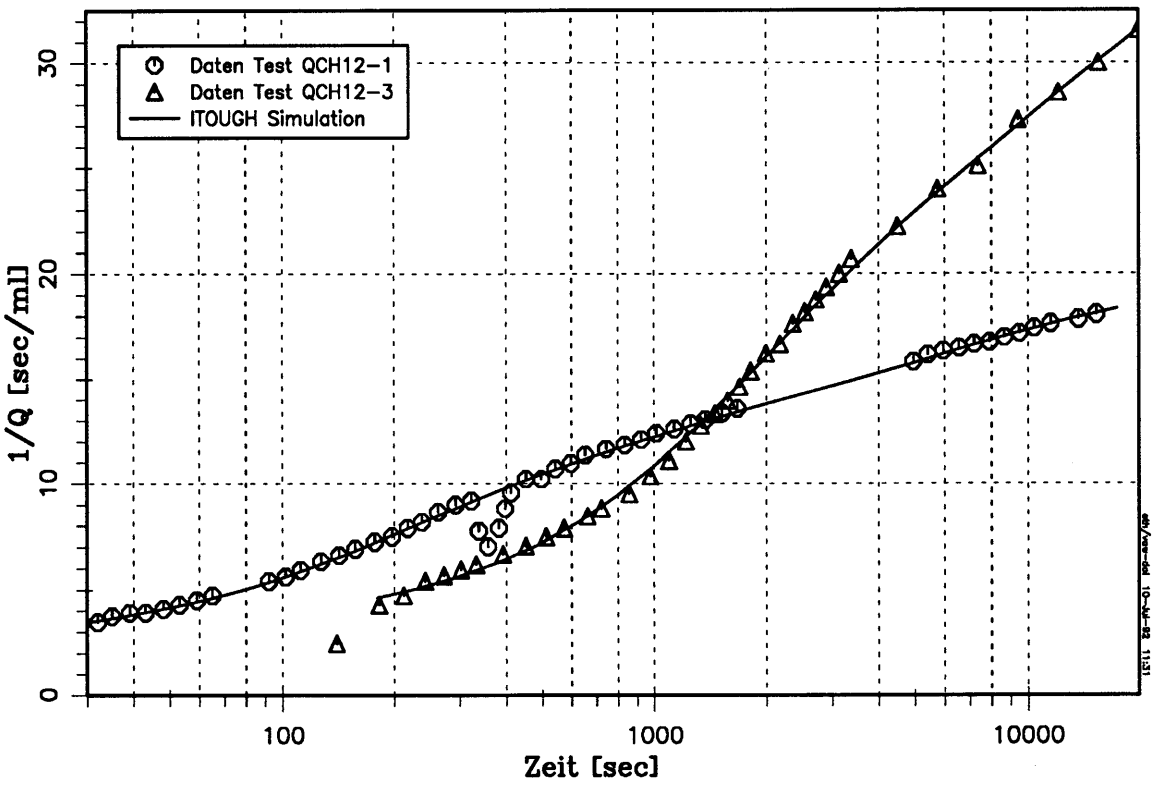
Bezeichnung	Testart	Testdauer [hh:mm]	Daten / Intervall	Bemerkungen
QCH12-3	Constant Head Test	5:30	Fliessrate / I1.2 Druck / I0.2	Wasserinjektion 20 bar
PRQCH12-3	Pressure Recovery	19:06	Druck / I1.2 Druck / I0.2	Shut-in

Tabelle 4.18: Testphase III: Überblick über die modellierten Tests

Geht man davon aus, dass die Existenz einer Gasphase in der Formation nicht bekannt ist, stellt sich die Frage, ob bei der Auswertung der Fliessraten durch die Annahme vollständiger Wassersättigung ein Fehler bei der Bestimmung der Transmissivitäten und Speicherkoeffizienten entsteht. Um diese Frage zu beantworten, wird eine Inverse Modellierung unter Einphasenbedingungen durchgeführt, wobei lediglich die Fliessraten während des Testabschnittes QCH12-3 für die Parameterbestimmung herangezogen werden. Der Vergleich der Resultate mit denjenigen der Testphase I (Testabschnitt QCH12-1) lässt sodann eine allfällige Veränderung der Schätzwerte erkennen.

Ein Jacob-Lohman-Plot der beiden zu vergleichenden Tests mit den dazugehörigen Berechnungsresultaten ist in Figur 4.37 dargestellt. Beide Tests können vom Simulationsprogramm TOUGH ähnlich gut nachgebildet werden. Aus der Tatsache, dass der Testabschnitt QCH12-3 (ausgeführt unter Zweiphasenbedingungen) mit einem Einphasenmodell simuliert werden kann, folgt die wichtige Erkenntnis, dass das Vorhandensein von Gas in der Formation trotz erfolgreicher Kalibrierung des Modells nicht ausgeschlossen werden kann. Allgemeiner formuliert bedeutet dies, dass ohne den Beizug modellexterner Informationen unter Umständen nicht entschieden werden kann, ob mit der gewählten Modellstruktur die tatsächlichen Gegebenheiten korrekt erfasst werden oder nicht. Ist eine eindeutige Evidenz für das Vorhandensein von Gas in der Formation nicht gegeben (z.B. durch die direkte Beobachtung ausströmenden Gases im Bohrloch), muss

die Plausibilität der gefundenen Parametersätze überprüft werden, um allfällige Hinweise zu erhalten über die Korrektheit oder Falschheit wichtiger Modelleigenschaften (hier die Annahme vollständig wassergesättigter Verhältnisse).



Figur 4.37: Testphase III: Kalibrierung der Einphasenmodelle unter Verwendung von Injektionsraten (Jacob-Lohman Plot)

Tabelle 4.19 fasst die Resultate der Testphase III zusammen und vergleicht sie mit denjenigen der Testphase I, wobei in beiden Berechnungen Einphasenbedingungen angenommen wurden.

Parameter	geschätzter Wert ± σ		Differenz
	Testphase I QCH12-1	Testphase III QCH12-3	
log ($k_{Zone\ 1}$)	-15.20 ± 0.15	-15.22 ± 0.10	-0.02
log ($k_{Zone\ 2}$)	-15.61 ± 0.03	-15.94 ± 0.08	-0.33
log ($c_{Zone\ 1}$)	-7.80 ± 0.07	-7.16 ± 0.06	0.64
log ($c_{Zone\ 2}$)	-8.60 ± 0.13	-7.63 ± 0.26	0.97

Tabelle 4.19: Testphase III: Resultate der Parameterschätzung unter Annahme wassergesättigter Verhältnisse

Figur 4.37 und Tabelle 4.19 lassen sich wie folgt kommentieren:

- In der Testphase III wurde Wasser in eine ungesättigte Formation injiziert. Das Gas in der Umgebung des Bohrlochs wird bis auf eine residuale Sättigung verdrängt. Dies führt dazu, dass die Daten des Tests QCH12-3 deutlich auf das Vorhandensein zweier Zonen verschiedener Diffusivität hinweisen (zwei Regressionsgeraden unterschiedlicher Steigungen im Jacob-Lohman-Plot). Die Neigung der ersten Geraden entspricht in etwa derjenigen des Tests QCH12-1, der unter Einphasenbedingungen durchgeführt wurde. Die zweite Gerade ist signifikant steiler, was eine markante Reduktion der Durchlässigkeit anzeigt.

- Die Interpretation der Injektionsraten ergibt eine korrekte Schätzung der Permeabilität in der Zone 1, obwohl das zugrunde liegende Modell vollständig wassergesättigte Verhältnisse annimmt. Die Differenz von -0.02 ist mit Blick auf die Unsicherheit der geschätzten Permeabilität nicht signifikant. Die gleiche Schlussfolgerung ergibt sich zudem bei der halbgraphischen Auswertung des Jacob-Lohman-Plots (WYSS 1989). Die Verwendung standardisierter Auswertemethoden führt somit zu keinem Schätzfehler, sofern sich die Auswertung auf die innere, weitgehend wassergesättigte Zone beschränkt.

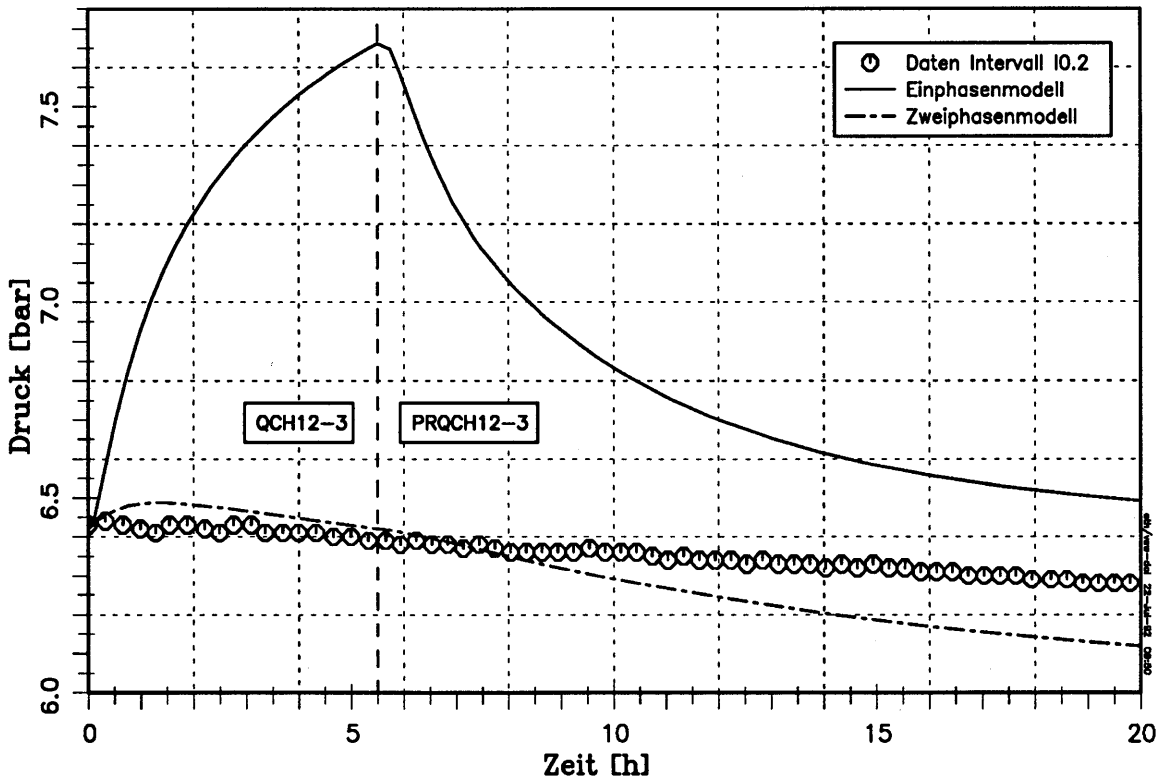
- Die Permeabilität der äusseren Zone wird unterschätzt. Der Wert repräsentiert nicht die Permeabilität unter Einphasenbedingungen, sondern eine gemittelte Diffusivität des Gas-Wasser-Gemisches.

- Das Vorhandensein einer residualen Gassättigung führt zu einer Zunahme des Speichervermögens der Formation. Im Einphasenmodell wird diese Kapazität erzeugt, indem der Kompressibilität des Porenraumes ein grosser Wert zugeordnet wird. In der äusseren Zone 2 erhöht sich die Kompressibilität beinahe um eine Grössenordnung gegenüber dem Ergebnis des Testanschnitts QCH12-1. Werden unrealistische Kompressibilitäten geschätzt, kann dies ein Hinweis auf das Vorhandensein einer freien Gasphase sein.

Mit diesen Bemerkungen sind einige der Fragen, deren Klärung Ziel des Gastests im Felslabor Grimsel war, weitgehend beantwortet.

Abschliessend soll gezeigt werden, dass das im Testabschnitt QCH12-3 beobachtete Systemverhalten besser erklärt werden kann, wenn man den Zweiphasenverhältnissen Rechnung trägt. Im folgenden werden die Prognoseresultate eines Einphasenmodells und

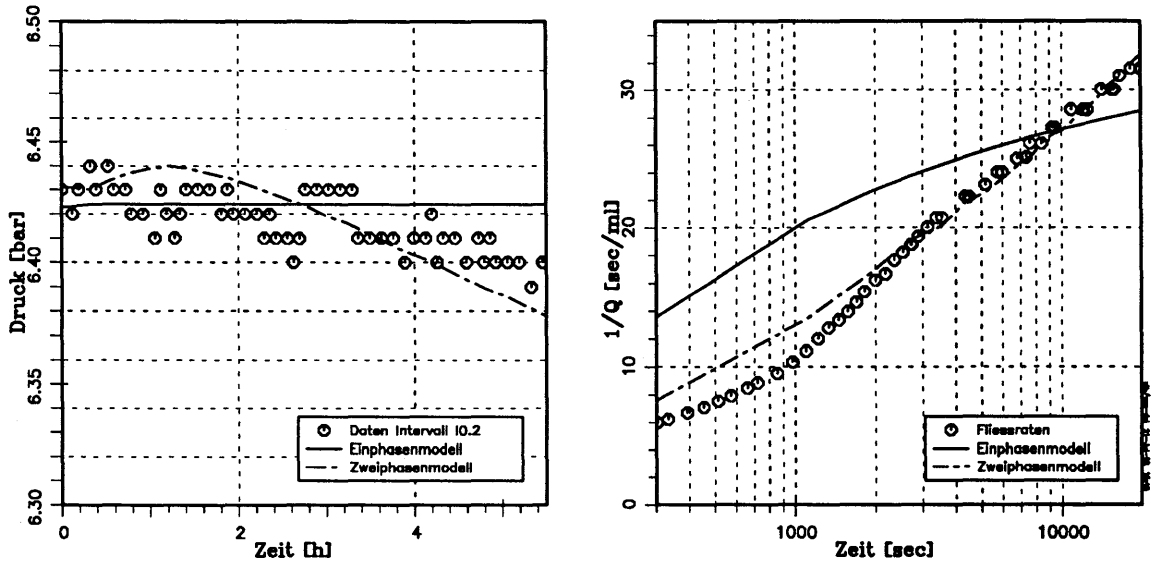
diejenigen eines Zweiphasenmodell mit den im Felslabor gemessenen Fliessraten und Druckreaktionen verglichen. Das Einphasenmodell entspricht demjenigen der Testphase I. Das Zweiphasenmodell ist das Resultat der Simulation sämtlicher in der Testphase II durchgeführten Gasinjektions-, Druckerholungs- und Extraktionsphasen. Ohne weitere Kalibrierung ergibt sich für die Druckreaktion im Intervall I0.2 folgendes Bild (Figur 4.38):



Figur 4.38: Testphase III: Druckreaktion in Intervall I0.2 für das Ein- und Zweiphasenmodell

Die Kompressibilität der Gasphase führt dazu, dass sich die im Injektionsintervall I1.2 herbeigeführte Druckerhöhung im benachbarten Beobachtungsintervall I0.2 kaum bemerkbar macht. Dieses Verhalten wird vom Zweiphasenmodell relativ gut wiedergegeben, während das Einphasenmodell einen starken Druckanstieg voraussagt.

In Unkenntnis der tatsächlich vorliegenden Phasenverhältnisse lassen sich jedoch beide Modelle anhand der Druckdaten und Injektionsraten des Testabschnittes QCH12-3 kalibrieren, indem man z.B. die Permeabilität der Zone 1 und Zone 2 durch Inverse Modellierung bestimmt. Dies ergibt das in Figur 4.39 dargestellte Systemverhalten:



Figur 4.39: Testphase III: Systemverhalten der kalibrierten Modelle

Es zeigt sich, dass selbst mit dem Einphasenmodell die Druckreaktion im Intervall I0.2 nachvollzogen werden kann. Wiederum stellt sich die Frage, ob anhand dieser Resultate die Existenz einer freien Gasphase erkennbar ist. Aufgrund des modellierten Systemverhaltens muss dies im allgemeinen verneint werden. Die Fliessraten - dargestellt als Jacob-Lohman-Plot - zeigen zwar für das Zweiphasenmodell eine eindeutig bessere Übereinstimmung. Durch Anpassung des Speicherkoeffizienten liesse sich jedoch eine ebenso gute Kalibrierung des Einphasenmodells erreichen, sodass die Entscheidung zwischen den beiden Modellkonzepten nicht leicht fällt. Mehr Aufschluss ergibt ein Blick auf die geschätzten Modellparameter, zusammengefasst in Tabelle 4.20.

Parameter	Resultat Testphase I	Einphasenmodell	Zweiphasenmodell
log ($k_{Zone\ 1}$)	-15.94	-16.22 ± 0.048	-16.18 ± 0.017
log ($k_{Zone\ 2}$)	-15.14	-12.73 ± 2.338	-15.26 ± 0.050
Kashyap Kriterium	-	436.91	228.45

Tabelle 4.20: Testphase III: Vergleich Einphasen-/Zweiphasenmodell

Die geschätzten Permeabilitäten des Zweiphasenmodells unterscheiden sich nur geringfügig von den Resultaten der Testphase I. Dies bedeutet, dass bei guter Kenntnis der gasbezogenen Modellparameter (charakteristische Kurven, Gassättigung zu Beginn des

Tests, etc.) die absoluten Permeabilitäten für beide Zonen relativ zuverlässig bestimmt werden können. Die Resultate des Einphasenmodells bestätigt die Erkenntnis aus der Jacob-Lohman-Auswertung, dass die Permeabilität in der inneren Zone korrekt bestimmt wird, da die unmittelbare Umgebung des Injektionsbohrloches weitgehend wassergesättigt ist. Der Permeabilität in der äusseren Zone wird jedoch ein überaus grosser Wert von $1.9 \cdot 10^{-13}$ m^2 zugewiesen, der sich bei den bekannten geologischen Verhältnissen in der FRI-Zone kaum begründen lässt. Die hohe Durchlässigkeit in der Zone 2 wird benötigt, um die überschätzte Druckreaktion im Intervall I0.2 (siehe Figur 4.38) zu verringern; der Druckabbau findet bei der resultierenden Parameterkombination weitgehend in der Zone 1 mit der um einige Zehnerpotenzen geringeren Permeabilität statt.

Der Entscheid für das Zweiphasenmodell wird im vorliegenden Fall vom Kashyap Kriterium unterstützt. Trotzdem wird sich die Begründung im allgemeinen auf modellexterne Kriterien - wie z.B. unrealistische Permeabilitäten oder Speicherkoeffizienten - abstützen müssen. Die gute Reproduzierbarkeit des Systemverhaltens garantiert nicht, dass das zugrunde liegende Modellkonzept die tatsächlichen Verhältnisse korrekt wiedergibt.

4.3.7 Gastest Felslabor Grimsel: Zusammenfassung

Der Gastest im Felslabor Grimsel wurde von der Nagra geplant und durchgeführt, um den Einfluss einer freien Gasphase auf die Interpretation standardisierter hydraulischer Tests zu untersuchen. Einzelne Testabschnitte unter Ein- und Zweiphasenbedingungen konnten vom Programm ITOUGH ausgewertet werden. Die Resultate deuten darauf hin, dass sich bei einem Wasserinjektionstest das Vorhandensein einer Gasphase nur geringfügig auf die Bestimmung der Permeabilität in der unmittelbaren Umgebung des Bohrlochs auswirkt. Stehen Daten eines weiter entfernten Beobachtungsbohrlochs zur Verfügung, zeigt sich der Einfluss der Gasphase stärker. Die Bestimmung der in der Formation vorhandenen Gasmenge ist mit grosser Unsicherheit verbunden, falls keine genauen Kenntnisse der Kapillardruckkurven und insbesondere der relativen Permeabilitätsfunktionen zur Verfügung stehen. Die Auswertung der Testphase II zeigt, dass die bei der Injektion von Gas auftretende Zweiphasenströmung vom Programm TOUGH zuverlässig simuliert werden kann. Die dabei geschätzten Parameter beziehen sich jedoch auf den vorherrschenden Verdrängungsprozess und können deshalb nicht ohne weiteres auf andere Berechnungsfälle übertragen werden.

5 ABSCHLIESSENDE BEMERKUNGEN UND SCHLUSSFOLGERUNGEN

5.1 Aufgabenstellung, Grundlagen und durchgeführte Arbeiten

Im Zusammenhang mit dem Nachweis der Langzeitsicherheit eines Endlagers für radioaktive Abfälle in der Schweiz ist die Beschreibung der hydrogeologischen Verhältnisse an den potentiellen Standorten von zentraler Bedeutung. Die im Endlagerbereich vorherrschende Grundwasserströmung wird unter anderem mit Hilfe numerischer Simulationsmodelle zu erfassen versucht. Das Vorhandensein von Naturgas in der Formation oder die Freisetzung von Korrosionsgasen im Endlager selbst führen dazu, dass der zu untersuchende Bereich als Zweiphasensystem beschrieben werden muss; die hydrodynamische Modellierung dieses Zweiphasensystems wird in der vorliegenden Arbeit vom Programm TOUGH übernommen.

Die Berechnungsresultate hängen weitgehend von den hydrogeologischen Parametern ab, welche die strömungsrelevanten Eigenschaften des Gesteins im Modell repräsentieren. Die Bestimmung dieser Modellparameter erfolgt mittels Kalibrierung des Modells anhand von Messdaten, welche den Systemzustand an diskreten Punkten in Raum und Zeit wiedergeben.

Das Ziel der vorliegenden Arbeit bestand darin, ein Verfahren zur Bestimmung hydrogeologischer Parameter für ein Zweiphasenmodell zu erarbeiten. Zu diesem Zweck wurden die theoretischen Grundlagen zusammengestellt, welche den Zusammenhang zwischen den fehlerbehafteten Beobachtungen des Systemzustandes und den daraus abgeleiteten Modellparametern beschreiben. Ein Verfahren zur automatischen Kalibrierung eines Zweiphasenmodells auf der Basis von TOUGH konnte erarbeitet und in einem Computerprogramm implementiert werden. Anhand eines synthetischen Laborexperimentes wurde das Vorgehen bei der Inversen Modellierung aufgezeigt und abschliessend das Verfahren auf Daten eines im Felslabor Grimsel durchgeführten Gastests angewandt.

5.2 Beschreibung des Zweiphasensystems (Kapitel 2)

Im hier untersuchten Zweiphasensystem enthält der Porenraum neben der flüssigen eine gasförmige Phase, deren jeweiliger Volumenanteil bei makroskopischer Betrachtungsweise durch den Sättigungsgrad beschrieben werden kann. Jede der beiden Phasen besteht aus den zwei Komponenten Wasser und Luft; die Massenanteile der Komponenten in den einzelnen Phasen sind abhängig von Druck und Temperatur. Die physikalischen Eigenschaften der Phasen wie Dichte, Viskosität und spezifische Energie sind abhängig vom thermodynamischen Zustand, wobei lokal Gleichgewichtsbedingungen angenommen werden. Änderungen des thermodynamischen Zustandes führen zu Phasenübergängen einzelner Komponenten (durch Evaporation, Kondensation, Lösung von Luft in Wasser, Ausgasung) sowie zum Auftreten bzw. Verschwinden einer Phase. Bilden die einzelnen Phasen ein Kontinuum, entsteht aufgrund eines Druckgradienten ein Fluss, der durch das verallgemeinerte Gesetz von Darcy beschrieben werden kann. Dabei wird der gegenseitigen Beeinträchtigung der einzelnen Phasen Rechnung getragen, indem eine Abhängigkeit des Fliesswiderstandes von der aktuellen Sättigung eingeführt wird. Das Konzept der relativen Permeabilität lässt sich durch Betrachtung mikroskopischer Vorgänge qualitativ begründen; die Parameter, welche in den zahlreich vorgeschlagenen Funktionen auftreten, sind jedoch als Modellgrössen zu interpretieren, welche die Art des Verdrängungsvorganges, die Ausbildung bevorzugter Fliesswege aufgrund von Heterogenitäten oder viskoser Instabilitäten sowie nicht-hydromechanische Vorgänge im Sinne eines effektiven Parameters berücksichtigen. Im weiteren ist das Auftreten von Kapillarkräften durch eine Kapillardruck-Sättigungs-Beziehung zu modellieren. Kapillarkräfte führen zu unterschiedlichen Druckwerten und Druckgradienten in den einzelnen Phasen, sodass komplizierte Fliessverhältnisse auftreten können.

Die aufgezählten Prozesse sind im mathematisch-numerischen Modell TOUGH implementiert. TOUGH simuliert den gekoppelten Transport der Komponenten Luft und Wasser sowie von Wärmeenergie in der gasförmigen und flüssigen Phase. Berechnungen mit TOUGH demonstrieren, dass das Systemverhalten unter Zweiphasenbedingungen zahlreiche, schwierig erfassbare Effekte zeigt, welche auf die Koppelung der verschiedenen Prozesse zurückzuführen sind.

Das Programm TOUGH bildet die Grundlage der Inversen Modellierung, indem es den Systemzustand für einen gegebenen Parametersatz - das sogenannte Direkte Problem - löst.

5.3 Theorie der Inversen Modellierung (Kapitel 3)

Die Aufgabe, Modellparameter aufgrund von Beobachtungen des Systemzustandes an ausgewählten Punkten zu bestimmen, wird als Inverses Problem bezeichnet. Der indirekte Ansatz formuliert das Inverse Problem als Optimierungsaufgabe auf der Basis wahrscheinlichkeitstheoretischer Überlegungen. Sind gewisse Voraussetzungen (insbesondere Normalverteilung der Residuen) erfüllt, ergibt die Minimierung einer Zielfunktion, welche die Summe der quadrierten und entsprechend gewichteten Residuen enthält, die maximale Wahrscheinlichkeit, den beobachteten Systemzustand mit dem deterministischen Modell zu realisieren. Die Formulierung des Inversen Problems im Rahmen der Maximum-Likelihood Theorie hat zudem den Vorteil, dass sich Aussagen über die Genauigkeit und Zuverlässigkeit der gewonnene Resultate ableiten lassen.

Die Eleganz einer Einbettung der Inversen Modellierung in die Wahrscheinlichkeitstheorie wird durch die Feststellung relativiert, dass in der Hydrogeologie die Voraussetzung rein zufälliger Residuen, deren Fehlerstruktur mittels statistischer Parameter beschrieben werden kann, meist *nicht* erfüllt ist. Die Schwierigkeit bei der Modellierung eines Zweiphasensystems liegt eindeutig bei der Konzeptualisierung, dem Erkennen signifikanter Prozesse und deren Umsetzung in ein mathematisch-numerisches Modell. Die grosse Ungewissheit in der räumlichen Verteilung der hydrogeologischen Eigenschaften schlägt sich in einem Modellfehler nieder, der im allgemeinen zu systematischen Abweichungen führt, welche im Stochastischen Modell nicht beschrieben werden können. Daraus ergibt sich:

- Die durch Inverse Modellierung geschätzten Parameter sind optimal nur unter der Voraussetzung rein zufälliger, normalverteilter Residuen mit kleiner Varianz. Diese Voraussetzung ist in den allermeisten Fällen nicht erfüllt, da systematische Fehler im Funktionalen Modell nicht vermieden werden können. Trotzdem ergibt die Schätzung nach der Methode der kleinsten Quadrate sinnvolle Resultate; deren beschränkte Aussagekraft ist zu beachten. Insbesondere gilt:

- Die durch Inverse Modellierung geschätzten Parameter beziehen sich stets auf die gegebene Modellstruktur, welche die Annahmen des Funktionalen und Stochastischen Modells enthält. Die Werte repräsentieren spezifische Modellparameter - und nicht allgemeingültige Aquiferparameter. Ändern sich Massstab, Geometrie, Diskretisierung, Anfangs- und Randbedingungen sowie die massgebenden Prozesse, ist die Prognosefähigkeit des kalibrierten Modells nicht gewährleistet; sie muss in einem anschliessenden Validierungsverfahren überprüft werden.

- Die Beschränkung des geschätzten Parametersatzes auf die gegebene Modellstruktur kann als Nachteil betrachtet werden, da eine Übertragung auf andere Modelle nicht unproblematisch ist und allgemeingültige Aussagen über die Gesteinseigenschaften nicht gemacht werden können. Andererseits liefert Inverse Modellierung diejenigen Parameter, welche sich direkt auf das mathematisch-numerische Modell beziehen. Stimmt dieses mit dem Prognosemodell weitgehend überein, entfällt das oft unterschätzte Problem der Skalierung und Uminterpretation von im Labor oder Feld gemessenen Grössen auf die im Modell zu verwendenden Eingabeparameter.

- Inverse Modellierung liefert keine direkten Entscheidungshilfen beim Vergleich unterschiedlicher Modellstrukturen. Unabhängige, modellexterne Informationen oder zusätzliche Verhaltensgrössen müssen herangezogen werden, um alternative Modelle vergleichend zu beurteilen. Kashyap liefert einen diesbezüglichen Ansatz, erlaubt aber nicht den Einbezug qualitativer Kriterien. Die erhöhte Effizienz bei der Kalibrierung sollte jedoch genutzt werden, um mehrere Modellkonzepte zu entwerfen und ihre Leistung bei der Erklärung des Systemverhaltens einander gegenüberzustellen.

- Inverse Modellierung stellt die Verbindung dar zwischen dem tatsächlichen Systemverhalten - soweit es verzerrungsfrei beobachtet werden kann - und dem mathematisch-numerischen Modell. Mittels Inverser Modellierung kann somit nicht nur das Verhalten der Natur, sondern auch das Modell sowie das Verhältnis zwischen den beiden untersucht werden. Durch Änderung der Modellstruktur und Neubestimmung der Parameter lässt sich Einblick in die Güte der Naturnachbildung sowie den Modellcharakter einzelner Parameter gewinnen.

5.4 Erkenntnisse aus den Anwendungsbeispielen (Kapitel 4)

Im Kapitel 4 wurde ein synthetisches Laborexperiment entworfen, um das Programm ITOUGH zu verifizieren und das Vorgehen bei der Inversen Modellierung aufzuzeigen. Die Auswertung des Gastests im Felslabor Grimsel stellt ein Anwendungsbeispiel dar, bei dem das gewählte Kalibrierungsverfahren im Rahmen einer praxisbezogenen Fragestellung eingesetzt wurde.

Die wichtigsten Schlussfolgerungen finden sich jeweils am Ende eines Kapitels; sie sollen hier nicht mehr im Detail wiederholt werden. Zusammenfassend lässt sich festhalten:

- Das Programm ITOUGH erfüllt die vorgegebenen Zielsetzungen bei der Parameterbestimmung, der Fehleranalyse und der Beurteilung von Prognoseberechnungen. Es darf als verifiziert betrachtet werden.

- Die Anwendbarkeit der in Kapitel 2 und 3 vorgestellten Konzepte auf synthetische und reale Datensätze konnte demonstriert werden. Insbesondere bei der Auswertung des Gastests kommen die Vorteile einer automatisierten Modelleichung zum tragen - gleichzeitig werden die Beschränkungen jeder vereinfachenden Modellbildung erkennbar.

- Der Aussagewert von Beobachtungsdaten wird durch deren Verwendung in einem Inversen Modell erhöht. Die Begrenzungen analytischer oder halbgraphischer Auswertemethoden können durch differenzierte Modellbildung teilweise überwunden werden. Die Planung von Experimenten sollte mit Blick auf eine mögliche Inverse Modellierung erfolgen. Dies impliziert eine vorgängige Sensitivitätsanalyse der geplanten Beobachtungen hinsichtlich einzelner Parameter sowie die Aufnahme statistischer Grössen für das Stochastische Modell während des Experimentes.

- Eine konsequente Fehleranalyse vermindert die Gefahr von Fehlinterpretationen, obwohl solche bei ungünstiger Form der Zielfunktion nicht auszuschliessen sind. Die Fehleranalyse basiert auf zahlreichen Voraussetzungen, die im allgemeinen nicht erfüllt sind. Die errechneten Fehlermasse sollten deshalb eher als relative Grössen betrachtet werden, die Auskunft über die Qualität der gefundenen Lösung liefern.

Die automatische Kalibrierung zur Bestimmung von gasbezogenen Modellparametern stellt ein Instrument dar, mit dessen Hilfe das Systemverhalten besser erklärt und somit zuverlässigere Prognoseberechnungen durchgeführt werden können. Als Voraussetzung sind gute Kenntnisse des theoretischen Hintergrundes sowie ein kritisches Urteilsvermögen bei der Interpretation des geschätzten Parametersatzes erforderlich.

LITERATURVERZEICHNIS

ANDREWS, R.W. 1988: OBS: Preliminary interpretation of hydraulic tests, and possible conceptual models for the groundwater flow regime considering the effects of gas, Nagra Interner Bericht NIB 88-48, Wettingen

BEAR, J. 1972: Dynamics of fluids in porous media, Elsevier, New York, London, Amsterdam

BEAR, J., Y. BACHMAT 1990: Introduction to modeling of transport phenomena in porous media, Kluwer Academic Publishers, Dordrecht, Boston, London

BECK, M.B. 1987: Water quality modeling: A review of the analysis of uncertainty, Water Resources Research, 23 (8), 1393-1442

BOND, W.J., P.J. WIERENGA 1990: Immobile water during solute transport in unsaturated sand columns, Water Resources Research, 26 (10), 2475-2481

BOSSART, P., M. MAZUREK 1991: Grimsel Test Site: Structural geology and water flow-paths in the Migration shear-zone, Nagra Technischer Bericht NTB 91-12, Wettingen

BROOKS, R., A. COREY 1964: Hydraulic properties of porous media, Hydrology Paper No. 3, Colorado State University

BROOKS, R., A. COREY 1966: Properties of porous media affecting fluid flow, Proc. Amer. Soc. Civil Eng., No. IR2, 92, 61-87

BURDINE, N. T. 1953: Relative permeability calculations from pore-size distribution data, Petroleum Transactions, AIME

CAROSIO, A. 1979: Robuste Ausgleichung, Vermessung, Photogrammetrie, Kulturtechnik, (11/79), 193-297

CAROSIO, A. 1990: Die Theorie der Zuverlässigkeit im Vermessungswesen, Bericht zur Weiterbildungstagung "Zuverlässigkeit in der Vermessung", ETH Zürich, Institut für Geodäsie und Photogrammetrie, Bericht Nr. 169

CARRERA, J. 1984: Estimation of aquifer parameters under transient and steady-state conditions, Ph.D. Dissertation, Department of Hydrology and Water Resources, University of Arizona, Tucson

CARRERA, J., S.P. NEUMAN 1986a: Estimation of aquifer parameters under transient and steady-state conditions, 1; Maximum likelihood method incorporating prior information, Water Resources Research, 22 (2), 199-210

CARRERA, J., S.P. NEUMAN 1986b: Estimation of aquifer parameters under transient and steady-state conditions, 2; Uniqueness, stability, and solution algorithms, Water Resources Research, 22 (2), 211-227

CARRERA, J., S.P. NEUMAN 1986c: Estimation of aquifer parameters under transient and steady-state conditions, 3; Application to synthetic and field data, Water Resources Research, 22 (2), 228-242

CARRERA, J. 1988: State of the art of the inverse problem applied to the flow and solute transport equations, in: E. Custodio et al. (eds), Groundwater flow and quality modelling, 549-583, D. Reidel Publishing Company

CARRERA, J., H. JAVIER 1988: Inverse modeling of Chalk River Block; HYDROCOIN Level 2/ Case 3, Level 3/Case 5A, Nagra Technischer Bericht NTB 88-14, Wettingen

CARRERA, J., S. JAVIER, V. LUIS, U. KUHLMANN 1989: Automatic inverse methods for the analysis of pulse tests: Application to four pulse tests at the Leuggern borehole, Nagra Technischer Bericht NTB 88-34, Wettingen

CARRERA, J., F. NAVARRINA, L. VIVES, J. HEREDIA, A. MEDINA 1990: Computational aspects of the inverse Problem, in: Computational methods in subsurface hydrology, Venedig

CHAVENT, G. 1991: On the theory and practice of non-linear least-squares, Advances in Water Resources, 14 (2), 55-63

CONZETT, R. 1985: Fehlertheorie und Ausgleichsrechnung I, Skript der Vorlesung an der ETH Zürich, Abt. VIII A + B, WS 85/86

DAKE, L.P. 1978: Developments in petroleum science 8: Fundamentals of reservoir engineering, Elsevier, London, New York

DEMOND, A., P. ROBERTS 1991: Effect of interfacial forces on two-phase capillary pressure-saturation relationships, Water Resources Research, 27 (3), 423-437

DRACOS, T. 1987: Hydraulik, Vorlesungsunterlagen, Verlag der Fachvereine, Zürich

FINSTERLE, S. 1989: FLG: Design calculations for a gas test at Grimsel Rock Laboratory, Nagra Interner Bericht NIB 89-62, Wettingen

FINSTERLE, S., E. SCHLUETER, K. PRUESS 1990a: Exploratory simulations of multiphase effects in gas injection and ventilation tests in an underground rock laboratory, NDC-13, LBL-28810

FINSTERLE, S., S. MISHRA, J.-M. LAVANCHY 1990b: Interpretation of selected OBS-1 tests using the two-phase numerical simulator TOUGH, Nagra Interner Bericht NIB 90-25, Wettingen

FINSTERLE, S. 1993: ITOUGH/ITOUGH2 user's guide, Version 1.1, Nagra Interner Bericht NIB 93-59, Wettingen

FINSTERLE, S., S. MISHRA, J.-M. LAVANCHY 1991: Hydrogeologic site characterization under two-phase flow conditions, Paper präsentiert an: NEA Workshop on Gas Generation and Release from Radioactive Waste Repositories, 23-26 September, Aix-en-Provence

FUENTES, C., R. HAVERKAMP, J.Y. PARLANGE, W. BRUTSAERT, K. ZAYANI, G. VACHAUD 1991: Constraints on parameters in three soil-water capillary retention equations, Transport in Porous Media (6), 445-449

GEER, F.C. VAN, C.B.M. TE STROET, Z. YANGXIAO 1991: Using Kalman filtering to improve and quantify the uncertainty of numerical groundwater simulations, Water Resources Research, 27(8), 1987-2006

GELHAR, L.G. 1990: Stochastic subsurface hydrology, Proceedings 11th International Course on Groundwater Management: "Flow and transport in heterogeneous porous and fractured media", ETH Zürich, 12.-6.3.1990

GILL, P.E., W. MURRAY, M.H. WRIGHT 1981: Practical optimization, Academic Press, London

GRANT, M. A. 1977: Permeability reduction factors at Wairakei, Paper 77-HT-52, ASME/AICHE Heat Transfer Conference, Utah

HEINIGER, P., E. WYSS 1988: FRI, Fracture Zone Investigation, Hydraulic testing, SOLEXPERTS AG, Schwerzenbach

HERBERT, A., B. SPLAWSKI 1990: Prediction of Inflow into the D-Holes at the Stripa Mine, Technical Report of the Stripa Project, No. 90-14

HIRSCHFELDER, J.O., C.F. CURTISS, R.B. BIRD 1954: Molecular theory of gases and liquids, John Wiley and Sons, New York

HUTTER, K., J. TRÖSCH 1975: Über die hydromechanischen und thermodynamischen Grundlagen der Seezirkulation, Mitteilung Nr . 20 der Versuchsanstalt für Wasserbau, Hydrologie und Glaziologie an der ETH, Zürich

HYDROCOIN 1990: Groundwater hydrology modelling strategies for performance assessment of nuclear waste disposal, Level 2: Model validation, NEA/OECD/SKI, Paris

INTERNATIONAL ATOMIC ENERGY AGENCY, IAEA 1982: Radioactive waste management glossary, IAEA-TECDOC-264, Wien

INTERNATIONAL FORMULATION COMMITTEE, IFC 1967: A formulation of the thermodynamic properties of ordinary water substance, IFC Secretariat, Düsseldorf

JENNINGS, J.W., D.S. MCGREGOR, R.A. MORSE 1988: Simultaneous determination of capillary pressure and relative permeability by automatic history matching, SPE Formation Evaluation, Juni, 322-328

KALUARACHCHI, J., J.C. PARKER 1987: Effects of hysteresis with air entrapment on water flow in the unsaturated zone, Water Resources Research, 23(19), 1967-1976

KASHYAP, R.L. 1982: Optimal choice of AR and MA parts in autoregressive moving average models, IEEE Trans. Pattern Anal. Mach. Intel., PAMI-4(2), 99-104

KEUSEN, H.R., J. GANGUIN, P. SCHULER, M. BULETTI 1989: Grimsel Test Site: Geology, Nagra Technischer Bericht NTB 87-14E, Wettingen

KOOL, J.B., J.C. PARKER 1987: Development and evaluation of closed-form expressions for hysteretic soil hydraulic properties, Water Resources Research, 23 (1), 105-114

KOOL, J.B., J.C. PARKER 1988: Analysis of the inverse problem for transient unsaturated flow, Water Resources Research, 24 (6), 817-830

KOOL, J.B., J.C. PARKER, M.TH. VAN GENUCHTEN 1987: Parameter estimation for unsaturated flow and transport models - a review, Journal of Hydrology, 91, 255-293

KUHLMANN, W. 1980: Parameterschätzung von Eingleichungsmodellen im unbeschränkten Parameterraum mittels des Levenberg-Marquardt-Verfahrens, Arbeiten zur Angewandten Statistik, Heft 22, Physica Verlag Würzburg

KUHLMANN, U. 1992: Inverse Modellierung in geklüfteten Grundwasserleitern, Dissertation Nr. 9922 der ETH Zürich

LANG, H.-J., HUDER, J. 1985: Bodenmechanik und Grundbau, Springer-Verlag, Berlin, Heidelberg, New York, Tokyo

LENHARD, R. J., J. C. PARKER 1987: Measurement and predicition of saturation-pressure relationships in three phase porous media systems, Journal of Contaminant Hydrology, 1, 407-424

LENHARD, R.J., J.C.PARKER, J.J.KALUARACHCHI 1991: Comparing simulated and experimental hysteretic two-phase transient fluid flow phenomena, Water Resources Research, 27(8), 2113-2124

LEVENBERG, K. 1944: A method for the solution of certain nonlinear problems in least squares, Quart. Appl. Math., 2, 164-168

LEVERETT, M.C. 1941: Capillary behaviour in porous solids, AIME Trans., Vol. 142

LIEB, R.W. 1988: Das Felslabor Grimsel von 1983 bis 1990 - Eine Übersicht, Nagra informiert, Nummer 1+2, Wettingen

LOAICIGA, H.A., M.A. MARIÑO 1987: Parameter estimation in groundwater: Classical, Baysian, and deterministic assumptions and their impact on management policies, Water Resources Research, 23(6), 1027-1035

LOHMAN, S.W. 1972: Ground-Water Hydraulics, U.S. Geological Survey Professional Papaer 708, Government Printing Office, Washington, D.C.

LUCKNER, L., M. TH. VAN GENUCHTEN, D. NIELSEN 1989: A consistent set of parametric models for the two-phase flow of immiscible fluids in the subsurface, Water Resources Research, 25 (10), 2187-2193

MANTOGLOU, A., L.W. GELHAR 1987a: Stochastic modeling of large-scale transient unsaturated flow systems, Water Resources Research, 23 (1), 37-46

MANTOGLOU, A., L.W. GELHAR 1987b: Capillary tension head variance, mean soil moisture content, and effective specific soil moisture capacity of transient unsaturated flow in stratified soils, Water Resources Research, 23 (1), 47-56

MANTOGLOU, A., L.W. GELHAR 1987c: Effective hydraulic conductivities of transient unsaturated flow in stratified soils, Water Resources Research, 23 (1), 57-67

MARQUARDT, D.W. 1963: An algorithm for least squares estimation of nonlinear parameters, SIAM J. Appl. Math., 11, 431-441

MARSILY, G. DE 1986: Quantitative hydrogeology, groundwater hydrology for engineers, Academic Press, Inc., Orlando, Florida

MAURER, W. 1980: Statistik und Wahrscheinlichkeitsrechnung, Skript der Vorlesung 20-012 der ETH Zürich

MISHRA, S., J.C. PARKER 1989: Parameter estimation for coupled unsaturated flow and transport, Water Resources Research, 25 (3), 385-396

MOREL-SEYTOUX, H.J. 1987: Multiphase flows in porous media, Developments in Hydraulic Engineering, Volume 4, Herausgeber: Novak, P., Elsevier, London, New York

MUALEM, Y. 1976a: A new model for predicting the hydraulic conductivity of unsaturated porous media, Water Resources Research, 12 (3), 513-522

MUALEM, Y. 1976b: A new model for predicting the hydraulic conductivity of unsaturated porous media, Water Resources Research, 12 (6), 1248-1254

NARASIMHAN, T. N., P.A. WITHERSPOON 1976: An integrated finite difference method for analyzing fluid flow in porous media, Water Resources Research, 12 (9), 57-64

NEBIKER, S. 1987: Kalman-Filter: Was ist das? Anwendungen in Geodäsie und Vermessung, Geodätisches Seminar II, ETHZ Abt. VIII/B

NEUMAN, S.P. 1973: Calibration of distributed parameter groundwater flow models viewed as a multiple-objective decision process under uncertainty, Water Resources Research, 9 (4), 1006-1021

NEUMAN, S.P. 1980: A statistical approach to the inverse problem of aquifer hydrology, Improved solution method and added perspective, Water Resources Research, 16 (2), 331-346

NORTON, J.P. 1986: An introduction to identification, Academic Press, London

PARKER, J.C., R. LENHARD 1987: A model for hysteresis constitutive relations governing multiphase flow, Water Resources Research, 23 (12), 2187-2196

PEACEMAN, D.W. 1977: Fundamentals of numerical reservoir simulation, Elsevier, Amsterdam, Oxford, New York

PRUESS, K. 1985: A quantitative model of vapor dominated geothermal reservoirs as heat pipes in fractured porous rock, Lawrence Berkeley Laboratory Report LBL-19366, Berkeley

PRUESS, K. 1987: TOUGH user's guide, NUREG/CR-4645, SAND86-7104, LBL-20700, Berkeley

PRUESS, K. 1988: Modeling studies for multiphase fluid and heat flow processes in nuclear waste isolation, Lawrence Berkeley Laboratory Report LBL-25688, Berkeley

PRUESS, K., T.N. NARASIMHAN 1985: A practical method for modeling fluid and heat flow in fractured porous media, Society of Petroleum Engineers Journal, Vol. 25, No. 1, 14-26

PRUESS, K., Y.W. TSANG 1990: On two-phase relative permeability and capillary pressure of rough-walled rock fractures, Water Resources Research, 26 (9), 1915-1926

RAWLS, W., D. BRAKENSIEK 1989: Estimation of soil water retention and hydraulic properties, H.J. Morel-Seytoux (ed.), Unsaturated flow in hydrologic modeling, theory and practice, Kluwer Academic Publishers

RESELE, G., H. ILLI 1991: Modelling of gas release from a nuclear waste repository, Paper präsentiert an: Workshop on Gas Generation and Release from Radioactive Waste Repositories, OECD/NEA, Aix-en-Provence, Frankreich

RUSSO, D., E. BRESLER, U. SHANI, J.C. PARKER 1991: Analyses of infiltration events in relation to determining soil hydraulic properties by inverse problem methodology, Water Resources Research, 27 (6), 1361-1373

SACHER, H.P. 1983: Berücksichtigung von Unsicherheiten bei der Parameterschätzung für mathematisch- numerische Grundwassermodelle, Mitteilungen Institut für Wasserbau und Wasserwirtschaft, Nr. 49, Rheinisch-Westfählische Technische Hochschule Aachen, Aachen

SCALES, L.E. 1985: Introduction to non-linear optimization, Springer-Verlag New York

SCHIEGG, H.O. 1979: Verdrängungs-Simulation dreier nicht mischbarer Fluide in poröser Matrix, Mitteilung Nr . 40 der Versuchsanstalt für Wasserbau, Hydrologie und Glaziologie an der ETH, Zürich

SCHIEGG, H.O. 1980: Grundlagen, Aufbau und Resultate von Laborexperimenten zur Erforschung von Ölausbreitungen in Grundwasserträgern, Mitteilung Nr. 43 der Versuchsanstalt für Wasserbau, Hydrologie und Glaziologie an der ETH, Zürich

SCHLATTER, H.P. 1991: Persönliche Mitteilung, Institut für Baustatik und Konstruktion, ETH Zürich, Bereich Sicherheitsanalyse

SCHNEEBELI, M., H.P. LÄSER, H. WYDLER, H. FLÜHLER 1990: Wasserpotential und Wassergehalt in ungesättigten Graniten des Felslabors Grimsel: Labormessungen, Nagra Interner Bericht NIB 90-20, Wettingen

SCHWEPPE, F.C. 1973: Uncertain dynamic systems, Prentice-Hall, Inc., Englewood Cliffs, New Jersey

SCOTT, P.S., G.J. FARQUHAR, N. KOUWEN 1983: Hysteretic effects on net infiltration, in: Advances in Infiltration, American Society of Agricultural Engineers, Michigan

STAUFFER, F., TH. DRACOS 1984: Local infiltration into layered soil and response of the watertable; experiment and simulations, in: Frontiers in Hydrology, 228-242, Water Resources Publications, Littleton, Colorado

SUN, N.-Z., W.W.-G. YEH 1990: Coupled inverse problems in groundwater modeling, Water Resources Research, 26 (10), 2507-2540

TCHOBANOGLOUS, G., E.D. SCHROEDER 1985: Water quality, Addison-Wesley Publishing Company, Massachusetts

THORSTENSON, D.C., D.W. POLLOCK 1989: Gas transport in unsaturated zones: Multicomponent systems and the adequacy of Fick's law, Water Resources Research, 25 (3), 477-507

VAN GENUCHTEN, M.TH. 1980: A closed form equation for predicting the hydraulic conductivity of unsaturated soils, Soil Sci. Soc. Am. J., 44(5), 892-898

VECCHIA, A.V., R.L. COOLEY 1987: Simultaneous confidence and prediction intervals for nonlinear regression models with application to a groundwater flow model, Water Resources Research, 23 (7), 1237-1250

VINARD, P., J.P. MCCORD 1991: Factors possibly affecting formation static pressure estimates at Wellenberg, Nagra Interner Bericht NIB 91-34, Wettingen

WYSS, E. 1989: FLG: Gas test phase 2, report on field testing and preliminary analysis, Nagra Interner Bericht NIB 89-57, Wettingen

YEH, W.W.-G. 1986: Review of parameter identification procedures in groundwater hydrology: The inverse problem, Water Resources Research, 22 (2), 95-108