

압축성을 고려한 분율 흐름 접근 방식에 근거한 삼상흐름모델 개발

석희준¹ · 고경석^{1*} · Gour-Tsyh Yeh²

¹한국지질자원연구원, ²University of Central Florida

Development of Compressible Three Phases Flow Simulator Based on Fractional Flow Approach

Heejun Suk¹, Kyung-Seok Ko^{1*} and Gour-Tsyh Yeh²

¹Korea Institute of Geoscience and Mineral Resources

²University of Central Florida

Most multiphase flow simulators following fractional flow approach assume incompressibility of fluid and matrix or consider only two phase flow (water and air, water and NAPL). However, in this study, mathematical governing equations were developed for fully compressible three-phase flow using fractional flow based approach. Also, fully compressible multiphase flow simulator (CMPS) considering compressibilities of matrix and fluid was developed using the mathematical governing equations. In order to verify CMPS, the CMPS were compared with analytical solution and the existing multiphase flow simulator, MPS, which had been developed for simulating incompressible multiphase flow (Suk and Yeh 2007; Suk and Yeh 2008). According to the results, solutions of CMPS and MPS and analytical solutions are well matched each other. Thus, it is found that CMPS has the capability of simulating compressible three phase flow phenomena assuming compressibilities of fluids and matrix.

Key words : multiphase flow simulator, fractional flow approach, incompressibility of fluid and matrix, compressibility of fluid and matrix

대부분의 분율 흐름 접근 방식을 따르는 다상흐름모델들은 주로 유체나 매질의 비압축성을 가정하거나 완전한 삼상 오염물을 다루지 않고 이상 유체 (물 또는 공기, 물 또는 불용용성유체)의 거동만을 다룬다. 그러나 본 연구에서는 유체 및 매질의 압축성과 완전한 삼상 오염물을 가정하는, 분율흐름접근방식을 따르는 수학적 지배방정식을 개발하고, 이를 토대로 압축성 유체 및 매질을 고려한 삼상흐름 수치모의프로그램을 개발하였다. 개발된 삼상흐름 수치모의프로그램 (Compressible Multiphase Flow Simulator, CMPS)을 검증하기 위해서 기존에 개발된 비압축성 유체 및 매질을 고려한 삼상흐름수치모의 프로그램인 MPS (Suk and Yeh, 2007; Suk and Yeh, 2008) 및 해석해를 통해서 간접적으로 비교 검증하였다. 비교결과 CMPS와 MPS의 결과와 해석해들은 서로 잘 일치하였다. 따라서 CMPS는 압축성 유체 및 매질을 고려한 삼상흐름 수치모의를 구현 할 수 있는 가능성을 가진다.

주제어 : 다상흐름모델, 분율흐름 접근방식, 비압축성 유체 및 매질, 압축성 유체 및 매질

1. 서 론

최근에 산업의 발달로 다양한 유기용제 및 화학물질들이 개발되고 부적절한 관리에 의해서 종종 지하수가 오염되고 있다. 이러한 오염물질은 물에 잘 녹지 않고 별개의 상으로 존재하여 이동하므로 단순히 단상오염

거동 지하수 수치모의 프로그램으로서 이를 해석하기는 어렵다. 또한 오염물 복원 설계 시, 증기주입법, 열주입법, surfactant 주입법 등이 사용되는데, 이런 경우 오염물질의 이동은 점성과 밀도의 변화에 따라서 변하기 때문에 압축성 유체 및 매질을 고려할 수 있는 다상흐름 수치모의 프로그램이 필요하다. 따라서 최근에

*Corresponding author: kyungsok@kigam.re.kr

는 다양한 다상오염물거동 흐름 모델들이 개발되었고 일부는 상용화되기도 하였으나 현실에서 일어나는 다양한 다상오염물 거동 현상을 모사하기에는 적합하지 않은 점도 있다. 대부분이 압력기저접근방식을 갖고 개발된 프로그램들(Pinder and Abriola 1986; Kaluarachchi and Parker 1989; Sleep and Sykes 1989; Kueper and Frind 1991a, b; Celia and Binning 1992; White and Oostrom 1995; Bradford *et al.* 1998; Bastian and Helmig 1999; Dekker and Abriola 2000)이므로 다양한 수치적 어려움을 내재하고 있다 (Class *et al.* 2002; Suk and Yeh, 2007; Suk and Yeh, 2008). 이러한 수치적 어려움을 극복하기 위해서 최근에는 분율흐름 접근 방식을 따르는 다상흐름거동 수치 모델이 개발되고 있는 추세이다(Guarnaccia and Pinder 1997; Spivak *et al.* 1977; Binning and Celia 1999; Chen *et al.* 2000; Gallo and Manzini 2001; Wendland and Flensburg 2002; Suk and Yeh, 2007, Suk and Yeh, 2008). 그러나 분율접근방식을 따르는 다상흐름거동 수치모델은 지하수 분야에서 자주 쓰이는 개개의 상의 경계조건이나 초기조건을 정의하기 어렵다. 왜냐하면 지하수 분야에서 경계조건은 주로 각 상의 압력이나 유량을 경계면에서 지정하나, 분율 흐름 접근 방식에서는 이런 경계 값들을 직접 수치계산식에 적용하기가 어렵기 때문이다. 따라서 이러한 한계를 극복하고자 하는 노력이 있었다(Binning and Celia 1999). 그러나 대부분의 분율 흐름 접근 방식을 따르는 다상흐름모델들은 주로 유체나 매질의 비압축성을 가정하거나 완전한 삼상 오염물을 다루지 않고 이상 오염물(물 또는 공기, 물 또는 불용용성유체)만을 다룬다(Binning and Celia 1999; Pope *et al.*, 1999; Chen *et al.* 2000; Jackson *et al.* 2006; Hoteit and Firoozabadi 2008a; Hoteit and Firoozabadi 2008b).

본 연구의 목적은 유체 및 매질의 압축성과 완전한 삼상 오염물을 가정하는 분율흐름접근방식을 따르는 수학적 지배방정식을 유도하고, 이를 토대로 압축성 유체 및 매질을 고려한 삼상흐름 수치모의프로그램을 개발하고자 한다. 개발된 삼상흐름 수치모의프로그램(Compressible Multiphase Flow Simulator, CMPS)을 검증하기 위해서 기존에 개발된 비압축성 유체 및 매질을 고려한 삼상흐름수치모의 프로그램인 MPS(Suk and Yeh, 2007; Suk and Yeh, 2008)와 해석해를 통해서 간접적으로 비교 검증하였다.

2. 지배방정식 전개

본 연구를 통해서 개발된 삼상흐름모델의 지배방정식은 분율흐름접근방식을 따르고 있으므로, 크게 압력방정식과 포화방정식으로 나눌 수 있다. 압력방정식은 일차변수로서 전역압력을 사용하고, 포화방정식은 몰포화도와 총유체포화도를 일차변수로 사용한다. 이 장에서는 하나의 압력방정식과 두개의 포화방정식들을 각각 유도하고 전개하는 과정을 나타내고자 한다.

2.1. 삼상 유체에서 압력방정식 전개

매질에서 삼상에 대한 흐름 방정식은 각상의 질량보존 법칙과 다알시 법칙에 의해 정의된다. 아래의 식은 각각의 삼상에 대한 질량보존법칙과 다알시 식을 나타낸다.

$$\frac{\partial \rho_i \phi S_i}{\partial t} + \nabla \cdot (M_i) = Q_i, \quad i = 1, 2, 3 \quad (1)$$

여기서

$$M_i = \rho_i V_i \quad (2)$$

$$V_i = -\frac{k_{r,i} k}{\mu_i} (\nabla p_i + \rho_i g \nabla z), \quad i = 1, 2, 3 \quad (3)$$

여기서 ρ_i 는 i 번째 상의 밀도 [M/L^3]를, 아래첨자 i 는 유체의 상을 표시하며, $i = 1$ 은 물, $i = 2$ 는 불용용성 유체, $i = 3$ 은 공기를 의미한다. ϕ 는 매질의 공극률 [무차원]을, S_i 는 i 번째 상의 포화도 [무차원]를, t 는 시간 [T]를, M_i 는 i 번째 상의 질량유속 벡터 [$M/(L^2T)$]를, Q_i 는 i 번째 상의 생성/소멸 질량 [$M/(L^3T)$]를, V_i 는 i 번째 상의 용적유속 벡터 [L/T]를, $k_{r,i}$ 는 i 번째 상의 상대 투수계수 [무차원]를, k 는 고유 투수계수 텐서 [L^2]를, μ_i 는 i 번째 상의 역학 점성도 [$M/(LT)$]를, p_i 는 i 번째 상의 압력 [$M/(LT^2)$]를, g 는 중력가속도 [L/T^2]를, z 는 고도 [L]를 의미한다. 여기서 각 상의 상대투수 $k_{r,1}$, $k_{r,2}$, $k_{r,3}$ 는 Parker 모델 (Parker *et al.*, 1987)에서와 같이 van Genuchten 모델을 이용하였으며,

$$k_{r,1} = \bar{S}_1^{\frac{1}{2}} \left[1 - \left(1 - \bar{S}_1^m \right)^{\frac{m}{2}} \right] \quad (4)$$

$$k_{r,2} = (\bar{S}_1 - \bar{S}_1) \left[\left(1 - \bar{S}_1^m \right)^{\frac{m}{2}} - \left(1 - \bar{S}_1^m \right)^{\frac{m}{2}} \right] \quad (5)$$

$$k_{r3} = (1 - \bar{S}_1)^{\frac{1}{2}} (1 - \bar{S}_1^m)^{2m} \quad (6)$$

또한 모세압력과 포화도의 관계는 Parker 모델 (Parker *et al.*, 1987)을 이용하였다.

$$\bar{S}_1 = [1 + (\alpha_{21} h_{21})^n]^{-m} \text{ if } h_{21} > 0 \quad (7)$$

$$\bar{S}_1 = 1 \text{ if } h_{21} \leq 0 \quad (8)$$

$$\bar{S}_1 = [1 + (\alpha_{32} h_{32})^n]^{-m} \text{ if } h_{32} > 0 \quad (9)$$

$$\bar{S}_1 = 1 \text{ if } h_{32} \leq 0 \quad (10)$$

여기서 n, m, α_{ij} 는 van Genuchten 상수들이고, h_{21} 과 h_{32} 는 각각 불용융성유체-물과 공기-불용융성유체의 모세수두 [cm]이다. \bar{S}_1 와 \bar{S}_2 는 각각 물과 총액상의 포화도이고, 다음과 같이 정의된다. $\bar{S}_1 = \frac{S_1 - S_{1r}}{1 - S_{1r}}$, $\bar{S}_2 = \frac{S_2 + S_2 - S_{2r}}{1 - S_{2r}}$, S_{2r} 는 물의 최소포화도이다.

세 가지 상의 질량흐름을 합한 전체 질량 흐름 유속, M_i [$M/(L^2T)$]는 다음과 같이 정의된다.

$$M_i = \rho_1 V_1 + \rho_2 V_2 + \rho_3 V_3 \quad (11)$$

식 (2)와 식 (3)을 이용하면 식 (11)은 다음과 같이 쓸 수 있다.

$$M_i = - \sum_{i=1}^3 \rho_i \frac{k_{ri} k}{\mu_i} (\nabla p_i + \rho_i g \nabla z) \quad (12)$$

여기서 총유동율, $\kappa[T]$ 은 다음과 같이 정의한다.

$$\kappa = \sum_{i=1}^3 k \left(\rho_i \frac{k_{ri}}{\mu_i} \right) \quad (13)$$

그리고 i 번째 상에 대한 분율 유동을 κ_i [무차원]는 다음과 같다.

$$\kappa_i = \frac{\rho_i \frac{k_{ri}}{\mu_i}}{\sum_{j=1}^3 \rho_j \frac{k_{rj}}{\mu_j}} \quad (14)$$

식 (13)과 (14)를 식 (12)에 대입하여 정리하면 다음과 같다.

$$M_i = -\kappa \left[\frac{1}{3} \nabla (p_1 + p_2 + p_3) + \left(\frac{\kappa_1 - \kappa_2}{3} \right) \nabla (p_1 - p_2) \right] - \kappa \left[\left(\frac{\kappa_2 - \kappa_3}{3} \right) \nabla (p_2 - p_3) + \left(\frac{\kappa_3 - \kappa_1}{3} \right) \nabla (p_3 - p_1) \right] - \kappa \bar{\rho} g \nabla z \quad (15)$$

여기서 가중액상밀도, $\bar{\rho}$ [M/L^3]는 다음과 같다.

$$\bar{\rho} = \kappa_1 \rho_1 + \kappa_2 \rho_2 + \kappa_3 \rho_3 \quad (16)$$

그리고 삼상의 분율 유동에는 다음과 같은 관계가 성립한다.

$$\kappa_1 + \kappa_2 + \kappa_3 = 1 \quad (17)$$

전역압력 P_i [$M/(LT^2)$]를 다음과 같이 정의한 후,

$$P_i = \frac{p_1 + p_2 + p_3}{3} + \frac{1}{3} \left(\int_0^{(p_1 - p_2)} (\kappa_1 - \kappa_2) d\eta + \int_0^{(p_2 - p_3)} (\kappa_2 - \kappa_3) d\eta + \int_0^{(p_3 - p_1)} (\kappa_3 - \kappa_1) d\eta \right) \quad (18)$$

식 (18)을 식(15)에 대입하면, 전체 질량 흐름 유속, M_i 은 전역압력, P_i 의 함수로 나타낼 수 있다.

$$M_i = -\kappa (\nabla P_i + \bar{\rho} g \nabla z) \quad (19)$$

식 (1)의 세 개의 상에 대한 흐름 방정식을 모두 더한 후, 식 (1)에 (19)를 대입하면, 식 (20)이 된다.

$$\sum_{i=1}^3 \left(\frac{\partial \phi \rho_i S_i}{\partial t} \right) + \nabla \cdot [-\kappa (\nabla P_i + \bar{\rho} g \nabla z)] = Q_i \quad (20)$$

여기서 $Q_i = \sum_{i=1}^3 Q_i$ 이다. 식 (20)을 매질의 공극과 각

각의 유체 상에 대한 시간의존 함수형태를 압력의존 함수형태로 바꾸면 다음과 같다.

$$(S_1 \rho_1 + S_2 \rho_2 + S_3 \rho_3) \frac{\partial \phi}{\partial p_i} \frac{\partial P_i}{\partial t} + \phi \left(S_1 \frac{\partial \rho_1}{\partial p_1} \frac{\partial p_1}{\partial t} + S_2 \frac{\partial \rho_2}{\partial p_2} \frac{\partial p_2}{\partial t} + S_3 \frac{\partial \rho_3}{\partial p_3} \frac{\partial p_3}{\partial t} \right) + \phi \left(\rho_1 \frac{\partial S_1}{\partial t} + \rho_2 \frac{\partial S_2}{\partial t} + \rho_3 \frac{\partial S_3}{\partial t} \right) - \nabla \cdot \kappa (\nabla P_i + \bar{\rho} g \nabla z) = Q_i \quad (21)$$

식 (21)을 일차변수 P_i, S_1 , 그리고 S_i 의 함수로 나

타내기 위해서 $\frac{\partial p_1}{\partial t}$, $\frac{\partial p_2}{\partial t}$, 그리고 $\frac{\partial p_3}{\partial t}$ 을 $\frac{\partial P_i}{\partial t}$ 의 합수로 변화시키면 다음과 같다.

$$\frac{\partial p_1}{\partial t} = \frac{\partial P_i}{\partial t} \hat{f}(S_1, S_i) \quad (22)$$

$$\frac{\partial p_2}{\partial t} = \frac{\partial P_i}{\partial t} \hat{g}(S_1, S_i) \quad (23)$$

$$\frac{\partial p_3}{\partial t} = \frac{\partial P_i}{\partial t} \hat{h}(S_1, S_i) \quad (24)$$

여기서 $\hat{f}(S_1, S_i)$, $\hat{g}(S_1, S_i)$, 그리고 $\hat{h}(S_1, S_i)$ 는 아래와 같다.

$$\hat{f}(S_1, S_i) = \frac{dp_{c12}}{\partial S_1} \frac{\partial S_1}{\partial t} (\kappa_1 - 1) - \frac{dp_{c23}}{\partial S_i} \frac{\partial S_i}{\partial t} \kappa_3 \quad (25)$$

$$\hat{g}(S_1, S_i) = \frac{dp_{c12}}{\partial S_1} \frac{\partial S_1}{\partial t} \kappa_1 - \frac{dp_{c23}}{\partial S_i} \frac{\partial S_i}{\partial t} \kappa_3 \quad (26)$$

$$\hat{h}(S_1, S_i) = \frac{dp_{c12}}{\partial S_1} \frac{\partial S_1}{\partial t} \kappa_1 + \frac{dp_{c23}}{\partial S_i} \frac{\partial S_i}{\partial t} (1 - \kappa_3) \quad (27)$$

$\frac{dp_i}{\partial t}$ 와 $\frac{dp_i}{\partial t}$ 의 관계에 대한 자세한 유도는 부록 A에 나타나 있다. 식 (21)에 식 (22)-(27)을 대입하고 재배열하면 식 (21)은 다음과 같다.

$$\begin{aligned} & \phi S_1 \frac{\partial \rho_1}{\partial p_1} \left(\frac{\partial P_i}{\partial t} - (\kappa_1 - 1) \frac{dp_{c12}}{\partial S_1} \frac{\partial S_1}{\partial t} + \kappa_3 \frac{dp_{c23}}{\partial S_i} \frac{\partial S_i}{\partial t} \right) \\ & + \phi S_2 \frac{\partial \rho_2}{\partial p_2} \left(\frac{\partial P_i}{\partial t} - \kappa_1 \frac{dp_{c12}}{\partial S_1} \frac{\partial S_1}{\partial t} + \kappa_3 \frac{dp_{c23}}{\partial S_i} \frac{\partial S_i}{\partial t} \right) \\ & + \phi S_3 \frac{\partial \rho_3}{\partial p_3} \left(\frac{\partial P_i}{\partial t} - \kappa_1 \frac{dp_{c12}}{\partial S_1} \frac{\partial S_1}{\partial t} - (1 - \kappa_3) \frac{dp_{c23}}{\partial S_i} \frac{\partial S_i}{\partial t} \right) \\ & + \phi \left(\rho_1 \frac{\partial S_1}{\partial t} + \rho_2 \frac{\partial S_2}{\partial t} + \rho_3 \frac{\partial S_3}{\partial t} \right) \\ & + \hat{\rho} \frac{\partial \phi \partial P_i}{\partial P_i \partial t} - \nabla \cdot \kappa (\nabla P_i + \bar{\rho} g \nabla z) = Q_i \quad (28) \end{aligned}$$

여기서 포화도가중액상밀도, $\hat{\rho}$ [ML^3]는 다음과 같다.

$$\hat{\rho} = S_1 \rho_1 + S_2 \rho_2 + S_3 \rho_3 \quad (29)$$

여기서 ρ_1 , ρ_2 , ρ_3 는 다음과 같이 각 상의 압력 p_1 , p_2 , p_3 에 의해 정의되고, 매질 공극률, ϕ 는 전역압력, P_i 에 의해 정의된다.

$$\rho_1 = \sum_j \omega_j [\rho_{1j}^0 (1 + \beta_w p_1 - \alpha_w T)] \quad (30)$$

$$\rho_2 = \sum_j \omega_j [\rho_{2j}^0 (1 + \beta_{Nj} p_2 - \alpha_{Nj} T)] \quad (31)$$

$$\rho_3 = \frac{P_3}{RT} \sum_j \omega_j M_j \quad (32)$$

$$\phi = 1 - (1 - \phi^0) e^{-\alpha(P_i - P_i^0)} \quad (33)$$

여기서 w_{ij} 는 i 번째 상에서 j 번째 구성물질의 몰분율, ρ_j^0 은 i 번째 상에서 j 번째 구성물질의 표준 밀도 [ML^3], α_w 는 물의 온도 팽창 계수, β_w 는 물의 압력 압축계수 [$(LT^2)/M$], α_{Nj} 는 NAPL에서 j 번째 구성물질의 온도 팽창 계수, β_{Nj} 는 NAPL에서 j 번째 구성물질의 압력 압축계수 [$(LT^2)/M$], T 는 온도 [$^{\circ}C$ or $^{\circ}K$], R 은 이상기체상수, M_j 는 가스 상에서 구성물질 j 의 몰 질량이다. 또한 ϕ^0 는 매질의 표준 공극률, α 는 포화대에서 매질의 압력 압축계수 [$(LT^2)/M$], P_i^0 는 표준 전역 압력 [M/LT^2]이다.

식 (30)-(33)과 $S_i = S_1 + S_2$, $S_1 + S_2 + S_3 = 1$ 를 이용하면, 식 (28)은 일차변수 S_1 , S_2 , P_i 에 대해 다음과 같이 정리할 수 있다.

$$c_{p_i} \frac{\partial P_i}{\partial t} + c_{s1} \frac{\partial S_1}{\partial t} + c_{s2} \frac{\partial S_2}{\partial t} - \nabla \cdot \kappa (\nabla P_i + \bar{\rho} g \nabla z) = Q_i \quad (34)$$

여기서

$$\begin{aligned} c_{s1} = & \{ \phi S_1 [\kappa_1 \sum_j \omega_j \rho_{2j}^0 \beta_{Nj} + (1 - \kappa_1) \sum_j \omega_j \rho_{1j}^0 \beta_w] \\ & + \phi S_2 \kappa_1 \left[\frac{1}{RT} \sum_j \omega_j M_j - \sum_j \omega_j \rho_{2j}^0 \beta_{Nj} \right] - \phi \frac{\kappa_1}{RT} \sum_j \omega_j M_j \} \frac{dp_{c12}}{\partial S_1} \\ & + \phi (\rho_1 - \rho_2) \quad (35) \end{aligned}$$

$$\begin{aligned} c_{s2} = & \{ \phi S_1 \kappa_3 [\sum_j \omega_j \rho_{1j}^0 \beta_w - \sum_j \omega_j \rho_{2j}^0 \beta_{Nj}] \\ & + \phi S_2 \left[(1 - \kappa_3) \frac{1}{RT} \sum_j \omega_j M_j + \kappa_3 \sum_j \omega_j \rho_{2j}^0 \beta_{Nj} \right] \\ & - \phi \frac{(1 - \kappa_3)}{RT} \sum_j \omega_j M_j \} \frac{dp_{c23}}{\partial S_i} + \phi (\rho_2 - \rho_3) \quad (36) \end{aligned}$$

$$\begin{aligned} c_{p_i} = & \phi \{ S_1 [\sum_j \omega_j \rho_{1j}^0 \beta_w - \sum_j \omega_j \rho_{2j}^0 \beta_{Nj}] + S_2 [\sum_j \omega_j \rho_{2j}^0 \beta_{Nj} - \frac{1}{RT} \sum_j \omega_j M_j] \\ & + \frac{1}{RT} \sum_j \omega_j M_j \} + \hat{\rho} \left[(1 - \phi^0) \alpha e^{-\alpha(P_i - P_i^0)} \right] \quad (37) \end{aligned}$$

식 (37)의 c_{p_i} 는 총압축계수이고, 서브항인 $\hat{\rho}[(1 - \phi^0) \alpha e^{-\alpha(P_i - P_i^0)}]$ 는 매질의 압축계수이다. 그리고 나머지 항들은 모두 다상유체의 압축계수를 나타낸다. 그리고 c_{s1}

과 c_{st} 는 각각 물포화도와 총유체포화도에 의한 다상 유체 용량들이다.

2.2. 삼상 유체에서 포화방정식 전개

삼상 유체의 거동을 완전히 나타내기 위해서는 두개의 포화방정식이 필요하다. 이를 나타내기 위해서 각각의 질량유속을 다음과 같이 나타낼 수 있다.

$$M_1 = \kappa_1 M_i - \kappa_1 \kappa (\kappa_2 \nabla P_{c12} + \kappa_3 \nabla P_{c13}) - \kappa_1 \kappa (\rho_1 - \bar{\rho}) g \nabla z \quad (38)$$

$$M_2 = \kappa_2 M_i - \kappa_2 \kappa (\kappa_1 \nabla P_{c21} + \kappa_3 \nabla P_{c23}) - \kappa_2 \kappa (\rho_2 - \bar{\rho}) g \nabla z \quad (39)$$

$$M_3 = \kappa_3 M_i - \kappa_3 \kappa (\kappa_1 \nabla P_{c31} + \kappa_2 \nabla P_{c32}) - \kappa_3 \kappa (\rho_3 - \bar{\rho}) g \nabla z \quad (40)$$

식 (38)-(40)의 유도과정은 부록 B에 나타나 있다. 식(38)을 식(1)의 식에 대입하고, $\nabla \cdot M_i$ 에 대해 식 (34)를 대입하면, 식 (1)은 다음과 같이 쓸 수 있다.

$$\begin{aligned} \frac{\partial(\rho_1 \phi S_1)}{\partial t} + M_i \cdot \nabla \kappa_1 = & -\kappa_1 \left(Q_i - c_{pi} \frac{\partial P_i}{\partial t} - c_{s1} \frac{\partial S_1}{\partial t} - c_{st} \frac{\partial S_i}{\partial t} \right) \\ & + \nabla \cdot \kappa \kappa_1 [\kappa_2 \nabla p_{c12} + \kappa_3 \nabla p_{c13} + (\rho_1 - \bar{\rho}) g \nabla z] + Q_1 \quad (41) \end{aligned}$$

비슷한 방식으로 다른 두개의 상에 대한 식도 아래와 같이 각각 쓸 수 있다.

$$\begin{aligned} \frac{\partial(\rho_2 \phi S_2)}{\partial t} + M_i \cdot \nabla \kappa_2 = & -\kappa_2 \left(Q_i - c_{pi} \frac{\partial P_i}{\partial t} - c_{s1} \frac{\partial S_1}{\partial t} - c_{st} \frac{\partial S_i}{\partial t} \right) \\ & + \nabla \cdot \kappa \kappa_2 [\kappa_1 \nabla p_{c21} + \kappa_3 \nabla p_{c23} + (\rho_2 - \bar{\rho}) g \nabla z] + Q_2 \quad (42) \end{aligned}$$

$$\begin{aligned} \frac{\partial(\rho_3 \phi S_3)}{\partial t} + M_i \cdot \nabla \kappa_3 = & -\kappa_3 \left(Q_i - c_{pi} \frac{\partial P_i}{\partial t} - c_{s1} \frac{\partial S_1}{\partial t} - c_{st} \frac{\partial S_i}{\partial t} \right) \\ & + \nabla \cdot \kappa \kappa_3 [\kappa_2 \nabla p_{c32} + \kappa_1 \nabla p_{c31} + (\rho_3 - \bar{\rho}) g \nabla z] + Q_3 \quad (43) \end{aligned}$$

여기서 $S_3 = 1 - S_1 - S_2$ 이므로, 체인법칙을 적용하고, 친수성 정도가 물, NAPL, 공기 순서이고, $p_{c13} = p_{c12}(S_1) + p_{c23}(S_2)$ 를 가정하고, 식 (17)을 이용하면, 지배 방정식은 다음과 같이 간략화 될 수 있다.

$$\begin{aligned} \frac{\partial(\rho_1 \phi S_1)}{\partial t} + M_i \cdot \frac{\partial \kappa_1}{\partial S_1} \nabla S_1 + M_i \cdot \frac{\partial \kappa_1}{\partial S_i} \nabla S_i = & -\kappa_1 \left(Q_i - c_{pi} \frac{\partial P_i}{\partial t} - c_{s1} \frac{\partial S_1}{\partial t} - c_{st} \frac{\partial S_i}{\partial t} \right) \\ & + \nabla \cdot \kappa \kappa_1 [(1 - \kappa_1) \frac{dp_{c12}}{dS_1} \nabla S_1 + \kappa_3 \frac{dp_{c23}}{dS_1} \nabla S_1 + (\rho_1 - \bar{\rho}) g \nabla z] + Q_1 \quad (44) \end{aligned}$$

$$\frac{\partial(\rho_2 \phi)}{\partial t} - \frac{\partial(\rho_2 \phi S_2)}{\partial t} + M_i \cdot \frac{\partial \kappa_2}{\partial S_1} \nabla S_1 + M_i \cdot \frac{\partial \kappa_2}{\partial S_i} \nabla S_i$$

$$\begin{aligned} = & -\kappa_2 \left(Q_i - c_{pi} \frac{\partial P_i}{\partial t} - c_{s1} \frac{\partial S_1}{\partial t} - c_{st} \frac{\partial S_i}{\partial t} \right) \\ & + \nabla \cdot \kappa \kappa_2 [(1 - \kappa_2) \frac{dp_{c23}}{dS_1} \nabla S_1 + \kappa_1 \frac{dp_{c21}}{dS_1} \nabla S_1 + (\rho_2 - \bar{\rho}) g \nabla z] + Q_2 \quad (45) \end{aligned}$$

식 (44)와 (45)에서 일차주요변수를 S_1 과 S_2 로 정하면, 식 (44)와 (45)는 각각 식 (46)과 (47)로 나타낼 수 있다.

$$\begin{aligned} (\rho_1 \phi - \kappa_1 c_{s1}) \frac{\partial S_1}{\partial t} - \kappa_1 c_{st} \frac{\partial S_i}{\partial t} + \left(\rho_1 \frac{\partial \phi \partial P_i}{\partial P_i \partial t} + \phi \frac{\partial \rho_1 \partial p_i \partial P_i}{\partial p_i \partial P_i \partial t} \right) S_1 \\ + M_i \cdot \frac{\partial \kappa_1}{\partial S_1} \nabla S_1 + M_i \cdot \frac{\partial \kappa_1}{\partial S_i} \nabla S_i = & -\kappa_1 \left(Q_i - c_{pi} \frac{\partial P_i}{\partial t} \right) \\ & + \nabla \cdot \kappa \kappa_1 [(1 - \kappa_1) \frac{dp_{c12}}{dS_1} \nabla S_1 + \kappa_3 \frac{dp_{c23}}{dS_1} \nabla S_1 + (\rho_1 - \bar{\rho}) g \nabla z] + Q_1 \quad (46) \end{aligned}$$

$$\begin{aligned} -(\rho_2 \phi + \kappa_2 c_{s2}) \frac{\partial S_2}{\partial t} - \kappa_2 c_{st} \frac{\partial S_i}{\partial t} + \left(\rho_2 \frac{\partial \phi \partial P_i}{\partial P_i \partial t} + \phi \frac{\partial \rho_2 \partial p_i \partial P_i}{\partial p_i \partial P_i \partial t} \right) (1 - S_1) \\ + M_i \cdot \frac{\partial \kappa_2}{\partial S_2} \nabla S_2 + M_i \cdot \frac{\partial \kappa_2}{\partial S_i} \nabla S_i = & -\kappa_2 \left(Q_i - c_{pi} \frac{\partial P_i}{\partial t} \right) \\ & + \nabla \cdot \kappa \kappa_2 [(1 - \kappa_2) \frac{dp_{c23}}{dS_1} \nabla S_1 + \kappa_1 \frac{dp_{c21}}{dS_1} \nabla S_1 + (\rho_2 - \bar{\rho}) g \nabla z] + Q_2 \quad (47) \end{aligned}$$

3. 수치 연산

3.1. 전역 압력식 수치 연산

압력식의 수치연산을 수행하기 위해서 포화미분값을 일차변수 포화식을 이용하여 반복적으로 푸는 알고리즘을 취한다면, 전역압력식은 다음과 같은 식으로 바꿀 수 있다.

$$c_{pi} \frac{\partial P_i}{\partial t} + c_{s1} \frac{S_1^{t,r} - S_1^{t-1}}{\Delta t} + c_{st} \frac{S_i^{t,r} - S_i^{t-1}}{\Delta t} - \nabla \cdot \kappa (\nabla P_i + \bar{\rho} g \nabla z) = Q_i \quad (48)$$

여기서 포화식을 아래와 같이 현재 반복수와 이전시간의 값의 가중치를 이용한다면 아래와 같이 나타낼 수 있다.

$$S_i^{t,r} = \omega S_i^{t,r} + (1 - \omega) S_i^{t-1} \quad (49)$$

여기서 ω 는 가중치 요소이고, Δt 는 시간간격수준이며, r 은 반복수이다. 여기서 유한요소법을 이용하여 가중 잔차 갤러킨 방법을 사용하면 아래와 같다.

$$R = \int_V N_i \left\{ c_{pi} \frac{\partial P_i}{\partial t} + c_{s1} \frac{S_1^{t,r} - S_1^{t-1}}{\Delta t} + c_{st} \frac{S_i^{t,r} - S_i^{t-1}}{\Delta t} - \nabla \cdot \kappa (\nabla P_i + \bar{\rho} g \nabla z) - Q_i \right\}$$

$$dV=0 \tag{50}$$

노드점에서 전역압력값을 구하기 위해서 전역압력을 아래와 같이 근사시킬 수 있다.

$$P_i = \hat{P}_i = \sum_{j=1} P_{ij}(t) N_j(x, y, z) \tag{51}$$

$P_{ij}(t)$ 와 N_j 는 각각 노드점 j 에서의 P_i 값과 기저함수 값이다. 여기서 잔차식에 식 (51)을 대입하면

$$\begin{aligned} & \partial \left(\sum_{j=1} P_{ij}(t) N_j \right) \\ & \int_V N_{c_{pr}} \frac{\partial \left(\sum_{j=1} P_{ij}(t) N_j \right)}{\partial t} dV + \int_V N_i \left[c_{s1} \frac{(S_i^{r'} - S_i^{r-1})}{\Delta t} dV + c_{s2} \frac{(S_i^{r'} - S_i^{r-1})}{\Delta t} dV \right] dV \\ & - \int_V N_i [\nabla \cdot \kappa (\nabla P_i + \bar{\rho} g \nabla z)] dV - \int_V N_i Q_i dV = 0 \end{aligned} \tag{52}$$

식 (52)를 수치행렬식으로 표현하면 다음과 같다.

$$[M] \left\{ \frac{dP_i}{dt} \right\} + [S] \{P\} = \{Q\} + \{G\} + \{SA\} + \{B\} \tag{53}$$

여기서

$$[M]_{ij} = \sum_{e \in M_e} \int_V N_a^e N_b^e c_{pr} dV \tag{54}$$

$$[S]_{ij} = \sum_{e \in M_e} \int_V \nabla N_a^e \cdot \kappa \cdot \nabla N_b^e dV \tag{55}$$

$$\{Q\}_i = \sum_{e \in M_e} \int_V N_a^e Q_i dV \tag{56}$$

$$\{G\}_i = - \sum_{e \in M_e} \int_V \nabla N_a^e \cdot \kappa \bar{\rho} g \nabla z dV \tag{57}$$

$$\{SA\}_i = - \sum_{e \in M_e} \int_V N_a^e \left[c_{s1} \frac{S_i^{r'} - S_i^{r-1}}{\Delta t} + c_{s2} \frac{S_i^{r'} - S_i^{r-1}}{\Delta t} \right] dV \tag{58}$$

$$\{B\}_i = \sum_{e \in M_e} \int_{\Gamma} \kappa N_a^e (\nabla P_i + \bar{\rho} g \nabla z) \cdot n d\Gamma \tag{59}$$

여기서 식 (54)-(58)에서 V 는 요소 e 의 영역이며, M_e 는 전체축선 $i-j$ 와 일치하는 국부축선 $a-b$ 을 갖는 요소들의 집합이다. N_a^e 는 요소 e 의 a 번째 국부기저함수이다. N_{bs} 는 전역노드 i 와 일치하는 국부노드 a 를 가지는 경계선들의 집합이다. 그리고 Γ 는 경계면의 길이이다. 식 (53)에서 $\{P_i\}$ 는 시간에 대한 미분식을 풀기 위해서 시간에 대한 가중값을 사용할 수 있다.

$$\{P_i\} = (1-w)\{P_i\} + w\{P_i\}_{t+\Delta t} \tag{60}$$

시간에 대한 가중치에 따라서 식 (60)을 세 가지로 분류할 수 있다.

$w = 0$ - Forward method

$$\frac{[M]}{\Delta t} \{P_i\}_{t+\Delta t} = \left(\frac{[M]}{\Delta t} - [S] \right) \{P_i\}_t + \{Q\} + \{G\} + \{SA\} + \{B\} \tag{61}$$

$w = \frac{1}{2}$ - Crank-Nicholson method

$$\left(\frac{[M]}{\Delta t} + \frac{[S]}{2} \right) \{P_i\}_{t+\Delta t} = \left(\frac{[M]}{\Delta t} - \frac{[S]}{2} \right) \{P_i\}_t + \{Q\} + \{G\} + \{SA\} + \{B\} \tag{62}$$

$w = 1$ - Backward method

$$\left(\frac{[M]}{\Delta t} + [S] \right) \{P_i\}_{t+\Delta t} = \frac{[M]}{\Delta t} \{P_i\}_t + \{Q\} + \{G\} + \{SA\} + \{B\} \tag{63}$$

3.2. 포화식 수치 연산

두개의 포화식 (46)과 (47)을 수치연산하기 위해서 물포화도, S_1 과 총유체포화도, S_t 를 식 (64)와 (65)와 같이 근사화시킨 다음, 잔차방정식을 통해서 격자화된 포화식을 얻을 수 있다.

$$S_1 = \hat{S}_1 = \sum S_{1j}(t) \cdot N_j(x, y, z) \tag{64}$$

$$S_t = \hat{S}_t = \sum S_{ij}(t) \cdot N_j(x, y, z) \tag{65}$$

여기서 $S_{1j}(t)$, $S_{ij}(t)$, N_j 는 각각 노드점 j 에서 S_1 과 S_t 기저함수의 값들이다. 이때 물포화도와 총유체포화도의 잔차방정식의 격자화된 포화식은 다음과 같이 나타낼 수 있다.

$$\begin{aligned} R = & \int_V N_i \left\{ (\rho_s \phi - \kappa_1 c_{s1}) \frac{\partial S_1}{\partial t} - \kappa_1 c_{s2} \frac{\partial S_1}{\partial t} + \left(\rho_s \frac{\partial \phi \partial P_i}{\partial t} + \phi \frac{\partial \rho_s \partial P_i}{\partial P_i \partial t} \right) S_1 \right. \\ & + M_i \frac{\partial \kappa_1}{\partial S_1} \nabla S_1 + M_i \frac{\partial \kappa_1}{\partial S_1} \nabla S_1 + \kappa_1 \left(Q_i - c_{pr} \frac{\partial P_i}{\partial t} \right) \\ & \left. - \nabla \cdot \kappa \kappa_1 \left[(1 - \kappa_1) \frac{dp_{c12}}{dS_1} \nabla S_1 + \kappa_2 \frac{dp_{c23}}{dS_1} \nabla S_1 + (\rho_s - \bar{\rho}) g \nabla z \right] - Q_i \right\} dV = 0 \end{aligned} \tag{66}$$

$$\begin{aligned} R = & \int_V N_i \left\{ (\rho_s \phi - \kappa_3 c_{s3}) \frac{\partial S_1}{\partial t} - \kappa_3 c_{s1} \frac{\partial S_1}{\partial t} + \left(\rho_s \frac{\partial \phi \partial P_i}{\partial t} + \phi \frac{\partial \rho_s \partial P_i}{\partial P_i \partial t} \right) (1 - S_1) \right. \\ & - M_i \frac{\partial \kappa_3}{\partial S_1} \nabla S_1 - M_i \frac{\partial \kappa_3}{\partial S_1} \nabla S_1 - \kappa_3 \left(Q_i - c_{pr} \frac{\partial P_i}{\partial t} \right) \\ & \left. + \nabla \cdot \kappa \kappa_3 \left[(1 - \kappa_3) \frac{dp_{c23}}{dS_1} \nabla S_1 + \kappa_1 \frac{dp_{c21}}{dS_1} \nabla S_1 + (\rho_s - \bar{\rho}) g \nabla z \right] + Q_i \right\} dV = 0 \end{aligned} \tag{67}$$

식 (66)과 (67)을 수치행렬로 표현하면 각각 식 (68)과 (69)와 같다.

$$[C_1] \left\{ \frac{\partial S_1}{\partial t} \right\} + [CP_1] \{S_1\} - [CT_1] \left\{ \frac{\partial S_1}{\partial t} \right\} + [ADW_1] \{S_1\} + [ADT_1] \{S_1\} + [DD_1] \{S_1\} + [E_1] \{S_1\} = \{Q_1\} + \{B_1\} \quad (68)$$

$$[C_2] \left\{ \frac{\partial S_1}{\partial t} \right\} + [CP_2] \{S_1\} + [CT_2] \left\{ \frac{\partial S_1}{\partial t} \right\} + [ADW_2] \{S_1\} + [ADT_2] \{S_1\} + [DD_2] \{S_1\} + [E_2] \{S_1\} = \{Q_2\} + \{B_2\} + \{P_2\} \quad (69)$$

여기서

$$[C_1]_{ij} = \sum_{e \in M_e} \int_V N_a^e N_b^e (\rho_1 \phi - \kappa_1 c_{s1}) dV \quad (70)$$

$$[CP_1]_{ij} = \sum_{e \in M_e} \int_V N_a^e N_b^e \left(\rho_1 \frac{\partial \phi \partial P_t}{\partial P_t \partial t} - \rho_1 \frac{\partial \rho_1 \partial p_1}{\partial p_1 \partial t} \right) dV \quad (71)$$

$$[CT_1]_{ij} = \sum_{e \in M_e} \int_V N_a^e N_b^e \kappa_1 c_{s1} dV \quad (72)$$

$$[ADW_{11}]_{ij} = \sum_{e \in M_e} \int_V W_a^e M_i \frac{d\kappa_1}{dS_1} \nabla N_b^e dV \quad (73)$$

$$[ADW_{12}]_{ij} = \sum_{e \in M_e} \int_V W_a^e \left[\frac{d[\kappa \kappa_1 (\rho_1 - \bar{\rho}) g]}{dS_1} \nabla N_b^e \cdot \nabla z \right] dV \quad (74)$$

$$[ADW_{11}]_{ij} = \sum_{e \in M_e} \int_V W_a^e M_i \frac{d\kappa_1}{dS_1} \nabla N_b^e dV \quad (75)$$

$$[ADT_{12}]_{ij} = - \sum_{e \in M_e} \int_V W_a^e \left[\frac{d[\kappa \kappa_1 (\rho_1 - \bar{\rho}) g]}{dS_1} \nabla N_b^e \cdot \nabla z \right] dV \quad (76)$$

$$[DD_1]_{ij} = \sum_{e \in M_e} \int_V \kappa \kappa_1 (1 - \kappa_1) \frac{dP_{c12}}{dS_1} \nabla N_a^e \cdot \nabla N_b^e dV \quad (77)$$

$$[E_1]_{ij} = \sum_{e \in M_e} \int_V \kappa \kappa_1 \kappa_3 \frac{dP_{c23}}{dS_1} \nabla N_a^e \cdot \nabla N_b^e dV \quad (78)$$

$$\{Q_1\}_i = - \sum_{e \in M_e} \int_V N_a^e \kappa_i Q_1 dV + \sum_{e \in M_e} \int_V N_a^e Q_1 dV$$

$$+ \sum_{e \in M_e} \int_V N_a^e \kappa_1 c_{pi} \frac{\partial P_i}{\partial t} dV \quad (79)$$

$$\{B_1\}_i = - \sum_{e \in N_{bs}} \int_{\Gamma} N_a^e M_i \cdot nd\Gamma + \sum_{e \in N_{bs}} \int_{\Gamma} N_i \kappa_1 M_i \cdot nd\Gamma - \sum_{e \in N_{bs}} \int_{\Gamma} N_b^e \kappa_1 \kappa (\rho_1 - \bar{\rho}) g \nabla z \cdot nd\Gamma \quad (80)$$

$$[ADW_1]_{ij} = [ADW_{11}]_{ij} + [ADW_{12}]_{ij} \quad (81)$$

$$[ADT_1]_{ij} = [ADT_{11}]_{ij} + [ADT_{12}]_{ij} \quad (82)$$

$$[C_2]_{ij} = \sum_{e \in M_e} \int_V N_a^e N_b^e (\rho_3 \phi - \kappa_3 c_{s3}) dV \quad (83)$$

$$[CP_2]_{ij} = \sum_{e \in M_e} \int_V N_a^e N_b^e \left(\rho_3 \frac{\partial \phi \partial P_t}{\partial P_t \partial t} + \phi \frac{\partial \rho_3 \partial p_3}{\partial p_3 \partial t} \right) dV \quad (84)$$

$$[P_2]_i = \sum_{e \in M_e} \int_V N_a^e \left(\rho_3 \frac{\partial \phi \partial P_t}{\partial P_t \partial t} + \phi \frac{\partial \rho_3 \partial p_3}{\partial p_3 \partial t} \right) dV \quad (85)$$

$$[CT_2]_{ij} = \sum_{e \in M_e} \int_V N_a^e N_b^e \kappa_3 c_{s3} dV \quad (86)$$

$$[ADW_{22}] = \sum_{e \in M_e} \int_V W_a^e \left[\frac{d[\kappa \kappa_3 (\rho_3 - \bar{\rho}) g]}{dS_1} \nabla N_b^e \cdot \nabla z \right] dV \quad (87)$$

$$[ADW_{21}]_{ij} = - \sum_{e \in M_e} \int_V W_a^e M_i \frac{d\kappa_3}{dS_1} \nabla N_b^e dV \quad (88)$$

$$[ADT_{22}] = \sum_{e \in M_e} \int_V W_a^e \left[\frac{d[\kappa \kappa_3 (\rho_3 - \bar{\rho}) g]}{dS_1} \nabla N_b^e \cdot \nabla z \right] dV \quad (89)$$

$$[ADT_{21}]_{ij} = - \sum_{e \in M_e} \int_V W_a^e M_i \frac{d\kappa_3}{dS_1} \nabla N_b^e dV \quad (90)$$

$$[DD_2]_{ij} = \sum_{e \in M_e} \int_V \kappa \kappa_3 \kappa_1 \frac{dP_{c12}}{dS_1} \nabla N_a^e \cdot \nabla N_b^e dV \quad (91)$$

$$[E_2]_{ij} = \sum_{e \in M_e} \int_V \kappa \kappa_3 (1 - \kappa_3) \frac{dP_{c23}}{dS_1} \nabla N_a^e \cdot \nabla N_b^e dV \quad (92)$$

$$\{Q_2\}_i = - \sum_{e \in M_e} \int_V N_a^e \kappa_i Q_2 dV - \sum_{e \in M_e} \int_V N_a^e Q_2 dV$$

$$-\sum_{e \in M_e} \int_V N_a^e \kappa_3 c_{pi} \frac{\partial P_i}{\partial t} dV \tag{93}$$

$$\{B_2\}_i = \sum_{e \in N_{bs}} \int_{\Gamma} N_a^e M_3 \cdot nd\Gamma - \sum_{e \in N_{bs}} \int_V N_i \kappa_3 M_i \cdot nd\Gamma + \sum_{e \in N_{bs}} \int_{\Gamma} N_a^e \kappa_3 \kappa (\rho_3 - \bar{\rho}) g \nabla_z \cdot nd\Gamma \tag{94}$$

$$[ADW_2] = [ADW_{21}] + [ADW_{22}] \tag{95}$$

$$[ADT_2] = [ADT_{21}] + [ADT_{22}] \tag{96}$$

식 (68)과 (69)를 함께 정리하면 다음과 같은 포화도의 최종식을 얻는다.

$$\begin{bmatrix} C_1 & CT_1 \\ CT_2 & C_2 \end{bmatrix} \begin{bmatrix} \frac{\partial S_1}{\partial t} \\ \frac{\partial S_2}{\partial t} \end{bmatrix} + \begin{bmatrix} DD_1 + ADW_1 + CP_1 & E_1 + ADT_1 \\ DD_2 + ADW_2 & E_2 + ADT_2 + CP_2 \end{bmatrix} \begin{Bmatrix} S_1 \\ S_2 \end{Bmatrix} = \begin{Bmatrix} Q_1 + B_1 \\ Q_2 + B_2 + P_2 \end{Bmatrix} \tag{97}$$

식 (97)을 계산하기 위해서는 시간에 대한 미분식을 풀어야 한다. 즉 식 (97)에서 S_1 과 S_2 는 시간에 대한 가중함수로 나타내어야 한다. 이때 시간 가중치는 압력식에서 사용하였던 가중치와 동일한 값을 사용해야 한다.

$$\{S_1\}_t = (1-w)\{S_1\}_t + w\{S_1\}_{t+\Delta t} \tag{98}$$

$$\{S_2\}_t = (1-w)\{S_2\}_t + w\{S_2\}_{t+\Delta t} \tag{99}$$

식 (97)을 시간가중치의 압력식을 사용하여 표현하면 다음과 같다.

$$\left(\frac{[C]}{\Delta t} + w[M] \right) \{S^{n+1}\} = \left(\frac{[C]}{\Delta t} - (1-w)[M] \right) \{S^n\} + w\{Q^{n+1}\} + (1-w)\{Q^n\} \tag{100}$$

여기서

$$[C] = \begin{bmatrix} C_1 & -CT_1 \\ CT_2 & C_2 \end{bmatrix} \tag{101}$$

$$[M] = \begin{bmatrix} DD_1 + ADW_1 + CP_1 & E_1 + ADT_1 \\ DD_2 + ADW_2 & E_2 + ADT_2 + CP_2 \end{bmatrix} \tag{102}$$

$$\{S\} = \begin{Bmatrix} S_1 \\ S_2 \end{Bmatrix} \tag{103}$$

$$\{Q\} = \begin{Bmatrix} Q_1 + B_1 \\ Q_2 + B_2 + P_2 \end{Bmatrix} \tag{104}$$

4. 수치 실험 및 모델 검증

본 연구에서 개발된 유체 및 매질의 압축성을 고려한 삼상흐름모델 (CMPS)을 검증하기 위해서, 이전 연구에서 개발된 비압축성을 고려한 삼상흐름모델 (MPS)의 결과들과 상호 비교하였다. CMPS와 MPS와의 객관적이고 공평한 비교를 위하여 동등한 수치모의 조건을 가지도록 개발된 삼상흐름 지배방정식에서 유체와 매질의 압축성에 관련된 항들의 값을 '0'으로 하였다. 즉, $\frac{\partial \rho_1}{\partial p_1}$, $\frac{\partial \rho_2}{\partial p_2}$, $\frac{\partial \rho_3}{\partial p_3}$, $\frac{\partial \phi}{\partial p}$ 의 값들을 '0'으로 하였다. 따라서 유체와 매질의 압축성에 관련된 항들이 모두 '0'이 되었으므로 CMPS의 결과와 MPS의 결과가 이론적으로 같아야 한다. 본 연구에서는 총 3개의 예제들을 갖고 CMPS과 MPS의 결과를 비교하여 검증하였으며, 또한 해석해와 비교를 통하여 검증하였다.

4.1. 예제 1 - 2DFATMIC, MPS, CMPS와의 비교

본 예제는 컬럼의 길이 40 cm, 폭 1 cm인 컬럼의 상부에서 약 70 분 동안 물을 10 cm/day로 주입되는 경우에 컬럼 내부의 수분거동 및 공기흐름을 모사하도록 설정하였다. 그리고 이 예제는 2DFATMIC과의 비교를 통해서 MPS 검증에 사용된 적이 있다 (Suk and Yeh, 2007; Suk and Yeh, 2008). 컬럼 내부는 불포화상태에 있으며 내부 투수계수는 $4.27 \times 10^{-8} \text{ cm}^2$, 공극률은 0.25로 설정하였으며 불포화도에 대한 수리상수함수는 van Genuchten 모델 (Parker *et al.*, 1987)을 따른다고 가정하였다. 이 때 van Genuchten 계수, α_{21} , α_{32} , α_{31} 와 n 는 각각 0.11 cm^{-1} , 0.099 cm^{-1} , 0.044 cm^{-1} , 2.2로 하였다. 본 예제에서는 2DFATMIC과 MPS와 CMPS의 결과를 비교 검증을 하고자 한다.

4.1.1. 2DFATMIC의 입력사항

관심영역에서 초기 압력 수두는 -50 cm이다. 컬럼의 우측, 좌측 경계부분에서는 비흐름 경계조건, 컬럼의

하부에는 -50 cm의 압력수두 경계조건, 컬럼의 상부에는 ponding depth가 0, 최소 압력은 -900 cm, 강수율은 10 cm/day가 주어졌다(Fig. 1(a)). 전 영역은 1×40 개의 유한요소와 82개의 절점으로 등분되었고, 각 요소는 1cm×1cm인 사각형이다. 시간간격은 초기 시간간격 4초에서 1.1 배씩 증가하여 최대 86.4 초가 되도록 하였고, 총 수치모의시간은 70분이 되도록 하였다.

4.1.2. MPS와 CMPS의 입력사항

MPS와 CMPS의 초기조건에서 물, 불용용성 유체, 공기의 압력은 각각 $7.156 \times 10^{15} \text{ g/cm/day}^2$, $7.302 \times 10^{15} \text{ g/cm/day}^2$, $7.465 \times 10^{15} \text{ g/cm/day}^2$ 가 되도록 하였다. 이때 공기의 압력은 대기압과 같다고 가정하였다. MPS와 CMPS의 경계조건은 Fig. 1(b)와 (c)에 각각 나타나 있다. MPS에서 컬럼의 우측과 좌측에는 비체적흐름조건을 설정하였고 CMPS에서 컬럼의 우측과 좌측에는 비질량흐름조건을 설정하였다. 그리고 MPS와 CMPS에서 컬럼 하부의 물, 불용용성 유체, 공기의 압력은 각각 $7.156 \times 10^{15} \text{ g/cm/day}^2$, $7.302 \times 10^{15} \text{ g/cm/day}^2$, $7.465 \times 10^{15} \text{ g/cm/day}^2$ 로 설정하였고, 이는 2DFATMIC의 압력수두 -50cm와 동등한 값이다. 즉 물포화도가 0.355인 경우에 해당하는 조건을 2DFATMIC, MPS와 CMPS의 컬럼 하부 경계조건으로 설정하였다. 그리고

MPS에서 관심영역의 상부에는 10 cm/day의 체적흐름으로 물이 주입되고, 불용용성유체와 공기는 주입되지 않도록 경계조건을 설정하였다. 마찬가지로 CMPS에서는 MPS의 10 cm/day와 동등한 양에 해당하는 물을 주입하기 위해서 물의 밀도를 1 g/cm^3 로 가정하여 관심영역의 상부에 $10 \text{ g/cm}^2/\text{day}$ 의 질량유속을 설정하였다. 마지막으로 2DFATMIC, MPS와 CMPS은 관심영역을 모두 같은 유한요소로 등분하였고, 또한 세 가지 모델들 모두 같은 시간 세분화 전략을 갖고 수치모의 하였다.

4.1.3. 비교결과

Fig. 2는 다양한 시간에서 깊이에 따른 물포화도와 공기포화도의 결과를 각각 나타낸다. Fig. 2에서 보는 바와 같이 물이 상부에서 주입되므로 물 포화도는 시간이 진행됨에 따라 상부로부터 커지는 것을 알 수 있었고, 2DFATMIC, MPS, CMPS의 결과들이 모두 잘 일치하는 것을 볼 수 있었다.

4.2. 예제 2 - 해석해, MPS, CMPS와의 비교

일반적으로 불균질 매질하에 비정류 다상흐름에서 중력의 효과와 모세압력의 효과를 모두 고려할 수 있는 해석해를 구하기는 쉽지 않다. 본 연구에서 모델검

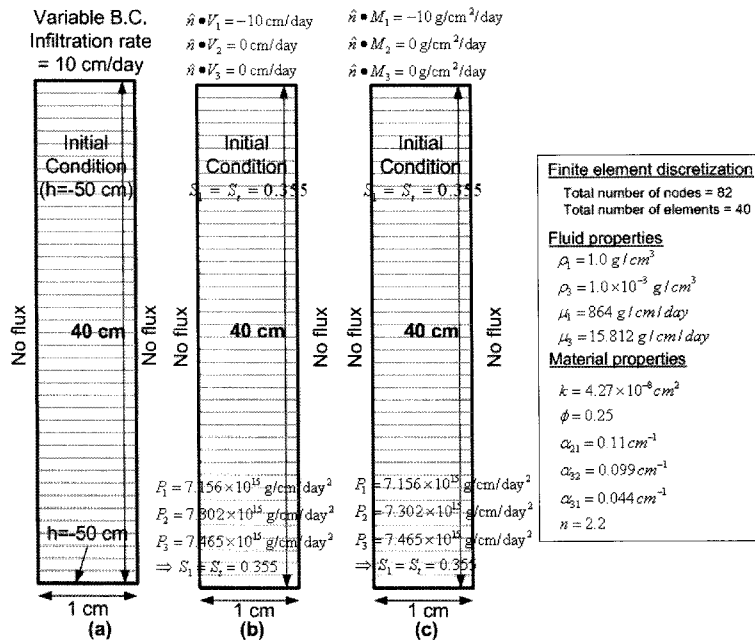


Fig. 1. Problem definition for (a) 2DFATMIC, (b) MPS, and (c) CMPS (Not to be scaled).

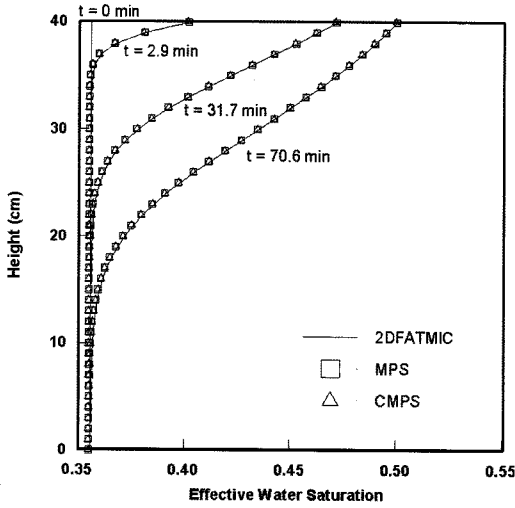


Fig. 2. Comparison of solutions of MPS, CMPS and 2DFATMIC solutions for model verification.

증은 모세압력효과를 고려할 수 있는 McWhorter and Sunada(1990)에 의해 개발된 해석 해를 이용하여 수행하였다. 본 모델의 검증에 위해 사용된 수치모의 조건은 다음과 같다. 초기에 2,000 cm 길이의 수평 컬럼이 완전히 물로 포화되어 있다고 가정하고 불용용성 유체를 계속적으로 컬럼의 좌측 경계부에서 주입하여 ($S_1(0,t) = 0.84$) 일정하게 유지되도록 시간에 따라 변하는 주입율을 설정하였다. MPS의 초기 및 경계조건은 각각 식(107)과 식(105), 식(106)에 각각 나타나있다. 마찬가지로 CMPS의 초기 및 경계조건은 식(107)과 식(108)에 각각 나타났다.

$$n \cdot V_1(0,t) = 0 \text{ for } t > 0 \quad (105a)$$

$$n \cdot V_2(0,t) = At^{\frac{1}{2}} \text{ for } t > 0 \quad (105b)$$

$$n \cdot V_3(0,t) = 0 \text{ for } t > 0 \quad (105c)$$

$$P_1(2000 \text{ cm},t) = 7.465 \times 10^{15} \text{ g/cm/day}^2 \text{ for } t > 0 \quad (106a)$$

$$P_2(2000 \text{ cm},t) = 7.465 \times 10^{15} \text{ g/cm/day}^2 \text{ for } t > 0 \quad (106b)$$

$$P_3(2000 \text{ cm},t) = 7.465 \times 10^{15} \text{ g/cm/day}^2 \text{ for } t > 0 \quad (106c)$$

$$P_1(x,0) = 7.465 \times 10^{15} \text{ g/cm/day}^2 \text{ for } t > 0 \quad (107a)$$

$$P_2(x,0) = 7.465 \times 10^{15} \text{ g/cm/day}^2 \text{ for } t > 0 \quad (107b)$$

$$P_3(x,0) = 7.465 \times 10^{15} \text{ g/cm/day}^2 \text{ for } t > 0 \quad (107c)$$

$$n \cdot M_1(0,t) = 0 \text{ for } t > 0 \quad (108a)$$

$$n \cdot M_2(0,t) = At^{\frac{1}{2}} \text{ for } t > 0 \quad (108b)$$

$$n \cdot M_3(0,t) = 0 \text{ for } t > 0 \quad (108c)$$

MPS에서 식 (105b)의 $A = 2 \text{ cm/day}^{\frac{1}{2}}$ 이고, CMPS에서는 불용용성 유체의 밀도를 1 g/cm^3 로 정하였으므로 (108b)의 A 로 정했다. 그리고 CMPS에서 관심영역 우측 경계조건은 식(106)과 같다. 마지막으로 MPS와 CMPS를 위한 초기조건과 경계조건 및 입력상수들은 Fig. 3(a)와 (b)에 각각 나타내었다. 본 예제는 물로 포화된 수평 컬럼의 왼쪽입구부분에서 불용용성 유체가 주입되므로, 왼쪽경계부근부터 서서히 물이 밀려나가고 불용용성 유체가 채워지는 현상을 묘사하는 것으로서, Fig. 4에서 보는바와 같이 249일 동안 시간에 따라서 물포화도 분포가 서서히 오른쪽으로 줄어드는 것을 볼 수 있다. Fig. 4에 따르면 해석해, MPS, 그리고 CMPS의 결과들이 서로 잘 일치한다는 것을 확인 할 수 있다.

4.3. 예제 3 - MPS와 CMPS와의 비교

예제 3은 초기에 컬럼 매질 내 물, 공기, 불용용성 유체의 세 가지 상이 공존할 때 매질의 상부 경계면에 10 cm/day 로 물이 주입되는 경우를 가정하여 삼상 유체의 거동을 수치모의 하였다(Fig. 5). 이때 초기 물, 공기, 불용용성유체의 포화도는 각각 0.211, 0.308, 0.481로 설정하였다(Fig. 5). 그리고 컬럼 하부에는 일정압력 경계조건이 주어지는데, 불용용성유체,공기의 압력은 각각 $7.156 \times 10^{15} \text{ g/cm/day}^2$, $7.392 \times 10^{15} \text{ g/cm/day}^2$, $7.465 \times 10^{15} \text{ g/cm/day}^2$ 로 정하였다. 이는 물, 공기, 불용용성유체의 포화도가 각각 0.211, 0.308, 0.481인 경우에 해당하는 값이다(Fig. 5). MPS와 CMPS의 결과를 비교하기 위해서, CMPS의 경우에는 물의 밀도를 1.0 g/cm^3 로 가정하여 상부에서 $10 \text{ g/cm}^2/\text{day}$ 의 물을 주입하는 것으로 설정하였다(Fig. 5). 이것은 MPS의 상부경계조건인 10 cm/day 의 침투율과 같은 조건이다. Fig. 6에서 보는바와 같이 본 예제는 세 개의 상이 공존하는 매질의 상부에서 물을 주입함에 따라 불용용성유체가 밀려나가면서 동시에 물과 하부에 있는 공기가 그 자리를 채워나가는 현상을 수치 모의하였다. Fig. 6에 따르면 MPS와 CMPS의 결과가 서로 잘 일

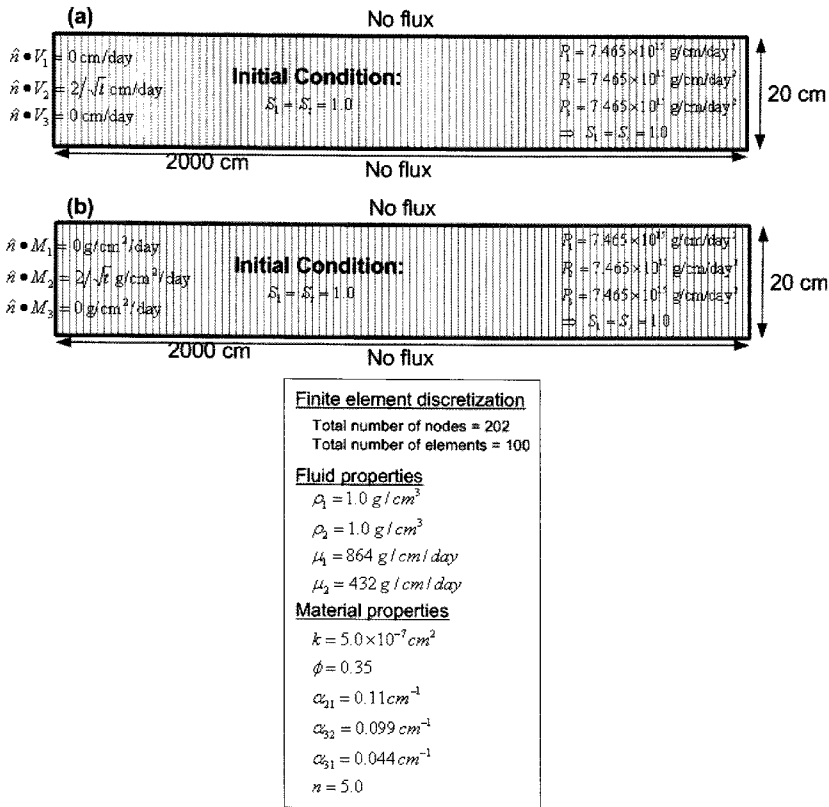


Fig. 3. Problem description for (a) MPS and (b) CMPS (McWhorter and Sunada, 1990) (Not to be scaled).

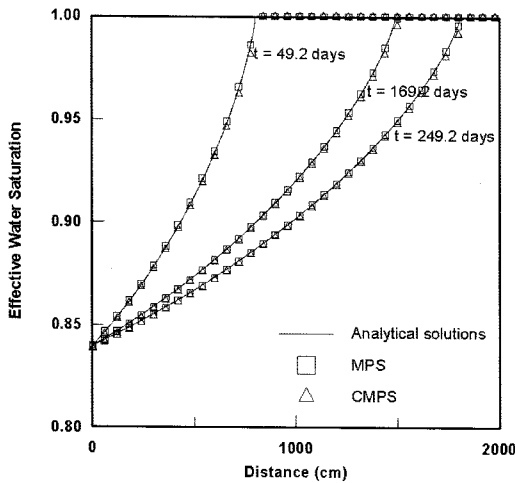


Fig. 4. Comparison of solutions of CMPS, MPS with exact solutions by McWhorter and Sunada (1990) at various times.

치하는 것을 확인할 수 있었다.

4.4. 예제 4 - 압축성 유체를 고려한 이상흐름 수치예제

예제 4는 유체의 압축성이 유체의 거동에 미치는 영향을 파악하기 위해서 불용융성 유체의 열팽창계수가 변함에 따른 유체의 거동을 수치 모의하였다. 이때 불용융성 유체의 밀도만 온도에 따라 변한다고 가정하고, 다른 물성치인 점성은 변하지 않는다고 가정하여 수치 모의하였다. 수치모의 조건은 물로 완전히 포화된 초기 컬럼 상태에서, 상부 경계면에 10 cm/day로 불용융성 유체를 주입시켰다. 이때 불용융성 유체가 주입되면서 영역내에 존재하던 물이 영역밖으로 밀려나가고 불용융성 유체는 영역내로 침투되도록 설정하였다. 그리고 컬럼 하부에는 일정압력 경계조건을 설정하여, 물로 포화된 상태가 유지되게 하였고(Fig. 7), 매질내의 온도분포는 Fig. 8(a)에서와 같이 상부는 온도가 높고 하부로 갈수록 온도가 낮도록 설정 하였다. 불용융성 유체의 표준 밀도는 1.0 g/cm³로 하였다. Fig. 8(b)에서 보는 바와 같이 불용융성 유체의 열팽창계수가 크면 온도가 상승함에 따라 밀도가 크게 작아져서 증력에

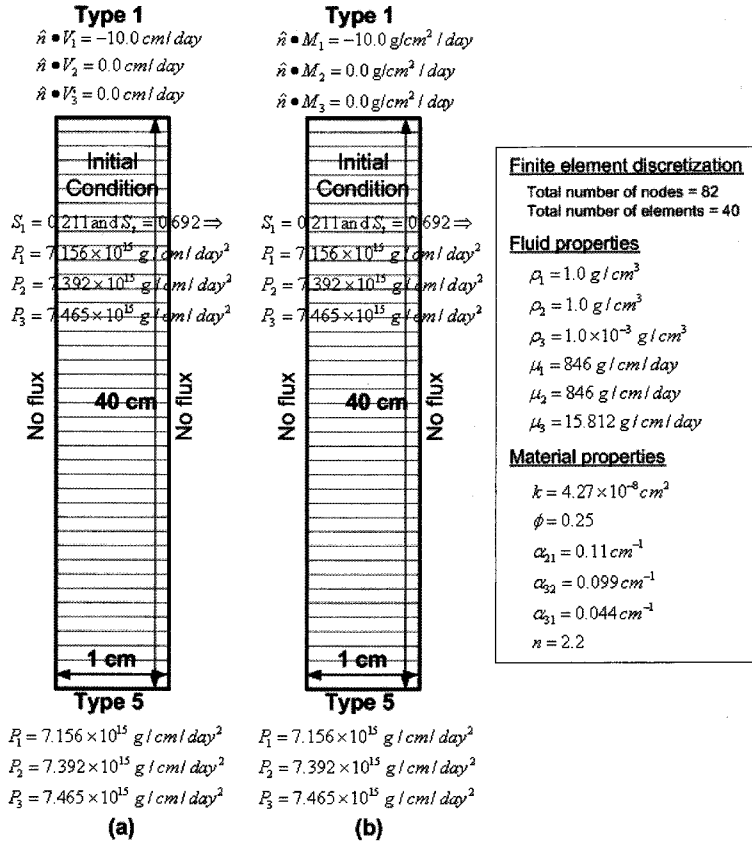


Fig. 5. (a) In MPS, water infiltration simulation with volumetric flux boundary condition and (b) in CMPS with mass flux boundary condition in a three phase system (Not to be scaled).

의해 아래로 침투하는 속도가 작아진다. 이로 인해서 상부 경계에서 주입된 불용용성 유체는 하부로 침투되지 못하고 상대적으로 상부에 머무름에 따라 불용용성 유체의 포화도는 높게 나타난다. 반면 불용용성 유체의 열팽창계수가 작으면 온도가 상승함에 따라 밀도가 덜 낮아져서 중력에 의해 하부로 침투하는 속도가 상대적으로 커진다. 따라서 상부에서 침투되지 못하고 머무르는 불용용성 유체는 상대적으로 적게 된다.

5. 결론 및 토의

본 연구에서는 유체 및 매질의 압축성과 완전한 삼상 오염물을 가정하여 분율흐름접근방식을 따르는 수학적 지배방정식을 개발하고, 이를 토대로 압축성 유체 및 매질을 고려한 삼상흐름 수치모의프로그램을 개발하였다. 개발된 삼상흐름 수치모의프로그램인 CMPS를 검증하기 위해서 기존에 개발된 비압축성 유체 및

매질을 고려한 삼상흐름수치모의 프로그램인 MPS와 해석해를 통해서 간접적으로 비교 검증하였다. 첫 번째 예제에서 물과 공기의 두 개 상이 존재하는 경우 MPS와 CMPS가 잘 일치하였으며, 두 번째 해석해와도 정확히 일치하였다. 마지막으로 세 개의 상 (물, NAPL, 공기)이 동시에 존재하는 경우인 세 번째 예제에서도 MPS와 CMPS가 잘 일치하였다. 이상과 같이 CMPS는 유체 및 매질의 압축에 해당하는 모든 항을 임의로 '0'으로 설정함으로써, 비압축성 유체 및 매질을 고려한 삼상흐름수치모의 프로그램인 MPS와 간접적으로 비교 검증하였다. 또한 유체의 압축성이 유체의 흐름에 미치는 영향을 파악하기 위해, 불용용성 유체의 열팽창계수를 변화시켜가며 유체의 거동 변화를 수치모의하였다. 열팽창계수가 큰 경우 온도 상승에 따른 밀도가 크게 낮아져 불용용성 유체의 침투이동속도가 낮아졌고, 반대로 열팽창계수가 작은 경우 온도 상승에 따라서 밀도가 작게 낮아져서 불용용성 유체의 침

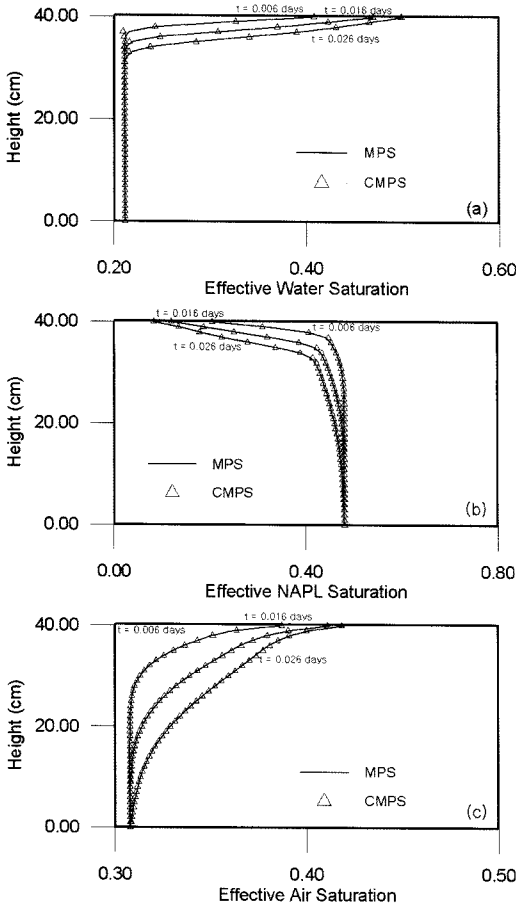


Fig. 6. Comparison of CMPS and MPS for distribution of (a) water saturation, (b) NAPL saturation, and (c) air saturation at various times.

두 이동 속도가 상대적으로 빨라짐을 확인할 수 있었다.

감사의 글

본 연구는 한국과학재단의 국제협력연구사업인 ‘몽골지역내 지하수 부존량, 지하수 유동 특성 및 수질 특성 평가’의 일환으로 수행되었으며 또한 한국지질자원연구원 기본 사업인 ‘청정 대용량 지하수 자원 확보 기술(08-3211)’의 연구비 지원에 의해 수행되었습니다. 이에 감사를 드립니다.

부 록 A

식 (22)의 $\frac{\partial p_1}{\partial t}$ 와 $\frac{\partial P_1}{\partial t}$ 와의 관계는 식 (18)의 수학

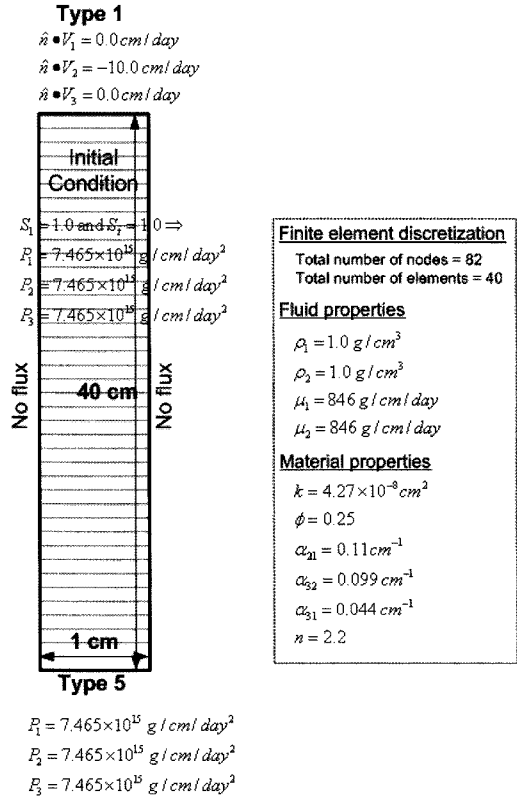


Fig. 7. NAPL infiltration by flux boundary condition in water only system.

적 조작을 통해 얻을 수 있다. 식 (18)은 다음과 같이 쓸 수 있다.

$$P_1 = \frac{3p_1 + p_2 - p_1 + p_3 - p_1}{3} + \frac{1}{3} \int_0^{(p_1 - p_2)} (\kappa_1 - \kappa_2) d\eta + \frac{1}{3} \int_0^{(p_2 - p_3)} (\kappa_2 - \kappa_3) d\eta + \frac{1}{3} \int_0^{(p_3 - p_1)} (\kappa_3 - \kappa_1) d\eta \tag{A1}$$

식 (A1)은 다음과 같이 쓸 수 있다.

$$P_1 = p_1 + \frac{p_{c21}}{3} + \frac{p_{c31}}{3} + f(S_1, S_2) \tag{A2}$$

여기서 $f(S_1, S_2)$ 는 식 (A1)에 있는 적분항들이다. 식 (A2)는 다음과 같다.

$$p_1 = P_1 - \frac{2p_{c21}}{3} - \frac{p_{c32}}{3} - f(S_1, S_2) \tag{A3}$$

$$\frac{\partial p_1}{\partial t} = \frac{\partial P_1}{\partial t} - \frac{2}{3} \frac{\partial p_{c21}}{\partial t} - \frac{1}{3} \frac{\partial p_{c32}}{\partial t} - \frac{\partial f(S_1, S_2)}{\partial t} \tag{A4}$$

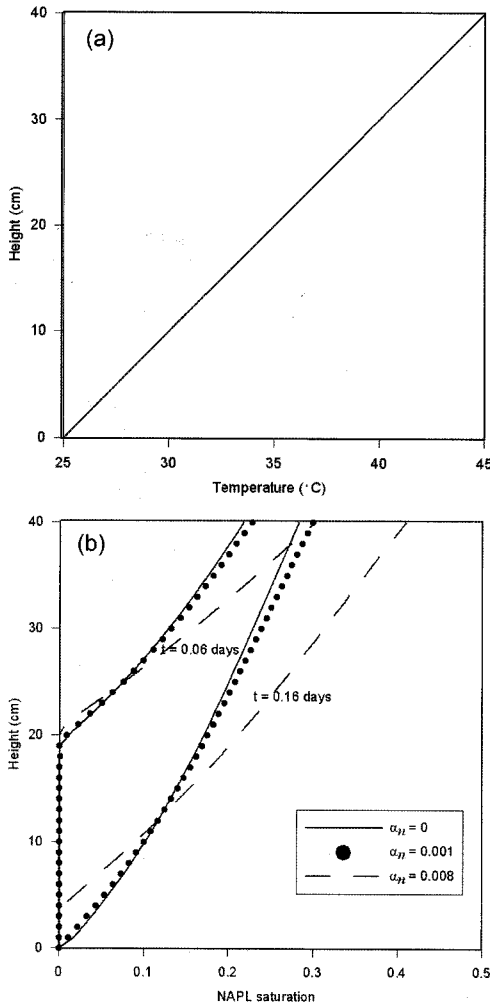


Fig. 8. (a)Temperature distribution with height and (b) NAPL saturation with thermal expansion coefficient of NAPL at various times.

$$\frac{\partial p_1}{\partial t} = \frac{\partial P_1}{\partial t} \hat{f}(S_1, S_2) \tag{A5}$$

여기서

$$\begin{aligned} \hat{f}(S_1, S_2) = & \frac{2\partial p_{c21}}{3} \frac{\partial p_{c32}}{\partial t} \\ & + \frac{1}{3} \frac{\partial}{\partial t} \left(\int_0^{P_1-P_2} (\kappa_1 - \kappa_2) d\eta + \int_0^{P_2-P_3} (\kappa_2 - \kappa_3) d\eta + \int_0^{P_3-P_1} (\kappa_3 - \kappa_1) d\eta \right) \end{aligned} \tag{A6}$$

$$\hat{f}(S_1, S_2) = \frac{2\partial p_{c21}}{3} \frac{\partial p_{c32}}{\partial t} + \frac{1\partial p_{c32}}{3} \frac{\partial p_{c21}}{\partial t}$$

$$+ \frac{1\partial p_{c12}}{3} \frac{\partial p_{c23}}{\partial t} (\kappa_1 - \kappa_2) + \frac{1\partial p_{c23}}{3} \frac{\partial p_{c31}}{\partial t} (\kappa_2 - \kappa_3) + \frac{1\partial p_{c31}}{3} \frac{\partial p_{c12}}{\partial t} (\kappa_3 - \kappa_1) \tag{A7}$$

$$\begin{aligned} \hat{f}(S_1, S_2) = & \frac{2\partial p_{c21}}{3} \frac{\partial p_{c32}}{\partial t} + \frac{1\partial p_{c32}}{3} \frac{\partial p_{c21}}{\partial t} \\ & + \frac{1\partial p_{c12}}{3} \frac{\partial p_{c23}}{\partial t} (\kappa_1 - \kappa_2) + \frac{1\partial p_{c23}}{3} \frac{\partial p_{c31}}{\partial t} (\kappa_2 - \kappa_3) + \frac{1\partial p_{c31}}{3} \frac{\partial p_{c12}}{\partial t} (\kappa_3 - \kappa_1) \end{aligned} \tag{A8}$$

식 (11)과 모세압력 $p_{c21} = -p_{c12}$, $p_{c32} = -p_{c23}$ 를 이용하면, 식 (A8)은 다음과 같다.

$$\hat{f}(S_1, S_2) = -\frac{\partial p_{c12}}{\partial t} (\kappa_2 + \kappa_3) - \frac{\partial p_{c23}}{\partial t} \kappa_3 \tag{A9}$$

결과적으로, 식 (A9)에서 p_{c12} 는 S_1 에 대한 함수이고, p_{c23} 는 S_2 에 대한 함수이므로, 식 (A9)는 다음과 같이 쓸 수 있다.

$$\hat{f}(S_1, S_2) = \frac{dp_{c12}}{dS_1} \frac{\partial S_1}{\partial t} (\kappa_1 - 1) - \frac{dp_{c23}}{dS_2} \frac{\partial S_2}{\partial t} \kappa_3 \tag{A10}$$

지금까지, 식(18)을 이용하여 식 (22)와 (25)를 유도하는 과정을 소개하였다. 식 (23), (24), (26), (27)도 같은 방식으로 유도할 수 있기 때문에, 여기서 이 식들에 대한 유도과정은 생략한다.

부 록 B

식 (38)은 식(3)과 논문에 사용된 수식들을 이용하여 간단한 수학적 조작을 실시함으로 얻을 수 있다. 다음은 식 (3)에서 (38)을 유도하는 과정을 상세히 나타내었다. 식 (2), (3), (13), (14)를 이용하면, 첫 번째 상의 질량유속 벡터 M_1 는 다음과 같이 쓸 수 있다.

$$M_1 = -\kappa_1 \kappa (\nabla p_1 + \rho_1 g \nabla z) \tag{B1}$$

$$M_1 = -\kappa_1 M_r - \kappa_1 \kappa (\nabla p_1 + \rho_1 g \nabla z) \tag{B2}$$

식 (19)를 이용하면, 식 (B2)는 다음과 같다.

$$M_1 = \kappa_1 M_r + \kappa_1 [\kappa (\nabla p_1 + \rho_1 g \nabla z)] - \kappa_1 \kappa (\nabla p_1 + \rho_1 g \nabla z) \tag{B3}$$

식 (19), (B1)과 $M = \sum_{i=1}^3 M_i$ 라는 정의를 이용하면,

$$\nabla P_r = \kappa_1 \nabla p_1 + \kappa_2 \nabla p_2 + \kappa_3 \nabla p_3 \quad (B4)$$

식 (B4)와 (17)을 이용하면, 식 (B3)은 다음과 같이 쓸 수 있다.

$$M_1 = \kappa_1 M_r + \kappa_1 \kappa (\kappa_1 \nabla p_1 + \kappa_2 \nabla p_2 + \kappa_3 \nabla p_3 - \kappa_1 \nabla p_1 - \kappa_2 \nabla p_1 - \kappa_3 \nabla p_1) - \kappa_1 \kappa (\rho_1 - \bar{\rho}) g \nabla z \quad (B5)$$

식 (B5)는 다음과 같이 쓸 수 있다.

$$M_1 = \kappa_1 M_r + \kappa_1 \kappa (\kappa_2 \nabla p_{c12} + \kappa_3 \nabla p_{c13}) - \kappa_1 \kappa (\rho_1 - \bar{\rho}) g \nabla z \quad (B6)$$

결과적으로, 모세압력 $p_{c21} = -p_{c12}$, $p_{c31} = -p_{c13}$ 을 이용하면, 식 (B6)는 다음과 같다.

$$M_1 = \kappa_1 M_r - \kappa_1 \kappa (\kappa_2 \nabla p_{c12} + \kappa_3 \nabla p_{c13}) - \kappa_1 \kappa (\rho_1 - \bar{\rho}) g \nabla z \quad (B7)$$

지금까지, 식 (3)을 이용하여 식 (38)을 유도하는 과정을 소개하였다. 식 (39)와 (40)도 위의 절차와 같은 방식으로 유도될 수 있으나, 여기서는 생략하도록 한다.

참고문헌

Bastian, P. and Helmig, R. (1999) Efficient fully-coupled solution techniques for two-phase flow in porous media parallel multigrid solution and large scale computations. *Advances in Water Resources*, v. 23, p. 199-216.

Binning, P. and Celia, M. A. (1999) Practical implementation of the fractional flow approach to multi-phase flow simulation. *Advances in Water Resources*, v. 22, p. 461-478.

Bradford, S. A., Abriola, L. M. and Rathfelder, K. M. (1998) Flow and entrapment of dense nonaqueous phase liquids in physically and chemically heterogeneous aquifer formations. *Advances in Water Resources*, v. 22, 117-132.

Chen, Z., Qin, G. and Ewing, R. E. (2000) Analysis of a compositional model for fluid flow in porous media. *SIAM Journal of Applied Mathematics*, v. 60, p. 747-777.

Class, H., Helmig, R. and Bastian, P. (2002) Numerical simulation of non-isothermal multiphase multicomponent processes in porous media. 1: An efficient solution technique. *Advances in Water Resources*, v. 25, p. 533-550.

Celia, M. A. and Binning, P. (1992) Two-phase unsaturated flow: One dimensional simulation and air phase velocities. *Water Resources Research*, v. 28, p. 2819-2828.

Dekker, T. J. and Abriola, L. M. (2000) The influence of field-scale heterogeneity on the infiltration and entrap-

ment of dense nonaqueous phase liquid in saturated formulations. *Journal of Contaminant Hydrology*, v. 42, p. 187-218.

Gallo, C. and Manzini, G. (2001) A fully coupled numerical model for two-phase flow with contaminant transport and biodegradation kinetics. *Commun. Numer. Methods Eng.*, v. 17, p. 325-336.

Guarnaccia, J. F. and Pinder, G. F. (1997) NAPL: A mathematical model for the study of NAPL contamination in granular soils, equation development and simulator documentation. RCGRD #95-22, The Univ. of Vermont, Burlington, Vt.

Hoteit, H. and Firoozabadi, A. (2008a) Numerical modeling of two-phase flow in heterogeneous permeable media with different capillarity pressures. *Advances in Water Resources*, v. 31, p. 56-73.

Hoteit, H. and Firoozabadi, A. (2008b) An efficient numerical model for incompressible two-phase flow in fractured media. *Advances in Water Resources*, v. 31, p. 891-905.

Jackson, R.E., Dwarakanath, V., Ewing, J.E. and Avis J. (2006) Migration of viscous non-aqueous phase liquids (NAPLs) in alluvium, Fraser River lowlands, British Columbia. *Canadian Geotechnical Journal*, v. 43, p. 694-703.

Kaluvarachchi, J. J. and Parker, J. C. (1989) An efficient finite element method for modeling multiphase flow. *Water Resources Research*, v. 25, p. 43-54.

Kueper, B. H. and Frind, E. O. (1991a) Two-phase flow in heterogeneous porous media. 1: Model development. *Water Resources Research*, v. 27, p. 1049-1057.

Kueper, B. H. and Frind, E. O. (1991b) Two-phase flow in heterogeneous porous media. 2: Model application. *Water Resources Research*, v. 27, p. 1058-1070.

Parker, J. C., Lenhard, R. J. and Kuppusamy, T. (1987) A parametric model for constitutive properties governing multiphase flow in porous media. *Water Resources Research*, v. 23, p. 618-624.

Pinder, G. F. and Abriola, L. M. (1986) On the simulation of nonaqueous phase organic compounds in the subsurface. *Water Resources Research*, v. 22, p. 109-119.

Pope G.A., Sepehrnoori, K., Sharma, M.M., McKinney, D.C., Speitel, G.E., and Jackson, R.E. (1999) Three-dimensional NAPL fate and transport model. EPA/600R-99/011 February 1999.

Sleep, B. E. and Sykes, J. F. (1989) Modeling the transport of volatile organics in variably saturated media. *Water Resources Research*, v. 25, p. 81-92.

Spivak, A., Price, H. S. and Settari, A. (1977) Solution of the equations for multidimensional, two phase, immiscible flow by variational methods. *Society of Petroleum Engineering Journal*, p. 27-41.

Suk, H. and Yeh, G.T. (2007) 3D, Three-Phase Flow Simulations Using the Lagrangian-Eulerian Approach with Adaptively Zooming and Peak/Valley Capturing Scheme. *Journal of Hydrologic Engineering, ASCE*, v. 12(1), p. 14-32.

Suk, H. and Yeh, G.T. (2008) Multiphase flow modeling with general boundary conditions and automatic phase-configuration changes using a fractional-flow approach. *Computational Geosciences, Online First*, DOI 10.1007/s10596-008-9094-x.

Wendland, E. and Flensburg, D. (2002) A hybrid numerical scheme for multi-phase flow in heterogeneous media. Proc., XIV Int. Conf. on Computational Methods in Water Resources, Delft, The Netherlands, p. 297-304.

White, M. D. and Ostrom, M. (1995) STOMP, sub-

surface transport over multiple phases, theory guide. PNL-XXXX, Pacific Northwest Laboratory, Richland, Wash.

2008년 9월 5일 원고접수, 2008년 12월 20일 게재승인.