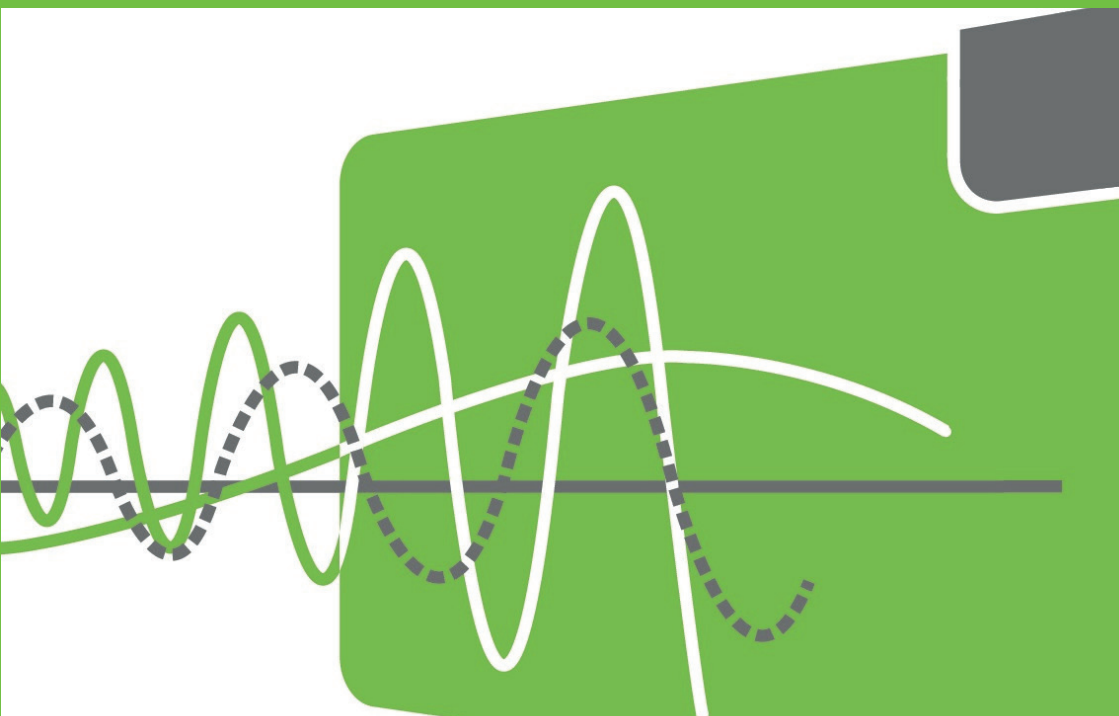


Simulation of contaminant
transport in groundwater:
From pore-scale to large-scale

Seyed Morteza Seyedpour



TECHNISCHE UNIVERSITÄT DORTMUND

Simulation of contaminant transport in groundwater:
From pore-scale to large-scale

von der Fakultät Architektur und Bauingenieurwesen der Technischen Universität
Dortmund zur Verleihung des akademischen Grades Doktor-Ingenieur (Dr.-Ing.)
genehmigte Dissertation

von

M.Sc. Seyed Morteza Seyedpour

Prüfungskommission:

Vorsitz:	Prof. Dr.-Ing. habil. Franz-Joseph Barthold
1. Gutachter:	Prof. Dr.-Ing. Tim Ricken
2. Gutachter:	Prof. Dr.-Ing. Renatus Widmann

Tag der mündlichen Prüfung: 25.08.2020

TU Dortmund
Lehrstuhl Statik und Dynamik
Fakultät Architektur und Bauingenieurwesen
August-Schmidt-Str. 6, 44227 Dortmund

Berichte aus dem Bauwesen

Seyed Morteza Seyedpour

**Simulation of contaminant transport in groundwater:
From pore-scale to large-scale**

D 290 (Diss. Technische Universität Dortmund)

Shaker Verlag
Düren 2021

Bibliographic information published by the Deutsche Nationalbibliothek

The Deutsche Nationalbibliothek lists this publication in the Deutsche Nationalbibliografie; detailed bibliographic data are available in the Internet at <http://dnb.d-nb.de>.

Zugl.: Dortmund, Technische Univ., Diss., 2020

Copyright Shaker Verlag 2021

All rights reserved. No part of this publication may be reproduced, stored in a retrieval system, or transmitted, in any form or by any means, electronic, mechanical, photocopying, recording or otherwise, without the prior permission of the publishers.

Printed in Germany.

ISBN 978-3-8440-8126-8

ISSN 0945-067X

Shaker Verlag GmbH • Am Langen Graben 15a • 52353 Düren

Phone: 0049/2421/99011-0 • Telefax: 0049/2421/99011-9

Internet: www.shaker.de • e-mail: info@shaker.de

Contents

Deutschsprachige Zusammenfassung	xv
Einführung	xv
Motivation	xv
Stand der Forschung	xvii
Gliederung der Arbeit	xviii
 Nomenclature and Abbreviations	 xxi
 1 Introduction	 1
1.1 Introduction	1
1.2 Motivation	1
1.3 Scope and aims	3
1.4 Outline of the thesis	3
 2 Groundwater contamination: Types, Sources and Transport Mechanisms of Contaminants	 7
2.1 Introduction	7
2.2 Types of groundwater contaminations	8
2.3 Sources and causes of groundwater contamination	11

2.3.1	Local wastewater treatment facilities: Septic storage . . .	11
2.3.2	Solid waste landfill	13
2.3.3	Liquid waste disposal: Surface pools	13
2.3.4	Fertilizing the ground with recycled water and treated sewage sludge	15
2.3.5	Reservoirs for chemical substances	15
2.3.6	Pipelines	16
2.3.7	Mining activities	16
2.3.8	Poorly constructed wells, abandoned wells, and injection wells	16
2.4	Site characteristics of aquifers, soils, and rocks	17
2.4.1	Water table and confined aquifers	18
2.5	Mechanisms involved in groundwater contamination: Transport of contaminants	18
2.5.1	Physical processes	20
2.6	Conclusion	24
3	Modeling of Groundwater Flow and Contaminant Transport	25
3.1	Introduction	25
3.2	Contaminant transport through saturated zone	26
3.2.1	Analytical modelling	26
3.2.2	Numerical modelling	29
3.3	Contaminant transport through unsaturated zone	33
3.3.1	Analytical modelling	34
3.3.2	Numerical modelling	34
3.4	Conclusion	38
4	Multiphase flow approach in order to simulate contaminant transport in porous media utilizing the Volume-Of-Fluid method	41

4.1	Introduction	41
4.2	Mathematical model	43
4.2.1	Phase indicator function	43
4.2.2	Mass conservation equation	44
4.2.3	Momentum equilibrium equation	45
4.2.4	Transport of contaminant	47
4.3	Numerical model	48
4.3.1	Volume fraction	49
4.3.2	Global variables	49
4.3.3	Volume-of-fluid formulation	50
4.3.4	Mass conservation	51
4.3.5	Evolution of the volume fraction function	51
4.3.6	Momentum equilibrium	52
4.3.7	Transport of the contaminant	53
4.4	Microfluidics fabrication and coating procedure	55
4.4.1	PDMS chip fabrication	55
4.4.2	Coating PDMS channels with nanoclay	55
4.4.3	SEM imaging	57
4.4.4	ATR-IR Analysis	58
4.5	Micro-PIV measurements	59
4.5.1	Contaminant transport visualisation	62
4.6	Verification of the simulation with the micro-PIV measurements	62
4.7	Comparison of flow patterns between simulation and experiments	63
4.8	Results and discussion	66
4.9	Conclusion	67

5 Optimal remediation design and simulation groundwater flow coupled

to contaminant transport using artificial intelligence (AI) and radial point collocation method (RPCM)	71
5.1 Introduction	71
5.2 Governing equations and boundary conditions	73
5.2.1 Groundwater flow	73
5.2.2 Reactive transport	74
5.3 RPCM formulation	76
5.3.1 Radial basis function interpolation	76
5.3.2 Discretisation of governing equations	79
5.4 Optimal shape parameter and model verification	82
5.4.1 Optimal shape parameters	82
5.4.2 Model verification with the sandbox experiment	88
5.4.3 Numerical model verification with the physical sandbox model	88
5.5 Remediation design optimization using GA	93
5.6 Particle swarm optimisation method in order to optimise the remediation of groundwater contamination through pump and treatment	94
5.7 Results and discussion	96
5.7.1 Case I	96
5.7.2 Case II	99
5.8 Conclusion	101
6 Fundamentals of the Theory of Porous Media with Respect to a Multi-component, Multiphase Model	103
6.1 Introduction	103
6.2 Why is TPM suitable for describing multiphase materials?	104
6.3 Modelling approach of contaminant transport in soil	105
6.3.1 Immiscible constituents	106

6.3.2	Miscible constituents	107
6.4	Kinematics	108
6.4.1	Porous body and motion of superimposed constituents . .	109
6.4.2	Deformation and strain measures	111
6.4.3	Velocity deformation and gradients rates	114
6.5	Balance equations	114
6.5.1	Extended Theory of Porous Media (eTPM)	116
6.5.2	Balance equation of mass	117
6.5.3	Balance equation of momentum	118
6.5.4	Balance equation of moment of momentum	121
6.5.5	Balance equation of energy	123
6.5.6	Entropy inequality	128
6.6	Conclusion	130
7	Contaminant transport in soil: A comparison of the extended Theory of Porous Media approach with the Microfluidic visualisation	131
7.1	Introduction	131
7.2	Assumptions	133
7.3	Field equations and constitutive theory	134
7.4	Evaluation of the entropy inequality	135
7.4.1	Adaption of the entropy inequality	137
7.4.2	The chemical potential as free Helmholtz energy function for contaminant	138
7.4.3	Stresses and interaction forces	139
7.5	Numerical treatment	140
7.6	Stabilized boundary conditions for contaminant	141
7.7	Computational fluid dynamic (CFD) approach	142
7.8	Statistical analysis	142

7.9	Results and discussion	143
7.10	Conclusion	147
8	Modelling contaminant transport in groundwater using coupled extended Theory of porous media and Random Field simulation	149
8.1	Introduction	149
8.2	Verification with sandbox experiment	151
8.2.1	Sandbox experiment	151
8.3	Random field method	154
8.4	Result	157
8.5	Conclusion	162
9	Simulation of contaminant transport through vadose zones	163
9.1	Introduction	163
9.2	Assumptions	165
9.3	Field Equations	166
9.4	Evaluation of Entropy Inequality	167
9.4.1	Evaluation of energy preserving terms	170
9.4.2	Evaluation of dissipation terms	174
9.5	Numerical treatment	176
9.6	Results and Discussion	177
9.6.1	Academic example	178
9.7	Conclusion	180
10	Summary, conclusion and future aspects	185

List of Figures

2.1	Distribution of contaminants affecting groundwater in Europe [Panagos et al., 2013].	10
2.2	Different groundwater contaminations: 1) Pesticides and fertilizers, 2) Deicing road salt, 3) Waste lagoon, 4) Accidental spills, 5) Hazardous waste injection well, 6) Septic tank, 7) Buried gasoline, 8) Sewer, 9) Pumping well, 10) Landfill, 11) Coal strip, 12) Mine runoff, 13) Discharge, 14) Leakage because of faulty casting. . . .	12
2.3	Schematic of contaminant transport from landfill.	14
2.4	a) Open-pit Hambach, largest open pit mine in Germany, Elsdorf, North Rhine-Westphalia. b)-d) Hambach mine has been leaking heavy metals into rivers.	17
2.5	Schematic of confined aquifer.	19
2.6	Main processes involved in contaminant transport in the aquifer. .	20
2.7	Schematic of mechanical dispersion.	23
3.1	Schematic of contaminant transport through the saturated zone. . .	27
3.2	Schematic of contaminant transport through the vadose zone. . . .	33
4.1	Illustration of the porous medium with two immiscible phases. . .	44
4.2	Evolution of the volume of oil $V_o(t)$ in a cell.	45

4.3	Schematic of a triple point soil/oil/water.	47
4.4	Schematic of the concentration profile at the interface, illustration of Henry's law with the jump of concentration.	48
4.5	Illustration of the values of n^α and ∇n^α	50
4.6	Schematic diagram showing PDMS chip fabrication [Seyedpour et al., 2019a].	56
4.7	Schematic illustration PDMS coating with the surface modified HNTs. PDMS substrate was grafted with aminosilane modified HNTs under UV exposure [Seyedpour et al., 2019a].	57
4.8	a) SEM micrographs of the PDMS chip coated by nanoclay after flooding experiment. b) higher magnification (135X) of the surface. Scale bar is 200 μm . c) coated wall is shown with magnification of 1207X. Scale bar is 10 μm [Seyedpour et al., 2019a].	58
4.9	a) SEM micrograph from bottom layer. It was basically a PDMS slab which was bonded to top layer. b) high resolution image confirmed surface coverage by nanoclay. Scale bar is 2 μm [Seyedpour et al., 2019a].	59
4.10	ATR-IR spectra of (a) native PDMS b) grafted PDMS with low concentration of HNTs, and c) highly loaded PDMS surface with HNTs [Seyedpour et al., 2019a].	60
4.11	Drainage of the oil in the water. In the channel, red and black colors represent oil and water, respectively.	63
4.12	Comparison of velocity distributions between micro-PIV measurements and numerical results.	64
4.13	a) and b) Comparison of the experimentally visualized phase distribution patterns with the simulation. In both (a) and (b) Oil is shown in red color, and water is shown in blue in (a) and in black in (b). c) Comparison between trapped water in experiment and simulation.	65
4.14	Pore geometry and boundary conditions in a complex 2D porous medium.	66
4.15	Evolution of the phase indicator function during drainage of water by oil in a complex 2D porous medium.	67

4.16	Evolution of the concentration of contaminant A during drainage of oil by water in a complex 2D porous medium.	68
4.17	a) Evolution of average concentration of contaminant in water and oil, b) Methanol Concentration difference $HC_o - C_w$ and flux per interfacial area.	69
5.1	The aquifer domain and physical setting of the model [Seyedpour et al., 2019b].	74
5.2	Different local support domains used in Meshfree methods [Seyedpour et al., 2019b].	77
5.3	Flowchart for PRCM based coupled groundwater flow and contaminant transport model.	83
5.4	The aquifer domain for the analytical solution [Seyedpour et al., 2019b].	84
5.5	The relative error of concentration for different shape parameter q [Seyedpour et al., 2019b].	86
5.6	Shape parameter effect on the contaminant concentration profile at point (30,7) a) shape parameter α_c b) shape parameter q [Seyedpour et al., 2019b].	87
5.7	Comparison of the MFree and Analytical solutions for two-dimensional transport [Seyedpour et al., 2019b].	88
5.8	Concentration profile at a) (5,4) m $Pe=25$, b) (9,5) m, $Pe=45$. . .	89
5.9	Schematic representation of sandbox experimental setup.	90
5.10	The comparison between observed and MeshFree predicted plume [Seyedpour et al., 2019b].	92
5.11	a) Piezometric head profile and contours, b) contaminant concentration profile, c) oxidant concentration profile [Seyedpour et al., 2019b].	97
5.12	The contaminant concentration profile at observation point located at a) (100,50) m, b) (150,65) m, c) (300,55) m [Seyedpour et al., 2019b].	98

5.13	a) Boundary conditions, nodal arrangement and the location of pumping wells b) head distribution after 10 years (in m) c) concentration distribution after 10 years (in ppm).	100
6.1	A representative element volume of the real structure of soil, an exemplary microscale model with three phases in separated volumes and a homogenised model of superimposed continua.	106
6.2	Motion of soil, water and air particles in vadose zone.	110
7.1	Depiction of stabilized contaminant concentration gradient at the outflow.	142
7.2	Depiction of the applied boundary conditions a) Theory of porous media (eTPM) b) Computational fluid dynamic (CFD) [Seyedpour et al., 2019a].	143
7.3	Normalized a) Pressure field, b) Magnitude of the velocity field, obtained by CFD simulation. The resulting fields are normalized by the highest value [Seyedpour et al., 2019a].	145
7.4	Predicted contaminant concentration a) Computational fluid dynamic (CFD), b) Theory of porous media(eTPM) [Seyedpour et al., 2019a].	146
7.5	The Comparison of measured concentration at observation points to Computational fluid dynamic (CFD) and Theory of porous media (eTPM) predicted concentration, a) Observation point located at (0.4,0.31) mm, b) Observation point located at (1.75,0.33) mm [Seyedpour et al., 2019a].	147
8.1	a) Schematic representation of the physical tank test, b) the 3 constructed layers and the sampling ports on tank.	152
8.2	The comparison between the simulation (right) and experiment (left) for a three-layer physical sandbox. The color bar shows the permanganate concentration.	153
8.3	The comparison between measured and eTPM predicted permanganate a) concentration b) arrival time.	154

8.4	Exponential correlation functions for different scale values Ψ . . .	155
8.5	Density function of the Log-Gaussian distribution with $\hat{\mu} = -17.26$ and $\hat{\sigma} = 0.38$. The probability (hatched area) of permeability values in the interval $[a, b] = [10^{-8}, 10^{-7}]$ amounts to 0.99. . . .	156
8.6	Permeability as realization of the three Log-Gaussian random fields for the three layers (here: a 50 meters section of the modelled ground). The colors represent the realized permeability values (cf. color legend).	158
8.7	The distribution of the contaminant concentration at different region of the aquifer at $t=128$ days.	159
8.8	The distribution of the contaminant concentration in the area located between (85,21) and (90,25) at different times.	160
8.9	Histograms of a) the average contaminant concentration at $t = 140$ days, b) contaminant arrival time for the region located between (100, 15) and (150, 100).	161
9.1	Depiction of the applied boundary conditions and geometry. . . .	180
9.2	a) The change of the groundwater table on the left-hand side of the vadose zone, b) progression of the $ \mathbf{w}_{LS} $ over the time of the right corner of the vadose zone.	181
9.3	Water saturation degree S^L at a) $t = 40$ b) $t = 140$	182
9.4	Contaminant concentration profile.	183

List of Tables

5.1	The parameters values for analytical solution [Seyedpour et al., 2019b].	85
5.2	The characteristics of sand [Seyedpour et al., 2019b].	89
5.3	Comparison of permanganate measured concentration at sampling points to MeshFree predicted concentration [Seyedpour et al., 2019b].	91
5.4	Optimum pumping rates by RPCM-PSO model.	99
7.1	Material parameters and initial values [Seyedpour et al., 2019a]. .	144
7.2	The root mean square error (RMSE) between measured and predicted concentration at two observation points [Seyedpour et al., 2019a].	145
8.1	The characteristics of sand.	151
8.2	Gaussian random field parameters for the three ground layers. . .	157
9.1	Material parameters and initial values.	179

Deutsprachige Einleitung

Einführung

In den letzten Jahrzehnten hat die Kontamination von Böden, und infolgedessen auch des Grundwassers, als bedrohlicher Einfluss auf das Leben von Menschen und anderen Organismen sowie die Nachhaltigkeit in der Landwirtschaft, zunehmend Besorgnis erregt. Die Weltgesundheitsorganisation (WHO) schätzt, dass jeden Tag 14 Menschen an Durchfallerkrankungen sterben, die auf unzureichende Wasser- und Sanitärversorgung sowie mangelnde Hygiene zurückzuführen sind Prüss-Üstün et al. [2016]. Diese Sorge wird durch die wachsende Zahl von kontaminierten Standorten und Kontaminationsquellen [Mondal et al., 2018, Zhao et al., 2016b] in Verbindung mit einem erhöhten weltweiten Wasserbedarf von Haushalten, Industrie und Landwirtschaft verstärkt. Berichten zufolge gibt es allein in Europa mehr als 3.000.000 kontaminierte Standorte, von denen acht Prozent als "hoch kontaminiert" eingestuft werden und dringend sanierungsbedürftig sind [EEA., 2007].

Motivation

Die Verschlechterung der Umweltindikatoren einer Vielzahl von Ökosystemen hat zu einer strengen ökologischen Kontrolle und zu mehr Forschung im Zusammenhang mit dem Verbleib von Schadstoffen in Boden, Luft und Wasser geführt. Fachleute und Regulierungsbehörden sind in der Lage, den Grad und das Niveau der Ausbreitung und der Kontaminationsfähnen zu prognostizieren, was es ihnen ermöglicht, angemessenere vorbeugende oder alternative Maßnahmen zu

fördern. Die Kontamination von Boden und Grundwasser durch Chemikalien hat sich in letzter Zeit zu einem ernsthaften Dilemma entwickelt. Die Chemikalien gelangen durch eine Vielzahl von Prozessen in das Bodensystem, z.B. durch unbeabsichtigte Austritte, durch die Entsorgung von Haus- und Industrieabfällen und durch die Verwendung von landwirtschaftlichen Düngemitteln. Das in einen Grundwasserleiter eingeleitete Grundwasser transportiert diese Schadstoffe und kann die Wasserqualität in benachbarten Brunnen und Bächen verschlechtern. Zunächst ist es wichtig, die verschiedenen Mechanismen zu verstehen, die den Transport von Schadstoffen im Grundwasser steuern, um die Bewirtschaftung und den Schutz der Grundwasserressourcen zu verbessern. Prognosen über den Verbleib von Grundwasserschadstoffen können für die Bewertung der Auswirkungen dieser Chemikalien auf die lokalen Wasserressourcen und für die Beurteilung der Wirksamkeit von Sanierungsmaßnahmen herangezogen werden. Weitere Untersuchungen sind im Bereich der Schadstofftransportmodellierung notwendig, um die nachteilige Langzeitwirkung der Schadstoffe auf die Umwelt zu verhindern. Durch die Erweiterung der mathematischen Modellierung und der experimentellen Untersuchungen, die häufig die Transportmechanismen, die die Schadstoffbahn in der Bodenschicht erhöhen, beanspruchen, entstanden anwendungsorientierte Schadstofftransportmodelle. In der Literatur findet man eine beeindruckende Anzahl von analytischen und numerischen Modellen, sowohl für kurzzeitigen als auch für langfristigen Schadstoffaustritt. Unabhängig vom ermittelten Modell ist eine der bedeutendsten Herausforderungen bei der Simulation des Schadstofftransports die Schwierigkeit bei der Bewertung der signifikanten Faktoren und Koeffizienten, einschließlich der Quellenkonzentration und -abmessungen, der Sickerwassergeschwindigkeit, der Zeit unter Berücksichtigung des anfänglichen Eindringens des Schadstoffs in das Grundwasser und der bis zu drei Dispersionsgrade für ein dreidimensionales Problem [Bear, 2012]. Der Einsatz numerischer Modelle zum Schadstofftransport nimmt rasch zu, da die Messung, Überwachung und Anwendung von Vorhersageansätzen für Schadstoffbahnen unterschiedlicher Größe und Form notwendig ist. Die vorhandenen analytischen Lösungen der Transportgleichung berücksichtigen ein oder zwei dominante Mechanismen, normalerweise in einer einfachen Strömungsdomäne mit einheitlichen Transportfaktoren. Die numerische Simulation des Schadstofftransports hingegen ermöglicht nahezu die Ergebnisse einer Reihe von Kontrollmechanismen und genau diese Methode kann zur Berechnung, die aus Geometrien und Parameterverteilungen bestehen kann, verwendet werden.

Ziel der Arbeit

Der Schadstofftransport im Untergrund wird durch Phänomene auf verschiedenen räumlichen Skalen, von Mikrometern bis hin zu Kilometern, beeinflusst. Die Modellierung auf der Porenskala ist ein präziserer Ansatz zur Simulation des grundlegenden Strömungsverhaltens, großräumige Simulationen erfordern jedoch eine makroskopische Betrachtung. Das Hauptziel dieser Arbeit ist es, Schadstofftransporte im Grundwasser von der Porenskala bis zur Großskala mittels Modellierung zu beschreiben und per Simulation vorherzusagen. Die porenskalige Modellierung des Schadstofftransports im Grundwasser durch den Boden mit Hilfe des Mehrphasenströmungsansatzes wird am häufigsten genannt, um das Verständnis der Strömungs- und Transportphänomene in solchen Umgebungen zu verbessern. Sie kann dazu verwendet werden, makroskalige konstitutive Gleichungen zu erhalten, um Mehrphasenströmungseigenschaften in großskaligen Modellen zuzuordnen, während die großskalige Simulation nützliche Informationen liefert, die Altlastenplanern und Entscheidungsträgern helfen, optimale Sanierungskonzepte zu finden. Um den Schadstofftransport in großem Maßstab zu simulieren, werden zwei verschiedene Ansätze entwickelt, nämlich ein gekoppeltes Grundwasser- und Schadstofftransportmodell und die Theorie poröser Medien. Das gekoppelte Grundwasser- und Schadstofftransportmodell wurde mit der Meshfree-Methode diskretisiert. Darüber hinaus wurde mit Hilfe des Genetischen Algorithmus (GA) und der Partikelschwarmoptimierung (PSO) ein optimiertes Sanierungsdesign für zwei kontaminierte Standorte bestimmt. Unter Verwendung der erweiterten Theorie poröser Medien (eTPM) wird eine kontinuumsmechanische Beschreibung des Schadstofftransports entwickelt. Ein Hauptziel dieser Arbeit ist die Entwicklung einer kontinuumsmechanischen Beschreibung für Verfestigungsvorgänge. Darüber hinaus wird deren Vorbereitung für die numerische Behandlung und die Implementierung im Rahmen der Finite-Elemente-Methode ausführlich erläutert. Um die Unsicherheit der Bodendurchlässigkeit über den Schadstofftransport zu berücksichtigen, wurde darüber hinaus die Random-Field-Methode zur Erfassung dieser Eigenschaft des Bodens eingesetzt. Das vorgestellte Modell wurde schließlich zur Simulation des Schadstofftransports in der ungesättigten Zone entwickelt. Da die Simulationen nur dann zuverlässig sind, wenn ihre Ergebnisse durch Experimente verifiziert wurden, ist das zweite Ziel dieser Arbeit, geeignete Experimente als Benchmarks zu entwerfen.

Gliederung der Arbeit

Das erste Kapitel dieser Arbeit führt den Leser in die Frage ein, warum Ingenieure motiviert sind, sich mit der Simulation des Schadstofftransports im Grundwasser zu beschäftigen und wie ihre Simulation nützliche Daten liefern kann, um Entscheidungsträger und Altlastenplaner zu unterstützen. Das nachfolgende Kapitel 2 beschäftigt sich zunächst mit dem Hintergrund der Kontamination des Grundwassers. Im Anschluss an dieses Kapitel wird eine Einführung in die verschiedenen Schadstoffe und Kontaminationsquellen gegeben. Darüber hinaus wird in Kapitel 2 der Mechanismus des Schadstofftransports beschrieben. Kapitel 3 gibt einen kurzen Überblick über einige Arbeiten zur analytischen und numerischen Modellierung der Grundwasserströmung und des Schadstofftransports durch die gesättigte und ungesättigte Zone. Darüber hinaus gibt dieses Kapitel Informationen über verschiedene Ansätze, die zur Modellierung des Schadstofftransports angewendet werden können. In Kapitel 4 wurde ein mehrphasiger Ansatz entwickelt, um den Schadstofftransport zu modellieren. In diesem Kapitel wird ein numerisches Schema vorgestellt, um den Spezies-Transfer über Fluid-Grenzflächen mit der Volume-Of-Fluid (VOF)-Methode zu simulieren. Um den numerischen Ansatz zu verifizieren, werden die Ergebnisse mit den Ergebnissen des mikrofluidischen Chips, der mit Nanoton beschichtet ist und der zur Nachahmung des Bodenverhaltens entwickelt wurde, verglichen. Rasterelektronenmikroskopische (REM) Aufnahmen und die Analyse des abgeschwächten Totalreflexions-Infrarot (ATR-IR) bestätigten, dass alle Merkmale und Oberflächen mit Nanoclay beschichtet sind. Darüber hinaus wird die Methode der Particle Image Velocimetry (PIV) zur Messung der Momentangeschwindigkeit eingesetzt, um die Dynamik von Zweiphasenströmungen in Mikromodellen zu untersuchen. In Kapitel 5 werden mit Hilfe der Multiquadratischen Radialen Basisfunktion (MRBF) eine gekoppelte Grundwasserströmung und ein reaktiver Transport von Schadstoff und Oxidationsmittel im Rahmen der Meshfree-Methode entwickelt. Die Parameteranalyse hat den optimalen Formparameter (0,97) ermittelt; die Ergebnisse des Modells werden mit einem physikalischen Sandkastenmodell verglichen, mit guter Übereinstimmung. Der Ansatz des genetischen Algorithmus wird verwendet, um die optimale Gestaltung der Sanierung mit Permanganat als Oxidationsmittel zu finden. Um das optimale Design zu finden, werden zwei Ziele und zwei Randbedingungen berücksichtigt. Die Ergebnisse zeigten, dass der Durchbruch der Verunreinigung in den nachgelagerten Interessensbereich und die Konzentration der Verunreinigung in diesem Bereich

mit der Optimierung deutlich reduziert wird. Außerdem wurde die gekoppelte Radialpunkt-Kollokationsmethode mit der Partikelschwarm-Optimierungsmethode auf die Sanierungsplanung eines kontaminierten Grundwasserleiters unter Verwendung der Pump- und Behandlungsmethode angewendet. Das Modell liefert ein effektives Sanierungsdesign der Pumprate für die ausgewählten Brunnen und der Sanierungskosten. In Kapitel 6 wurde die Theorie poröser Medien im Detail erläutert. Dieses Kapitel beginnt mit einer kurzen Einführung in den historischen Hintergrund dieser Theorie. Diese Theorie eignet sich für die makroskopische Beschreibung von Mehrphasen- und Mehrkomponentenmaterialien in Hinblick auf einen kontinuumsmechanisch und thermodynamisch konsistenten Rahmen. Nach der Erläuterung des Konzepts der Volumenanteile und der Mehrphasenkinematik schließt das Kapitel mit der Ableitung der Bilanzgleichungen und der Entropie-Ungleichung. Kapitel 7 beschreibt die Simulation des Transportprozesses im entwickelten mikrofluidischen Chip unter Verwendung der erweiterten Theorie poröser Medien (eTPM) und des in Kapitel 4 beschriebenen CFD-Ansatzes (Computational Fluid Dynamics). Die Ergebnisse beider numerischer Ansätze sind in guter Übereinstimmung mit den Experimenten, jedoch ist der Root Mean Square Error (RMSE) der durch die eTPM vorhergesagten Verunreinigungen an zwei Beobachtungspunkten geringer als der der Computational Fluid Dynamics (CFD). In Kapitel 8 wird der Schadstofftransport im Grundwasser durch mehrschichtige Böden dargestellt. Um die Unsicherheit der modellierten Grundwasserkontamination zu quantifizieren, wird ein Zufallsfeld-Ansatz angewendet. Dazu wird der TPM-Eingangsparameter, der die Durchlässigkeit der Bodenschichten beschreibt, als Realisierung eines Log-Gaußschen Zufallsfeldes unter Berücksichtigung der betrachteten Standorte modelliert. Das Modell wurde mit experimentellen Ergebnissen des Tanktests validiert. In Kapitel 9 wird mit Hilfe der eTPM ein ternäres Modell zur Simulation des Schadstofftransports in der ungesättigte Zone entwickelt. Für die konzeptionelle und numerische Prüfung des Modells wird ein akademisches Beispiel betrachtet und die Simulationsergebnisse vorgestellt. Abschließend werden in Kapitel 10 eine Zusammenfassung und zukünftige Arbeitsvorschläge gegeben, die den vorgestellten Beitrag reflektieren und das Erweiterungspotential des vorgeschlagenen Modells aufzeigen.

Nomenclature and Abbreviations

Although all symbols and abbreviations are explained within the descriptive text, a summary of applied nomenclature and abbreviations is provided for quick look up.

Scalar, vector, and tensor denomination

quantity	example	description
scalar	ρ	small and capital letters/ symbols with and without indices
vector	b	small letters/ symbols in bold face with and without indices
tensor	C_s	capital letters in bold face with and without indices

Placeholder indices

symbol	description
α	boldface index denoting a main phase
α	index for immiscible solvent phases
β	index for miscible solutes
$\alpha\beta$	dual index for solute β solved in phase α

Conventions

quantity	description
$(\cdot)$	given quantities of the external solution
$(\cdot)_\alpha$	kinematic quantity attached to phase α
$(\cdot)^\alpha$	non-kinematic quantity attached to phase α
$\hat{(\cdot)}^\alpha$	supply quantities attached to phase α
$(\cdot)'_\alpha$	first material time derivative following phase α
$(\cdot)''_\alpha$	second material time derivative following phase α
$\dot{(\cdot)}$	total time derivative
$\partial(\cdot)$	partial derivative or surface of the body or boundary of the domain
$B, \partial B$	spatial body and surface of the aggregate
$\delta(\cdot)$	virtual test function
$\text{Grad}_\alpha(\cdot)$	partial derivative of $(\cdot)$ with respect to $\mathbf{X}_\alpha$
$\text{grad}(\cdot)$	partial derivative of $(\cdot)$ with respect to $\mathbf{x}$

List of Symbols

symbol	unit	description
dA, da	m ²	referential, actual area element
dt	s	time increment
dV, dv	m ³	referential, actual volume element
E	N/m ²	Young's modulus
ε	J/kg	specific internal energy
η	J/K kg	specific entropy
J	—	Jacobian determinant
k _D	m ⁴ /Ns	isotropic Darcy permeability
λ	N/m ²	2. Lamé constant for solid phases
m	kg	mass of the considered body or phase
M _{mol}	kg/mol	molar mass
μ	N/m ²	1. Lamé constant for solid phases
ν	—	Poisson's ratio
n ^{α}	—	volume fraction of main phases / phases
φ	—	constituent denominator
ψ	J/kg	Helmholtz free energy
C	mg/L	contaminant and oxidant concentration
h	m	piezometric head
$\tilde{q}$	m/s	aquifer recharge rate
Q _w	m/s	aquifer source or sink term
r	J/kg s	specific heat supply
R	J/mol K	universal gas constant
S		aquifer storage coefficient
α_L		longitudinal dispersivity
α_T		transverse dispersivity
D*		effective molecular diffusion
ρ	kg/m ³	partial density
ρ^R	kg/m ³	real density
θ	°K	absolute temperature
b	m/s ²	external acceleration
dA, da	m ²	oriented referential, actual area element
dX, dx	m	referential, actual line element
f _{st}	N	surface tension force

symbol	unit	description
$\mathbf{n}$	—	unit normal vector
$\mathbf{q}$	$\text{J}/\text{m}^2\text{s}$	heat flux vector
$\mathbf{t}$	N/m^2	surface traction vector
$\mathbf{u}$	m	displacement vector
$\mathbf{w}$	m/s	seepage velocity
$\mathbf{X}$	m	reference position vector
$\mathbf{x}$	m	actual position vector
$\mathbf{A}$	—	Almansi strain tensor
$\mathbf{B}$	—	left Cauchy deformation tensor
$\mathbf{C}$	—	right Cauchy deformation tensor
$\mathbf{D}$	s^{-1}	symmetric deformation velocity tensor
$\hat{\mathbf{D}}$		dispersion coefficient tensor
$\mathbf{D}_{\text{Fick}}$	m^2/s	diffusivity tensor
$\mathbf{E}$	—	Green-Lagrange strain tensor
$\mathbf{F}$	—	deformation gradient
$\mathbf{I}$	—	identity tensor
$\mathbf{K}$	m/s	hydraulic conductivity tensor
$\mathbf{K}_{\text{F}}$	m^4/Ns	intrinsic permeability tensor
$\mathbf{L}$	s^{-1}	deformation velocity tensor
$\mathbf{M}$	—	structural tensor
$\mathbf{P}$	N/m^2	1. Piola-Kirchhoff stress tensor
$\mathbf{T}$	N/m^2	Cauchy stress tensor
$\mathbf{W}$	—	skew-symmetric deformation velocity tensor

Abbreviations

List of abbreviations and acronyms used in this thesis.

expression	description
1D	one dimensional
2D	two dimensional
3D	three dimensional
AI	Artificial intelligence

expression	description
ATR-IR	Attenuated total reflection-Infrared
BaRe	Bayesian recursive estimation
cf.	cofer (Latin: compare)
CFD	Computational fluid dynamics
CI	Confidence interval
CSF	Continuous Surface Force
DNS	Direct Numerical Simulation
e. g.	exempla gratia (Latin: for example)
et al.	et altera (Latin: and others)
eTPM	extended Theory of porous media
FDM	Finite difference method
FE	Finite element
FEAP	Finite Element Analyses Program
FEM	Finite element method
GA	Genetic algorithm
GLUE	Generalised likelihood uncertainty estimation
HFE	Hermitian finite element
LFEM	Linear Finite Element Method
LS	LevelSet
LP	Linear programming
MCMC	Markov Chain Monte Carlo
MRBF	Multiquadratic Radial Basis Function
MOO	Multi-objective optimisation
NLP	Nonlinear pro-programming
NSE	Navier-Stokes Equation
PFM	Phase-Field Model
PIV	Particle Image Velocimetry
PSO	Particle swarm optimization
QP	Quadratic programming
RBF	Radial basis functions
RPCM	Radial point collocation method
RMSE	Root Mean Square Error
RVE	Representative volume element
SEMS	Scanning electron microscopy
TPM	Theory of Porous Media

expression	description
VOF	Volume-Of-Fluid
WHO	World Health Organization