

Folyadék-visszatartás, folyadékvezetés és porozitás összefüggései vízzel és/vagy szerves folyadékkal telített talajokban. II. Folyadékvezető-képesség – Szemle

^{1,2}HERNÁDI Hilda, ²BARNA Gyöngyi és ²MAKÓ András

¹ Pannon Egyetem, Georgikon Kar, Keszthely

²Magyar Tudományos Akadémia, Agrártudományi Központ,
Talajtani és Agrokémia Intézet, Budapest

A talaj porozitása, pórusméret-eloszlása (*pore size distribution* – PoSD), szemcseméret eloszlása (*particle size distribution* – PSD), az aggregátumok méret szerinti eloszlása (*grain size distribution* – GSD), az elemi szemcsék és aggregátumok alakjellemezői, elrendeződése, fajlagos felülete, a felület minősége, a molekulák és a szemcsék közötti kötőerők, a humusz- és agyagkolloidok hatásai, illetve mindezek változása jelentős mértékben meghatározza a víz és a vízzel nem elegyedő szerves folyadékfázisú (*nonaqueous phase liquids* – NAPL) szennyezőanyagok terjedését és megkötődését a talajban (pl. MITCHELL & MADSEN, 1987; GRABER & MINGELGRIN, 1994; MOHANTY et al., 1998; ŠIMŮNEK et al., 2003; PIRI & BLUNT, 2005; NIMMO et al., 2007; JARVIS, 2007; ALIZADEH & PIRI, 2014). A talaj fenti jellemzői és telített, illetve telítetlen fázisú folyadékvezető-képessége (K_{sat} , illetve K_h) között általában szoros kapcsolatot állapítottak meg (pl. PACHEPSKY et al., 2006a; ALAOUI et al., 2011; ALIZADEH & PIRI, 2014; VEREECKEN et al., 2016). A K_h -ra felírt összefüggésekben a folyadékfeltöltettség, illetve a kapilláris nyomás is jelentős szerepű (HILLEL, 1998; AMER, 2012; MAKÓ & HERNÁDI, 2012).

A víz és NAPL típusú szennyezőanyagok talajban történő terjedését modellező számítások eredményességét meghatározza, hogy a modellezett pórustér milyen mértékben reprezentálja a valós porózus közeget és a közegben fellépő fáziskölcsönhatásokat (BOULDING, 1995; BRAUN et al., 2005; PACHEPSKY et al., 2006b; ANDERSON, 2015). Az alkalmazott modellszámítások kiindulópontját a kapilláris nyomás–folyadékfeltöltettség (*capillary pressure–saturation* – P_c – S), a relatív áteresztés–telítettség (*relative permeability–saturation* – k_r – S), ezek kombinált alkalmazása (P_c – S – k_r) és a telített vízvezető-képesség (*hydraulic conductivity* – K_{sat}) ismerete (mért vagy becsült értéke) jelenti (*constitutive models*). Két folyadékfázis egyidejű jelenlétekor a talaj vizsgált folyadékra vonatkozó áteresztőképessége (permeabilitása) a másik folyadékmennyisége függvényében meghatározható. A relatív permeabilitás ekkor a közegre jellemző abszolút permeabilitás és a két folyadék jelenlétében meghatározható effektív permeabilitás hányadosa. A vízre vonatkozó k_r függvény minimum és maximum értéke – kapilláris áramlást feltételezve – a víz, illetve NAPL szennyezőanyag-maradvány feltöltettségtől függően határozható meg. A két végponti telítettség (*endpoint*

saturation), és a két folyadék áteresztőképesség „görbe” metszéspontja (*cross point saturation* – a közeg két folyadékra vonatkozó k_r értéke) kiemelkedő jelentőségű a kőolajipari számításokban is. A kulcsfontosságú függvény értékek (*key points*) közül legtöbb esetben az effektív víztelítettség, illetve az aktuális víztelítettség értéke ismert (pl. FATTAH, 2004; ANDERSON, 2015).

Szemle közleményünk első részében összefoglaltuk, hogy a talajok a pórusterének elméleti leképezése hogyan változott az elmúlt hatvan évben. A szemléletbeli változásokkal és a víztartó-képesség meghatározására alkalmazott módszerek, eszközök fejlődésével szükséges lépést tartani a szerves folyadékokra vonatkozó hidrológiai jellemzők meghatározásakor is (HERNÁDI et al., 2017). Tanulmányunk második részében a víznél kisebb sűrűségű (LNAPL – *light nonaqueous phase liquid* típusú) kőolaj, illetve kőolajszármazékok (továbbiakban csak: NAPL) porózus közegben áramlását szimuláló modellezésben fontos folyadékvezető-képesség és a talaj pórusrendszerének jellemzői közötti összefüggéseket tárgyaló szakirodalom megállapításait, eredményeit foglaltuk össze.

A talajpórusok vízvezető-képességének becslési lehetőségei

A telített (K_{sat}), illetve telítettség közeli vízvezető-képesség megfelelő pontosságú meghatározása elsődleges fontosságú a folyadékok felszín alatti mozgásának szimulációjában. A telítetlen talaj vízvezető-képessége a (kapilláris vezetőképesség – K_h) a vízre vonatkoztatható relatív áteresztőképesség, illetve permeabilitás és a vízpotenciál/kapilláris nyomás (P_c), illetve víztelítettség (S) függvénye. A hidrológia, talajmechanika és talajfizika szakterületén számos helyszíni és laboratóriumi eljárást fejlesztettek ki a talaj vezetőképességének meghatározására (CSÓKÁS, 1995; WALSH, 2008; FODOR et al., 2009; MAKÓ & HERNÁDI, 2012) valamint nagy agyagtartalmú talajok, agyagszigetelések K_{sat} értékeinek és porozitásának (tömődöttségének) egyidejű vizsgálatára (RUBIN et al., 1998; LAL & SHUKLA, 2004; MAKÓ & HERNÁDI, 2012). A K_{sat} értékét és a K_h függvényt – a mérés bonyolultsága, időigényesség miatt – a modellezési gyakorlatban általában becsléssel határozzák meg. A becslő eljárások három csoportja a Kozeny-típusú becslő egyenletek, a fizikai elvű becslések (empirikus vagy a pórusok méret szerinti eloszlásából képzett függvényértékek, illetve függvény-paraméterek meghatározására alkalmas közelítő eljárások) és pedotranszfer típusú becslő egyenletek (*pedotransfer function* – PTF) (1. táblázat).

A vízvezető-képesség meghatározása Kozeny-típusú egyenletekkel

A KOZENY (1927) CARMAN (1937) által módosított ún. Kozeny-Carman egyenlet általános formája a porózus közegek hidraulikus vezetőképessége és a folyadék-tulajdonságok (dinamikai viszkozitás, sűrűség), valamint a szilárd fázis pórusterét (porozitás, pórusok alak paramétere, a pórusok kanyarulatosságát kifejező mutató), illetve szemcseösszetételét (a szemcsék fajlagos felülete) jellemző mutatók közötti összefüggést számszerűsíti – ideális porózus közeget feltételezve. E számítási eljá-

rás alapját a homok fizikai féleségű talajokon (ideális porózus közeg) végzett vizsgálatok eredményei jelentik. Az agyag fizikai féleségű talajokra végzett vezetőképesség-becslés pontatlansága ugyanakkor részben csak mérés technikai (pl. nem tömegállandóság mellett meghatározott egyensúlyi telítettség értékek mérése), illetve elméleti leegyszerűsítések eredménye (pl. immobil víztartalom elhanyagolt, izotróp közeg feltételezett). A számítás egyik kritikus pontja a szemeloszlást jellemző fajlagos felület értékek meghatározása (CHAPUIS & AUBERTIN, 2003). A fajlagos felület mérése sokféle módszerrel lehetséges (pl. adszorpciós izotermák felvétele – LOWEL & JOEN, 1984), amelyek azonban meglehetősen körülményesek és eszközigényesek. A hidrológiai és talajmechanikai gyakorlatban alkalmazott egyenletekben ezért a fajlagos felület értékét általában az ún. effektív átmérő (hatékony szemcsenagyság) értékekkel (BEAR, 1979; HAZEN, 1982) helyettesítik. (Az effektív átmérő értékek – a vizsgált közeggel azonos fajlagos felülettel jellemezhető, adott elrendeződésű gömbökből álló rendszer „reprezentatív” átmérője, mely becsülhető pl. a szemeloszlási görbék nevezetes értékeiből (pl. 10 és 60% kumulatív gyakoriságú átmérőértékek ismeretében – JUHÁSZ, 2002), illetve a görbe formáját és a szemcsék osztályozottságát is kifejező ún. alaki paraméterek képzésével is (KOVÁCS, 1972)). A fajlagos felület számszerűsíthető a porózus közeg fajlagos ellenállása ismeretében (GÁLFI & LIEBE, 1981), vagy reológiai jellemzők figyelembevételével. A folyási határ (*liquid limit*) alapján meghatározható fajlagos felület értékekkel a Kozeny-Carman egyenlet megfelelő pontossággal alkalmazható tömörített agyagtalajok vezetőképességének meghatározására (STEIAKAKIS et al., 2012). CHAPUIS és LÉGARÉ (1992) javasolt egy egyszerű geometriai alapú összefüggést a fajlagos felület meghatározására a szemcsék átmérője és elrendeződése alapján, rigid – a folyadékáramlás során a változatlan pórusméret-eloszlással jellemezhető – porózus közegekre vonatkozóan. Ez utóbbi elméleti alapon pontosítható különböző alaki és átszámítási faktorokkal (pl. GREGG & SING, 1967; CHAPUIS & AUBERTIN, 2003).

A vízvezető-képesség meghatározása fizikai elvű becsléssel

Az 1950-es évektől számos összefüggést dolgoztak ki a K_{sat} és K_h becslésére, melyekről IRMAY (1954), GARDNER (1958) tanulmányai adnak első iránymutatást. A K_h függvényt közelítő számításokban a K_{sat} – mért vagy becsült – értéke referencia pontként (*matching point*) szolgál, a K_h függvény pedig a K_{sat} és a relatív áteresztőképesség (k_r) szorzata (VAN GENUCHTEN, 1980; RAJKAI, 1984, 2004). Ez utóbbi (k_r) a víztartó-képességből (P_c-S) származtatható valamely parametrikus függvény alkalmazásával (legelterjedtebbek pl.: MUALEM, 1976; VAN GENUCHTEN, 1980), akár egyidejűleg is (P_c-S-k_r összefüggések). A K_{sat} azonban nagy variabilitást mutató talajfizikai jellemző, értéke a művelésmódtól, a talaj mechanikai összetételétől, típusától, a talajképző közettől, a makro-porozitástól, a nedvességtartalomtól és a mérés módjától, eszközétől függően, illetve térben és időben is jelentős mértékben változik (ANDERSON & BOUMA, 1973; NIMMO, 1997; ŠIMŮNEK, 2003). A K_{sat} ismeretében végzett parametrikus függvényillesztés a „száraz végponti” (kisebb telítettség melletti) vezetőképesség értékek torzításához

is vezethet (LUCKNER et al., 1989). Ezért a K_h függvény K_{sat} közeli értékeinek alkalmazása javasolt (VERECKEN et al., 1990; FODOR et al., 2009: 1 hPa; illetve JARVIS et al., 2002; SCHAAP & VAN GENUCHTEN, 2006: 0,4 hPa) (*1c ábra*).

A talajok szemcseméret eloszlása és folyadékvezető-képessége közötti első fizikai alapú összefüggések számszerűsítése a kapilláriscső (BPC – *Bundle of Parallel Capillary tubes*) elmélet alapján PURCELL (1949) nevéhez fűződik. (A BPC elméletben a talaj hidrológiai jellemzőinek meghatározására szolgáló összefüggéseket a póruster viszonylagos leegyszerűsítésével képzik: a talaj pórusterét kapilláris csövekből álló rendszerként írják le – *1A ábra*). A leegyszerűbb becslő összefüggésekben a HAZEN (1982) által javasolt effektív szemcseátmérő értékek ismeretében végzett közelítést pontosították azzal, hogy a szemcseméret-eloszlás jellemzésére inkább a medián pórusméret értékeket alkalmazták becslő változóként (MARSH & PERRY, 1966). A későbbi módosításokkal elsősorban a kapillárisok jellemzőinek jobb reprezentációját próbálták elérni (pl. a pórusok érdességét és kanyarulatosságát kifejező paraméter – „*tortuosity*” – pontosabb, tapasztalati alapú, illesztési paraméterként történő meghatározásával) (pl. BURDINE, 1953; WILLEY & GARDNER, 1958; MUALEM, 1976; MUALEM & DAGAN, 1978) (*1b ábra*). A póruster különböző szabályos alakzatokból (háromszögek, négyszögek, összetett alakzatok, stb. – *1B ábra*) alkotta rendszerként való leképezésével a kapilláris csövek lamináris és nem lamináris, folyadékok vékony filmfázisként történő áramlási folyamatai (*thin film flow*), illetve a pórusokon belüli ún. pórusszögleti áramlási folyamatok (*corner flow*) elkülöníthetővé váltak (DULLIEN, 1979; TULLER et al., 1999; TULLER & OR, 2005). A tapasztalati alapon képzett modellekkel azonban a fizikai folyamatok megértése és pontosabb számszerűsítése korlátozott lehetőségű (TYLER & WHEATCRAFT, 1989). A fizikai alapú P_c – S – k_r összefüggésekben a talaj szemcséi és szerkezeti elemei között kialakuló, különböző keresztmetszetű (ekvivalens átmérőjű) kapillárisokból álló póruster az alkotó elemek meghatározott statisztikai eloszlásával jellemezhető, a kapilláris egyenlet (Laplace–Young egyenlet) felhasználásával (BRUTSAERT, 1966; LALIBERTE, 1969) (*1C ábra*). Az ún. „*cutting and random rejoining*” modellek már a pórusok összeköttetéseit és „*kölcsönhatásait*” is figyelembe veszik (pl. CHILDS & COLLIS-GEORGE, 1950; CAMPBELL, 1974). A modellezés során a BPC elmélet a Darcy és Poiseuille törvény alkalmazhatóságának teremt lehetőséget. A gyakorlatban alkalmazott parametrikus modellek – az egyszerűbbektől a pórusok kanyarulatosságát és geometriáját is figyelembe vevőkig – tehát mind ún. kapilláris áramlási modellek (*capillary flow model*). Ezek alkalmazásával elsősorban a kapilláris erők által meghatározott áramlási folyamatok modellezhetőek (BEVEN & GERMAN, 1982), a telítettség közeli (*wet end*) és „száraz végponti” (*dry end*) folyadéktelítettség mellett mérhető folyadékvezető-képesség kisebb pontossággal határozható meg. A századfordulón alkalmazott mikrotomográfiai és spektroszkópiai eljárásokkal végzett kísérletek eredményei alapján a fizikai alapú számításokat folyamatosan fejlesztették. E csoportba tartoznak a KOSUGI (1999), a SCHAAP és LEIJ (2000), az ASSOULINE (2001, 2005), illetve a TULLER és OR (2001) függvényeit alkalmazó javaslatok. Ezek több

alapvető szemléletbeli újítást is magukban foglalnak – ld. az alábbiakban és az 1e ábrán.

A PoSD és PSD összefüggések nemlineáris reprezentációja – A szerkezetes talajok pórusméret eloszlása sok esetben nem közelíthető megfelelő pontossággal egymódusú, szigmoid jellegű függvényekkel. A textúrából (specifikus összetétel) adódóan, illetve talajképződési folyamatok során képződött másodlagos porozitás következtében (pl. aggregáltság, biológiai élettevékenység hatására keletkező pórusok) heterogén szemcseeloszlással jellemezhető talajok hidrológiai jellemzői is jelentős heterogenitást, illetve talajtípustól is függő multimodalitást mutatnak (pl. OTHMER et al., 1991; DURNER, 1994; SCHAAP et al., 1999). Feltételezve hogy a talajszerkezet uniform véletlenszerű fragmentációs folyamat eredményeképpen keletkezik, a talajok szemcséi és pórusmérete közötti összefüggés jobban közelíthető a pórusméret eloszlás lognormál (KOSUGI, 1994; 1999), illetve exponenciális eloszlásával (ASSOULINE & TESSIER, 1988; ASSOULINE & TARAKOVKY, 2001), mint a PSD és a folyadékvisztartó-képesség görbe (*soil water retention curve* – SWRC) közötti lineáris összefüggésből kiindulva (pl. ARYA & PARISH, 1981; ARYA et al., 1999).

A póruster felosztása a folyadékokra ható erők szerint, multimodalitás – A póruster „felosztása” a pórusok mérete (ekvivalens átmérő értékek), illetve a pórusterben áramló folyadékokra ható erők szerint a talajtani, hidrológiai kutatásokban sem új keletű (KLIMES-SZMIK, 1962; BEVEN & GERMAN, 1982). Hidrológiai szerepük szerint különböző, eltérő pórusátmérő határértékekkel jellemezhető pórusok különíthetők el a talajtani, hidrológiai szakterületen is (pl. SSSA pórusméret szerinti csoportosítása – SSSA, 2008; *1d ábra*). A pórusteren belül gyakorlati szempontból alapvetően két pórus-típus különböztethető meg; a kapilláris/mikro/mátrix pórusok és nem-kapilláris/makro/szerkezeti pórusok csoportja (HILLEL, 1998). A gyakorlati felosztás jelentőségét a tanulmány első részében részletesebben összefoglaltuk a víztartó-képességre vonatkozóan (HERNÁDI et al., 2017). A vízmozgás szempontjából a makropórusok gyorsan leürülő pórusok (*rapidly-drainable-pores* – RDP). A mikropórusokat két különböző pórusátmérő-tartománnyal jellemezhető kapilláris pórusok alkotják, melyek megfeleltethetők a lassan leürülő és víztartó pórusoknak (*slowly drainable pores* – SDP; *water holding pores* – WHP) (AMER, 2012).

A többmódusú pórusméret-eloszlással jellemezhető talajok hiszterézis által befolyásolt hidrológiai jellemzőinek számszerűsítésére jó példával szolgál a RUDIYANTO és munkatársai (2015) által kidolgozott folyadékvezető-képesség meghatározási módszertan. A szerzők a kapilláris folyadékvisztartó-képesség hiszterézis jelenségeket mutató P_c - S összefüggéseit a PARKER és LENHARD (1987), az adszorpciós pórusterre vonatkozó P_c - S összefüggést az IDEN és DURNER (2014) által javasolt függvények szerint számították, majd ezt kombinálta PETERS (2013) filmfázisú és a kapillaritás által kontrollált vezetőképesség értékek összegeként számított, folyadékvezető-képességet leíró egyenletével (*1e ábra*).

A K_h becslés gyakorlati szempontból jelentős ágát napjainkban is elsősorban az SWRC, illetve porozitás alapú közelítő eljárások jelentik. Ezekkel lehetőség nyílik

a P_c – S – K_r meghatározására – külön-külön (AMER, 2012) vagy egyidejűleg (*simultaneous scaling* – pl. NASTA et al., 2013) –, a modellezési léptékek közötti átszámításra, a változók térbeli variabilitásának kifejezésére elméleti pórusgeometriai és a pórusok/elemi szemcsék statisztikai eloszlását jellemző mutatókból képzett faktorokkal (MILLER & MILLER, 1956; VERECKEN et al., 2007; KOSUGI, 1999). További tapasztalat, hogy az illesztési paraméterekre vonatkozó peremfeltételek megadásával a becslés pontosabbá tehető (RUDIYANTO et al., 2015).

A P_c – S – K_r összefüggések fejlesztésének sarkalatos pontja, hogy a K_h becslés pontosságát alapvetően meghatározza az SWRC meghatározásának pontossága. Egyes esetekben megfelelő becslés csak az SWRC multimodális leképezésével lehetséges (pl. DURNER, 1994; KOSUGI, 2002). A többmódusú függvények alkalmazása ugyanakkor jelentős kihívást jelent a numerikus modellezés során. Továbbra is kutatások tárgyát képezi, hogy a különböző pórustartományok közötti összeköttetések következtében létrejövő kölcsönhatások hogyan számszerűsíthetők megfelelő pontossággal (kettős- vagy multi-porozitású és/vagy átteresztőképességű modellek – *dual- or multi-porosity and dual- or multi-permeability models*) (JARVIS, 1994; HUTSON & WAGENET, 1995; GERKE & VAN GENUCHTEN, 1993; ŠIMŮNEK et al., 2003). Ezen összefüggések már szoftver szinten is alkalmazottak (MACRO – JARVIS, 1994; RZWQM – AHUJA & HEBSON, 1992; TRANSMIT – HUTSON & WAGNET, 1995; HYDRUS 1D, és 2D – ŠIMŮNEK et al., 1998; 1999).

Makropórusos áramlás – A telítettség közeli áramlási folyamatokban a makropórusok szerepe kiemelkedő jelentőségű, hiszen a felszínre jutó folyadék elsődlegesen a nagyobb pórusokban áramlik tovább (*macropore/preferential flow*) (KOOL & PARKER, 1987; PARKER & LENHARD, 1987; LENHARD et al., 1989, 1991; ŠIMŮNEK, 2003; PHAM et al., 2005). A makropórusok kis mennyiségben is akár egy nagyságrenddel is növelhetik a talaj mátrix vezetőképességét is (BOUMA et al., 1977; CHEN & WAGENET, 1992). A talajszerkezet hatása 1 000 hPa nyomásértékig a fizikai féleségét akár el is fedheti (HILLEL, 1998). E pórusokban a folyadékmozgás nem a kapillaritás, hanem elsősorban a gravitációs erők által meghatározott. A makropórusos folyadékáramlási folyamatok számszerűsítésében további hibaforrás lehet, ha nincsen figyelembe véve a pórusokba bezárt levegő mennyisége (ebből adódóan az effektív összporozitás alapján számított K_{sat} értéke a valós K_{sat} értékének megközelítőleg 80–90 százaléka) és az hogy a telítetlen fázisú vezetőképesség jelentős hiszterézis hatást mutat (RUDIYANTO et al., 2015). Egyes esetekben – az SWRC függvény paraméterei közötti szoros függőségi kapcsolat következtében – a telítettség közeli értékek meghatározásának pontosságát csökkentheti a száraz végponti értékek (pl. reziduális telítettség) pontatlan, egyszerűsített meghatározása.

A makropórusos áramlás (*macropore flow*) jellemzésére javasolt parametrikus függvények és fizikai alapú közelítő eljárások leírása pl. ŠIMŮNEK és munkatársai (2003), illetve JARVIS (2007) összefoglaló munkájában részletesen megtalálható. A többmódusú SWRC függvények parametrizálását követően a K_h is jobb pontossággal közelíthető a teljes nyomástartományban (ROMANO & NASTA, 2016).

AMER (2012) a makropórusos áramlási folyamatok számszerűsítésének pontosításához a gyorsan leürülő pórusok (RDP) további felosztását javasolta az inercia erők és viszkozitási erők egyensúlyi értékéhez (Reynolds szám: $R = 1$) – a Poiseuille törvény értelmében – rendelhető kapilláris átmérő értékhatár alapján (95 μm – CHEN & WAGENET, 1992). A lamináris folyadékarámlással nem jellemezhető ($R > 1$) pórusokon átáramló folyadék mennyisége más matematikai összefüggéssel közelíthető, mint azon pórusok telítetlen folyadékvezető-képessége, melyekben a vízvezető-képesség a lamináris áramlást feltételező Darcy törvény értelmében számítható, a P_c -S és K_{sat} ismeretében meghatározható.

Gőz- és filmfázisú áramlás – A száraz végponti, kis átmérővel jellemezhető kapilláris pórusok által meghatározott, telítettségfüggő folyadékvezető-képesség a folyadékokra ható kapilláris és viszkozitási erők, intermolekuláris kölcsönhatások függvényében alakul (TULLER & OR, 2001, 2005; LEBEAU & KONRAD, 2010; AMER, 2012). A kis átmérővel jellemezhető kapilláris pórusok vezetőképességének pontosításához AMER (2012) javasolta azok SWRC értékeinek pontosítását a vízgőzadszorpciós mérések alapján a többrétegű adszorpciós folyamatok jellemzésére kidolgozott BET-elmélet (BRUNAUER et al., 1938) értelmében meghatározott immobil adszorpciós víztartalommal – ezáltal a „száraz” végponti értékek is jobb pontossággal közelíthetők; a talaj vezetőképessége pedig a pórusméret-tartományok vezetőképességének összege.

A „száraz” végponti közelítés pontosságának növelésére – az SWRC meghatározására alkalmazott összefüggések fejlesztési lehetőségeihez hasonlóan – egyes szerzők a filmfázisú (TULLER & OR, 2001; ZHANG, 2011; PETERS, 2013), illetve a gőzfázisú transzport folyamatok (PHILIP & DE VIRES, 1957) figyelembevételét, illetve számszerűsítését javasolták a parametrikus modellekben. A kapilláris nyomás adott, a talaj fizikai féleségére jellemző határértéke felett (TULLER & OR, 2005: -2,1 m ~ 200 hPa; LEBEAU & KONRAD, 2010: a talaj fizikai féleségétől függően -1– -10 m ~ 100–1 000 hPa) a pórusfolyadék folyadékfilmként viselkedik, a pórusokban egyidejűleg több folyadékfázis is jelen lehet (*thin film flow model*), melynek vastagsága arányos a folyadék viszkozitásával és a hőmérséklettel. (Ez esetben a kapilláris áramlási modell feltételei nem érvényesek). Nagyon vékony filmek esetében az összefüggés exponenciális (OR & TULLER, 2000). TOKUNAGA (2009) modellkísérlete alapján a viszkózus folyadékarámlás monodiszperz gömbszerű részecskék esetén két külön egyenlettel számítható, 10 μm átmérő határt kijelölve – egy a porozitás és a részecskék átmérőjéből számítható új paraméter felhasználásával. TULLER és OR (2005) szerint ezen elmélet kiterjeszhető polidiszperz rendszerekre, a pórusok ekvivalens átmérőit behelyettesítve az egyenletekbe – amely szintén a BET-elmélet (BRUNAUER et al., 1938) szerint határozható meg. A két elméleti nyomástartomány (adszorpciós és kapilláris erők által meghatározott) jellemzésére szolgáló összefüggések egyszerre pl. egyszerű súlyozott átlagolással használhatóak egymás mellett (PETERS & DURNER, 2008).

A vízvezető-képesség meghatározása pedotranszfer függvényekkel

A K_{sat} becsülhető alapvizsgálati jellemzők (textúra, porozitás), illetve morfológiai talajtulajdonságok ismeretében. Alapvető tapasztalat, hogy a talajjellemzők és a vízvezetőképesség közötti összefüggés exponenciális függvényekkel közelíthető megfelelő pontossággal (pl. CAMPBELL & CAMPBELL, 1982; CAMPBELL, 1985; PUCKET et al., 1985) és a K_{sat} értékét leginkább meghatározó talajjellemző az agyagtartalom (HERNÁDI & MAKÓ, 2012). Emellett az iszaptartalom és a térfogattömeg is figyelembe vehető (JARSO, 1997).

Gyakran használják a légáteresztő-képesség mérését a talaj K_{sat} becslésére, mivel mind a légvezetés, mind pedig a K_{sat} döntő hányadában a makropórusokban történik. Irodalmi adatok alapján a szántóföldi vízkapacitásnak megfelelő víztelítettség mellett mért légáteresztő-képesség vethető össze leginkább a talajok hidraulikus vezetőképességével (LOLL et al., 1999; IVERSEN et al., 2001).

A K_h függvény értékei és a függvény paraméterei is becsülhetőek PTF-típusú becslő összefüggésekkel (pl. SCHAAP & VAN GENUCHTEN, 2006). A PTF-ekben felhasznált talajjellemzők általában a mechanikai összetétel, térfogattömeg mellett, a szervesanyag-tartalom, illetve a térfogatszázalékos telítési nedvességtartalom értékek által jellemzett összporozitás (BLOEMANN, 1980; BRAKENSIEK et al., 1984; JAINES & TYLER, 1984; VERECKEN 1995; WÖSTEN et al., 1999; VERECKEN et al., 2007). E becslő eljárások alkalmazhatóságát mind a telített (COSBY et al., 1984; VERECKEN et al., 1990; WÖSTEN et al., 1999), mind a telítetlen vízvezető-képesség becslésére számos publikált kutatási eredmény igazolta (RAWLS & BRAKENSIEK, 1985; VERECKEN et al., 1990; WÖSTEN et al., 1999). A K_h függvény paraméterei becsülhetőek egy mért víztartó-képesség érték ismeretében is (pl. GREGSON et al., 1987). A becslést pontosíthatja – a változók közötti összefüggések nemlineáris jellege következtében – ha a független változók logaritmikus értékei szerepeltethetők az egyenletben; a változók értékei így normálhoz közelebb álló eloszlást mutatnak (VERECKEN et al., 1990). SCHAAP és VAN GENUCHTEN (2006) megállapították, hogy pontbecslő módszerekkel – bár matematikailag bonyolultabb – jobb pontossággal határozható meg a talajok vízvezető-képessége a nagyobb agyag és portartalmú talajokra, a görbebecslés a homoktalajok esetében ad megfelelő pontosságú eredményt. A parametrikus függvényillesztés elvégezhető szabadon elérhető specifikus szoftverekkel (pl. VAN GENUCHTEN et al., 1991 – RETC; FODOR & RAJKAI, 2005 – TALAJTANonc 1.0), illetve általános felhasználású táblázatkezelő programokkal (pl. Excel – Microsoft Corp. Seattle, WA; Lotus 1-2-3 – IBM Software Group, Cambridge, MA). A validált PTF-ek egy része már a gyakorlatban is alkalmazott. Ígéretes eredményekkel szolgálnak a neurális háló alapú becslő eljárások (pl. TAMARI et al., 1996; KOEKKOEK & BOETLINK 1999; SCHAAP et al., 1999; WAGNER et al., 2001; WÖSTEN, 1999; 2001; GHANBARIAN-ALAVIJEH, et al., 2014) és szoftverek is (MINASNY et al., 2004 – Neuromultistep; ACUTIS & DONATELLI, 2003 – SOILPAR 2.0; SCHAAP et al., 2001 – ROSETTA; CRESSWELL et al., 2000 – SH-Pro).

A pórusszerkezet megváltozása víz/szerves folyadék/szilárd fázis rendszerben

A különböző fizikai-, kémiai- és fizikokémiai tulajdonságokkal jellemezhető folyadékok számára a pórustérnek csak meghatározott része elérhető; a szabad folyadékáramlást biztosító, egymással összeköttetésben álló, adott folyadékkal telített pórusok mennyisége – az effektív porozitás – folyadékonként eltérő. Általánosság szerint a talajok NAPL-vezető képessége nagyobb, mint a vízvezető-képessége (DRAGUN, 1998). A szerves folyadékok jellemzőitől (pl. sűrűség, viszkozitás) is függő értékű K_h növeléséről számol be pl. MITCHELL és MADSEN (1987) és SHACKELFORD (1994) is. A szerves folyadékvezető-képesség azonban két vagy három nagyságrenddel is nagyobb lehet annál az értéknél, mint ami a vízvezető-képességből és a víz és az NAPL sűrűségi, viszkozitási értékeiből ún. „átskálázási technikákkal” számolható, ideálisan porózus közeget feltételezve (ld. később, Kozeny-Carman típusú közelítés). Az 1980-as években készült hulladéklerakók, vagy kármentesítési helyszínek szigeteléséhez alkalmazható természetes és szintetikus agyagok és szerves folyadékok „kompatibilitását” vizsgáló tanulmányok tapasztalatai alapján a porózus közeg folyadékvezető-képessége jelentősen nőhet, ha szerves folyadékkal szennyeződik, meghaladva akár az előzetesen vízzel telített talaj telített vízvezető-képességét/relatív áteresztőképességét is (ANDERSON et al., 1985; GRABER & MINGELGRIN 1994; DRAGUN, 1998). E jelenség alapvetően kétféle folyamattal magyarázható, a folyadékfázis jellemzőinek megváltozása, illetve a folyadékok és szilárd fázis közötti kölcsönhatások eltéréseivel. Két folyadékfázis egyidejű jelenléte esetén a talajba jutó szerves folyadékok a pórusvíz fizikai-, kémiai- és fizikokémiai tulajdonságait megváltoztathatják – többnyire koncentráció függően – mint pl. a felületi feszültség, kontakt szög, viszkozitás, diffuzivitás, illetve a szerves folyadék jellemzői is változhatnak, pl. oldhatósági viszonyok, egyes komponensek elpárolgása, vagy a szerves felületeken való adszorpciója következtében („*reciprocal effect*” – CHEN et al., 1987).

A szilárd fázis/víz és/vagy szerves folyadék fázis kölcsönhatásából eredő porozitás-változás és a hidrológiai jellemzők megváltozását is vizsgáló tanulmányok alapvetően háromféle – egymással összefüggésben lévő – porozitás-változási folyamatról számolnak be: az aggregátumok és mikroaggregátumok (részleges) dezintegrációja; a duzzadás-zsugorodás következtében létrejövő térfogati változások, és az egyéb, kisebb mértékben meghatározó folyamatok (mint pl. a szemcsék és aggregátumok elrendeződésének megváltozása, illetve a szerves folyadékok rétegek közötti adszorpciója hatására bekövetkező változások – pl. CHEN et al., 1987; DRAGUN, 1998; RUBIN et al., 1998). A talajok szerves folyadék és vízvezető-képessége között tapasztalt eltérést egyesek elsősorban a folyadékok polaritásbeli eltéréseivel (pl. MESRI & OLSON, 1971), míg mások a szerves folyadékok víznél kisebb dielektromos állandójával magyarázták. A kisebb dielektromos állandó következtében az NAPL csökkentheti a részecskék közötti kötőerőket – a talaj alkotóelemeinek felületén képződő diffúz kettős réteg (*diffuse*

double layer – DDL) „összehúzódását” eredményezve repedéseket hozhatnak létre. A szerves folyadékok kiszoríthatják a pórusokból a vizet növelve a vezetőképességet/permeabilitást (KINSKY et al., 1971; ANDERSON et al., 1985; FERNANDEZ & QUIGLEY, 1985; HETTIARATCHI et al., 1988; BUDHU et al., 1991). A szerves folyadékok okozta elektrosztatikus hatások továbbá flokkulációt indukálhatnak a talajban. A víz/szilárd fázis rendszerek porozitás-változásához hasonló folyamat szerint az effektív pórustér nőhet – amennyiben a pórusszerkezet homogenitásából és a viszonylagosan kis pórusméretből adódóan a szemcsék helyben flokkulálódhatnak pl. tiszta kaolinit minták esetében (VAN OLPHEN, 1963; ANDERSON et al., 1985; DRAGUN, 1998; RUBIN et al., 1998). Az effektív pórustér csökkenhet is, ha a flokkuláló szemcsék a talaj strukturált pórusterében lefelé vándorolnak és felhalmozódnak a nagyobb pórusok szűk torok részeiben „*pore throat*” (CHEN et al., 1987; GRABER & MINGELGRIN, 1994). Számos szerző szerint az aggregátumok közötti összekötő erők csökkenésével keletkező mikropórusok és repedések okozhatják az agyagszigetelések és nagyobb agyagtartalmú talajok növekvő szerves folyadék átérésztését (pl. FERNANDEZ & QUIGLEY 1985). Nagy agyagtartalmú illetve sok cementáló hatású összetevőt tartalmazó talajok mikrostruktúrája, a pórusok geometriája és a porozitás is megváltozhat a vizsgált talaj aktuális víztartalmától függően (MURRAY & QUIRK, 1982; ANDERSON et al., 1985; FERNANDEZ & QUIGLEY, 1985; IZDEBSKA-MUCHA & TRZCIŃSKI, 2008). A agyagtartalom befolyásolja a szerves folyadékfázis konduktív transzportját és a szerves komponensek diffúzióját is (CHEN et al., 1987).

Számos szerző publikált eredményei mutatják, hogy különböző mértékű és nem egyértelműen számszerűsíthető az összefüggés a dielektromos állandó és az agyagásványok szerves folyadékviszartartó-, illetve vezetőképessége között (MURRAY & QUIRK, 1982; MAKÓ & ELEK, 2006; MAKÓ et al., 2009). Két folyadékfázis egyidejű jelenléte esetén a fizikokémiai tulajdonságok együttes figyelembevételére javasolható a duzzadási folyamatok leírására szolgáló összefüggésekben, mint pl. az oldhatósági viszonyok mutatói (*solubility parameter* – OLEJNIK et al., 1974; HETTIARACHI et al., 1988). GRABER és MINGELGRIN (1994) a HILBRANT és munkatársai (1970) által polimerek duzzadási folyamatainak jellemzésére szolgáló – eredetileg kismolekulájú kétfázisú rendszerek keveredését jellemző – termodinamikai összefüggéseit terjesztette ki agyagásványokra vonatkozóan. Az egymással kölcsönhatásban lévő fázisok viselkedése – pl. a szilárd fázis duzzadásának maximuma – ez alapján leegyszerűsítve három különböző energia arányán múlik, a szilárd-szilárd, a folyadék-folyadék és a szilárd-folyadék fázisok közötti kölcsönhatások mértékének megfelelően; pl. a részecskék közötti kölcsönhatásokat meghatározó erők (pl. elektrosztatikus és van der Waals erők) egyensúlyát kifejező függvénykapcsolatok (*net interparticle interaction curve*) alapján jellemezhetőek (ACAR & OLIVIERI, 1990).

A talajporusok szerves folyadékvezető-képességének meghatározása

A talajok NAPL-vezető képessége is meghatározható a vízvezető-képesség méréséhez hasonlóan laboratóriumban pl. a csökkenő folyadéknomás módszerrel (Darcy-, illetve Richards-egyenlet érvényessége mellett), az NAPL-visszatartó képesség meghatározására alkalmas dinamikus eljárásokkal (Darcy-Buckingham áramlás). Helyszíni értéke közvetve meghatározható, fúróluk módszerrel, gázkitermelési adatok alapján, vagy a talajok légáteresztő-képességének meghatározásával – feltételezve, hogy a levegőfázis a NAPL fázishoz hasonlóan mérsékelt kölcsönhatásokat mutat a talajok szilárd fázisával (HORNAPOUR et al., 1986; MAKÓ & HERNÁDI, 2012). Ez utóbbi eljárás laboratóriumi körülmények között is alkalmazható, elsősorban a telített vezetőképeség meghatározására (pl. COREY 1986; DUNAI et al., 2007).

Az NAPL-vezető képesség meghatározására alkalmazott becslő eljárások

A gyakorlatban a talajok NAPL-vezető képességét általában a vízre vonatkozó hidrológiai jellemzők ismeretében határozzák meg, becsléssel. A közelítő eljárások DULLIEN (1979), illetve HORNAPOUR és munkatársai (1986) szerint alapvetően négy csoportba sorolhatóak. Az 1950-es években kidolgozott “korai” számítási eljárások három csoportja a Kozeny-típusú eljárások, a „geometriai” modellek (különböző típusú kapilláris áramlást feltételező „empirikus modellek”) és a statisztikai módszerek (*cutting and random rejoining models*). E csoportosítás szerint empirikus modellek közé sorolhatóak a K_h függvény paramétereinek meghatározására alkalmazott empirikusan, illetve fizikai elv alapján (ld. korábban) képzett közelítő eljárások és az NAPL-visszatartó képesség becslésére alkalmas pedotranszfer függvények képzésére irányuló kezdeményezések is. A kőolajipar által támogatott kutatásokban kifejlesztett “korai” modellekkel párhuzamosan képzett és napjainkban is alkalmazott környezetvédelmi célú modellek algoritmusai is többnyire a fizikai elv alapján képzett, két- (és három)fázisú összefüggéseket tartalmaznak. A negyedik csoportba az ún. pórushálózat modellek sorolhatóak. E csoportosítás alapvetően a vízvezető-képesség becslés módszertani csoportjainak felosztását követi, hiszen elsősorban az arra vonatkozó összefüggések fejlődésével változtak e számítások, kis mértékben pontosítottak általuk az NAPL-vezetőképességre vonatkozó összefüggések.

Korai modellek

A kétfázisú (két folyadékfázis: víz/levegő; olaj/levegő) talaj NAPL típusú szennyezőanyagokra vonatkozó vezetőképességének közelítő meghatározása a Kozeny-Carman egyenlet értelmében lehetséges a porózus közegre jellemző effektív permeabilitás (a közet/porózus közeg folyadékjellemzőktől független értékű tulajdonsága), illetve a folyadékok sűrűsége és viszkozitása ismeretében a vízvezető-képességéből. Az átszámításhoz – az NAPL-visszatartó képesség becslésére alkalmazott átszámítási/skálázási eljárásokhoz hasonlóan – elméleti alapon feltételezett a porózus közeg jelentős leegyszerűsítése (ideális porózus közeg:

homogén, izotróp és a fáziskölcsönhatások elhanyagolhatóak) (AMYX et al., 1960; KESSLER & RUBIN, 1987; WEAWER et al., 1994). Nagy heterogenitású talajmintasoron elvégzett vizsgálatok igazolták, hogy a modellekben széleskörűen alkalmazott Kozeny-Carman egyenlet alapján történő fenti átskálázási technika csupán a durva mechanikai összetételű talajoknál eredményez megfelelő pontosságú NAPL vezetőképesség becslést, egyéb esetekben hibás eredményekre vezethet (MAKÓ, 1995, 1997; MAKÓ et al., 2009; DUNAI & MAKÓ, 2011).

A hidrológiai, kőolajipari és a környezetvédelmi célú modellezésben is egyaránt az az eljárás terjedt el, hogy (kettő vagy) több fázis egyidejű jelenléte esetén a porózus közeg NAPL típusú szennyezőanyagra vonatkozó relatív áteresztő képessége másodlagos bemeneti változóként határozható meg. A vízre vonatkozó különböző parametrikus eljárásokkal képzett k_r függvény (pl. BURDINE, 1953; MUALEM, 1976; FULCHER, 1985) a KOZENY (1927), illetve a PURCELL (1949) által javasolt összefüggésekkel számítható át a szerves fázisokra vonatkozóan.

A porózus közeg (elsősorban kőzetek) szerves fázisvezető-képességét számszerűsítő összefüggések pontosítására vonatkozóan a kőolajipari célú kutatások elsősorban a több fázis egyidejű jelenléte esetén meghatározható k_r összefüggések fejlesztését tűzték ki célul. Az 1960-as években már ismert, de csak az 1980-as években elterjedt dinamikus (fokozatmentes nyomásváltoztatás mellett), a P_c – S – k_r meghatározására alkalmas mérési eljárásokkal (pl. nyomáscellák) lehetővé vált a nem egyensúlyi folyamatok tanulmányozása akár háromfázisú, kevert nedvesítésű, heterogén porozitású és rétegelrendezésű rendszerekben is. A dinamikus módszerek és a röntgen-, gamma sugáryengítési módszerek, illetve a digitális képalkotási eljárások kombinált alkalmazása a pórusterben lezajló mikro-léptékű áramlási folyamatok tanulmányozására, és a póruster jellemzésére is lehetőséget nyújt. A dinamikus mérési eljárások alkalmazásával végzett kísérletek eredményei igazolták – a maradványtelítettség és belépési küszöbnyomás mellett – az áramlási folyamatok során változó fázis jellemzők, mint a viszkozitás, a nedvesedési szög, a határfelületi feszültség, a szilárd fázis és fázisok kölcsönhatását jellemző terjedési koefficiens értéke, illetve a hiszterézis jelenségek és a szilárd- és fázisok közötti kölcsönhatások (duzzadás-zsugorodás, dezaggregáció) meghatározó szerepét fázisú transzportfolyamatokban (HONARPOUR et al., 1986; DiCARLO, et al., 2000; BLUNT, 2001, WERTH et al., 2010; MAKÓ & HERNÁDI, 2012; ALIZADEH & PIRI, 2014).

Az 1980-ig alkalmazott kétfázisú relatív permeabilitás meghatározására alkalmas mérési módszereket és a két-, illetve háromfázisú relatív permeabilitás empirikus meghatározási eljárásokat HONARPOUR és munkatársai (1986) foglalták össze. A P_c – S – k_r elméleti összefüggések pontosítására indult kőolajipari kutatások vizsgálati eredményeit – az 1980-as évektől napjainkig – pl. ALIZADEH és PIRI (2014) összefoglalója tartalmazza. A szerzők az 1980-as évektől kezdődően indult megközelítőleg 100 publikált laboratóriumi mérés körülményeit és tapasztalatait elemezték és foglalták össze, előretételeket nyújtva a jövőben szükséges és lehetséges kutatási irányokra és szempontokra nézve. Felhívták a figyelmet az ez irányú kísérletek beállításának és validálásának nehézségeire és az eltérő porozitású

közeggel végzett kísérleti tapasztalatok hiányára. Tapasztalataik alapján a telítési sorrend, a terjedési koefficiens és a határfelületi feszültség hatásának további tanulmányozására lenne szükség, mind vízzel, mind a szerves folyadékokkal, illetve kevert nedvesítettségű közegekre vonatkozóan, vizsgálatot végezve többféle – kémiai és fizikokémiai tulajdonságaiban eltérő – szerves folyadékkal is. Ez azonban megkívánja a kísérleti eljárások és berendezések további fejlesztését is. A legújabb eredmények szerint a szerves folyadékfázis telítettsége is mutat hiszterézist (pl. PHAM et al., 2005), melynek mértéke ciklusszám-függően is változó lehet (*cycle-dependent hysteresis*) (pl. SHAHVERDI et al., 2011). A kezdeti telítettség és hiszterézis jelenségek hatását nem mutató eredmények valószínűleg azzal magyarázhatóak, hogy a vizsgált minták általában „szűk” porozítással jellemezhetőek – homok, homokkő vagy üveggyöngyből készített mesterséges minták (ALIZADEH & PIRI, 2014).

A BPC elmélet kiindulópontja az NAPL típusú szennyezőanyagok felszín alatti terjedését szimuláló modellek bemeneti hidrológiai jellemzőinek meghatározására kidolgozott összefüggéseknek is. Az NAPL visszatartó és vezetőképesség általánosságban véve a vízre vonatkozóan számított vagy mért értékek ismeretében közvetve határozható meg (ideálisan porózus közeget feltételezve). A modellfejlesztések során elsősorban a vízre vonatkozó hidrológiai jellemzők meghatározásának pontosítására törekedtek, az NAPL típusú szennyezőanyagokra vonatkozó összefüggések csak közvetve váltak „pontosabbá”, illetve viszonylag kis mértékben változtak napjainkig. A LENHARD és PARKER (1987) által kidolgozott P_c -S és P_c -S- k_r összefüggések, illetve ezek némiképpen módosított verziói kerültek beépítésre például az UTCHEM (POPE et al., 1999), a STOMP (WHITE & OOSTROM, 2006) modellekbe, a PLSI szimulátorba (GUARNACCHIA et al., 1997). Később különböző modellesaládokba is, mint a HSSM (KOPT, OILENS és TSGPLUME – WEAVER et al., 1994), vagy a GMS (MODFLOW 2000, MODPATH, MT3DMS/RT3D, SEAM3D, ART3D, UTCHEM, FEMWATER, PEST, UCODE, MODAEM és SEEP2D – Környezetvédelmi Modellezés Kutatási Laboratórium, Brigham Egyetem). A DNAPL3D (GERHARD és KUEPER, 2003) pedig a KUEPER és FRIND által 1991-ben megalkotott numerikus megoldások egy kiterjesztett változatát alkalmazza. A környezetvédelmi gyakorlatban, napjainkban elterjedt szerves folyadék-visszatartó képesség becslő eljárásokat kétfázisú rendszerekre dolgozták ki (levegő/víz vagy levegő/szerves folyadék). Ezen összefüggések háromfázisú rendszerekre (víz/szerves folyadék/levegő) elméleti alapon terjeszthetők ki – feltételezve, hogy a gázfázis kapilláris nyomása ($P_{c,g}$) konstans (pl. LENHARD & PARKER, 1987). A víztartó-képességhez hasonlóan hiszterézis által meghatározott a vízvezető-képesség (K_h vagy k_r) (TOPP & MILLER, 1996; PHAM et al., 2005) és – a telítési-sorrendtől függően – a pórusszögletek által bezárt víz mennyisége is (*hysteretic entrapment*) (KOOL & PARKER, 1987; PARKER & LENHARD, 1987). Ugyanakkor a hiszterézis jelenségek számszerűsítése általánosan a P_c -S összefüggésekre korlátozódik, hiszen a legtöbb esetben a K_h vagy k_r gyakorlatilag abból származtatott érték. Az NAPL típusú szennyezőanyagokra vonatkozó elsődleges bemeneti változók pontatlan meghatározása tehát jelentős hibaforrás lehet a többfázisú folyadékáramlás és

transzport modellezésében (ANDERSON & BROWN, 1981; RATHFELDER & ABRIOLA, 1996; TULI & HOPMANS, 2004).

A kőzetek porozitása a tároló és a szabad folyadékmozgást biztosító pórusok összessége (*storage and connecting pores*) (BASHTANI et al., 2015), melyben a folyadékok mozgását/eloszlását a kapilláris, egyensúlyi és viszkozitási erők szabják meg. Az, hogy melyik erő hatása az uralkodó, az ún. "Kapilláris szám/*Capillary number*" (viszkozitási és kapilláris erők hányadosa) és "Eötvös szám/*Bond number*" (gravitációs és kapilláris erők hányadosa) alapján határozható meg. E mutatók jól alkalmazhatóak a pórusról jellemzésére a kőolajipari számítások pontosítását célzó kutatások eredményei szerint (pl. FULCHER et al., 1985), illetve a maradvány NAPL-telítettség számításához is (pl. PENNELL et al., 1996).

LEVERETT (1941), illetve LEVERETT és LEWIS (1941) a homok mintákkal végzett kísérletek eredményeinek kiértékelése alapján már tapasztalta, hogy a P_c – S – k_r összefüggéseket kis mértékben, de szigorúan meghatározza a pórusok méret szerinti megoszlása. Ezt azonban elhanyagolhatónak tekintették, mivel az abszolút áteresztés (k) és k_r arányát vizsgálva a kőzetek porozitása és a k_r közötti összefüggést nem tudták számszerűsíteni. Megközelítőleg azonos, hasonló litológiai összetétellel, de különböző porozitással jellemezhető kőzetek k_r értéke azonban egyértelműen különböző lehet (FELSENTHAL, 1959). Az empirikus eljárások egy különálló irányát képező módszertan kialakításával már kőzettípus és nedvesíthetőség-függő P_c – k_r – S összefüggéseket dolgoztak ki pl. HONARPOUR és munkatársai (1986) is különböző országok laboratóriumi méréseit egyesítő adatbázis összeállítását követően. Stepwise lineáris regressziós eljárással becsülték karbonátos és karbonát-mentes kőzetek nedvesíthetőség-függő relatív áteresztőképességét. Repedezett közegek (*fractured rocks*) hidraulikai jellemzőinek meghatározására alkalmas empirikus összefüggéseket képeztek pl. HIRASAKI (1975) HONARPOUR és munkatársai (1986), illetve HARDISTY és munkatársai (2003).

A századfordulót követően a kőolajiparban 20 évre visszamenően különböző országok esettanulmányait összefoglaló publikációk jelentek meg a szakirodalomban pl. a „*Journal of Petroleum Science and Engineering*” különkiadványában (2014) a mesterséges intelligencia alapú (*artificial neural network, artificial neuro fuzzy inference system*) eljárások kőolajipari célú alkalmazására vonatkozóan. Ezek között és emellett is található példa a k_r függvények kulcsfontosságú telítettségi értékeit a kőzet és a folyadékjellemzők ismeretében közelítő lineáris és nemlineáris becsülő eljárások kidolgozására vonatkozó kezdeményezésekről, környezetvédelmi és kőolajipari esettanulmányok eredményeit összefoglaló adatbázisokon (pl. FATTAH, 2004; ROGHANIAN, 2010; JOONAKI & GHANAATIAN).

Pedotranszfer függvények

Az empirikus eljárások másik fejlesztési irányát az NAPL vezető képesség becslésére kidolgozott pedotranszfer típusú becsülő egyenletek jelentik. Az ez irányú kutatások tapasztalatai szerint a szerves folyadékvezető képesség pl. az agyag és portartalom értékeket felhasználó exponenciális összefüggésekkel kevésbé pontosan közelíthető, mint a hidraulikus vezetőképesség. A K_{sat} exponenciális függvényekkel

(CAMPBELL & CAMPBELL, 1982; CAMPBELL, 1985; PUCKET et al., 1985) való becslő összefüggéseinek korlátozott alkalmazhatóságát tapasztalta MAKÓ (1997) különböző fizikai féleségű, agyagásvány minőségű, eltérő humusztartalmú és tömődöttségű minták különféle folyadékokkal (desztillált víz, kerozin, gázolaj, és kőolaj) mért, szerves folyadékokra vonatkozó K_{sat} értékeinek meghatározására. Javíthatja azonban a becslés pontosságát, ha a folyadékvezető képesség, az agyag- és portartalom összefüggései az egyes szerves folyadékokra, agyagásványféleségekre, illetve a különféle mértékben szerkezetes talajmintacsoportokra külön-külön számszerűsített. Az így parametrizált regressziós függvényekkel a vezetőképesség megbízhatóan becsülhető (MAKÓ, 1997; MAKÓ & ELEK, 2006). A szerzők tapasztalatai alapján a portartalom szerepe jelentősebb, mint az agyagtartalomé, ami igazolni látszik a szilárd fázis és szerves folyadékok, illetve víz kölcsönhatásainak különbözőségére vonatkozó korábbi vizsgálatok eredményeit (pl. az agyagátrendeződés meghatározó szerepét). A talajminták relatív áteresztőképessége függ továbbá a folyadékok minőségétől, a folyadékfeltöltés sorrendjétől, illetve a talajminták tulajdonságaitól (elsősorban agyagtartalmától) is. DUNAI és munkatársai (2007), illetve MAKÓ és munkatársai (2009) tapasztalatai alapján a légáteresztő-képesség, agyag- és homoktartalom, illetve az összporozitás adatok alapján lineáris regressziós eljárással megfelelő pontossággal közelíthető a $K_{sat\ NAPL}$ értéke. Korlátozott lehet azonban az ilyen típus összefüggések alkalmazhatósága az alacsonyabb folyadékfeltöltettség mellett mérhető NAPL vezetőképesség értékek meghatározására nagyobb agyagtartalmú minták esetében – pl. a mérés során a minták porozitása megváltozhat, pl. repedések keletkezhetnek, melyek nagyságrendnyi eltéréseket eredményezhetnek a meghatározott K értékek között.

Pórusálózat modellek

A kőolajipari és hidrológiai modellezésben előrelépést jelentett a pórustér elméleti leképezésére irányuló elméleti és laboratóriumi kutatások eredményei alapján képzett modellek fejlesztése. Elsősorban a kőolajipar támogatta/támogatja a háromdimenziós pórustérben lezajló többfázisú, kapillaritás által kontrollált áramlási folyamatok mérnöki szempontból „elegáns”, számítástechnikailag egyszerű és pontos, ígéretes eredményekkel szolgáló ún. pórusálózat modellek (*pore network model*) alkalmazását, fejlesztését. E modellekben az elméleti pórustér kapilláris nyomástól függő telítettség (P_c-S), illetve közvetve a folyadékfeltöltettség függvényében is változó relatív áteresztés értéke (P_c-S-k_r) az 1805-ben definiált Laplace–Young egyenlet alapján – pórus sugár (a meniszkusz görbületi sugara) és a kapilláris nyomás közötti összefüggés szerint – határozható meg. Az első modellek alapja még részben a BPC elmélet volt, a makro-léptékű folyamatok jellemzésére fizikai elven meghatározott összefüggéseket alkalmaztak (Van Genuchten, illetve Brooks és Corey modell, stb.). FATT (1965), illetve CATZIS és DULLIEN (1985) kutatási eredményei teremtették meg a pórustér hierarchikus hálózatos leképezésének és a pórustér topológiai (különböző alakokkal jellemezhető pórustest és az azok összeköttetései) jellemzésére kidolgozott összefüggések elméleti

hátterét. Viszonylag kevés publikált nemzetközi kutatás történt szerves folyadékok heterogén közegben, talajokban történő áramlási- és transzport-folyamatainak modellezésével kapcsolatban (pl. PATERSON et al., 1998; HELD & CELIA, 2001).

Az első környezetvédelmi tapasztalatokat ún. mikromodell kísérletek (többnyire valamilyen szénhidrogén kármentesítési technológiai folyamat modellezése) és kőzetminták átteresztőképességét becsülő módszerek alkalmazhatóságát vizsgáló kísérletek eredményei szolgáltatták (BLUNT, 2001). A pórushálózat modelleket kettő- vagy háromdimenziós szimulációs modellek validálására, a nedvesítési vagy telítési sorrendből következő nyomás-telítettség eltérések, illetve a hiszterézis jelenségek vizsgálatra használták fel (pl. DICARLO et al., 2000; PIRI & BLUNT, 2005). Alkalmazhatóságuk feltétele a porozitás, illetve a pórushálózat geometriájának megfelelő pontosságú leképezése. A porózus közeg elméleti porozitása meghatározható pl. a kőzetképződési folyamat-modellezéssel (pl. BAKKE & OREN, 1997), fraktál elvű közelítésével (TSAKIROGLOU et al., 1999; PATERSON et al., 1998) vagy közvetlenül, méréssel (pl. higany-poroziméterrel: HELD & CELIA, 2001; BAK, 2015), illetve becsléssel (pl. SWRC alapján: FISCHER & CELIA, 1999).

A századforduló előtt képzett pórushálózat modellek alapján kalibrált modellekkel napjainkban még csak egy azzal topológiailag ekvivalens átmérőjű hálózat áramlási tulajdonságai jellemezhetők megfelelő pontossággal. Ugyanakkor a pórushálózat modellekben a PoSD statisztikai jellemzői is felhasználhatóak (ØREN et al., 1998). A századfordulón a pórushálózat és szivárgási (*percolation*) elmélet kombinált alkalmazásával jöttek létre az ún. sztochasztikus hálózati modellek (*random pore network model/stochastic network model*) – melyek a porózus közeget, mint véletlen gráfokban kapcsolódó csomópontokat azok statisztikai eloszlásával jellemzik (pl. CHATZIS & DULLIEN, 1985; PATERSON et al., 1998; PIRI & BLUNT, 2005). Hazánkban pl. BAK (2015) tett kísérletet a porozitásviszonyok modellezésére inverziós szivárgási (perkolációs) eljárással gráfon, higany-porozimetriás mérések eredményei alapján (*ID ábra*). A pórushálózat modellezés legújabb fejlesztési irányai pl. RAOOF és HASSANIZADEH, 2009, illetve XIONG és munkatársai (2016) összefoglaló munkájában tekinthetők át. A pórustér megváltozásainak (pl. duzzadási-zsugorodási vagy szerkezet-változási, szétiszapolódási folyamatok), illetve a dinamikus áramlási folyamatok leképezése még kísérleti fázisban van (pl. HUI & BLUNT, 2000; JOEKAR-NIASSAR et al., 2010). A pórusméret-eloszlás változásának modellezésére irányuló törekvések megjelentek pl. a kőzetképződési folyamatokat számszerűsítő modellekben, illetve a duzzadási folyamatokat – uniform pórusméret csökkenést a „szemcse”-méret növekedésével jellemző – (*grain based models* – MEHMANI et al., 2012), illetve az aggregátumok képződését – az alkotóelemek egyesülésével (pl. ASSOULINE et al., 2006) modellező eljárásokban (*IE ábra*). A multimodalitással jellemezhető porózus közegek hidrológiai folyamatainak jellemzése a többléptékű pórushálózati modellezéssel válhat lehetővé (*two-scale pore network models* – MEHMANI & PRODANOVIĆ, 2014). Eltérő topológiájú közegek közötti átszámításra a fraktáldimenzió alapú eljárások (LIAN & SAGAR, 2006), illetve topológiai paraméterek (Euler szám) alkalmazása (VOGEL & ROTH, 2001) jelenthet megoldást. Valós minták pórusméret-eloszlásának meghatározását követően képzett szabálytalan hálózatok generálásával

a négy dimenzióban lejátszódó (térben és időben is változó) folyamatok modellezhetők (PIRI & BLUNT, 2005). Szabályos hálózatok esetén pl. a koordinációs szám (összeköttetések száma a hálózat csomópontjai között – illetve léptékfüggően változó értékének) meghatározása is kritikus pontja a modellezésnek (REEVES & CELIA, 1996; RAOOF & HASSANIZADEH, 2009). Mára már több, a pórushálózat képzését és az áramlási folyamatok modellezését is lehetővé tévő modell elérhető. A Matlab alapú „Poreflow” (RAOOF et al., 2013), a nyílt forráskódú „Open PNM” (GOSTICK et al., 2016) vagy a „Two phase network Code” (Imperial College, London: VALVATNE & BLUNT, 2004), lehetőséget adnak a különböző léptékű áramlási folyamatok szimulációjára is.

Összefoglalás

A talajokban, illetve a porózus közegben lezajló önálló fázisú és többfázisú folyadékmozgás modellezéséhez szükséges a közeg folyadékviszatarató- (P_c -S), és folyadékvezető-képességének (K_{sat} és K_h) ismerete.

A különböző szakterületek kutatási eredményei alapján megállapítható, hogy a Kozeny-típusú becslő egyenletek csak korlátozottan alkalmazhatóak mind a vízvezető-képesség (homoktól eltérő fizikai féleségű talajok esetében), mind a szerves folyadékvezető-képesség (ld. a különböző polaritású folyadékok és a szilárd fázis között lezajló különböző mértékű és jellegű kölcsönhatások) meghatározására. A Kozeny-típusú becslő egyenletek alkalmazhatóságát növelné a szilárd fázis porozitását, illetve annak dinamikus változását jellemző mutatók (pl. fajlagos felület, reológiai jellemzők) és a modellezéshez szükséges hidrofizikai jellemzők közötti összefüggések pontosítása.

A vízre vonatkozó K_h becslésére a különféle szakterületeken legáltalánosabban a fizikai elven történő becslő eljárások valamelyikét alkalmazzák (pl. empirikus alapú, statisztikus eljárások), amellyekkel a telítetlen fázisú folyadékviszatarató- és folyadékvezető-képesség, illetve relatív áteresztő képesség egyidejűleg és önállóan is meghatározható. E függvények lehetőséget adhatnak a hidrológiai jellemzők és porozitás-viszonyok közötti, vagy akár a léptékek közötti összefüggések tanulmányozására, illetve a hiszterézis jelenségek, talajtömörödés, stb. okozta változások figyelembevételére, számszerűsítésére. A fizikai elven történő becslések fejlesztésében idővel egyre inkább fontossá vált a differenciált porozitás meghatározása (makro-, mezo- és mikropórusok, vagy gravitációs, kapilláris és adszorpciós pórusok stb. elkülönítése). Az adott „pórusméret-tartományok” hidrológiai jellemzőinek meghatározása a „tartományonként” eltérő folyadékmozgást meghatározó erők figyelembevételével lehetséges (pl. gravitációs erő kapillaritást meghaladó szerepe a makropórusos áramlásban, illetve az adszorpciós erőket meghatározó talajtulajdonságok szerepe a filmfázisú folyadékáramlásban). E „tartományokon” belüli és az azok közötti kölcsönhatások számszerűsítése napjainkban is fontos kutatási terület. A fizikai típusú becslések szoftverszintű alkalmazására a hidrológiai gyakorlatban és a környezetvédelmi, illetve kőolajipari felhasználású modellezésben is található példa. A szerves folyadékokra vonatkozó hidrológiai jellemzők meghatározása azonban közvetett;

a modellfejlesztések elsősorban a víztartó- és vízvezető-képesség meghatározására készített közelítő eljárások pontosítását célozták meg.

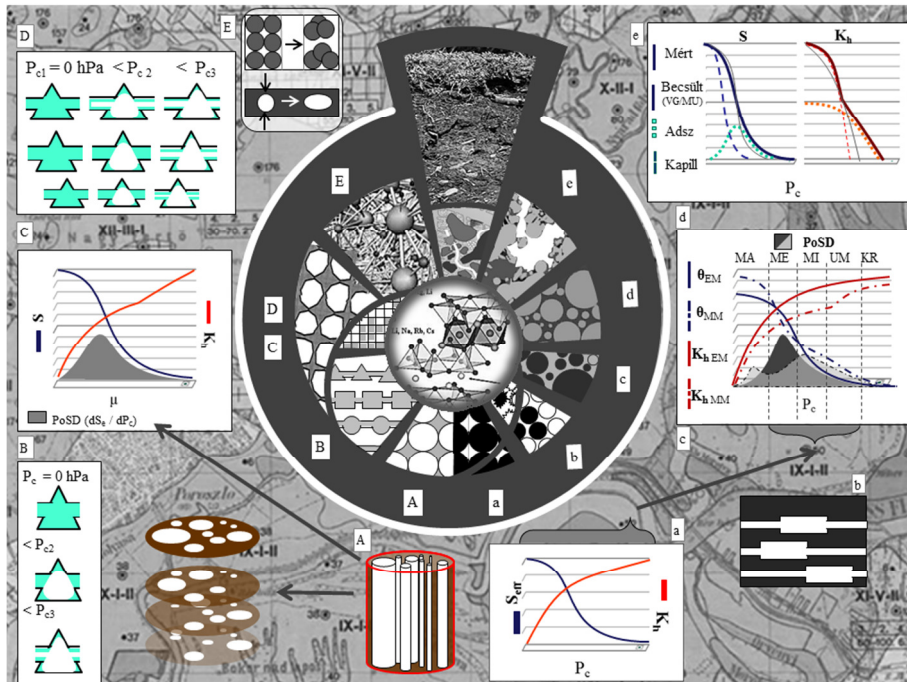
Az önálló fázisú és többfázisú folyadékterjedés és folyadéktranszport modellezésben némileg elkülönülő fejlesztési irányt képviselnek az ún. pórushálózat modellek. E modellek alkalmazhatóságának feltétele a vizsgált közeg pórustérének pontos jellemzése. A pórustér dinamikus változásának elméleti leképezésére irányuló kutatások eredményei alapján kifejlesztett komplexebb modellekkel (pl. többléptékű pórushálózatok modellezése) megfelelő pontossággal közelíthetők a heterogén pórusméret eloszlással jellemezhető (pl. aggregált) talajok, illetve a folyadék-szilárd fázis közötti kölcsönhatások (duzzadási-zsugorodás; dezaggregáció, fagyás-olvadás, stb.) következtében változó porozitású talajok hidrofizikai jellemzői is. A modellezett pórustér vagy elméleti alapon készített, vagy a vizsgált közeg (mért szemcseeloszlásból, illetve a P_c -S görbéből kiindulva) becsült porozitása alapján „felépített”. A különböző közettípusokra kidolgozott összefüggések a kőolajipari célú modellezés során megfelelő pontosságúnak bizonyultak, ám ezek általánosíthatósága, talajokra vonatkozó kiterjeszhetősége (tekintetbe véve a talajok fizikai és kémiai tulajdonságainak nagyfokú variabilitását) mind a mai napig vita tárgya.

A rendelkezésre álló és egyre bővülő talajfizikai adatbázisok mára már lehetővé teszik a vízre vonatkozó hidrofizikai jellemzők megfelelő pontosságú és megbízhatóságú becslését ún. pedotranszfer függvények (PTF) alkalmazásával. A vízvezető-képesség PTF típusú, egyenlet alapú (pl. lineáris vagy nemlineáris regressziós), illetve mintázatfelismerésen alapuló (pl. regressziós fák, neurális hálóak képzésén alapuló) eljárásokkal történő becslésére vonatkozóan azonban jóval kevesebb tapasztalat áll rendelkezésre, mint a víztartó-képesség esetében. Ez egyrészt abból adódhat, hogy a vezetőképességre a víztartó-képességnél lényegesen kisebb elemszámú adatállományok elérhetőek (keves K_{sat} és még kevesebb K_h mérési adat). Másrészt a rendelkezésre álló vezetőképesség értékeket nagyon eltérő módszerekkel mérték és a mért értékek ugyanazon módszeren belül is jelentős szórást mutatnak. A rendelkezésre álló adatbázisok tehát kiegészítésre szorulnak, lehetőség szerint egységes módszertan szerint, a talajok heterogenitását megfelelően reprezentáló mintaállományon mért eredményekkel. A kőolajipari és környezetvédelmi célú kutatások tapasztalatai igazolták, hogy a vízzel nem elegyedő szerves folyadékok (NAPL) és a víz a talajok szilárd fáziséval szemben eltérő módon viselkedik; a kölcsönhatások (duzzadási-zsugorodási folyamatok, dezaggregáció, stb.) különbözősége jelentős mértékben meghatározhatja a modellezés során bemeneti paraméterként megadandó hidrofizikai jellemzőket, és ezáltal a modellezés eredményességét is. Ennek ellenére mind a mai napig kevés az NAPL típusú szennyezőanyagokkal valódi talajokon, nagy heterogenitású mintaseregen, jól dokumentáltan és egységes módszertan szerint végzett talajfizikai mérések száma. Az ilyen mérések eredményei adatbázisba szervezve alapot nyújthatnának az NAPL visszatartó és NAPL vezető képesség PTF típusú becslési módszereinek kidolgozásához, továbbá bővíthetnék ismereteinket a porózus közegben fellépő „talaj- és folyadék-specifikus” fáziskölcsönhatásokról, illetve a talajok porozitás-viszonyait jelentős mértékben meghatározó talajszerkezet

(aggregátum-morfológia, aggregátum-eloszlás, aggregátum-stabilitás) és a talajok hidrofizikai tulajdonságainak kapcsolatáról

1.ábra

A talaj porozitásviszonyai és hidrológiai jellemzői közötti összefüggéseket tárgyaló szakirodalomban található szemléltetési változásokat szemléltető ábrák



Ahol: P a kapilláris nyomás (hPa); S és S_{eff} a telítettség és effektív telítettség (-); θ a folyadéktartalom ($m^3 \cdot m^{-3}$); μ a kémiai potenciál ($J \cdot kg^{-1}$); K_n a telítetlen fázisú folyadékvezető képesség; $PoSD$ a pórusok méret szerinti eloszlása; Ads_z és $Kapill$ az adszorpciós erők, illetve a kapilláris erők által meghatározott folyadékviszataró és vezetőképesség

Ábrák: A – A pórusűr leképezése a kapilláris cső elmélet szerint

B – Folyadékfilmek elhelyezkedése háromszögletű pórusokban különböző P_c mellett

C – Hidrológiai jellemzők meghatározása a porozitás ismeretében (Laplace–Young egyenlet, póruszinten megkülönböztethető áramlási típusok szerinti meghatározás)

D – Különböző méretű pórusokból álló 2D és 3D hálózatok

E – Többszintű, 3D és 4D hálózatok dinamikus porozitásváltozás mellett (pl. aggregátumképződés és pórusdeformációs jelenségek számszerűsítésével)

a – Hengerszerű kapilláris csövek P_c – S és K_n összefüggései

b – Eltérő alakú és változó méretű kapilláris csövekből álló elméleti pórusrendszer

c – Egy- (EM) és többmódusú (MM) hidrológiai függvények illesztett értékei

d – A pórusok méret szerinti megoszlása, „pórustípusok” (SSSA, 2008) és P_c összefüggései különböző folyadéktelítettség mellett (*Ahol:* MA, ME, MI, UM, KR: a makro-, mezo-, mikro-, ultramikro- és kriptopórusok)

e – A talaj hidrológiai jellemzőinek a póruszintű/mikroléptékű (különböző pórusrégiók) és „közepes” (REV – reprezentatív elemi egység) léptékű alakulása

1. ábra kiegészítő táblázata

	Kapilláris nyomás-folyadékteleltetés (P_c -S)	Telített és telítetlen vezetőképesség (K_{sat} és K_{sa})	Porozitás és a pórusok méret szerinti eloszlása (PoSD)
a	<ul style="list-style-type: none"> ◊ <i>Nedvességpotenciál elmélet</i> ◊ empirikus parametrikus függvények ◊ víztől eltérő folyadékokra vonatkozóan közvetett meghatározás (pl. két fázis esetén: $P_T = P_w + P_m$) 	<ul style="list-style-type: none"> ◊ Fizikai alapú becslés/ empirikus függvények mikro és közepes (REV, reprezentatív elemi egység) léptékben ◊ <i>Kapilláris áramlási modellek</i> ◊ Kozeny-Carman egyenlet (vízre vonatkozó közvetlen és víztől eltérő folyadékokra vonatkozó értékek közvetett meghatározása) ◊ <i>BCC elmélet</i> → folyadékok filmszerű áramlása 	<ul style="list-style-type: none"> ◊ <i>ideális porózus közeg</i>: gömb alakú szemcsék, homogén, izotróp, folyadékkal nem kölcsönható közeg ◊ <i>idealizált pórusok</i>: hengerszerű kapilláris csövek ◊ tároló és szabad folyadékmozgást biztosító pórusok elkülönítése (kapilláris szám és Eötvös szám)
A	<ul style="list-style-type: none"> ◊ <i>Kapilláris cső elmélet (BCC) – mikroléptékű összefüggések</i> 		
b	<ul style="list-style-type: none"> ◊ <i>parametrikus függvények képzése, pontosítása</i> ◊ PTF típusú függvényértékeket, vagy paramétereket becsülő eljárások ◊ <i>szemcséméret eloszlás alapú becslés</i> ◊ porozitás alapú meghatározás (Laplace-Young egyenlet értelmében) mikro, majd közepes léptékben 	<ul style="list-style-type: none"> ◊ P_c-S-k_r összefüggések, különböző függvények paramétereit közti átszámítások ◊ K_{sa} becslése K_{sat} referencia érték felhasználásával ◊ kapilláris folyadékáramlás szabályos, majd szabálytalan alakú és elrendeződési pórusokban → pontosítás a szemcsék érdessége, pórusok kanyarulatossága, összekötöttsége, stb. alapján 	<ul style="list-style-type: none"> ◊ inhomogén pórusfelszín, kanyarulatos csatornák, többféleképpen, szabályosan elrendeződő, különböző méretű, alakú szemcsék közötti pórustér – jellemzőit a szemcsék minősége is meghatározhatja, stb. ◊ szabályos, egymással összekötöttesben álló különböző alakú pórusokból álló pórushálózat modellezése
B			
c	<ul style="list-style-type: none"> ◊ <i>statisztikai alapú PoSD-SWRC összefüggések</i> ◊ multimodális P_c-S, illetve P_c-S-k_r függvények ◊ PTF típusú becsülő eljárások fejlesztése ◊ sztochasztikus hálózati modellezés 	<ul style="list-style-type: none"> ◊ makropórusos folyadékáramlás ◊ K_{sa} becslése K_{sat} közeli K_{sa} referencia érték felhasználásával ◊ További áramlás-típusok elkülönítése (pl. vékony folyadékfilmek, vagy gőzfázisú áramlás) 	<ul style="list-style-type: none"> ◊ szilárd fázis random fragmentációjával keletkező pórusok méret szerinti eloszlása ◊ multimodalitás → a pórustér felosztása a folyadékra ható erők szerint (pl. SSSA, 2008) ◊ sztochasztikus hálózati modellek
C			
d	<ul style="list-style-type: none"> ◊ SWRC függvények „regionalizálása” – eltérő összefüggések alkalmazása a különböző hatóerők (pl. gravitációs, kapilláris, adszorpció) mellett meghatározható P_c-S és K számítására ◊ a pórustér dinamikus „változásának” (hűsterézis, duzzadás-zsugorodás, tömörödés, stb.) és a „pórus régiók” hidrológiai jellemzői közötti összefüggések számszerűsítése mikro és közepes léptékben → léptékek közötti átszámítások ◊ PTF típusú becsülő egyenletek (egyenlet alapú és mintázat-felismerésen alapuló eljárások) képzése, validálása (vízre vonatkozó hidrológiai paraméterek meghatározására) 		
D			
e	<ul style="list-style-type: none"> ◊ póruszintű és reprezentatív elemi egységre (REV) értelmezhető sztochasztikus két és háromdimenziós modellezés (rigid, nem kölcsönható porózus közegre) ◊ kettős porozitási, illetve áteresztőképességi, illetve multiporozitási modellek ◊ PTF típusú becsülő eljárások képzése és validálása nagyméretű adatbázisok adatelemzésére alkalmas statisztikai eljárásokkal (pl. neurális háló) k_r függvény paraméterek, és kulcsfontosságú pontjainak meghatározására (NAPL típusú szerves folyadékokra vonatkozó közvetett módon) 		
E			
	<ul style="list-style-type: none"> ◊ három és négydimenziós (idődimenzió) áramlási folyamatok pórushálózati modellezése különböző léptékekben, dinamikus változó porozitás mellett 		

Kulcsszavak: vízvezető-képesség, NAPL vezető képesség, porozitás, talajszerkezet

Kutatásunkat T048302 sz. OTKA és a K119475 sz. NKFI pályázatok, valamint az Emberi Erőforrások Minisztériuma Új Nemzeti Kiválóság Programjának támogatásával végeztük.

Irodalomjegyzék

- ACAR, Y. B. & OLIVIERI, I., 1990. Pore fluid effects on the fabric and hydraulic conductivity of laboratory-compacted clay. *Transp. Res. Rec.*, **1219**. 144–159.
- ACUTIS, M. & DONATELLI, M., 2002. SOILPAR 2.00: Software to estimate soil hydrological parameters and functions. *Eur. J. Agron.* **8**, (3–4) 373–377.
- AHUJA, L.R. & HEBSON, C., 1992. Root Zone Water Quality Model. GPSR Technical Report No. 2. USDA, ARS, Fort Collins, CO.
- ALIZADEH, A. H. & PIRI, M., 2014. Three-phase flow in porous media: A review of experimental studies on relative permeability. *Rev. Geophys.* **52**. 468–521.
- AMER, 2012. Prediction of hydraulic conductivity as related to pore size distribution in unsaturated soils. *Soil Sci.* **174**, (9) 508–515.
- AMYX, J. W., BASS, D. M. & WHITTING, R. L., 1960. Petroleum reservoir engineering. Physical properties. McGraw-Hill Book Company. New York.

- ANDERSON, J.L. & BOUMA, J., 1973. Relationships between saturated hydraulic conductivity and morphometric data of an argillic horizon. *Soil Sci. Soc. Am. J.* **37**. 408–413.
- ANDERSON, D.A. & BROWN, K.W., 1981. Organic leachate effects on the permeability of clay liner. In: *Proceedings of the seventh annual research symposium on land disposal: Hazardous Waste*. EPA-600/9-81-002b. Cincinnati, OH. US.
- ANDERSON, D.C., BROWN, K. & THOMAS, J.C., 1985. Conductivity of compacted clay soils to water and organic liquids. *Water Management & Research*. **3**. 339–349.
- ANDERSON, M.P., WOESSNER, W.W. & HUNT, R.J., 2015. *Applied Groundwater modeling*. 2nd ed. Elsevier.
- ARYA, L.M. & PARIS, J.F., 1981. A physicoempirical model to predict soil moisture characteristics from particle-size distribution and bulk density data. *Soil Sci. Soc. Am. J.* **45**. 1023–1030.
- ARYA, L.M., LEIJ, F.J., SHOUSE, P.J. & VAN GENUCHTEN, M.TH., 1999. Relationship between the hydraulic conductivity function and the particle-size distribution. *Soil Sci. Am. J.* **63**. 1063–1070.
- ASSOULINE, S., 2001. A model for soil relative hydraulic conductivity based on the water retention characteristic curve, *Water Resour. Res.* **37**. 265–271.
- ASSOULINE, S., 2005. On the relationship between the pore size distribution index and characteristics of the soil hydraulic functions. *Water Resour. Res.* **41**. W07019.
- ASSOULINE, S., 2006. Modeling the relationship between soil bulk density and the hydraulic conductivity function, *Vadose Z. J.* **5**. 697–705.
- ASSOULINE, S. & TESSIER, D., 1988. A conceptual model of soil water retention. *Water Resour. Res.* **34**. (2) 223–231.
- ASSOULINE S. & TARAKOVSKY D. M., 2001. Unsaturated hydraulic conductivity function based on a soil fragmentation process. *Water Resour. Res.* **37**. (5) 1309–1312.
- BAK, B.D., 2015. *Inváziós perkoláció gráfokon: Porozimetria modellezése és szimulálása*. TDK Dolgozat. Budapest.
- BAKKE, S. & OREN, P.-E., 1997. 3-D pore-scale modelling of sandstones and flow simulations in the pore networks SPEJ. **2**. 136–149.
- BASHTANI, F., MAINI, B. & KANTZAS, A., 2015. Single-phase and two-phase flow properties of mesaverde tight sandstone formation; random-network modeling approach. *Adv. Water Res.* **94**. 174–184.
- BEAR, J., 1979. *Hydraulics of groundwater*. McGraw-Hill Co. New York.
- BEVEN, K.J. & GERMANN, P.F., 1982. Macropores and water flow in soils. *Water Resour. Res.* **18**. (5) 1311–1325.
- BLUNT, M.J., 2001. Flow in porous media pore-network models and multiphase flow. *Current Opinion in Colloid & Interface Science*. **6**. 197–207.
- BOULDING, R.S., 1995. *Practical handbook of soil vadose zone and groundwater contamination*. Boca Raton, Fla.

- BOUMA, J.A., BOERSMA, A.J. & SCHOONDERBEEK, D., 1977. The function of different types of macropores during saturated flow through four swelling soil horizons. *Soil. Sci. Soc. Am. J.* **41**. 945–950.
- BRAKENSIEK, D.L., RAWLS, W.J., STEPHENSON, G.R., 1984. Modifying SCS hydrologic soil groups and curve numbers for rangeland soils. ASAE Paper No. PNR-84-203, St. Joseph, MI.
- BRAUN, C., HELMING, R. & MANTHEY, S., 2005. Macro-scale effective conductivity relationship for two-phase flow processes in heterogeneous porous media with emphasis on the relative permeability-saturation relationship. *J. Contam. Hydrol.* **76**. 1–2. 47–80.
- BRUNAUER, S., EMMETT, P.H. & TELLER, E., 1938. Adsorption of gases in multi-molecular layers. *J. Am. Chem. Soc.* **60**. 309–319.
- BRUTSAERT, W., 1966. Probability laws for pore size distributions. *Soil Sci.*, **101**. 85–92.
- BUDHU, M., GIESE, R.F., CAMPBELL, G.JR. & BAUMGRASS, L., 1991. The permeability of soils with organic fluids. *Can. Geotech. J.* **28**. 140–147.
- BURDINE, N.T., 1953. Relative permeability calculations from pore size distribution data. *Petroleum Transactions, AIME.* **198**. 71–78.
- CAMPBELL, G.S., 1974. A simple method for determining unsaturated conductivity from moisture retention data. *Soil Sci.* **117**. 311–314.
- CAMPBELL, G.S., 1985. *Soil physics with basic*. Development in soil science. 14. Elsevier. Amsterdam.
- CAMPBELL, G.S. & CAMPBELL, M.D., 1982. Irrigation scheduling using soil moisture measurements: theory and practice. *Adv. Irrig.* **1**. 25–42.
- CARMAN, P.C., 1937. Fluid flow through granular beds. *Transactions, Institution of Chemical Engineers. London.* **15**. 150–166.
- CHAPUIS R.P. & AUBERTIN M., 2003. On the use of the Kozeny-Carman's equation to predict the hydraulic conductivity of a soil. *Can. Geotech. J.* **40**. (3) 616–628.
- CHAPUIS R.P. & LÉGARÉ P.P., 1992. A simple method for determining the surface area of fine aggregates and fillers in bituminous mixtures. In *Effects of Aggregates and Mineral Fillers on Asphalt Mixture Performance*. ASTM STP 1147. 177–186.
- CHATZIS, I. & DULLIEN, F.A.L., 1985. The modelling of mercury porosimetry and relative permeability of mercury in sandstones using percolation theory. *Int. Chem. Eng.* **25**. 47–65.
- CHEN, C. & WAGENET, R.J., 1991. Simulation of water and chemicals in macropore soils, I. Representation of the equivalent macropore influence and its effect on soil-water flow. *J. Hydrol.* **130**. 105–126.
- CHEN, S., LOW, P.F., CUSHMAN, J.H. & ROTH, C.B., 1987. Organic compound effects on swelling and flocculation of Upton montmorillonite. *Soil Sci. Soc. Am. J.* **51**. 1444–1450.
- CHILDS, E.C. & COLLIS-GEORGE, N., 1950. The permeability of porous media. *Proc. R. Soc. Lond.* **201**. 392–405.

- COREY, A.T., 1986. Air permeability. In: *Methods of Soil Analysis*. (ed.: KLUTE, A.) 2nd ed. Agronomy monograph 9. ASA and SSSA. Madison, WI. 1121–1136.
- COSBY, B.J., HORNBERGER, G.M., CLAPP, R.B. & GINN, T.R., 1984. A statistical exploration of the relationship of soil moisture characteristics to the physical properties of soils. *Water Resour. Res.* **20**. 6. 682–690.
- CRESWELL, H.P. et al., 2000. *The SH-Pro V1.03 Software for Predicting and Analysing Soil Hydraulic Properties*. CSIRO Land and Water. Canberra, Australia.
- CŠÓKÁS, J. 1995: Vízadó rétegek jellemző hozamának és a víz minőségének meghatározása geofizikai fúrólúkszelvények alapján. *Magyar Geofizika*. **35**. 176–203
- DICARLO, D.A., SAHNI, A. & BLUNT, M.J., 2000. Three-phase relative permeability of water-wet, oil-wet, and mixed-wet sandpacks. *SPE J.* **5**. (1) 82–91.
- DRAGUN, J., 1998. *The soil chemistry of hazardous materials*. Amherst scientific publishers. Amherst. Massachusetts.
- DULLIEN, F.A.L., 1979. *Porous media, Fluid Transport and Pore Structure*. Academic Press Inc. New York. ISBN-13:978-0122236518.
- DUNAI, A. & MAKÓ, A., 2011. Talajok folyadékvezető képességének összehasonlító vizsgálata vizes és nem vizes rendszerekben. Talajvédelem különszám. In: FARSANG, A. & LADÁNYI, ZS. (szerk.): *Talajaink a változó természeti és társadalmi hatások között*. Talajtani vándorgyűlés Szeged, 2010. szeptember 3–4. 331–337.
- DUNAI, A., MAKÓ, A. & HERNÁDI, H., 2007. A talajok légáteresztő képességének és szerves folyadék vezető képességének összehasonlító vizsgálata. *Erdei Ferenc IV. Tudományos Konferencia*. Kecskemét. 2007. augusztus 27–28. 971–974.
- DURNER, W., 1994. Hydraulic conductivity estimation for soils with heterogeneous pore structure. *Water Resour. Res.* **30**. 211–223.
- FATT, I., 1965. The network model of porous media I. Capillary pressure characteristics. *Trans AIME*. **207**. 141–159.
- FATTAH, A., 2004. Equations for water/oil relative permeability in Saudi Arabian sandstone reservoirs. *Saudi Aramco J. Technol.* **4**. (1) 48–58.
- FELSENTHAL, M., 1959. Correlation of K_g/K_o data with sandstone core characteristics. *Trans AIME*. **216**. 258–261.
- FERNANDEZ, F. & QUIGLEY, R.M., 1985. Hydraulic conductivity of natural clays permeated with simple liquid hydrocarbons. *Can. Geotech. J.* **22**. 205–214.
- FISHER, U. & CELIA, M.A., 1999. Prediction of relative and absolute permeabilities for gas and water from water retention curves using a pore-scale network model. *Water Resour. Res.* **35**. 1089–1100.
- FODOR, N., BLASKÓ, L., ÉRI, L. & RAJKAI, K., 2009. Hidraulikus vezetőképesség mérési és becslési eredmények összehasonlítása homoktalajra. *Agrokémia és Talajtan*. **58**. 369–380.
- FODOR, N. & RAJKAI, K., 2005. Számítógépes program a talajok fizikai és vízgazdálkodási jellemzőinek egyéb talajjellemzőkből történő számítására (TALAJTANonc 1.0). *Agrokem. Talajtan*. **54**. 25–40.

- FULCHER, R. A., ERTEKIN, T., & STAHL, C.D., 1985. Effect of capillary number and its constituents on two-phase relative permeability measurements. *J. Petrol. Technol.* Feb. 249.
- GÁLFI J. & LIEBE P., 1981. Az elektromos fajlagos ellenállás és a szivárgási tényező kapcsolata törmelékes vízáradó kőzetekben. *Vízügyi Közlemények.* **63.** 437–448.
- GARDNER, W.R., 1958. Some steady state solutions of the unsaturated moisture flow equation with application to evaporation from water table. *Soil. Sci.* **85.** (3) 218–232.
- GERHARD, J.I. & KUEPER, B.H., 2003. Relative permeability characteristics necessary for simulating DNAPL infiltration, redistribution, and immobilization in saturated porous media. *Water Resour. Res.* **39.**
- GERKE, H.H. & VAN GENUCHTEN, M. TH., 1993. A dual-porosity model for simulating the preferential movement of water and solutes in structured porous media. *Water Resour. Res.* **29.** 305–319.
- GHANBARIAN-ALAVIJEH, B., HUNT, A.G. EWING, R.P. & SKINNER, T.E., 2014. Universal scaling of the formation factor in porous media derived by combining percolation and effective medium theories. *Geophys. Res. Lett.* **41.** (11) 16.3884–3890.
- GOSTICK et al., 2016. Open PNM: A pore network modeling package. *Comp. Sci. Eng.* **18.** (4) 60–74.
- GRABER, E.R. & MINGELGRIN, U., 1994. Clay swelling and regular solution theory. *Environ. Sci. Technol.* **28.** 2360–2365.
- GREGG, S.J. & SING, K.W.S., 1967. Adsorption Surface Area and Porosity. Academic Press. London.
- GREGSON, D., HECTOR, D.J. & MCGOWAN, M., 1987. A one-parameter model for the soil water characteristic. *J. Soil. Sci.* **38.** 483.
- GUARNACHIA, J., PINDER, G. & FISHMAN, M., 1997. NAPL simulator documentation. National Risk Management Research Laboratory. Ada, OK 74820. EPA/600/R-97/102.
- HARDISTY, P.E., WHEATER, H.S., BIRKS, D. & DOTTRIDGE. J., 2003. Characterization of NAPL in fractures rock. *Quat. J. Eng. Geol. Hydrol.* **36.** (4) 343–354.
- HAZEN, A., 1982. Some physical properties of sands and gravels. Massachusetts State Board of Health. Annual report. 539–556.
- HELD, R.J. & CELIA, M.A., 2001. Modeling support of functional relationships between capillary pressure, interfacial areas and common lines. *Adv. Water Resour.* **24.** 325–343.
- HERNÁDI, H., BARNA GY. & MAKÓ, A., 2017. Folyadék-visszatartás, folyadékvezetés és porozitás összefüggései vízzel és/vagy szerves folyadékkal telített talajokban I. Folyadék-visszatartó képesség — Szemle. *Agrokémia és Talajtan.* **66.** (1) 251–282.
- HETTIRATCHI, J.P.A., HRUDEY, S.E., SMITH, D.W. & SEGO, D.C.C., 1988. A procedure for evaluating municipal solid waste leachate components capable of causing volume shrinkage in compacted clay soils *Environ. Technol. Letters.* **9.** 23–34.

- HILLEL, D., 1998. *Environmental Soil Physics*. Academic Press. San Diego, CA. USA.
- HILDEBRAND, J.H., PRAUSNITZ, J.M. & SCOTT, L.R., 1970. *Regular and Related Solutions*. Van Nostrand Reinhold, New York.
- HIRASAKI, G., 1975. Sensitivity Coefficients for History Matching Oil Displacement Processes. *Soc. Petrol. Eng. J.* **15**. (1) 32–59.
- HONARPOUR, M., KOEDERITZ, L., HARVEY, A.A., 1986. *Relative Permeability of Petroleum Reservoirs*. CRC Press Inc. Florida USA.
- HUI M.H. & BLUNT, M.J., 2000. Pore-scale modeling of three-phase flow and the effects of wettability. SPE 59309. Proceedings of the SPE_DOE Improved Oil Recovery Symposium. Tulsa, OK. April, 2000.
- HUTSON, J.L. & WAGENET, R.J., 1995. A multiregion model describing water flow and solute transport in heterogeneous soils. *Soil Sci. Soc. Am. J.* **59**. 743–751.
- IDEN, S. C. & DURNER, W., 2014. Comment on “Simple consistent models for water retention and hydraulic conductivity in the complete moisture range” by A. Peters, *Water Resour. Res.*, 50, 7530–7534, doi:10.1002/2014WR015937.
- IRMAY, S. 1954. On the hydraulic conductivity of unsaturated soils. *Trans. Am. Geophys. Union.* **35**.
- IZDEBSKA-MUCHA, D. & TRZCIŃSKI, J., 2008. Effects of petroleum pollution on clay soil microstructure. *Geologija. Vilnius.* **50**. Supplement. 68–74.
- IVERSEN, B.V., MOLDRUP, P., SCHJONNING, P. & LOLL, P., 2001a. Air and water permeability in differently textured soils at two measurement scales. *Soil Science.* **166**. 643–659.
- JAINES, B. & TYLER, E.J. 1984. Using soil physical properties to estimate hydraulic conductivity. *Soil Sci.* **138**. (4) 298–305.
- JARISO, J., DESTOUNI, G. & YARON, B., 1994. Retention and volatilization of kerosene laboratory experiments on glacial and post glacial soils. *J. Contam. Hydrol.* **17**. 167–185.
- JARISO, J., DESTOUNI, G. & YARON, B. 1997. On the relation between viscosity and hydraulic conductivity values for volatile organic liquid mixtures in soils. *J. Contam. Hydrol.* **25**. 113–127.
- JARVIS, N.J., 1994. *The MACRO Model (Version 3.1). Technical Description and Sample Simulations*. Reports and Dissertations 19. Department of Soil Science, Swedish University of Agricultural Science. Uppsala, Sweden.
- JARVIS N. J., 2007. A review of non-equilibrium water flow and solute transport in soil macropores: principles, controlling factors and consequences for water quality. *Eur. J. Soil Sci.* **58**. 523–546.
- JARVIS, N. J., ZAVATTARO, L., RAJKAI, K., REYNOLDS, W. D., OLSEN, P.-A., MCGECHAN, M., MECKE, M., MOHANTY, B., LEEDS-HARRISON, P. B. & JACQUES, D., 2002. Indirect estimation of near-saturated hydraulic conductivity from readily available soil information. *Geoderma.* **108**. (1–2) 1–17.
- JOEKAR-NIASSAR, V., HASSANIZADEH, S.M. & DAHLE, H.K., 2010. Non-equilibrium effects in capillarity and interfacial area in two-phase flow: Dynamic pore-network modelling, *J. Fluid. Mech.* **655**. 38–71.

- JOONAKI, A. & GHANAATIAN, S. 2013. Prediction of Relative Permeability for Multiphase Flow in Fractured Oil Reservoirs by using a soft computing approach. *J. Comp. Appl.* **73**. 45–55.
- JUHÁSZ J. 2002. Hidrogeológia. Akadémiai Kiadó. Budapest.
- KINSKY, J., FRYDMAN, S. & ZASLAVSKY, D., 1971. The effect of different dielectric liquids on the engineering properties of clay. *Proceedings of fourth Asian regional conference on SFME*. **1**. 369–372.
- KLIMES-SZMIK A., 1962. A talaj pórustérének beosztása a víz mozgása alapján. *Agrokémia és Talajtan*. **1**. 41–54.
- KESSLER, A. & RUBIN, H., 1987. Relationships between water infiltration and oil spill migration in sandy soils. *J. Hydrol.* **91**. 187–204.
- KOEKKOEK, E. J. W. & BOLTINK, H., 1999. Neural Network models to predict soil water retention. *Am. J. Soil. Sci.* **350**. 489–495.
- KOOL, J. B. & PARKER, J. C., 1987. Development and evaluation of closed-form expressions for hysteretic soil hydraulic properties. *Water Resour. Res.* **23**. 105–114.
- KOSUGI, K., 1994. Three-parameter lognormal distribution model for soil water retention. *Water. Resour. Res.* **30**. (4) 891–901.
- KOSUGI, K., 1999. General model for unsaturated hydraulic conductivity for soils with lognormal pore size distribution. *Soil. Sci. Am. J.* **63**. 270–277.
- KOSUGI, K., HOPMANS, J. W. & DANE, J. H., 2002. Parametric models. In: *Methods of Soil Analysis* (Eds.: DANE, J. H. & TOPP, G. C.) 739–757. Part 4. SSSA Book Ser. 5. SSSA. Madison, Wis.
- KOVÁCS, GY., 1972. A szivárgás hidraulikája. Akadémiai Kiadó. Budapest.
- KOZENY, J., 1927. Über kapillare Leitung des Wassers im Boden. *Wiener Akademie Wissenschaft.* **136**. 271.
- KUEPER, B. H. & FRIND, E. O., 1991. Two-phase flow in heterogeneous porous media, 1, Model development. *Water Resour. Res.* **27**. 1049–1057.
- LAL, R. & SHUKLA, M. K., 2004. *Principles of Soil Physics*. Marcel Dekker. New York.
- LALIBERTE, G. E., 1969. A mathematical function for describing capillary pressure-desaturation data. *Bull. Int. Assoc. Sci. Hydrol.* **142**. 131–149.
- LEBEAU, M. & KONRAD, J-M., 2010. A new capillary and thin film flow model for predicting the hydraulic conductivity of unsaturated porous media. *Water Resour. Res.* **46**. W12554.
- LENHARD, R.J. & PARKER, J.C., 1987. A model for hysteretic constitutive relations governing multiphase flow, 2. Permeability-saturation relations. *Water Resour. Res.* **23**. (12) 2197–2206.
- LEVERETT, M.C., 1941. Capillary behavior in porous solids. *Trans. AIME.* **142**. 152–169.
- LEVERETT, M.C. & LEWIS, W.B., 1941. Steady flow of gas-oil-water mixtures through unconsolidated sands. *Trans. AIME.* **142**. 107–116.
- LIAN, L.T. & SAGAR, B.S.D. 2006. Modeling, description, and characterization of fractal pore via mathematical morphology. *Discrete Dyn. Nat. Soc.* Article ID 89280.

- LOLL, P., MOLDRUP, P., SCHJØNNING, P. & RILEY, H., 1999. Predicting saturated hydraulic conductivity from air permeability: application in stochastic water infiltration modeling. *Water Resour. Res.* **35** 8. 2387–2400.
- LOWEL, S. & JOEN, E.S., 1984. Powder surface area and porosity. 3rd ed. Chapman & Hall. London.
- LUCKNER, L.M., VAN GENUCHTEN, M. TH. & NIELSEN, D.R., 1989. A consistent set of parametric models for the two-phase flow of immiscible fluids in the subsurface. *Water Resour. Res.* **25**. 2187–2193.
- MAKÓ, A., 1995. Szerves folyadékokkal telített talajok hidraulikus vezetőképessége. II. A becslés lehetőségei. *Agrokémia és Talajtan.* **44**. (1–2) 203–220.
- MAKÓ, A., 1997. A talaj szilárd fázisa és a szerves folyadékok kölcsönhatásai. Kandidátusi értekezés. Keszthely.
- MAKÓ, A. & ELEK, B., 2006. Measuring the fluid conductivities of soil in multiphase system. *Cereal Research Communication.* **34**. 239–242.
- MAKÓ, A., ELEK, B., DUNAI, A. & HERNÁDI H., 2009. Comparison of nonaqueous phase liquids conductivity and air permeability of different soils. *Commun. Soil.Sci. Plant Anal.* **40**. (1) 787–799.
- MAKÓ A. & HERNÁDI H., 2012. Kőolajszármazékok a Talajban: Talajfizikai Kutatások. Pannon Egyetem. Veszprém. Magyarország.
- MEHMANI, Y., SUN, T., BALHOFF, M., EICHHUBL, P. & BRYANT, S., 2012. Multiblock pore-scale modeling and upscaling of reactive transport: application to carbon sequestration. *Trans. Porous Media.* **95**. (2) 305–326.
- MEHMANI, A. & PRODANOVIĆ, M., 2014. The effect of microporosity on transport properties in porous media. *Adv. Water Resour.* **63**. 104–119.
- MESRI, G. & OLSON, R.E., 1971. Consolidation characteristics of montmorillonite. *Geotechnique.* **21**. 341–352.
- MILLER, E.E. & MILLER, R.D., 1956. Physical theory of capillary flow phenomena. *J. Appl. Phys.* **27**. 324–332.
- MINASNY, B., HOPMANS, J.W., HARTE, T., ECHING, S.O., TULI, A. & DENTON, M.A., 2004. Neural networks prediction of soil hydraulic functions for alluvial soils using multistep outflow data. *Soil Sci. Soc. Am. J.* **68**. 417–429.
- MITCHELL, J.K. & MADSEN, F.T., 1987. Chemical effects on clay hydraulic conductivity. In: *Proc. Speciality Conference on Geotechnical practice for waste disposal.* 87–116.
- MOHANTY, B.P., SKAGGS & VAN GENUCHTEN, M.TH., 1998. Impact of saturated hydraulic conductivity on the prediction of tile flow. *Soil Sci. Soc. Am. J.* **62**. 1522–1529.
- MUALEM, Y., 1976. A new model for predicting the hydraulic conductivity of unsaturated porous media. *Water Resour. Res.* **12**. 513–521.
- MUALEM, Y. & DAGAN, G., 1975. A dependent domain model of capillary hysteresis. *Water Resour. Res.* **11**. 3. 452–460.
- MURRAY, R.S. & QUIRK, J.P., 1982. The physical swelling of clays in solvents. *Soil Sci. Soc. Am. J.* **46**. (4) 865–868.

- NAGARAJARAO, Y., 1994. Pore size distribution measurements in swell-shrink soils. *J. Plant. Nutr. Soil. Sci.* **157**. (2) 81–85.
- NASTA, P., ROMANO, N., ASSOULINE, S., VRUGT, J. & HOPMANS, J.W., 2013. Prediction of spatially variable unsaturated hydraulic conductivity using scaled particle-size distribution functions. *Water Resour. Res.* **49**. 4219–4229.
- NIMMO, J.R., 1997. Modeling structural influences on soil water retention. *Soil Sci. Soc. Am. J.* **61**. 712–719.
- NIMMO, J. R., HERKELRATH, W. N. & LAGUNA LUNA, A. M., 2007. Physically based estimation of soil water retention from textural data: general framework, new models, and streamlined existing models. *Vadose Z. J.* **6**. 766–773.
- OLEJNIK, S., POSNER, A.M. & QUIRK, J.P., 1974. Swelling of montmorillonite in polar organic liquids. *Clays & Clay Minerals.* **22**. 361–365.
- OOSTROM, M. & LENHARD, R. J., 2003. Carbon tetrachloride flow behavior in unsaturated hanford calcic material: an investigation of residual nonaqueous phase liquids. *Vadose Zone J.* **2**. 25–33.
- OOSTROM, M., DANE, J.H. & WIETSMA, T. W., 2005. Removal of carbon tetrachloride from a layered porous medium by mean of soil vapor extraction enhanced by desiccation and water table reduction. *Vadose Z. J.* **4**. 1170–1182.
- OTHMER, H., DIEKKRÜGER, B. & KUTILEK, M., 1991. Bimodal porosity and unsaturated hydraulic conductivity. *Soil Sci.* **152**. 139–149.
- ØREN, P.-E., BAKKE, S. & ARNTZEN, O.J., 1998. Extending predictive capabilities to network models SPE J. Richardson. **3**. 324–336.
- PACHEPSKY, Y.A., RAWLS, W.J. & LIN, H.S., 2006a. Hydropedology and pedotransfer functions. *Geoderma.* **131**. 308–316.
- PACHEPSKY, Y. A., GUBER, AK. K., VAN GENUCHTEN, M. TH., NICHOLSON, T.J., CADY, R.E., ŠIMŮNEK, J. & SCHAAP, M.G., 2006b. Model abstraction techniques for soil water flow and transport. NUREG/CR-688.
- PHAM, H. Q., FREDLUND, D.G. & BARBOUR, S.L., 2005. A study of hysteresis models for soil-water characteristic curves. *Canadian Geotechnical J.* **42**. 1548–1568.
- PARKER, J.C. & LENHARD, R.J., 1987. A model of hysteretic constitutive relations governing multiphase flow: 1. Saturation-pressure relations. *Water Resour. Res.* **23**. 2187–2196.
- PATERSON L., PAINTER S., ZHANG X., PINCZEWSKI W.V., 1998. Simulating residual saturation and relative permeability in heterogeneous formations. *SPE J.* **3**. 211–218.
- PENNELL, K.D., POPE, G.A. & ABRIOLA, L.M., 1996. Influence of viscous and buoyancy forces on the mobilization of residual tetrachloroethylene during surfactant flushing. *Environ. Sci. Technol.* **30**. 1328–1335.
- PETERS, A., 2013. Simple consistent models for water retention and hydraulic conductivity in the complete moisture range. *Water Resour. Res.* **49**. 6765–6780.
- PETERS, A. & DURNER, W., 2008. Simplified evaporation method for determining soil hydraulic properties. *J. Hydrol.* **356**. 147–162.

- PHILIP, J.R. & DE VRIES, D.A., 1957. Moisture movement in porous materials under temperature gradients. *Trans. Amer. Geophys. Union.* **38.** 222–232.
- PIRI, M. & BLUNT, M.J., 2005. Three-dimensional mixed-wet random pore-scale network modelling of two- and three-phase flow in porous media. II. Results. *Phys. Rev. E*, **71.** (2) 026302.
- POPE, G.A., SEPEHRNOORI, K., SHARMA, M.M., MCKINNEY, D.C., SPEITEL, G.E. & JACKSON, R. E., 1999. Three-dimensional NAPL fate and transport model. U. S. Environmental Protection Agency.
- PURCELL, W.R., 1949. Capillary pressures – Their measurements using Mercury and calculation of permeability. *Trans. AIME.* **186.** 39–48.
- RAJKAI K., 1984. A talaj kapilláris vezetőképességének számítása a pF-görbe alapján, *Agrokémia és Talajtan.* **33.** 50–62.
- RAJKAI K., 2004. A víz mennyisége, eloszlása és áramlása a talajban. MTA Talajtani és Agrokémiai Kutatóintézet. Budapest.
- RAOOF, A. & HASSANIZADEH, S.M., 2009. A new method for generating pore-network models of porous media. *Transp. Porous Media.* **81.** (3) 391–407.
- RAOOF, A., NICK, H., HASSANIZADEH, S. & SPIERS, C. 2013. PoreFlow: a complex pore-network model for simulation of reactive transport in variably saturated porous media. *Comput. Geosci.* **61.** 160–174.
- RATHFELDER, K. & ABRIOLA, L.M., 1996. The influence of capillarity in numerical modelling of organic liquid redistribution in two-phase systems. *Adv. Water Resour.* **21.** (2) 159–170.
- RAWLS, W. J. & BRAKENSIEK, D. L., 1985. Prediction of soil water properties for hydrologic modeling. In: *Watershed Management in the 1980s. Proceeding of Symposium of Irrig. Drainage Div., Denver, CO., April 30–May 1, 1985.* ASCE. NY. 293–299.
- REEVES, P.C. & CELIA, M.A., 1996. A functional relationship between capillary pressure, saturation, and interfacial area as revealed by a pore-scale network model. *Water Resour. Res.* **32.** 2345–2358.
- ROGHANIAN, R. RASAEI, M. R. & HAGHIGHI, M., 2010, Key point prediction of water-oil relative permeability curves using linear regression technique. *Petrol. Sci. Technol.* **30.** (5) 518–533.
- ROMANO, N. & NASTA, P., 2016. How effective is bimodal soil hydraulic characterization? Functional evaluations for predictions of soil water balance. *Eur. J. Soil Sci.* **67.** 523–535.
- RUBIN, H., NARKIS, N. & CARBERRY, J., 1998. *Soil and Aquifer Pollution. Non-aqueous Phase Liquis – Contamination and Reclamation.* Springer-Verlag. Berlin.
- RUDIYANTO, R., SAKAI, M., VAN GENUCHTEN, M.TH., ALAZBA, A.A., SETIAWAN, B.I. & MINASNY, B., 2015. A complete soil hydraulic model accounting for capillary and adsorptive water retention, capillary and film conductivity, and hysteresis. *Water Resour. Res.* **51.** WR017703.

- SCHAAP, M.G., LEIJ, F.J. & VAN GENUCHTEN, M.TH., 1999. A bootstrap neuralnetwork approach to predict soil hydraulic parameters. In: Proc. of the International Workshop on Characterization and Measurements of the Hydraulic Properties of Unsaturated Porous Media (Eds.: VAN GENUCHTEN, M.TH., LEIJ, F.J. & WU, L.). University of California. Riverside, CA. 1237–1250.
- SCHAAP, M.G. & VAN GENUCHTEN, M.TH., 2006. A modified Mualem-van Genuchten formulation for improved description of the hydraulic conductivity near saturation. *Vadose Z. J.* **5**, 27–34.
- SCHAAP, M.G., LEIJ, F., J. & VAN GENUCHTEN, M.TH., 2001. Rosetta: a computer program for estimating soil hydraulic parameters with hierarchical pedotransfer functions. *J. Hydrol.* **251**, 163–176.
- SHAHVERDI, H., SOHRABI, M., FATEMI, S.M. & JAMIOLAHMADY, M., 2011. Three-phase relative permeability and hysteresis effect during WAG process in mixed and low IFT systems. *J. Pet. Sci. Eng.* **78**, 732–739.
- ŠIMŮNEK, J., JARVIS, N.J., VAN GENUCHTEN, M. TH. & GÄRDENÄS, A., 2003. Review and comparison of models for describing non-equilibrium and preferential flow and transport in the vadose zone. *J. Hydrol.* **272**, 14–35.
- ŠIMŮNEK, J., SEJNA, M. & VAN GENUCHTEN, M.TH., 1998. The HYDRUS-1D software package for simulating the one-dimensional movement of water, heat, and multiple solutes in variably saturated media. Version 2.0, IGWMC-TPS-70, International Ground Water Modeling Center, Colorado School of Mines, Golden, Colorado.
- ŠIMŮNEK, J., SEJNA, M. & VAN GENUCHTEN, M.TH., 1999. The HYDRUS-2D software package for simulating two-dimensional movement of water, heat, and multiple solutes in variably saturated media. Version 2.0, IGWMC-TPS-53, International Ground Water Modeling Center, Colorado School of Mines, Golden, Colorado.
- SSSA, 2008. Soil Science Society of America: Glossary of soil science terms. Mad WI.
- STEIAKAKIS, E., GAMVROUDIS, C. & ALEVIZOS, G., 2012. Kozeny-Carman equation and hydraulic conductivity of compacted clayey soils. *Geomaterials.* **12**, 37–41.
- TAMARI, S., WÖSTEN, J.H.M. & RUIZ-SÁREZ, J.C., 1996. Testing an artificial neural network for predicting soil hydraulic conductivity. *Soil Sci. Soc. Am. J.* **60**, 1732–1741.
- TSAKIROGLOU, C.D. & FLEURY, M., 1999. Pore network analysis of resistivity index for water-wet porous media. *Transport in Porous Media.* **35**, 89–128.
- TULI, A. & HOPMANS, J.W., 2004. Effect of degree of fluid saturation on transport coefficients in disturbed soils. *Eur. J. Soil Sci.* **55**, 147–164.
- TULLER, M. & OR, D., 2001. Hydraulic conductivity of variably saturated porous media: film and corner flow in angular pore space. *Water Resour. Res.* **37**, (5) 1257–1276.
- TULLER, M. & OR, D. 2005. Water films and scaling of soil characteristic curves at low water contents. *Water. Resour. Res.* **41**, W09403.

- TULLER, M., OR, D. & DUDLEY, L.M., 1999. Adsorption and capillary condensation in porous media: Liquid retention and interfacial configurations in angular pores. *Water Resour. Res.* **35**. (7) 1949–1964.
- TYLER, S. & WHEATCRAFT, S., 1989. Application of fractal mathematics to soil water retention estimation. *Soil Sci. Soc. Am. J.* **53**. 987–996.
- VALVATNE, P.H. & BLUNT, M.J., 2004. Predictive pore-scale modeling of two-phase flow in mixed wet media. *Water Resour. Res.* **40**. W07406.
- VAN GENUCHTEN, M. TH., 1980. A closed-form equation for predicting the hydraulic conductivity of unsaturated soils, *Soil Sci. Soc. Am. J.* **44**. 892–898.
- VAN GENUCHTEN, M.TH. & NIELSEN, D.R., 1985. On describing and predicting the hydraulic properties of unsaturated soils. *Annales Geophysicae*. **3**. (5) 615–628.
- VAN OLPHEN, H., 1963. An introduction to clay colloid chemistry. Interscience Publ. New York.
- VEECKEN, H., 1995. Estimating the unsaturated hydraulic conductivity from theoretical models using simple soil properties. *Geoderma*. **65**. 81–92.
- VEECKEN, H., MAES, J. & FEYEN, J. 1990. Estimating unsaturated hydraulic conductivity from easily measured soil properties. *Soil Sci.* **149**. 1–12.
- VEECKEN, H., KASTEEL, VANDERBORGHT, J. & HARTER, T., 2007. Upscaling hydraulic properties and soil water flow processes in heterogeneous soils: A review. *Vadose Zone J.* **6**. 1–28.
- VEECKEN et al., 2016. Modeling soil process: Review, key challenges, and new perspectives. *Vadose Zone J.* **15**. 1–57.
- WEAVER, J.W., CHARBENEAU, R.J., TAUXE, J.D., LIEN, B.K. & PROVOST, J.B., 1994. The hydrocarbon spill screening model (HSSM). **1**. USEPA. EPA/600/R-94/039a. Ada. Okl.
- VOGEL, H.J., & ROTH, K., 2001. Quantitative morphology and network representation of soil pore structure. *Adv. Water Resour.* **24**. (3) 233–242.
- WALSH, D., 2008. Multi-channel surface NMR instrumentation and software for 1D/2D groundwater investigations. *Journal of Applied Geophysics*. **66**. (3–4) 140–150.
- WERTH., C.H., ZHANG, C., BRUSSEAU, M.L., OOSTROM, M. & BAUMANN, T., 2010. A review of non-invasive imaging methods and applications in contaminant hydrogeology research. *J. Contam. Hydrol.* **113**. 1–24.
- WHITE, M.D. & OOSTROM, M., 2006. STOMP Subsurface transport over multiple phases. Version 4. PNNL 15782.
- WÖSTEN, J.H.M., LILLY, A., NEMES, A. & LE BAS, C., 1999. Development and use of a database of hydraulic properties of European soils. *Geoderma*. **90**. 169–185.
- WÖSTEN, J.H.M., PACHEPSKY, Y.A. & RAWLS, W.J., 2001. Pedotransfer functions: bridging the gap between available basic soil data and missing soil hydraulic characteristics. *J. Hydrol.* **251**. 123–150.
- XIONG, G., BAYCHEV, T.G. & JIVKOV, A.P., 2016. Review of pore network modelling of porous media: Experimental characterisations, network constructions and applications to reactive transport. *J. Contam. Hydr.* **192**. 101–107.
- ZHANG, Z.F., 2011. Soil water retention and relative permeability for conditions from oven-dry to full saturation. *Vadose Z. J.* **10**. 1299–1308.

Correlations between porosity, fluid retention and conductivity in soils saturated with water and/or non-aqueous phase organic liquids

II. Water conductivity – A review

^{1,2}H. HERNADI, ²G. BARNA and ²A. MAKÓ

¹Georgikon Faculty, University of Pannonia, Keszthely

²Institute for Soil Science and Agricultural Chemistry, Centre for Agricultural Research, Hungarian Academy of Sciences, Budapest

Summary

Modelling the flow and transport of fluids (water and non-aqueous phase liquids or NAPLs) in porous systems or soils requires the accurate and reliable determination of basic input modelling parameters, such as liquid retention (Pc–S) and conductivity (Ksat, Kh). Methods for the determination (measurement and estimation) of water retention and conductivity have improved enormously over the last 60 years (*Table 1*). Promising results verified the applicability of pedotransfer functions (PTF) and their incorporated versions into software and submodels. However, the development of models was only aimed at improving methods with which these hydrological parameters could be determined for water, while calculations for NAPLs can still only be made indirectly. Several studies (e.g. in the petroleum industry, and research for environmental or hydrological purposes) revealed differences in the relationship between the hydraulic properties and pore system of the porous solid phase. Interactions (swelling-shrinking, desaggregation, etc.) between the phases may be significantly different in water/soil and NAPL/soil systems, affecting the efficiency of modelling. However, relatively few well-documented results have been published on the measurement of these hydraulic properties for NAPL-type fluids using a sufficient number of real, especially undisturbed soils. The establishment of databases of this sort might provide a basis for creating and developing PTF-type estimation methods for predicting NAPL retention and conductivity. Furthermore, it might improve our knowledge on interactions specific to the solid and fluid phases of pore systems, and also on the soil properties influencing the pore size distribution of soils (e.g. soil structure, the size distribution, morphology or stability of aggregates) and their relationship with the hydrophysical properties of the soil.

Keywords: water conductivity, NAPL conductivity, porosity, soil structure

Table 1

Changes in the way correlations between porosity, differential porosity and the hydraulic properties of the soil are treated in scientific papers

	P_c-S	K_{sat} and K_h	Porosity and pore size distribution
a	<ul style="list-style-type: none"> ◊ <i>Water potential theory</i> ◊ empirical hydraulic functions ◊ indirect determinations for liquids other than water (eg. $P_T = P_w + P_{mv}$) 	<ul style="list-style-type: none"> ◊ Physically based estimation /empirical hydraulic functions (micro and mezo – REV – scale) ◊ <i>Capillary flow models</i> ◊ Kozeny-Carman equation (direct determination method for water and indirect for NAPLs) 	<ul style="list-style-type: none"> ◊ <i>ideal pore system</i>: sphere shaped elementary particles, homogeneous, isotropic, non-interacting porous system ◊ <i>idealised pores</i>: cylindrical capillary tubes ◊ storage and connecting pores featured by „Capillary number” and/or „Eötvös/Bond number”
A	<ul style="list-style-type: none"> ◊ <i>BPC theory</i> (microscale correlations) 	<ul style="list-style-type: none"> ◊ <i>BPC theory</i> → film flow 	
b	<ul style="list-style-type: none"> ◊ <i>development of parametric functions</i> ◊ PTF type estimations ◊ Estimation based on particle size distribution 	<ul style="list-style-type: none"> ◊ P_c-S-k_r parametric functions and scaling between parameters of various functions ◊ K_h determination using K_s as matching value ◊ capillary flow in regular and then in irregular pores (take into consideration e.g. the tortuosity and interconnectedness of pores, roughness of particles) 	<ul style="list-style-type: none"> ◊ inhomogeneous pore surface, tortuosity of pores ◊ pores with various shape and size among differently packed particles ◊ theoretical assumptions for regular, interconnected pores → pore network modelling
B	<ul style="list-style-type: none"> ◊ porosity based determination (according to the Laplace-Young equation) 		
c	<ul style="list-style-type: none"> ◊ <i>statistically based PoSD-SWRC relationships</i> ◊ multimodal P_c-S and P_c-S-k_r functions ◊ development of PTF type estimation 	<ul style="list-style-type: none"> ◊ macropore flow ◊ K_h estimation using near saturated K_h as matching-point value ◊ various other types of flow (thin film flow, vapour flow, etc.) 	<ul style="list-style-type: none"> ◊ Random fragmentation theory (formation) ◊ multimodality – Theoretical partition of pore system (e.g. SSSA, 2008)
C	<ul style="list-style-type: none"> ◊ stochastic pore network modeling 		<ul style="list-style-type: none"> ◊ stochastic pore network modelling
d	<ul style="list-style-type: none"> ◊ Regionalisation of SWRC according to main forces affect P_c-S and K (e.g. gravity, capillarity, adsorption) ◊ Determination and development of numerical relationships between „pore regions” and in changing pore systems (hysteresis, swelling-shrinking, etc.) at micro and REV scale → upscaling ◊ PTF type estimations – estimation for water/soil systems 		
D	<ul style="list-style-type: none"> ◊ 2D and 3D stochastic pore network models – pore and mezo-scales (for rigid, non-interacting porous systems) 		
e	<ul style="list-style-type: none"> ◊ Dual and multiporosity and/or permeability models ◊ Development and validation of PTF type estimations; utilize more sophisticated statistical methods (e.g. artificial neural networks) to handle and analyse large databases; direct relationships for water/soil systems and indirect determination of the relative permeability (k_r) function and its „key points” for NAPL/soil or water/NAPL/soil systems; direct estimation of NAPL retention and conductivity with PTF type relationships 		
E	<ul style="list-style-type: none"> ◊ Pore network modelling of 3D and 4D (time scale) flow processes at different scale in continually changing pore systems 		

This research programs were supported by the Hungarian National Research, Development and Innovation Office Foundation (Grant No. K 119475) and by the New National Excellence Program of the Ministry of Human Capacities.