

Modellentwicklung zum gekoppelten Transport von Wasser, Wärme und Gasen in Abraum aus dem Braunkohletagebau

Diplomarbeit

vorgelegt von
Olaf Ippisch

Universität Bayreuth
Abteilung Bodenphysik
Lehrstuhl für Bodenkunde und Bodengeographie
Prof. Dr. B. Huwe

Bearbeitungszeitraum:
8.01.96 bis 7.10.96

Inhaltsverzeichnis

Vorwort	iv
Zusammenfassung	v
Summary	vi
Abbildungsverzeichnis	vii
Tabellenverzeichnis	ix
Symbolverzeichnis	x
1 Einleitung	1
1.1 Motivation	1
1.2 Ziel der Arbeit	2
1.3 Dimensionen und Einheiten	3
2 Bodenphysikalische Grundlagen – Physikalisch-chemisches Modell	4
2.1 Wassertransport	4
2.1.1 Transportgleichung	4
2.1.2 Wasserspannungskurve	5
2.1.3 Ungesättigte Leitfähigkeit	5
2.2 Wärmetransport	7
2.2.1 Transportgleichung	7
2.2.2 Volumetrische Wärmekapazität	8
2.2.3 Wärmeleitfähigkeit	8
2.2.4 Horizontaler Wärmeverlust	10
2.3 Gastransport	10
2.3.1 Konvektiver Gastransport	10
2.3.1.1 Luftpermeabilität	11
2.3.1.2 Dynamische Viskosität	12
2.3.2 Diffusiver Gastransport	12
2.3.2.1 Effektiver Diffusionskoeffizient	13
2.3.3 Gastransportgleichung	15
2.4 Pyritoxidation	15
2.4.1 Kinetik	15
2.5 Prozeßkopplungen	16
2.5.1 Überblick	16
2.5.2 Druckkopplung	16

2.5.3	Temperaturabhängigkeit von Transportparametern	17
2.5.3.1	Ungesättigte Leitfähigkeit	17
2.5.3.2	Wasserspannungskurve	17
2.5.3.3	Gasviskosität	18
2.5.3.4	Gasdiffusionskoeffizienten	18
2.5.4	Wasserdampftransport	18
2.5.4.1	Wasserdampfdiffusion	20
2.5.5	Einfluß auf den Wärmetransport	22
2.6	Resultierendes Gleichungssystem	23
3	Numerische Behandlung des Problems	24
3.1	Räumliche Diskretisierung	24
3.1.1	„Finite Differenzen“-Verfahren	24
3.1.2	„Finite Volumina“-Verfahren	25
3.1.3	Formulierung der Flüsse an den Rändern der Volumina	26
3.2	Zeitdiskretisierung	26
3.3	Behandlung der nichtlinearen Gleichungen	27
3.4	Randbedingungen	28
3.4.1	Allgemeines	28
3.4.2	Anfangsbedingungen	28
3.4.3	Oberer Rand	28
3.4.4	Unterer Rand	29
3.4.5	Randflüsse	29
3.4.6	Randbedingungen für Wasserdampf	30
3.5	Lösung der linearen Gleichungssysteme	30
3.6	Prozeßkopplungen	30
3.6.1	Explizite Linearisierung	30
3.6.2	Iterative Lösung	31
3.6.3	Direkte Lösung	31
4	Programmtechnische Umsetzung	32
4.1	Vorüberlegungen	32
4.1.1	Programmiersprache und Betriebssystem	32
4.1.2	Anforderungen an ein Computermodell	32
4.1.3	Struktur des zu modellierenden Problems	33
4.2	Programmaufbau	33
4.2.1	Aufbau des Pedons	34
4.2.2	Aufbau eines Horizonts	34
4.2.3	Klassenstruktur des Gridpoints	36
4.3	Umsetzungsdetails	36
4.3.1	Parameterfunktionen	36
4.3.2	Zeitschrittsteuerung	37
4.3.3	Ein- und Ausgabe	38
4.3.4	Randbedingungen	38

5	Überprüfung des Modells	39
5.1	Massenbilanzen	39
5.2	Analytische Lösungen	39
5.2.1	Wassertransport	40
5.2.2	Gastransport	43
5.2.2.1	Konvektiver Gastransport	43
5.2.2.2	Diffusiver Gastransport	43
5.2.3	Wärmetransport	46
6	Anwendungsbeispiel	48
6.1	Parameter	48
6.2	Modellierung eines Lysimeters	48
7	Zusammenfassung und Ausblick	55
7.1	Bodenphysikalische Grundlagen	55
7.2	Bewertung der Modellierung	55
7.3	Erweiterungsmöglichkeiten	56
7.4	Aussagefähigkeit und Anwendungsmöglichkeiten	56
	Literaturverzeichnis	58
A	Lysimeter-Randbedingung	61
B	Adaptive Spline-Approximation	62
C	Eingabe-Dateien	64
D	Hydraulische Parameter der Beispielböden	69
D.1	Yolo Light Clay	69
D.2	Sand	69
E	Visualisierung der Ergebnisse mit 'gnuplot'	70
F	Anmerkungen zum Quellcode	71
G	Inhalt der CD-ROM	72

Vorwort

As far as the laws of mathematics refer to reality, they are not certain, and as far as they are certain, they do not refer to reality.

– Albert Einstein –

Viele Leute haben dazu beigetragen, daß es mir trotz dieses Dilemmas, vor dem jeder modellierende Wissenschaftler zwangsläufig steht, gelungen ist, diese Arbeit zu beenden.

Bedanken möchte ich mich vor allem bei

- Prof. Dr. B. Huwe für die gute Betreuung und dafür, daß er immer Zeit für mich hatte, wenn ich nicht mehr weiter wußte.
- Prof. Dr. P. Obermann für die Überlassung der Daten.
- Dr. K. U. Totsche, weil ich ihn jederzeit mit Fragen löchern durfte.
- Dr. W. Durner für seine Tips.
- Bernd Schultze für seine Hilfe bei der Messung der ungesättigten Leitfähigkeit.
- Iris Dörfler für ihre Mitarbeit bei den Messungen und manches aufmunternde Wort.
- Andreas Gaßner, weil ich seine *TArray*, *TVector* und *Comment*-Klassen verwenden durfte, die mir viel Arbeit erspart haben. Außerdem danke ich ihm für seine Diskussionsbereitschaft bei der Erarbeitung der Klassenhierarchie.
- Dieter Arnold und Stefan Noppenberger für ihre Hilfe beim Korrekturlesen und für viele gute Ratschläge.
- Rita Kilger für die Unterstützung bei der Übersetzung des Summary.
- Den Diplomanden und Doktoranden der Abteilung Bodenphysik für das gute „Betriebsklima“.
- Jürgen Ott, dafür daß er mich so oft vor dem Hungertod bewahrt hat.
- dem unbekanntem Helfer, stellvertretend für alle die ich vergessen haben sollte.

Besonders bedanken möchte ich mich bei meinen Eltern, die mir dieses Studium erst ermöglicht haben.

Zusammenfassung

Beim Abbau von Rohstoffen im Tagebau ist die Oxidation von pyrithaltigen Nebengesteinen in den Abraumhalden ein weltweit verbreitetes Problem. In Deutschland betrifft dies vor allem die Gewinnung von Braunkohle. An der Ruhr-Universität Bochum werden deshalb Säulenversuche mit Abraummaterial durchgeführt, um die Pyritoxidation zu studieren und Wege zu ihrer Reduktion zu finden.

Das Ziel dieser Arbeit ist die Entwicklung eines Computermodells, mit dem es möglich ist, den Transport von Wasser, Wärme und Gasen in pyrithaltigem Material zu simulieren.

Die Erstellung des Modells erfolgt in drei Schritten. Den ersten Schritt bildet die Zusammenstellung der verschiedenen physikalischen und chemischen Prozesse und ihrer mathematischen Beschreibung. Dazu gehören Wassertransport, Wärmetransport, konvektiver und diffusiver Gastransport und Wasserdampftransport. Die Wechselwirkungen zwischen den Prozessen und die notwendigen Transportparameter wurden untersucht. Diese Überlegungen resultieren in der Aufstellung eines Gleichungssystems, das die Transportprozesse und ihre Kopplung beschreibt.

Die numerische Behandlung des Gleichungssystems stellt den zweiten Schritt dar. Dieser läßt sich in die räumliche und zeitliche Diskretisierung, die Lösung der linearen und nichtlinearen Gleichungssysteme und die Wahl der Anfangs- und Randbedingungen unterteilen. Zur Realisierung der Prozeßkopplungen wurden verschiedene Verfahren verwendet.

Im dritten Schritt folgt die Umsetzung in ein Computerprogramm. Dazu sind Vorüberlegungen zur Wahl der Programmiersprache und des Betriebssystems, zu den Anforderungen an das Programm und zur Struktur des zu modellierenden Problems nötig. Da ein objektorientierter Programmaufbau am besten eine leichte Erweiterbarkeit bei hoher Leistungsfähigkeit garantiert, wurde als Programmiersprache C++ verwendet. Besondere Aufmerksamkeit muß dabei dem Aufbau der Klassenhierarchie gewidmet werden.

Das Computermodell wurde an verschiedenen analytischen Lösungen getestet, wobei sich eine gute bis sehr gute Übereinstimmung ergab. Die Leistungsfähigkeit des Programmes wird an Beispielrechnungen demonstriert. Diese zeigen, daß eine Vernachlässigung der Prozeßkopplungen zu Abweichungen bei Wassergehaltsprofilen und Sickerungsraten führen kann.

Da es kaum möglich ist die vielen notwendigen Parameter ohne Kalibrierung zu bestimmen, ist der Einsatz des Modells zu Prognosezwecken nicht sinnvoll. Es kann jedoch zu Schulungszwecken, zum Studium von Prozeßkopplungen und zur Versuchsplanung verwendet werden.

Summary

The surface mining of raw material raises a problem that is known worldwide, which is the oxidation of pyrite in overburden. In Germany it is primarily the extraction of brown coal that is concerned. At the Ruhr-University in Bochum column experiments are being done to study the pyrite oxidation and to find a way to reduce it.

The aim of this paper is the development of a computer model which makes it possible to simulate the coupled transport of water, heat and gases.

The model has been drawn up in three steps. In the first step the different physical and chemical processes have been put together and described mathematically, including the transport of water, heat, water vapour and the convective and diffusive transport of gas. The interaction between the processes and the necessary parameters for the transport have been investigated. As a result of these examinations a system of equations has been set up, describing the processes of transport and the linkage of them.

The numerical treatment of the equation system constitutes the second step, which can be subdivided into spacial and temporal discretization, the solution of the systems of linear and nonlinear equations and the choice of boundary conditions. Different procedures have been used for the realization of process linkages.

In a third step the translation into a computer program has been carried through. For this end preliminary deliberations have been necessary concerning the choice of the programming language and the operating system, the demands on the program and the structure of the problem to be modelled. An object-oriented program structure being the best way to guarantee an easy extensibility at high capacity, C++ has been chosen as programming language. Special attention had to be paid to the construction of the Class Hierarchy.

The computer model has been tested with different analytical solutions, the result being a good to very good correspondence. The capacity of the program has been demonstrated with exemplary calculations, which show that to ignore the process linkages can lead to deviations in the calculated water content profiles and seepage rates.

As it is hardly possible to fix the great number of parameters without calibration, it is not useful to apply the model with prognostic purposes. But it can be used for training purposes, in order to study process linkages and to plan experiments.

Abbildungsverzeichnis

1.1	Aufbau der Versuchssäulen	2
2.1	Hysterese der Wasserspannungskurve eines grob-texturierten Bodens	6
2.2	Wärmeleitfähigkeit verschiedener Böden in Abhängigkeit vom volumetrischen Wassergehalt.	9
2.3	Relative Luftpermeabilität in Abhängigkeit von der relativen Wassersättigung	11
2.4	Vergleich von gemessenen relativen Diffusionskoeffizienten mit verschiedenen Tortuositätsmodellen	14
2.5	Wasserdampftransport durch eine Wasserbrücke.	20
2.6	Temperaturgradienten in verschiedenen Materialien	22
3.1	Aufbau des unteren Randes der Bochumer Versuchssäulen	29
4.1	Beispiel eines Pedons	34
4.2	Schematische Darstellung der Objektstruktur von <i>MUSIC</i>	35
4.3	Schematische Darstellung der Objektstruktur von <i>PedonClass</i>	35
4.4	Schematische Darstellung der Objektstruktur von <i>HorizonClass</i>	36
4.5	Darstellung der Ableitung von <i>GridpointClass</i>	37
5.1	Vergleich von Profilen, die mit <i>MUSIC</i> berechnet wurden, und Werten aus der quasi-analytischen Lösung von Philip für den Yolo Light Clay.	41
5.2	Vergleich der Infiltrationsraten und der kumulativen Infiltration, die mit <i>MUSIC</i> berechnet wurden, und der quasi-analytischen Lösung von Philip für den Yolo Light Clay.	41
5.3	Vergleich von Profilen, die mit <i>MUSIC</i> berechnet wurden, und Werten aus der quasi-analytischen Lösung von Philip für den Sand.	42
5.4	Vergleich der Infiltrationsraten und der kumulativen Infiltration, die mit <i>MUSIC</i> berechnet wurden, und der quasi-analytischen Lösung von Philip für den Sand.	42
5.5	Berechnete Molenbrüche und Vergleichswerte für O_2	44
5.6	Berechnete Molenbrüche und Vergleichswerte für CO_2	45
5.7	Berechnete Molenbrüche und Vergleichswerte für N_2	45
5.8	Vergleich zwischen simuliertem Temperaturprofil und analytischer Lösung. .	47
6.1	Wasserspannungskurve und relative Wasserleitfähigkeit des Säulenmaterials	49
6.2	Relative Luftpermeabilität des Säulenmaterials	49
6.3	Entwicklung des Matrixpotentials im unteren Teil des Lysimeters bei Szenario I und II.	50

6.4	Verlauf des vol. Wassergehalt im unteren Teil des Lysimeters bei Szenario I und II.	50
6.5	Entwicklung des Luftdrucks im untersten Volumenelement bei Szenario II. .	51
6.6	Druckverlauf im Profil bei Szenario II.	52
6.7	Vorgegebene Randbedingung für die Entwicklung des Luftdrucks in Szenario III.	52
6.8	Entwicklung des Luftdrucks in der Mitte der Säule und im untersten Volumenelement bei Szenario III.	53
6.9	Vergleich der Sickerungsraten bei den unterschiedlichen Szenarien.	53
6.10	Gasflußdichte am oberen Rand bei Szenario II und III.	54
6.11	Gasflußdichte am unteren Rand bei Szenario II und III.	54

Tabellenverzeichnis

2.1	Überblick über die relevanten Prozeßkopplungen	16
2.2	Abhängigkeit der Gasviskositäten von der Temperatur.	18
2.3	Berechnung der binären Diffusionskoeffizienten	19
5.1	Für die Simulation des diffusiven Gastransportes verwendete Parameter. . .	46
5.2	Für die Simulation des Wärmetransports verwendete Parameter.	47
6.1	Transportparameter des Säulenmaterials	48
6.2	Massenbilanzen und Rechenzeiten der verschiedenen Szenarien	50

Symbolverzeichnis

Kleinbuchstaben

Symbol	Bezeichnung	Einheit
c_{Pyrit}	Massenbezogene Konzentration von Pyrit	mol/kg
c_{O_2}	Massenbezogene Konzentration von Sauerstoff	mol/kg
d_l	Dicke der laminaren Grenzschicht	m
d_{Wand}	Dicke der Wandung	m
Δh_{Pyrox}	Molare Reaktionsenthalpie der Pyritoxidation	J/mol
g	Erdbeschleunigung	m/s^2
g_a, g_b, g_c	Formfaktoren zur Berechnung der Wärmeleitfähigkeit a, b, c Symbole für die Achsen eines Ellipsoids	–
h_a	Druckpotential	m
h_g	Gravitationspotential	m
h_m	Matrixpotential	m
h_o	Osmotisches Potential	m
$f(\theta_a)$	Reduktionsfunktion für den temperaturabhängigen Wasserdampftransport	–
k_g	Luftpermeabilität	m^2
k_i	Verhältnis des mittleren Temperaturgradienten in Partikeln vom Typ i zum Temperaturgradienten im umgebenden Medium	–
k_r	Reaktionskonstante	kg/mol s
k_w	Permeabilität für Wasser	m^2
m	van Genuchten Parameter	–
m_{Pyrit}	Im Boden vorhandene Pyritmasse	kg
n	van Genuchten Parameter	–
n	Molendichte der Bodenluft	mol/m^3
\vec{n}	Normalenvektor auf das Flächenelement dF	–
n_i	molare Konzentration des Gases i	mol/m^3
n_v	Molendichte des Wasserdampfes	mol/m^3
n_{v0}	Molendichte von gesättigtem Wasserdampf	mol/m^3
p	Gasdruck	Pa
p_0	Referenzdruck	Pa
r	Respirationskoeffizient: Verhältnis von Sauerstoffverbrauch und CO_2 -Produktion	–
rH	relative Luftfeuchtigkeit	–
t	Zeit	s
$u(z)$	Platzhalter fuer eine beliebige Differentialgleichung.	–
x_i	Molenbruch des Gases i	–

Symbol	Bezeichnung	Einheit
z	Abstand zu einer Referenzhöhe	m
z_i	Mittelpunkt des Volumen-Elements V_i	m^2
Δz_i	Höhe des Volumen-Elements V_i	m

Großbuchstaben

Symbol	Bezeichnung	Einheit
A	Grundfläche der Volumen-Elemente	m^2
C_d	volumetrische Wärmekapazität des trockenen Bodens	J/m^3K
C_p	volumetrische Wärmekapazität der Bodenluft	J/m^3K
C_s	volumetrische Wärmekapazität des feuchten Bodens	J/m^3K
C_w	volumetrische Wärmekapazität von Wasser	J/m^3K
D_{atm}	Diffusionskoeffizient von Wasserdampf in der freien Gasmischung	m^2/s
$D_{h_{mv}}$	Diffusionskoeffizient für Wasserdampftransport durch Feuchtigkeitsgradienten	m^2/s
D_i	Diffusionskoeffizient des Gases i in der Gasmischung	m^2/s
$D_{i\text{eff}}$	Effektiver Diffusionskoeffizient des Gases i in der Gasmischung	m^2/s
D_{ij}	Binärer Diffusionskoeffizient der Gase i und j	m^2/s
$D_{ij\text{eff}}$	Effektiver binärer Diffusionskoeffizient der Gase i und j	m^2/s
$D_{i\text{eff}}^K$	Effektiver Knudsendiffusionskoeffizient des Gases i	m^2/s
D_{T_v}	Diffusionskoeffizient für Wasserdampftransport durch Temperaturgradienten	m^2/s
dF	Flächenelement	L^2
F_i	Begrenzungsfläche des Volumens V_i	L^2
H	Gesamtpotential	m
I	kummulative Infiltration	m
\vec{J}_a	Flußdichte des Bodengases	mol/m^2s
\vec{J}_{g_i}	molarer Gesamtfluß des Gases i	mol/m^2s
\vec{J}_{g_k}	molarer konvektiver Gasfluß	mol/m^2s
\vec{J}_{gD_i}	molarer Fluss des Gases i durch molekulare Diffusion	mol/m^2s
\vec{J}_{gDG}	molarer Fluss des Gases i nach dem Dusty-Gas-Modell	mol/m^2s
\vec{J}_h	Wärmeflußdichte	J/m^2s
\vec{J}_v	Wasserdampfllußdichte	mol/m^2s
\vec{J}_{vD}	diffusiver Wasserdampflluß	mol/m^2s
\vec{J}_w	Wasserflußdichte	m/s
J_{Wand}	Wärmeflußdichte durch die Wand der Säule	J/m^2s
$[J_w]_{z_i \pm \frac{\Delta z_i}{2}}$	Flußdichten am Rand des Volumen-Elements	m/s
K_r	relative Leitfähigkeit	–
K_w	ungesättigte Leitfähigkeit	m/s

Symbol	Bezeichnung	Einheit
$K_{w_{sat}}$	gesättigte Leitfähigkeit	m/s
L	Verdunstungsenthalpie von Wasser	J/mol
L	Länge der Bodensäule	m
M_i	molare Masse des Gases i	kg/mol
M_{Pyrit}	molare Masse von Pyrit	kg/mol
M_w	molare Masse von Wasser	kg/mol
Q_{gi}	Quell-/Senkenterm des Gases i	$mol/m^3 s$
Q_w	Quell-/Senkenterm für Wasser	s^{-1}
\bar{Q}_{w_i}	mittlerer Quell-/Senkenterm im Volumen V_i	t^{-1}
Q_H	Quell-/Senkenterm für Wärme	$J/m^3 s$
Q_{PC}	Phasenwechsel von Wasserdampf	$mol/m^3 s$
Q_{Wand}	Wärmeverlust durch mangelnde Isolierung	$J/m^3 s$
R	ideale Gaskonstante	$J/mol K$
T	Temperatur	K
T_0	Referenztemperatur	K
T_a	Außentemperatur	K
T_i	Temperatur in der Säule am Punkt i	K
$(\nabla T)_a$	mittlerer Temperaturgradient im luftgefüllten Porenraum	K/m
V_i	Teilvolumen	m^3
W	Benetzungswärme	J/kg
X_i	Volumenanteil der Komponente i am Gesamtvolumen	–
X_o	Volumenanteil organischer Substanz	–

Griechische Buchstaben

Symbol	Bezeichnung	Einheit
α	van Genuchten Parameter	–
α	Fittingparameter für den Wärmeverlust	$J/m^2 s K$
δ_{ij}	Kronecker Delta $\delta_{ij} = \begin{cases} 1 & \text{falls } i = j \\ 0 & \text{falls } i \neq j \end{cases}$	–
ε	Porosität	–
γ	Relaxationsparameter ($1 \geq \gamma > 0$)	–
λ_0	Wärmeleitfähigkeit des umgebenden Mediums	$J/ms K$
λ_*	theoretische Wärmeleitfähigkeit ohne Feuchtigkeitstransport	$J/ms K$
λ_{eff}	effektive Wärmeleitfähigkeit einschließlich Feuchtigkeitstransport	$J/ms K$
λ_i	Wärmeleitfähigkeit von der Komponente i	$J/ms K$
λ_s	Wärmeleitfähigkeit des Bodens	$J/ms K$
λ_{Wand}	Wärmeleitfähigkeit des Wandmaterials	$J/ms K$
μ_g	dynamische Viskosität der Gasmischung	$kg/m s$
μ_i	dynamische Viskosität des reinen Gases i	kg/ms
μ_w	dynamische Viskosität von Wasser	kg/ms
μ_{w20}	dynamische Viskosität von Wasser bei $20^\circ C$	kg/ms
ρ_w	Dichte von Wasser	kg/m^3

Symbol	Bezeichnung	Einheit
σ_w	Oberflächenspannung von Wasser	N/m
σ_{w_0}	Oberflächenspannung von Wasser bei Referenztemperatur	N/m
τ	empirischer Tortuositätsfaktor (im Mualem-Modell)	–
θ_a	Luftgefüllte Porosität	m^3/m^3
θ_r	Residualwassergehalt (van Genuchten Parameter)	m^3/m^3
θ_s	Sättigungswassergehalt (van Genuchten Parameter)	m^3/m^3
θ_w	volumetrischer Wassergehalt	m^3/m^3
$\bar{\theta}_{w_i}$	mittlerer volumetrischer Wassergehalt im Volumen V_i	m^3/m^3
θ_w^{j-1}	Wassergehalt in der (j-1)-ten Iteration des Gastransportes	m^3/m^3
θ_w^j	Wassergehalt in der j-ten Iteration des Gastransportes	m^3/m^3
θ_w^{j*}	Wassergehalt aus der Lösung der Wassertransportgleichung in der j-ten Iteration	m^3/m^3
θ_E	effektiver Wassergehalt	m^3/m^3
θ_K	Wassergehalt ab dem das Porenwasser nicht mehr kontinuierlich ist	m^3/m^3
ξ_g	relativer Diffusionskoeffizient	–

1 Einleitung

1.1 Motivation

Die Bundesrepublik Deutschland ist zur Zeit einer der größten Braunkohleproduzenten der Welt. 1991 betrug die Fördermenge 29,4 Mio. Tonnen. Braunkohle ist nach Mineralöl der zweitwichtigste Primärenergieträger (Wisotzky 1994). Sie wird ausschließlich im Tagebau gewonnen.

In den Nebengesteinen der Braunkohle ist Pyrit enthalten, der beim Abbau mit Luft-sauerstoff in Kontakt gerät und oxidiert wird. Dabei werden beträchtliche Mengen Säure sowie meist sulfidisch gebundene Schwermetalle freigesetzt. Es kommt zu einer starken Aufmineralisierung des Grundwassers, wodurch dessen weitere Nutzbarkeit ernsthaft in Frage gestellt wird.

Der Lehrstuhl für Angewandte Geologie des Institutes für Geologie an der Ruhr-Universität Bochum (RUB) wurde deshalb vom Landesumweltamt Nordrhein-Westfalen damit beauftragt, die Auswirkungen der Haldenversauerung auf die Grundwasserbeschaffenheit des Rheinischen Braunkohlenreviers zu untersuchen. Zu diesem Zweck wurden zunächst Haldenversuche durchgeführt, deren Ergebnisse darauf hindeuten, daß die Sauerstoffnachlieferung den limitierenden Faktor für die Pyritoxidation darstellt.

Um diese Hypothese zu überprüfen und Maßnahmen zur Schadensbegrenzung zu testen, werden an der RUB Versuche mit drei Laborsäulen durchgeführt. Die Säulen sind drei Meter hoch und haben einen Durchmesser von 70 cm. Sie wurden mit bergfeuchtem, homogenisiertem Material gefüllt, dessen Pyritgehalt durch Vermischen mit pyritfreiem Sand auf 0,3 Gewichtsprozent gebracht wurde. Dies ist für die Tagebaue des Rheinischen Braunkohlenreviers typisch. In einer Säule wurde dem Material Kalk in einer zweiten Kraftwerksasche beigemischt, um die Säurebildung abzupuffern. In sieben Ebenen wurden Sonden zur Bestimmung von Temperatur, Wasserspannung und Gasdruck eingebracht, in weiteren drei Ebenen werden Bodenwasser- und Gasproben entnommen und das Redoxpotential gemessen (Abbildung 1.1). Die Säulen werden pro Tag mit 700 ml Wasser beregnet, was einem Jahresniederschlag von 660 mm entspricht und zu der ortsüblichen Sickerung von 300 mm führen soll. Genaueres zum Aufbau der Säulen und der Meßgeräte findet sich bei Schulz (1995).

Bei der Untersuchung des Gastransports unter instationären Bedingungen muß eine Vielzahl sich gegenseitig beeinflussender Prozesse berücksichtigt werden. Um die bestehenden Hypothesen über diese Vorgänge und ihr Zusammenspiel zu prüfen, ist ein Computerprogramm notwendig, das die Prozesse und ihre Kopplungen simuliert und Vergleiche mit den Meßdaten zuläßt.

Die Untersuchung des Gastransportes bildet einen Forschungsschwerpunkt der Abteilung Bodenphysik am Lehrstuhl für Bodenkunde und Bodengeographie der Universität Bayreuth. Die vorliegende Arbeit ist ein Teil umfangreicher Forschungen (Haubold und

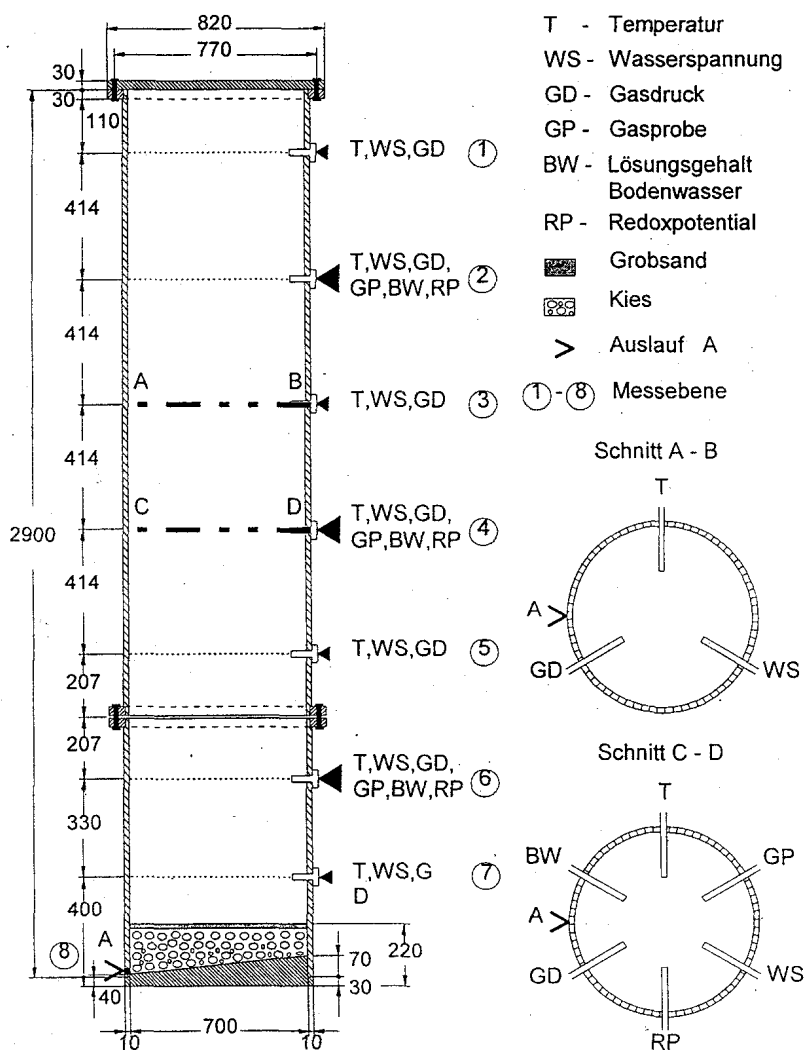


Abbildung 1.1: Aufbau der Versuchssäulen

Huwe 1995, Haubold 1994, Ott 1996). Zwischen der Abteilung Bodenphysik und dem Lehrstuhl für angewandte Geologie gibt es gemeinsame Projekte und Projektplanungen im Bereich des Umwelt- und Grundwasserschutzes.

1.2 Ziel der Arbeit

Das Ziel dieser Arbeit ist die Erstellung des Computermodells MUSIC¹ mit dem sich die wesentlichen Transportprozesse in den oben beschriebenen Versuchssäulen simulieren lassen sollen.

Das Modell soll zunächst vor allem die Analyse der Prozeßkopplungen erleichtern und zur Verbesserung des Experimentdesigns dienen. Auf lange Sicht sollen Ansätze entwickelt werden, die eine konzeptionelle und prognostische Modellierung auch realitätsnaher, kom-

¹Multiphase transport in Unsaturated Soils including Interprocess-Coupling

plexer Systeme ermöglichen.

Bei den mit Zuschlagsstoffen versehenen Säulen spielen sekundäre chemische Umsetzungen eine nicht vernachlässigbare Rolle, so daß ein Modell ohne volle Berücksichtigung der Bodenchemie nicht sinnvoll sein dürfte. Die Modellierung soll sich daher an der zuschlagsfreien Referenzsäule orientieren.

Da sich Gase und Wasser einen Porenraum teilen und die Pyritoxidation stark exotherm ist, ist eine gleichzeitige Simulation von Wasser-, Wärme und Gastransport notwendig.

Basis hierfür ist die Erarbeitung einer physikalischen Modellvorstellung für die beim Transport von Wasser, Wärme und Gasen in einem porösen Medium ablaufenden Vorgänge und eine Zusammenstellung der dabei relevanten Parameter.

Die Modellierung kann eindimensional durchgeführt werden, da die Säulen mit homogenem Material gefüllt sind und gleichmässig beregnet werden. Abweichungen könnten sich allerdings aus der fehlenden Wärmedämmung in Verbindung mit der Temperaturabhängigkeit der Pyritoxidation und aus Inhomogenitäten in den Säulen ergeben, die sich trotz aller Sorgfalt kaum vermeiden lassen.

Bei der darauf folgenden Programmentwicklung soll besonderer Wert auf eine ausbaufähige Struktur und eine einfache Erweiterbarkeit gelegt werden, um eine spätere Verknüpfung mit weiteren Teilmodellen² zu erleichtern.

Wegen der komplexen Struktur des Modells ist ein gründlicher Test des Programms insbesondere unter Verwendung analytischer Lösungen für Teilprobleme notwendig. Eine Anwendung auf beispielhafte Fälle unter genauen Plausibilitätsanalysen soll die Leistungsfähigkeit des Computermodells testen.

In einer späteren Arbeit soll eine Anpassung des Modells an die in Bochum erhobenen Daten erfolgen.

1.3 Dimensionen und Einheiten

In wissenschaftlichen Arbeiten ist es üblich, die Dimension der verwendeten Größen anzugeben; die Angabe von Einheiten ist unüblich. Dies ist zwar theoretisch gut begründbar, verbessert jedoch die Lesbarkeit nicht unbedingt. Die Dimension der Wärmeleitfähigkeit M/t^3 ist sicher weniger anschaulich als die Einheit J/m^2s . Aus diesem Grund sind in dieser Arbeit bei allen Größen die verwendeten Einheiten angegeben.

²z.B. Stofftransport, Bodenchemie

2 Bodenphysikalische Grundlagen – Physikalisch-chemisches Modell

Der erste Schritt zur Modellierung eines Systems ist die Entwicklung einer Vorstellung von den ablaufenden Vorgängen und einer adäquaten physikalischen oder chemischen Beschreibung.

2.1 Wassertransport

2.1.1 Transportgleichung

Schon sehr früh in der vergleichsweise jungen Geschichte der Bodenphysik wurde versucht, eine physikalische Beschreibung des Wassertransportes in Böden zu finden. Darcy formulierte 1856 eine Gleichung, die es ermöglicht, den Wasserfluß in gesättigten Böden zu berechnen. Sie wurde 1907 von Buckingham für ungesättigte Böden erweitert:

$$\vec{J}_w = -K_w(h_m) \cdot \nabla H \quad (2.1)$$

mit \vec{J}_w : Wasserflußdichte [m/s]
 $K_w(h_m)$: ungesättigte Leitfähigkeit [m/s]
 h_m : Matrixpotential [m]
 H : Gesamtpotential [m]

Das Gesamtpotential H setzt sich aus dem Matrixpotential h_m , dem Gravitationspotential h_g , dem osmotischen Potential h_o und dem Druckpotential h_a zusammen:

$$H = h_m + h_g (+h_a + h_o) \quad (2.2)$$

Die beiden letzteren werden jedoch in der Regel vernachlässigt.

Die Darcy-Buckingham-Gleichung ist bei sehr niedrigen und bei sehr hohen Fließgeschwindigkeiten nicht anwendbar. Bei niedrigen Geschwindigkeiten spielen - insbesondere bei hohen Tongehalten - Oberflächenkräfte eine nicht mehr vernachlässigbare Rolle, bei sehr hohen Geschwindigkeiten Turbulenzen.

Zur Beschreibung des instationären Wassertransports setzt man die Flußdichte aus der Darcy-Buckingham-Gleichung in die Kontinuitätsgleichung ein und erhält dadurch die sogenannte Richardsgleichung:

$$\frac{\partial \theta_w}{\partial t} = \nabla \cdot [K_w(h_m) \nabla H] + Q_w \quad (2.3)$$

mit θ_w : volumetrischer Wassergehalt [-]
 Q_w : Quell-/Senkenterm [s^{-1}]
 t : Zeit [s]

Die Richardsgleichung ist eine inhomogene, stark nichtlineare partielle Differentialgleichung. Da in der Gleichung gleichzeitig das Matrixpotential und der Wassergehalt vorkommen, ist zu ihrer Lösung die Kenntnis der funktionalen Abhängigkeit dieser beiden Größen sowie der ungesättigten Leitfähigkeit als Funktion des Matrixpotentials notwendig.

2.1.2 Wasserspannungskurve

Die graphische Auftragung des volumetrischen Wassergehaltes gegen das Matrixpotential bezeichnet man als Wasserspannungskurve. Da das Matrixpotential im Feld um etwa 4 Größenordnungen variiert, wird der Wassergehalt häufig gegen den negativen dekadischen Logarithmus des Matrixpotentials aufgetragen, den sogenannten pF-Wert. Die Wasserspannungskurve wird deshalb oft auch pF-WG-Kurve genannt.

Die Wasserspannungskurve ist nicht nur hochgradig nichtlinear, sie zeigt auch eine Hysterese, d.h. ihr Verlauf ist für Be- und Entwässerung unterschiedlich. Gründe dafür sind z.B. der Einschluss von Luftblasen bei der Bewässerung und der unterschiedliche Benetzungswinkel zwischen einer vorrückenden oder sich zurückziehenden Bewässerungsfront und der Festphase.

Aus praktischen Gründen wird die Hysterese in der Regel nicht berücksichtigt. Geeignete mathematische Modelle für ihre Beschreibung sind zur Zeit noch Gegenstand der Forschung.

Zur Lösung der Richardsgleichung ist eine analytische Beschreibung der Wasserspannungskurve hilfreich. Unter den vielen Ansätzen (vgl. Durner 1991) ist die Formulierung nach van Genuchten wohl die in den letzten Jahren am meisten verwendete:

$$\frac{\theta - \theta_r}{\theta_s - \theta_r} = [1 + (\alpha |h_m|)^n]^{-m} \quad (2.4)$$

Gewöhnlich wird dabei $m = 1 - \frac{1}{n}$ gesetzt. θ_r , θ_s , α und n sind Fittingparameter ohne reale physikalische Bedeutung. θ_r wird trotzdem häufig als Residual- und θ_s als Sättigungswassergehalt bezeichnet.

2.1.3 Ungesättigte Leitfähigkeit

Die Abhängigkeit der Leitfähigkeit eines Bodens vom Wassergehalt bzw. dem Matrixpotential ist nur schlecht meßbar. Dies ist besonders problematisch, da die ungesättigte Leitfähigkeit für die Modellierung des Wassertransportes von zentraler Bedeutung ist.

Auch bei der $K_w(h_m)$ -Beziehung treten Hysterese-Effekte auf. Sie ergeben sich jedoch vor allem aus der Hysterese der Wasserspannungskurve und sind bei der $K_w(\theta_w)$ -Beziehung vernachlässigbar klein. Deshalb werden sie auch hier in der Regel nicht berücksichtigt.

Eine mathematische Beschreibung der Leitfähigkeitskurve läßt sich aus dem Kapillarbündelmodell¹ ableiten (Kutilek und Nielsen 1994). Für die relative Leitfähigkeit ergibt

¹Man stellt sich das Porensystem des Bodens dabei als Bündel paralleler Kapillaren mit unterschiedlichem Durchmesser und unterschiedlicher Tortuosität vor.

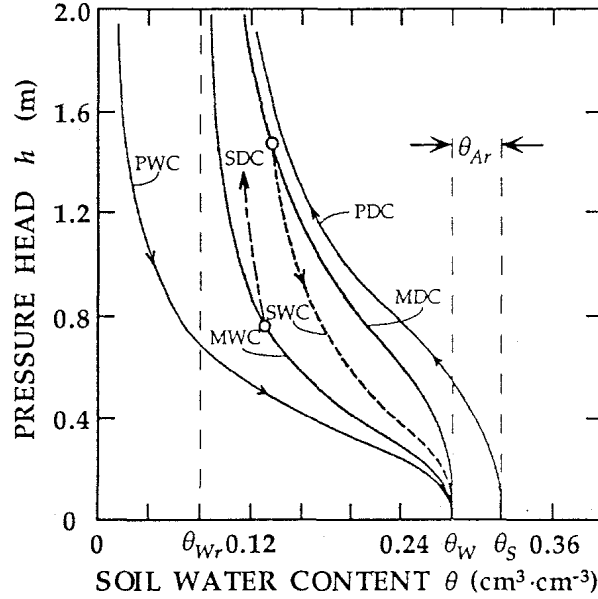


Abbildung 2.1: Hysterese der Wasserspannungskurve eines grob-texturierten Bodens (Kutilek und Nielsen 1994) PDC: Erstentwässerungskurve, PWC: Erstbewässerungskurve, MDC: Hauptentwässerungskurve, MWC: Hauptbewässerungskurve, SDC,SWC: Kurven bei Wechsel zwischen Ent- und Bewässerung.

sich bei diesem Ansatz unter Verwendung des Hagen-Poiseuille'schen Gesetzes und der Ableitung der Porengrößenverteilung aus der Wasserspannungskurve:

$$K_r(\theta_E) = \theta_E^\tau \int_0^{\theta_E} \frac{d\theta_E}{h^2(\theta_E)} / \int_0^1 \frac{d\theta_E}{h^2(\theta_E)} \quad (2.5)$$

mit $\theta_E = \frac{(\theta - \theta_r)}{(\theta_s - \theta_r)}$: effektiver Wassergehalt [-]
 τ : empirischer Tortuositätsfaktor [-]

Nach Vergleich mit den Leitfähigkeitskurven von 50 Böden modifizierte Mualem diese Funktion zu:

$$K_r = \theta_E^\tau \left[\int_0^{\theta_E} \frac{d\theta_E}{h(\theta_E)} / \int_0^1 \frac{d\theta_E}{h(\theta_E)} \right]^2 \quad (2.6)$$

Setzt man das van Genuchten-Modell für die Wasserspannungskurve ein (Gleichung 2.4), ergibt sich:

$$K_r(\theta_E) = \theta_E^\tau \left[1 - \left(1 - \theta_E^{1/m} \right)^m \right]^2 \quad (2.7)$$

$$K_r(h_m) = \frac{\left\{ 1 - (\alpha |h_m|)^{n-1} [1 + (\alpha |h_m|)^n]^{-m} \right\}^2}{[1 + (\alpha |h_m|)^n]^{m\tau}} \quad (2.8)$$

Der Tortuositätsfaktor τ , den Mualem gleich 0.5 setzte, wird heute in der Regel zusammen mit den van Genuchten-Parameter α , n , θ_r und θ_s durch inverse Modellierung bestimmt.

2.2 Wärmetransport

2.2.1 Transportgleichung

Wärmeenergie wird im Boden durch mehrere verschiedene Prozesse transportiert. De Vries (1958) gibt eine Gleichung für die Wärmeflußdichte an:

$$\vec{J}_h = \underbrace{-\lambda_s \nabla T}_1 + \underbrace{L \vec{J}_v}_2 + \underbrace{C_p (T - T_0) \frac{\vec{J}_a}{n}}_3 + \underbrace{C_w (T - T_0) \vec{J}_w}_4 \quad (2.9)$$

mit \vec{J}_h : Wärmeflußdichte [$J/m^2 s$]
 λ_s : Wärmeleitfähigkeit des Bodens [J/msK]
 L : Verdunstungsenthalpie von Wasser [J/mol]
 \vec{J}_v : Wasserdampfflußdichte [$mol/m^2 s$]
 C_p : volumetrische Wärmekapazität der Bodenluft [$J/m^3 K$]
 T : Temperatur [K]
 T_0 : Referenztemperatur [K]
 \vec{J}_a : Flußdichte des Bodengases [$mol/m^2 s$]
 n : Molendichte der Bodenluft [mol/m^3]
 C_w : volumetrische Wärmekapazität von Wasser [$J/m^3 K$]

Term 1 beschreibt die Wärmeleitung, Term 2 den Transport latenter Wärme, Term 3 und 4 den Transport fühlbarer Wärme mit Bodenluft und Wasser. Dabei wird angenommen, daß Wärmestrahlung im Boden nicht von Bedeutung ist.

Der Energieinhalt pro Volumen ist:

$$C_d(T - T_0) + L \cdot n_v + C_p \theta_a (T - T_0) + C_w \theta_w (T - T_0) + \rho_w \int_0^{\theta_w} W d\vartheta \quad (2.10)$$

mit C_d : volumetrische Wärmekapazität des trockenen Bodens [$J/m^3 K$]
 n_v : Molendichte des Wasserdampfes [mol/m^3]
 θ_a : Luftgefüllte Porosität [-]
 ρ_w : Dichte von Wasser [kg/m^3]
 W : Benetzungswärme [J/kg]

Da die Wärmekapazität der Luft sehr klein ist, können der Wärmetransport (Term 3 in Gleichung 2.9) und die Wärmespeicherung in der Bodenluft vernachlässigt werden. Einsetzen beider Gleichungen in die Kontinuitätsgleichung, ergibt:

$$\begin{aligned} \frac{\partial (C_s(T - T_0))}{\partial t} + L \frac{\partial n_v}{\partial t} + \rho_w W \frac{\partial \theta_w}{\partial t} &= -\nabla \cdot \vec{J}_h \\ &= \nabla \cdot (\lambda_s \nabla T) - L_0 \nabla \vec{J}_v - C_w \nabla \cdot [(T - T_0) \vec{J}_w] \end{aligned} \quad (2.11)$$

$$C_s = C_d + \theta_w \cdot C_w \text{ volumetrische Wärmekapazität des feuchten Bodens [J/m}^3\text{]}$$

Gibt es keine Quellen und Senken für Wasserdampf im Boden, so läßt sich dessen Kontinuitätsgleichung folgendermaßen umschreiben:

$$\frac{\partial n_v}{\partial t} = \nabla \cdot \vec{J}_v + Q_{PC} \quad (2.12)$$

Der Term Q_{PC} entspricht dem Phasenwechsel von Wasserdampf. Setzt man dies in Gleichung 2.11 ein, und vernachlässigt die Benetzungswärme, läßt sich diese vereinfachen zu:

$$\frac{\partial (C_s(T - T_0))}{\partial t} = \nabla \cdot (\lambda_s \nabla T) - L \cdot Q_{PC} - C_w \nabla \cdot [\vec{J}_w(T - T_0)] \quad (2.13)$$

Für die Lösung der Differenzialgleichung ist die Wahl der Referenztemperatur T_0 ohne Bedeutung. T_0 kann deshalb auf $0K$ gesetzt werden. Wärmeleitung und der Transport latenter Wärme sind nicht einfach additiv, wie das die obigen Gleichungen suggerieren. Darauf wird bei der Ableitung der effektiven Wärmeleitfähigkeit noch näher eingegangen.

Unberücksichtigt geblieben ist, daß auch durch viskose Reibung des sich bewegenden Wassers Wärme entsteht. Außerdem sind die Quellen und Senken für Wärme durch Kondensation bzw. Verdunstung von Wasser nicht gleichmässig über den Boden verteilt. Ersteres ist vernachlässigbar, letzteres würde eine hochkomplizierte Untersuchung der Transportprozesse auf mikroskopischem Maßstab erfordern.

2.2.2 Volumetrische Wärmekapazität

Die Wärmekapazität eines Bodens läßt sich, wie oben hergeleitet, durch Aufsummierung der mit dem Volumenanteil gewichteten Wärmekapazitäten der Bodenbestandteile errechnen. Die Wärmekapazitäten der verschiedenen Bodenminerale unterscheiden sich kaum voneinander, nur die der organischen Substanz liegt etwas höher. De Vries (1963) schlägt die Verwendung der Mittelwerte $1.9 \cdot 10^6 \text{ J/m}^{-3} \text{ K}^{-1}$ für die Bodenminerale und $2.5 \cdot 10^6 \text{ J/m}^{-3} \text{ K}^{-1}$ für die organische Substanz vor. Da die Wärmekapazität der Bodenluft vernachlässigbar klein ist, ergibt sich:

$$C_s = 4.2 \cdot 10^6 \frac{\text{J}}{\text{m}^3 \text{K}} \cdot \theta_w + 1.9 \cdot 10^6 \frac{\text{J}}{\text{m}^3 \text{K}} \cdot (1 - \varepsilon - X_o) + 2.5 \cdot 10^6 \frac{\text{J}}{\text{m}^3 \text{K}} \cdot X_o \quad (2.14)$$

ε : Porosität [-]

X_o : Volumenanteil organischer Substanz [-]

2.2.3 Wärmeleitfähigkeit

Die Wärmeleitfähigkeit eines Bodens ist nicht so leicht zu berechnen wie die Wärmekapazität, da sie außer vom Volumenanteil der einzelnen Phasen auch von deren Form und Anordnung abhängt. Eine Erhöhung der Wärmeleitfähigkeit oder des Volumenanteils einer Phase kann zu einem überproportionalen Anstieg der Gesamtwärmeleitfähigkeit führen, z.B. durch Bildung von Wasserbrücken zwischen Bodenpartikeln.

De Vries (1963) beschreibt eine Methode, die eine Abschätzung der effektiven Wärmeleitfähigkeit in Abhängigkeit vom Wassergehalt² ermöglicht. Danach gibt folgende Formel

²Die Wärmeleitfähigkeit ist auch von der Temperatur abhängig, diese Abhängigkeit wird aber vorerst nicht berücksichtigt.

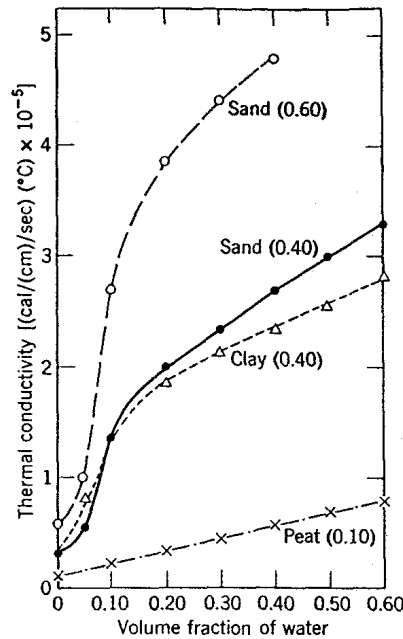


Abbildung 2.2: Wärmeleitfähigkeit verschiedener Böden in Abhängigkeit vom volumetrischen Wassergehalt. Die Zahlen in Klammern geben den Volumenanteil der Festphase an (Jury et al. 1991).

eine gute Näherung der Leitfähigkeit, wenn man den Boden als eine Suspension von verschiedenen Partikeln in einem umgebenden Medium betrachtet:

$$\lambda = \frac{\sum_{i=0}^N k_i X_i \lambda_i}{\sum_{i=0}^N k_i X_i} \quad (2.15)$$

mit k_i : Verhältnis des mittleren Temperaturgradienten in den Partikeln vom Typ i zum mittleren Temperaturgradienten im umgebenden Medium [-]
 X_i : Volumenanteil von Komponente i am Gesamtvolumen [-]
 λ_i : Wärmeleitfähigkeit von Komponente i [J/msK]

Der Wert von k_i hängt vom Verhältnis λ_i/λ_0 ³, von der Größe und Form der Partikel und von deren Position ab. Unter der Annahme, daß die Bodenpartikel Ellipsoide sind und so weit voneinander entfernt sind, daß sie sich gegenseitig nicht beeinflussen, läßt sich k_i errechnen:

$$k_i = \frac{1}{3} \sum_{a,b,c} \left[1 + \left(\frac{\lambda_i}{\lambda_0} - 1 \right) g_a \right]^{-1} \quad (2.16)$$

Dabei sind g_a, g_b, g_c dimensionslose Formfaktoren, die von dem Verhältnis der Achsen a, b und c des Ellipsoids abhängen. Ihre Summe ist eins. Sind zwei Achsen gleich, so sind auch die entsprechenden Formfaktoren gleich. Für kugelförmige Partikel gilt $g_a = g_b = g_c = 1/3$.

³ λ_0 ist die Wärmeleitfähigkeit des umgebenden Mediums.

Obwohl beide oben getroffenen Annahmen für einen Boden nicht haltbar sind, sprechen laut de Vries sowohl theoretische Gründe, als auch Vergleiche mit Meßwerten, für eine Anwendbarkeit von 2.16.

Nur für vollkommen gesättigte und absolut trockene Böden läßt sich die Wärmeleitfähigkeit mit 2.15 und 2.16 berechnen. Für dazwischenliegende Wassergehalte ist eine Vorstellung über die Formfaktoren g_a, g_b, g_c der Luftblasen notwendig. De Vries gibt jedoch ein Verfahren an, mit dem sich diese abschätzen lassen (a.a.o. Bsp. 7.6.1). Außerdem muß die Erhöhung der effektiven Wärmeleitfähigkeit der Bodenluft durch Wasserdampftransport berücksichtigt werden.

Auch Blom und Troelstra (1972) und Huwe (1992) verwenden die Abschätzung nach de Vries in ihren Modellen.

2.2.4 Horizontaler Wärmeverlust

Da die Versuchssäulen nicht ausreichend wärmeisoliert sind, ist ein Wärmeverlust in horizontaler Richtung wahrscheinlich. In das Gleichungssystem muß deshalb ein Senkenterm eingebaut werden, der diesem Sachverhalt Rechnung trägt:

$$Q_{\text{Wand}} = \frac{J_{\text{Wand}}}{dz} = -\frac{\alpha}{dz} \cdot [T_i(z) - T_a] \quad (2.17)$$

mit Q_{Wand} : Wärmeverlust durch mangelnde Isolierung [J/m^3s]
 J_{Wand} : Flußdichte durch die Wand [J/m^2s]
 α : Fittingparameter für den Wärmeverlust [J/m^2sK]
 $T_i(z)$: Temperatur in der Säule am Punkt z [K]
 T_a : Außentemperatur [K]

Ist die Wärmeleitfähigkeit des Wandmaterials sehr viel geringer als die des Bodens, läßt sich α abschätzen:

$$\alpha \approx \frac{\lambda_{\text{Wand}}}{d_{\text{Wand}}} \quad (2.18)$$

mit λ_{Wand} : Wärmeleitfähigkeit des Wandmaterials [J/msK]
 d_{Wand} : Dicke der Wandung [m]

2.3 Gastransport

Bei der Beschreibung des Gastransports müssen verschiedene Mechanismen unterschieden werden. Der Transport von gelösten Gasen mit dem Bodenwasser wird vorerst nicht berücksichtigt, da dies einen erheblichen Mehraufwand verursachen würde. Zu erheblichen Fehlern kann dies nur für CO_2 führen.

2.3.1 Konvektiver Gastransport

Wird ein Gas oder eine Gasmischung durch Anlegen eines Druckes in Bewegung versetzt, spricht man vom viskosen oder konvektiven Gastransport⁴. Bei einer Gasmischung gibt

⁴Strenggenommen muß dazu auch noch gelten, daß alle Gasmoleküle, die auf eine Wand treffen, innerhalb kurzer Distanz mit anderen Gasmolekülen zusammenstoßen.

es dabei nur einen Fluß, an dem die verschiedenen Gase entsprechend ihres Molenbruchs teilhaben. Durch Stöße von Gasmolekülen mit den Wänden geht dem Gas Impuls verloren. Der Fluß bleibt deshalb nur bestehen, solange ein Druckgradient aufrechterhalten wird.

Der viskose Fluß läßt sich mit dem Darcy-Gesetz beschreiben:

$$\vec{J}_{gk} = -\frac{k_g}{\mu_g} \frac{p}{RT} \nabla p \quad (2.19)$$

mit \vec{J}_{gk} : molarer konvektiver Gasfluß [$mol/m^2 s$]
 k_g : Luftpermeabilität [m^2]
 μ_g : dynamische Viskosität der Gasmischung [$kg/m s$]
 p : Gasdruck [Pa]
 R : ideale Gaskonstante [$J/mol K$]

Den molaren Fluß eines einzelnen Gases i erhält man durch Multiplikation des Gesamtflusses mit dem Molenbruch x_i .

2.3.1.1 Luftpermeabilität

Die Luftpermeabilität ist ein Parameter, der nur von der Struktur des Porensystems abhängen sollte. Sie kann aus Messungen der Luftleitfähigkeit ermittelt werden. Problematisch ist dabei, daß die ermittelte Luftpermeabilität von der Größe der verwendeten Stechzylinder abhängt (Potsch 1996) und einer starken Hysterese unterliegt (Dury und Schulin 1996). Ab einem bestimmten Wassergehalt, der bei Entwässerung bei einer relativen Sättigung von ca. 50 Prozent und bei Bewässerung bei ca. 60-70 Prozent liegt, ist die Luftpermeabilität gleich Null, es findet also kein konvektiver Gastransport mehr statt.

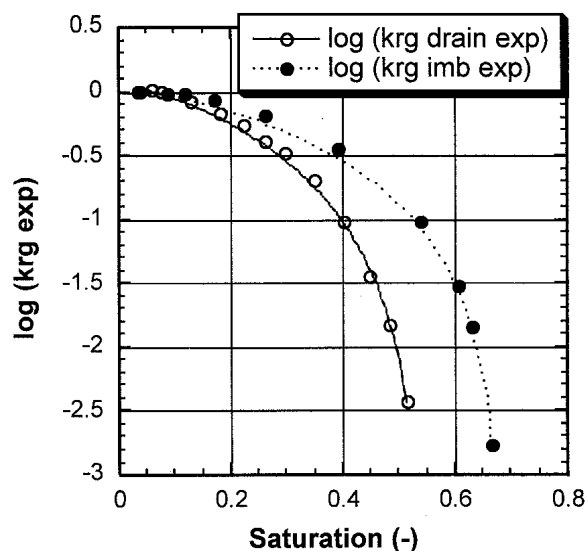


Abbildung 2.3: Logarithmus der relativen Luftpermeabilität in Abhängigkeit von der relativen Wassersättigung (Dury und Schulin 1996).

2.3.1.2 Dynamische Viskosität

Die dynamische Viskosität einer Gasmischung hängt von deren Zusammensetzung ab. Nach dem VDI-Wärmeatlas (VDI 1974) läßt sich die Viskosität einer Mischung von ν Gasen folgendermaßen berechnen:

$$\mu_g = \sum_{i=1}^{\nu} \frac{\mu_i x_i \sqrt{M_i}}{x_i \sqrt{M_i}} \quad (2.20)$$

mit μ_i : dynamische Viskosität des reinen Gases i [kg/ms]

M_i : molare Masse des Gases i [kg/mol]

2.3.2 Diffusiver Gastransport

Beim diffusiven Transport muß genaugenommen noch einmal zwischen zwei Prozessen unterschieden werden: Der molekularen Diffusion und der Knudsen-Diffusion. Beiden Mechanismen ist gemeinsam, daß Gase entlang eines Konzentrationsgradienten transportiert werden. Das Vorhandensein eines Druckgradienten ist also nicht notwendig.

Die Knudsen-Diffusion tritt nur bei extrem kleinen Poren⁵ oder sehr niedrigen Drücken auf. Kennzeichnend dafür ist, daß die mittlere freie Weglänge⁶ der Gasmoleküle wesentlich größer ist als der Porenradius. Es ist deshalb für ein Gasmolekül viel wahrscheinlicher auf die Wand zu treffen als mit einem anderen Molekül zusammenzustoßen. Der Knudsen-Diffusionskoeffizient eines Gases ist daher unabhängig von der Zusammensetzung der Gasmischung. Die Knudsen-Diffusion spielt jedoch unter Normalbedingungen in einem Boden keine Rolle, da alle Poren wassergefüllt sind, deren Durchmesser für Knudsen-Diffusion klein genug ist.

Bei der molekularen Diffusion ist die mittlere freie Weglänge wesentlich kleiner als der Porendurchmesser. Gasmoleküle kollidieren deshalb vor allem untereinander. Der Diffusionskoeffizient eines Gases ist abhängig von der Zusammensetzung der diffundierenden Gasmischungen.

Findet Diffusion von zwei Gasen bei Abwesenheit von Wänden statt, läßt sich die molekulare Diffusion mit dem Fick'schen Gesetz beschreiben:

$$\vec{J}_{gD_i} = -D_{ij} \nabla n_i \quad (2.21)$$

mit \vec{J}_{gD_i} : molarer Fluß des Gases i durch molekulare Diffusion [$mol/m^2 s$]

D_{ij} : Binärer Diffusionskoeffizient der Gase i und j [m^2/s]

n_i : molare Konzentration des Gases i [mol/m^3]

Bei mehr als zwei Gasen oder in einem porösen Medium ist das Fick'sche Gesetz strenggenommen nicht mehr anwendbar⁷. Trotzdem ist es bisher immer wieder auch zur Berechnung der Gasdiffusion im Boden verwendet worden (Findikakis und Leckie 1979,

⁵Knudsendiffusion tritt bei Normaltemperatur und -druck bei einem Porenradius von kleiner 50 nm auf (Schulz 1995).

⁶Die mittlere freie Weglänge ist die Strecke die ein Gasmolekül durchschnittlich zurücklegt, bevor es mit einem anderen Gasmolekül zusammenstößt.

⁷Wenn es sich um die Diffusion eines Spurengases in einem konstanten Medium (z.B. Luft) handelt, gilt das Fick'sche Gesetz näherungsweise auch noch für mehr als zwei Gase (Jaynes und Rogowski 1983).

Lindgren und Rasmuson 1994, Baehr und Baker 1995, Freijer und Leffelaar 1996). Dazu wird ein relativer Diffusionskoeffizient ξ_g eingeführt, der von Wassergehalt, Tortuosität und Kontinuität abhängt. Durch Multiplikation des binären Diffusionskoeffizienten in Luft mit dem relativen Diffusionskoeffizienten ergibt sich der effektive Diffusionskoeffizient im Boden $D_{ij\text{eff}}$.

Eine theoretisch besser fundierte Beschreibung für den Transport einer Gasmischung in einem porösen Medium stellt das Dusty-Gas-Modell dar. Dabei werden die Bodenpartikel als sehr große Gasmoleküle behandelt, die im Bezugssystem ruhen (Thorstenson und Pollock 1989a, Thorstenson und Pollock 1989b, Cunningham und Williams 1980, Mason et al. 1967). Davon ausgehend läßt sich ein Gleichungssystem ableiten, das sowohl molekulare Diffusion, Knudsen-Diffusion und viskosen Fluß als auch den nonäquimolaren Fluß beschreibt. Dieser ergibt sich daraus, daß leichtere Gasmoleküle sich bei gleicher Temperatur schneller bewegen, weshalb sich bei molekularer Diffusion ein Druckgradient aufbaut, der zu einem quasi-viskosen Gegenfluß führt.

Für ein isothermes System von ν Gasen ergibt sich folgendes Gleichungssystem (Cunningham und Williams 1980):

$$[\vec{J}_{gDG}] = - [x] k_g (p/\mu_g) \nabla n - [f_{\text{eff}}]^{-1} [\nabla n] \quad (2.22)$$

$[\vec{J}_{gDG}]$, $[x]$ und $[\nabla n]$ sind Spaltenvektoren mit ν Elementen

\vec{J}_{gDG_i} : molarer Fluß des Gases i nach dem Dusty-Gas-Modell [mol/m^2s]

x_i : Molenbruch [-]

∇n_i : Gradient der molaren Konzentration des Gases i [mol/m^4]

f_{eff} ist eine $\nu \times \nu$ Matrix mit den Koeffizienten:

$$f_{ij,\text{eff}} \equiv (\delta_{ij} - 1) \frac{x_i}{D_{ij\text{eff}}} + \delta_{ij} \left[D_{ii\text{eff}}^{K-1} + \sum_{\substack{h=1 \\ h \neq i}}^{\nu} \frac{x_h}{D_{ih\text{eff}}} \right] \quad (2.23)$$

δ_{ij} : Kronecker Delta: $\delta_{ij} = \begin{cases} 1 & \text{falls } i = j \\ 0 & \text{falls } i \neq j \end{cases}$

$D_{ij\text{eff}}$: Effektiver binärer Diffusionskoeffizient der Gase i und j [m^2/s]

$D_{ii\text{eff}}^K$: Effektiver Knudsendiffusionskoeffizient des Gases i [m^2/s]

Da sich dieses Gleichungssystem nicht explizit nach \vec{J}_{DG_i} auflösen läßt, wäre ein Einbau in ein gekoppeltes Modell sehr schwierig und würde sehr hohe Rechenzeiten beanspruchen. Deshalb soll in dieser Diplomarbeit trotz aller Legitimationsprobleme mit einem modifizierten Fick'schen Gesetz gearbeitet werden. Es sollte jedoch zu einem späteren Zeitpunkt überprüft werden, ob das Dusty-Gas-Modell bessere Resultate liefert.

2.3.2.1 Effektiver Diffusionskoeffizient

Soll das Fick'sche Gesetz auf Gastransportprozesse in einem porösen Medium angewendet werden, ist dazu die Kenntnis der Diffusionskoeffizienten nötig. Da Meßwerte der binären Diffusionskoeffizienten der beteiligten Gase unter Abwesenheit von Wänden in der Regel verfügbar sind, ist ein Verfahren zur Berechnung von Diffusionskoeffizienten für die

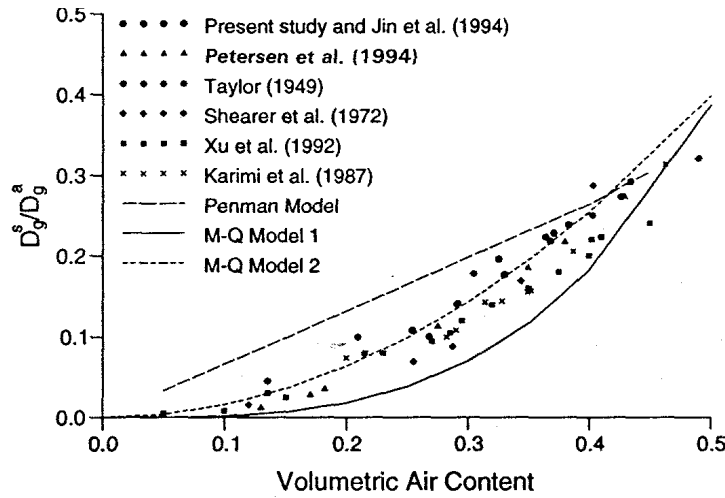


Abbildung 2.4: Vergleich von gemessenen relativen Diffusionskoeffizienten mit verschiedenen Tortuositätsmodellen. Penman Model: $\xi_g(\theta_a) = 0.66\theta_a$, M-Q Model 1: $\xi_g(\theta_a) = \theta_a^{10/3}/\varepsilon^2$, M-Q Model 2: $\xi_g(\theta_a) = \theta_a^2/\varepsilon^{2/3}$ (Jin und Jury 1996).

einzelnen Gase in der jeweiligen Gasmischung, sowie zur Abschätzung des relativen Diffusionskoeffizienten notwendig.

Um den Diffusionskoeffizienten für jedes Gas einer ternären Mischung zu erhalten, benutzen Findikakis und Leckie (1979) die Formel:

$$D_i = \frac{1 - x_i}{\sum_{\substack{l=1 \\ l \neq i}}^3 \frac{x_l}{D_{il}}} \quad (2.24)$$

Diese Gleichung läßt sich für ein Spurengas in einer ternären Gas Mischung als Näherung aus den Stefan-Maxwell-Gleichungen ableiten, die für die freie Diffusion einer Gas Mischung die exakte Beschreibung darstellen. In Ermangelung theoretisch besser begründeter Konzepte wird sie in dieser Arbeit auch für vier Gase verwendet.

Für die Abschätzung des relativen Diffusionskoeffizienten in Abhängigkeit von Wassergehalt und Porosität wurde eine Vielzahl von empirischen Formeln entwickelt. Jin und Jury (1996) kommen zu dem Ergebnis, daß eine bisher wenig beachtete Formulierung von Millington und Quirk die vorhandenen Meßdaten am besten wiedergibt:

$$\xi_g(\theta_a) = \frac{\theta_a^2}{\varepsilon^{2/3}} \quad (2.25)$$

Ott (1996) bestätigt die prinzipielle Verwendbarkeit dieser Näherungsformel.

Im Gegensatz zur Luftpermeabilität nimmt der relative Diffusionskoeffizient erst bei vollständiger Wassersättigung den Wert Null an. Dies läßt sich damit erklären, daß Gase durch Lösung und Diffusion in Wasser auch Poren durchqueren können, die durch Wasserfilme verschlossen sind.

2.3.3 Gastransportgleichung

Der Gastransport wird durch folgende Gleichung beschrieben:

$$\frac{\partial n_i}{\partial t} = \nabla \cdot \left(x_i \frac{k_g}{\mu_g} \frac{p}{RT} \nabla p + D_{i,\text{eff}} \nabla n_i \right) \quad (2.26)$$

Einsetzen des idealen Gasgesetzes⁸ $p = nRT = \left(\sum_{j=1}^{\nu} n_j \right) RT$ und von $n_i = x_i \cdot n$ führt zu:

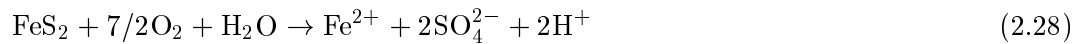
$$\frac{\partial n_i}{\partial t} = \nabla \cdot \left(\frac{k_g}{\mu_g} n_i \nabla (nRT) + D_{i,\text{eff}} \nabla n_i \right) \quad (2.27)$$

Diese Gleichung ist in der Lage, auch die Druckänderung durch eine Temperaturerhöhung zu beschreiben.

Die Gaszusammensetzung in natürlichen Böden unterscheidet sich von der der Atmosphäre vor allem durch einen geringeren O₂- und einen erhöhten CO₂-Gehalt. Die Wasserdampfkonzentration liegt nahe der Sättigung. Es ist also mindestens der Transport von O₂, N₂, CO₂ und H₂O zu simulieren. Argon wurde aus Rechenzeitgründen vernachlässigt, außerdem liegen auch keine Bochumer Meßdaten zum Vergleich vor.

2.4 Pyritoxidation

Die Oxidation von Pyrit durch Luftsauerstoff wird durch die folgende Reaktionsgleichung beschrieben:



Bei der Reaktion wird Sauerstoff verbraucht und gleichzeitig Wärme freigesetzt. Die Reaktionsenthalpie der Pyritoxidation beträgt 410 kJ/mol (Wisotzky 1994).

2.4.1 Kinetik

Zur Kinetik der Pyritoxidation wurden an der Ruhr-Universität Bochum umfangreiche Untersuchungen durchgeführt (Leßmöllmann 1994). Dabei konnte folgendes Ratengesetz erfolgreich gefittet werden:

$$\begin{aligned} \frac{1}{3.5} \frac{dc_{\text{O}_2}}{dt} &= -k_r c_{\text{Pyrit}} c_{\text{O}_2} \\ \frac{dc_{\text{Pyrit}}}{dt} &= -k_r c_{\text{Pyrit}} c_{\text{O}_2} \end{aligned} \quad (2.29)$$

mit c_{O_2} : Gaskonzentration [mol/kg]
 c_{Pyrit} : Pyritkonzentration [mol/kg]
 k_r : Reaktionskonstante [kg/mol s]

Die Reaktionskonstante k_r für das Material der Referenzsäule beträgt $4.6 \cdot 10^{-5} \frac{\text{kg}}{\text{mmol d}}$. Sie ist stark temperaturabhängig und erhöhte sich bei einer Temperaturerhöhung von 21.4 auf 31.9° C um den Faktor 2.7.

⁸Man beachte, daß n in dieser Arbeit die Molendichte ist, nicht die Stoffmenge

Tabelle 2.1: Überblick über die relevanten Prozeßkopplungen.

	Wassertransport	Wärmetransport	Gastransport	Pyritoxidation
Wassertransport	–	konvektiver Wärmetransport Wärmekapazität Wärmeleitfähigkeit Wasserdampftransport	Verdrängung von Luft Luftpermeabilität rel. Diffusionskoeff. Wasserdampftransport	
Wärmetransport	Viskosität Oberflächen- spannung Wasserdampftransport	–	Viskosität Diffusionskoeffizienten Gasdruck	Reaktionskonstante
Gastransport	Druckpotential Wasserdampftransport	Wasserdampftransport	–	Sauerstoffnachlieferung
Pyritoxidation		Wärmefreisetzung	Sauerstoffverbrauch	–

2.5 Prozeßkopplungen

2.5.1 Überblick

In einem porösen Medium laufen die oben beschriebenen Prozesse nicht von einander getrennt, sondern gleichzeitig ab. Dabei kommt es zu Wechselwirkungen und Prozeßkopplungen, die bisher bei der Modellierung meist vernachlässigt wurden. Tabelle 2.1 gibt einen Überblick über die verschiedenen Kopplungen.

2.5.2 Druckkopplung

Da sich Gase und Wasser im Boden einen Porenraum teilen, sind ihre Transportprozesse eng miteinander verknüpft. Dies wurde bei Wassertransportmodellen bisher in der Regel ignoriert. Bei Modellen, die auch Gastransport simulieren sollen, ist das auf keinen Fall mehr möglich.

Bei der Lösung der Richardsgleichung muß ein Druckpotential berücksichtigt werden. Gibt man das Gesamtpotential in m Wassersäule an, ergibt sich:

$$H = h_m + h_g + h_a = h_m - z + \frac{p - p_0}{\rho_w g} \quad (2.30)$$

- z : Abstand zu einer Referenzhöhe [m]
- p_0 : Referenzdruck [Pa]
- g : Erdbeschleunigung [m/s^2]

Da die gasgefüllte Porosität und der volumetrische Wassergehalt nicht unabhängig voneinander sind, muß die Kontinuitätsgleichung für die Gase umformuliert werden:

$$\frac{\partial (\theta_a n_i)}{\partial t} = \frac{\partial ((\varepsilon - \theta_w) n_i)}{\partial t} = -\nabla \cdot \vec{J}_{g_i} + Q_{g_i} \quad (2.31)$$

mit \vec{J}_{g_i} : molarer Gesamtfluß des Gases i [$mol/m^2 s$]
 Q_{g_i} : Quell-/Senkenterm des Gases i [$mol/m^3 s$]

2.5.3 Temperaturabhängigkeit von Transportparametern

Eine Reihe von Transportparametern in den oben aufgeführten Gleichungen ändern sich mit der Temperatur. Ich habe versucht, die relevanten Abhängigkeiten zu berücksichtigen.

2.5.3.1 Ungesättigte Leitfähigkeit

Die ungesättigte Leitfähigkeit läßt sich in folgende Faktoren trennen:

$$K(\theta_w) = \frac{k_w(\theta_w) \rho_w g}{\mu_w} \quad (2.32)$$

Die Permeabilität $k_w(\theta_w)$ und die Dichte von Wasser ρ_w ändern sich im für dieses Modell relevanten Bereich von 10 bis 40°C kaum, g ist eine ortsabhängige Konstante. Die Temperaturabhängigkeit der dynamischen Viskosität von Wasser μ_w läßt sich mit der Gleichung:

$$\begin{aligned} \mu_w &= \mu_{w20} \cdot 10^{-A} \\ A &= \frac{1.37023 \cdot (T - 293.15) + 8.36 \cdot 10^{-4} \cdot (T - 293.15)^2}{-164.15 + T} \\ \mu_{w20} &= 1.0019 \cdot 10^{-3} \frac{kg}{m s}, \quad [T \text{ in Kelvin}] \end{aligned} \quad (2.33)$$

beschreiben (Atkins 1990).

2.5.3.2 Wasserspannungskurve

Auch die Wasserspannungskurve ändert sich mit der Temperatur. Dabei müssen zwei Bereiche unterschieden werden. Bei schwach negativen Wasserspannungen ist das Matrixpotential vor allem durch Kapillarkräfte bestimmt, bei stark negativen vor allem durch physikalische Adsorptionsprozesse. Im zweiten Fall ändert sich das Matrixpotential bei gleichem Wassergehalt kaum mit der Temperatur, im ersten ist die Änderung des Matrixpotentials eine Folge der Temperaturabhängigkeit der Oberflächenspannung. Ob darüberhinaus noch andere Faktoren eine Rolle spielen, ist noch nicht geklärt (Milly 1984). Laut Philip und de Vries (1957) liegt die Grenze zwischen dominierenden Kapillarkräften und physikalischer Adsorption bei einer relativen Luftfeuchtigkeit von 60 Prozent, was bei 20°C einem Matrixpotential von etwa $-700000cm$ entspricht.

Nach Jasper (1972) läßt sich die Oberflächenspannung von reinem Wasser im Bereich zwischen 10 und 100°C mit einer Standardabweichung von $\pm 0.08 N/m$ durch eine Gerade approximieren:

$$\sigma_w(T) = 116.19 N/m - T \cdot 0.1477 N/m K \quad (2.34)$$

Die Wasserspannungskurve wird also im Bereich zwischen null und $-700000 cm$ von $\theta_w(h_m)$ nach $\theta_w(h_m \cdot \sigma_w(T)/\sigma_{w_0})$ transformiert. Dabei ist σ_{w_0} die Oberflächenspannung, bei der die Wasserspannungskurve gemessen wurde.

2.5.3.3 Gasviskosität

Die Änderung der Gasdichte mit der Temperatur ist in der Transportgleichung berücksichtigt. Die Viskosität eines Gases ist jedoch ebenfalls temperaturabhängig. An die im VDI-Wärmeatlas (VDI 1974) angegebenen Meßwerte für die Gasviskosität lassen sich für den Bereich zwischen 0 und 100°C Geraden anpassen.

	Steigung [kg/m s K]	Achsenabschnitt [kg/m s]	r [-]
O ₂	$5.2 \cdot 10^{-8}$	$0.5 \cdot 10^{-5}$	0.9993
N ₂	$4.3 \cdot 10^{-8}$	$0.5 \cdot 10^{-5}$	0.9995
H ₂ O	$3.5 \cdot 10^{-8}$	$-0.072 \cdot 10^{-5}$	0.9993
CO ₂	$4.5 \cdot 10^{-8}$	$0.15 \cdot 10^{-5}$	0.9998

Tabelle 2.2: Abhängigkeit der Gasviskositäten von der Temperatur.

2.5.3.4 Gasdiffusionskoeffizienten

Die Temperaturabhängigkeit bei Gasdiffusionskoeffizienten ist komplexer als bei den anderen Parametern. Marrero und Mason (1972) geben Gleichungen an, die an verfügbare Meßwerte der binären Diffusionskoeffizienten von O₂, N₂, CO₂ und H₂O⁹ angepaßt wurden (Tabelle 2.3).

Mit diesen Gleichungen lassen sich bei gegebener Temperatur und gegebenem Druck die binären Diffusionskoeffizienten und daraus mit Gleichung 2.24 die Diffusionskoeffizienten der Gasmischung ausrechnen.

2.5.4 Wasserdampftransport

Im Gegensatz zu anderen Gasen kann Wasserdampf in einem feuchten porösen Medium kondensieren und Wasser kann verdunsten. Aufgrund dieser Tatsache stellt der Wasserdampftransport eine Kopplung von Wasser-, Wärme- und Gastransport her. Philip und de Vries (1957) und de Vries (1958) haben sich in zwei grundlegenden Arbeiten mit den Besonderheiten des Wasserdampftransportes beschäftigt.

⁹d.h. die binären Diffusionskoeffizienten der verschiedenen Gaspaare, die sich aus obengenannten Gasen ergeben.

Tabelle 2.3: Berechnung der binären Diffusionskoeffizienten.

$$\ln(pD_{ij}) = \ln A + s \ln T - (S/T)$$

	A $\left[\frac{\text{atm}\cdot\text{cm}^2}{\text{s}(K)^s}\right]$	s [-]	S [K]	Temperaturbereich [K]	Genauigkeit [-]
N ₂ – O ₂	$1.13 \cdot 10^{-5}$	1.724	–	285 – 10 ⁴	±3%
N ₂ – CO ₂	$3.15 \cdot 10^{-5}$	1.570	113.6	288 – 1800	±2%
N ₂ – H ₂ O	$0.187 \cdot 10^{-5}$	2.072	–	282 – 373	±4%
O ₂ – CO ₂	$1.56 \cdot 10^{-5}$	1.661	61.3	287 – 1083	±3%
O ₂ – H ₂ O	$0.189 \cdot 10^{-5}$	2.072	–	282 – 1070	±7%
CO ₂ – H ₂ O	$9.24 \cdot 10^{-5}$	1.500	307.9	296 – 1640	±10%

Die Hauptannahme der folgenden Ausführungen ist, daß die Wasserdampfkonzentration in der Bodenluft lokal mit dem Bodenwasser im Gleichgewicht steht. Durch die Annahme eines lokalen Gleichgewichts ist für die Berechnung des Wasserdampftransports keine eigene Transportgleichung notwendig. Es müssen in die bestehenden Gleichungen für den Wasser-, Wärme- und Gastransport nur zusätzliche Terme eingefügt werden. Laut Philip und de Vries (1957) gilt die Beziehung:

$$n_v(h_m, T) = n_{v_0}(T) \cdot \text{rH} = n_{v_0}(T) \exp\left(\frac{h_m M_w g}{RT}\right) \quad (2.35)$$

mit n_{v_0} : Molendichte des gesättigten Wasserdampfes [mol/m^3]
 rH: relative Luftfeuchtigkeit [-]
 M_w : Molare Masse von Wasser [kg/mol]

Außerdem gilt nach Weischet (1991) für die Sättigungskonzentration von Wasserdampf folgende empirische Formel:

$$n_{v_0}(T) = \frac{610.78 \text{ Pa}}{RT} \cdot \exp\left(\frac{17.08085 \cdot (T - 273.15 \text{ K})}{T - 38.975 \text{ K}}\right) \quad (2.36)$$

Sind Temperatur, Matrixpotential und Gasflüsse zu Beginn und am Ende eines Zeitschrittes bekannt, läßt sich die kondensierte oder verdunstete Wassermenge berechnen:

$$\frac{\partial((\varepsilon - \theta_w) \cdot n_v(h_m, T))}{\partial t} = -\nabla \cdot \vec{J}_v + Q_{PC}(t) \quad (2.37)$$

$$\Rightarrow Q_{PC}(t) = \frac{\partial((\varepsilon - \theta_w) \cdot n_v(h_m, T))}{\partial t} + \nabla \cdot \vec{J}_v$$

mit

$$\nabla \cdot \vec{J}_v = -\nabla \cdot \left(x_v \frac{k_g(\theta_w)}{\mu_g} n \nabla p + D_v \nabla n_v(h_m, T) \right) \quad (2.38)$$

Dieser Ausdruck für Q_{PC} kann nun in die Gleichungen für Wasser- und Wärmetransport eingesetzt werden. Bei der Berechnung des diffusiven Wasserdampfflusses sind einige Besonderheiten zu berücksichtigen.

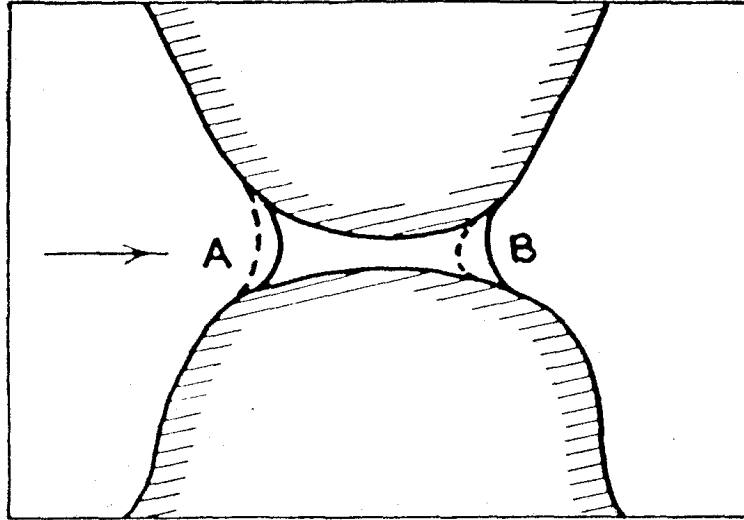


Abbildung 2.5: Wasserdampftransport durch eine Wasserbrücke. Der Pfeil gibt die Richtung des Transports an (Philip und de Vries 1957).

2.5.4.1 Wasserdampfdiffusion

Der Dichtegradient im Fick'schen Gesetz läßt sich unter Verwendung von 2.35 schreiben als:

$$\nabla n_v = rH \nabla n_{v0} + n_{v0} \nabla rH \quad (2.39)$$

Bei konstantem θ_w ist die Temperaturabhängigkeit von rH hinreichend klein, so daß $\partial rH / \partial T = 0$ gesetzt werden kann. Deshalb folgt:

$$\nabla n_v = rH \frac{dn_{v0}}{dT} \nabla T + n_{v0} \frac{drH}{d\theta_w} \nabla \theta_w = rH \frac{dn_{v0}}{dT} \nabla T + \frac{n_v g}{RT} \frac{\partial h_m}{\partial \theta_w} \nabla \theta_w \quad (2.40)$$

Im Gegensatz zu der Formulierung von Philip und de Vries ist es für dieses Modell sinnvoller, die Wasserdampfdiffusion nicht als Funktion von T und θ_w , sondern von T und h_m auszudrücken:

$$\nabla n_v = rH \frac{dn_{v0}}{dT} \nabla T + \frac{n_v g}{RT} \nabla h_m \quad (2.41)$$

Die Transportgleichung für Wasserdampfdiffusion lautet dann:

$$\vec{J}_{vD} = -D_{T_v} \nabla T - D_{h_m v} \nabla h_m \quad (2.42)$$

Zur Ermittlung von D_{T_v} ist es hilfreich, sich eine Pore in einem relativ trockenen Boden vorzustellen, die von einem Wasserfilm verschlossen ist (Abbildung 2.5). Ist weder Temperatur- noch Potentialgradient vorhanden, so ist die Krümmung bei A und B gleich groß.

Ein Transport von Gasen ist durch diese Pore kaum möglich, da sie sich erst im Wasser lösen müßten. Dies ist durch die Henry-Konstante beschränkt, und der Diffusionskoeffizient in wäßriger Lösung ist um Größenordnungen kleiner als der Diffusionskoeffizient in Luft.

Wasserdampf kondensiert im Gegensatz dazu bei Vorhandensein eines Konzentrationsgradienten in Pfeilrichtung auf der einen Seite der Pore. Dadurch wird die Krümmung bei A kleiner. Die Krümmung bei B steigt dagegen durch Verdunstung an. Im Gleichgewicht führt dies zu einem Wasserfluß zwischen A und B, der dem Wasserdampffluß in der Bodenluft entspricht. Das Gleichgewicht ist laut Philip und de Vries (1957) innerhalb kurzer Zeit erreicht. Der verfügbare Fließquerschnitt ist für Wasserdampf deshalb gegenüber anderen Gasen erhöht.

Die genaue Untersuchung der kleinräumigen Temperatur- und Wasserdampfverteilung wäre äußerst kompliziert. Zur Vereinfachung betrachten die Autoren (s.o.) zuerst den Wasserdampffluß in einer einzelnen Pore. Die Flußdichte ist dann:

$$-D_{atm}rH \frac{dn_{v0}}{dT} (\nabla T)_a \quad (2.43)$$

Mit $(\nabla T)_a$ wird dabei der mittlere Temperaturgradient in der Pore bezeichnet, D_{atm} ist der Diffusionskoeffizient von Wasserdampf in der freien Gasmischung. Diese Gleichung setzt eine Ähnlichkeit des Temperatur- und Wasserdampfes in der Pore voraus. Sie gilt auch für die mittlere Flußdichte in allen luftgefüllten Poren, wenn man $(\nabla T)_a$ als den mittleren Temperaturgradienten in diesen Poren interpretiert. Unter Einbeziehung der Annahme, daß die Flußdichte in den Wasserbrücken gleich der mittleren Flußdichte in den luftgefüllten Poren ist, erhält man:

$$-(\theta_a + \theta_w)D_{atm}rH \frac{dn_{v0}}{dT} (\nabla T)_a = -D_{T_v} \nabla T \quad (2.44)$$

Die Tortuosität ist in $(\nabla T)_a$ bereits enthalten.

Die mittleren Temperaturgradienten sind nicht in jeder Phase des Bodens gleich groß. Dies resultiert aus der unterschiedlichen Wärmeleitfähigkeit der Phasen. Stellt man sich ein eindimensionales System vor, das aus einem Stück Quarz, einer Wasserschicht auf der Quarzoberfläche, einem Luftspalt und darüber noch einem wasserbedeckten Quarzblock besteht, an dem ein Temperaturgefälle anliegt, dann ist klar, daß im Gleichgewicht der Temperaturgradient nicht überall gleich groß ist (Abbildung 2.6). Bei der komplizierten dreidimensionalen Struktur eines Bodens ergibt sich ein komplexes Temperaturmuster aus dem sich die unterschiedlichen mittleren Temperaturgradienten erklären lassen.

Bei hohen Wassergehalten nimmt der durch den Wasserdampftransport hervorgerufene Wasserfluß in Wasserbrücken ab, da sich einerseits die Kapillarradien nicht mehr so schnell anpassen können und andererseits die Wasserbrücken immer weniger und länger werden. Als Grenze kann ein Wassergehalt θ_K definiert werden, an dem die Wasserleitfähigkeit auf einen Wert nahe Null abgefallen ist. In Gleichung 2.44 wird deshalb statt $\theta_a + \theta_w$ ein Faktor $\theta_a + f(\theta_a) \cdot \theta_w$ eingefügt:

$$D_{T_v} = f(\theta_a)D_{atm}rH \frac{dn_{v0}}{dT} \frac{(\nabla T)_a}{\nabla T} \quad (2.45)$$

Philip und de Vries (1957) schlagen als erste Annäherung $f(\theta_a) = 1$ für $\theta_a \geq (\varepsilon - \theta_k)$ und $f(\theta_a) = \theta_a / (\varepsilon - \theta_k)$ für $\theta_a < (\varepsilon - \theta_k)$ vor.

Das Verhältnis zwischen dem mittleren Temperaturgradienten in den luftgefüllten Poren und dem mittleren Temperaturgradienten im Gesamtboden läßt sich mit dem Verfahren von de Vries zur Bestimmung der Wärmeleitfähigkeit abschätzen (Abschnitt 2.2.3).

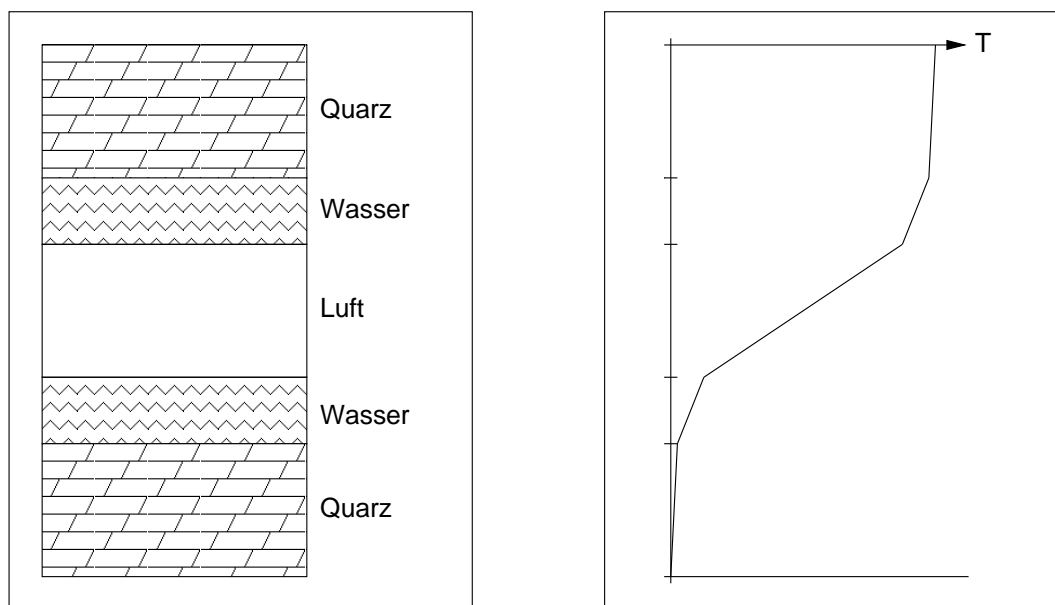


Abbildung 2.6: Temperaturgradienten in verschiedenen Materialien. Links: Aufbau des Beispielsystems. Rechts: Temperaturverlauf im Beispielsystem (schematisch).

Für den isothermen Wasserdampffluß spielt der Fluß durch die Wasserbrücken laut Philip und de Vries (1957) keine Rolle, da dabei sehr geringe Änderungen des Kurvenradius ausreichen würden, um die Richtung des Wasserdampfstromes umzukehren. Dies erscheint nicht besonders plausibel, wird aber mangels besserer Alternativen in dieser Arbeit übernommen. Es gilt dann:

$$D_{h_{m_v}} = \frac{D_{atm} \xi_g n_v g M_w}{RT} \quad (2.46)$$

2.5.5 Einfluß auf den Wärmetransport

In der Wärmetransportgleichung 2.13 sind Wärmeleitung und Wasserdampftransport additive Prozesse. Da Wasserdampftransport jedoch zu einer Erhöhung der effektiven Wärmeleitfähigkeit der Bodenluft führen kann, stimmt dies nur in erster Näherung. De Vries (1958) schlägt deshalb zwei alternative Formulierungen der Wärmeleitfähigkeit λ_s des Bodens vor.

$$\lambda_{s_1} = \lambda_* \quad (2.47)$$

$$\lambda_{s_2} = \lambda_{eff} - D_{T_v} \quad (2.48)$$

λ_* ist die hypothetische Wärmeleitfähigkeit eines Bodens ohne jeden Wasserdampftransport. Man erhält sie mit dem in Abschnitt 2.2.3 geschilderten Verfahren, wenn man die Wärmeleitfähigkeit der luftgefüllten Poren gleich der Wärmeleitfähigkeit von Luft setzt. λ_{eff} ist die effektive Wärmeleitfähigkeit, die sich aus dem Zusammenspiel von Wasserdampftransport und Wärmeleitung ergibt. Eine Näherung dafür erhält man durch Addition von D_{T_v} zur Leitfähigkeit der Luft in obigem Verfahren. Der Unterschied zwischen λ_{s_1}

und λ_{s_2} ist laut de Vries klein, aber nicht vernachlässigbar. Je nach Größe und Richtung des isothermen diffusiven und des konvektivem Wasserdampftransportes, ist die erste oder die zweite Näherung richtiger.

Da die Trennung der beiden Fälle schwierig und λ_{eff} stark temperaturabhängig ist, werde ich λ_{s_1} verwenden, wenn der Wasserdampftransport explizit modelliert wird und λ_{eff} , wenn dies nicht der Fall ist.

2.6 Resultierendes Gleichungssystem

Wassertransport:

$$\frac{\partial \theta_w}{\partial t} = \nabla \cdot [K_w(\theta_w, T) \nabla H] - \frac{M_w}{\rho_w} Q_{PC} + Q_w \quad (2.49)$$

Wasserpotential:

$$H = h_m + h_a + h_g = h_m - z + \frac{p - p_0}{\rho_w g} \quad (2.50)$$

Wärmetransport:

$$\frac{\partial (C_s(\theta_w)T)}{\partial t} = \nabla \cdot [\lambda_*(\theta_w) \nabla T] + \nabla \cdot [C_w T \vec{J}_w] \quad (2.51)$$

$$\begin{aligned} &+ k_r c_{\text{Pyrit}} c_{O_2} \Delta h_{\text{Pyrox}} - L Q_{PC} + Q_H \\ &- \frac{\alpha}{dz} \cdot [T_i(z) - T_a] \end{aligned} \quad (2.52)$$

Gastransport (CO_2 , N_2):

$$\frac{\partial ((\varepsilon - \theta_w) n_i)}{\partial t} = \nabla \cdot \left[\frac{k_g(\theta_w)g}{\mu_g(T)} n_i \nabla (nRT) + D_i \nabla n_i \right] + Q_{g_i} \quad (2.53)$$

Sauerstofftransport:

$$\begin{aligned} \frac{\partial ((\varepsilon - \theta_w) n_{O_2})}{\partial t} &= \nabla \cdot \left[\frac{k_g(\theta_w)g}{\mu_g(T)} n_{O_2} \nabla (nRT) + D_{O_2} \nabla n_{O_2} \right] \\ &- 3,5 \cdot k_r c_{\text{Pyrit}} c_{O_2} + Q_{O_2} \end{aligned} \quad (2.54)$$

Wasserdampftransport:

$$Q_{PC} = \frac{\partial ((\varepsilon - \theta_w) n_v)}{\partial t} - \nabla \cdot \left[\frac{k_g(\theta_w)g}{\mu_g(T)} n_v \nabla (nRT) + D_{T_v} \nabla T + D_{h_{m_v}} \nabla h_m \right] - Q_v \quad (2.55)$$

Pyritvorrat:

$$\frac{d\rho_{\text{Pyrit}}}{dt} = -k_r \rho_{\text{Pyrit}} c_{O_2} \quad (2.56)$$

3 Numerische Behandlung des Problems

Zur Lösung von Differentialgleichungen gibt es prinzipiell zwei Möglichkeiten:

Analytische Lösung: Es wird unter bestimmten Annahmen ein geschlossener mathematischer Ausdruck gesucht, der eine Lösung der Differentialgleichung(en) darstellt.

Numerische Lösung: Mit Hilfe von Computern wird eine hinreichend genaue Näherung an die Lösung für bestimmte Raum- und Zeitpunkte berechnet.

Da analytische Lösungen nur für wenige, einfache Fälle gefunden werden können, müssen Differentialgleichungen in der Regel numerisch gelöst werden.

3.1 Räumliche Diskretisierung

Zur numerischen Lösung partieller Differentialgleichungen wird das betrachtete Gebiet zunächst in diskrete Intervalle zerlegt. Diese können entweder alle gleich groß sein oder eine an das Problem angepasste variable Größe haben. Dies bezeichnet man als „Diskretisierung“. Eine sehr feine Diskretisierung verbessert die Genauigkeit der Lösung, erhöht jedoch die Rechenzeit.

3.1.1 „Finite Differenzen“-Verfahren

Beim „Finite Differenzen“-Verfahren werden die räumlichen Ableitungen, die in partiellen Differentialgleichungen vorkommen, an den Diskretisierungspunkten durch Differenzenquotienten ersetzt. Dabei werden aus Genauigkeitsgründen häufig zentrale Differenzenquotienten verwendet:

$$\frac{\partial u(z_i)}{\partial z} \approx \frac{u(z_{i+1}) - u(z_{i-1}))}{2\Delta z_i} \quad (3.1)$$

$$\frac{\partial^2 u(z_i)}{\partial z^2} \approx \frac{u(z_{i+1}) - 2u(z_i) + u(z_{i-1}))}{\Delta z_i^2} \quad (3.2)$$

$u(z)$ ist ein Platzhalter für eine beliebige Variable in einer Differentialgleichung.

Setzt man diese Ausdrücke in die Differentialgleichung ein, erhält man statt einer partiellen Differentialgleichung ein System gewöhnlicher Differentialgleichungen in der Zeit mit je einer Gleichung pro Diskretisierungspunkt.

3.1.2 „Finite Volumina“-Verfahren

Beim „Finite Volumina“-Verfahren wird das gesamte Simulationsgebiet in einzelne Teilvolumina unterteilt. Im eindimensionalen Fall können dies z.B. Quader mit beliebiger Grundfläche A sein.

Die Differentialgleichungen werden über die Teilvolumina V_i integriert. Für die Richardsgleichung ergibt sich beispielsweise:

$$\iiint_{V_i} \frac{\partial \theta_w}{\partial t} dV = \iiint_{V_i} (-\nabla \cdot \vec{J}_w + Q_w) dV \quad (3.3)$$

Die linke Seite der Gleichung läßt sich umschreiben, auf die rechte Seite kann der Gauß'sche Satz angewendet werden. Man erhält:

$$V_i \frac{\partial \bar{\theta}_{w_i}}{\partial t} = - \oint_{F_i} \vec{J}_w \cdot \vec{n} dF + V_i \bar{Q}_{w_i} \quad (3.4)$$

mit $\bar{\theta}_{w_i}$: mittlerer volumetrischer Wassergehalt im Volumen V_i [-]
 F_i : Begrenzungsfläche des Volumens V_i [L^2]
 dF : Flächenelement [L^2]
 \vec{n} : Normalenvektor auf das Flächenelement dF [-]
 \bar{Q}_{w_i} : mittlerer Quell-/Senkenterm im Volumen V_i [t^{-1}]

Bei einem eindimensionalen System sind die Flüsse senkrecht zu den Randflächen. Für ein Element mit dem Volumen $V_i = A \Delta z_i$ ergibt sich:

$$A \Delta z_i \frac{\partial \bar{\theta}_{w_i}}{\partial t} = A [J_w]_{z_i - \frac{\Delta z_i}{2}} - A [J_w]_{z_i + \frac{\Delta z_i}{2}} + A \Delta z_i \bar{Q}_{w_i} \quad (3.5)$$

A : Grundfläche der Volumen-Elemente [m^2]
 $[J_w]_{z_i \pm \frac{\Delta z_i}{2}}$: Flußdichten am Rand des Volumen-Elements [m/s]
 z_i : Mittelpunkt des Volumen-Elements V_i [m^2]
 Δz_i : Höhe des Volumen-Elements V_i [m]

oder nach Division durch das Volumen:

$$\frac{\partial \bar{\theta}_{w_i}}{\partial t} = \frac{1}{\Delta z_i} \left([J_w]_{z_i - \frac{\Delta z_i}{2}} - [J_w]_{z_i + \frac{\Delta z_i}{2}} \right) + \bar{Q}_{w_i} \quad (3.6)$$

Die Flüsse über den Rand des Volumen-Elementes müssen dann noch geeignet formuliert werden (Abschnitt 3.1.3).

Die Methode der „Finiten Volumina“ hat folgende Vorteile:

- Sie ermöglicht eine auch mathematisch saubere Massenbilanz.
- Sie ist bei linearen Systemen bzw. bei explizit berechneten nichtlinearen Systemen massenbilanzerhaltend.
- Bei zwei- bzw. dreidimensionalen Modellierungen ermöglicht sie eine einfache Realisierung einer lokal feineren Diskretisierung.

Im eindimensionalen Fall unterscheidet sie sich im wesentlichen jedoch nur dadurch vom „Finite Differenzen“-Verfahren, daß die erhaltenen Lösungswerte nicht als die Werte der Funktion an einem bestimmten Punkt, sondern als Mittelwerte über ein Intervall interpretiert werden.

3.1.3 Formulierung der Flüsse an den Rändern der Volumina

Für das „Finite Volumina“-Verfahren ist eine Näherung für die Flüsse über die Ränder der Teilvolumina notwendig. Dies erfolgt durch einen Differenzenquotienten des Potentials (bzw. der Temperatur, der Gasdichte...) kombiniert mit einer Näherung der Leitfähigkeit (bzw. der Luftpermeabilität, des relativen Diffusionskoeffizienten...) an der Volumengrenze:

$$[J_w]_{z_i - \frac{\Delta z_i}{2}} = [K_w]_{z_i - \frac{\Delta z_i}{2}} \cdot \frac{\bar{H}_i - \bar{H}_{i-1}}{z_i - z_{i-1}} \quad (3.7)$$

Zur Berechnung der Leitfähigkeit an der Volumengrenze gibt es verschiedene Verfahren. Entweder berechnet man einen Mittelwert von $K_w(\bar{\theta}_{w_i})$ und $K_w(\bar{\theta}_{w_{i-1}})$, wobei das arithmetische, geometrische oder harmonische Mittel verwendet werden kann, oder man mittelt den Wassergehalt in den beiden Volumina und berechnet daraus die Leitfähigkeit.

de Marsily (1986) zeigt, das sich bei gesättigten Bedingungen ein verallgemeinertes harmonisches Mittel für die Leitfähigkeiten als korrekte Näherung herleiten läßt:

$$\frac{z_i - z_{i-1}}{[K_{w_{\text{sat}}}]_{z_i - \frac{\Delta z_i}{2}}} = \frac{\Delta z_{i-1}/2}{K_{w_{\text{sat}_{i-1}}}} + \frac{\Delta z_i/2}{K_{w_{\text{sat}_i}}} \quad (3.8)$$

Dagegen erzielte Zurmühl (1994), der sich ausgiebig mit diesem Problem beim „Finite Differenzen“-Verfahren beschäftigte, die besten Ergebnisse durch die Berechnung der Leitfähigkeit aus dem mittleren Wassergehalt:

$$[K_w]_{z_i - \frac{\Delta z_i}{2}} = K_w \left(\frac{\Delta z_{i-1} \bar{\theta}_{w_{i-1}} + \Delta z_i \bar{\theta}_{w_i}}{2(z_i - z_{i-1})} \right) \quad (3.9)$$

Bei Infiltration in trockenen Sandböden führte das arithmetische Mittel zu einer Aufweitung der Front gegenüber der „richtigen“ Lösung und einer Überschätzung der Infiltrationsrate, das geometrische Mittel hingegen zu starker Versteilung der Front und Unterschätzung der Infiltrationsrate.

An Horizontgrenzen ist die Berechnung der Leitfähigkeit aus dem mittleren Wassergehalt nicht möglich, wenn die Horizonte unterschiedliche Leitfähigkeitsfunktionen aufweisen. Zurmühl empfiehlt deshalb an Horizontgrenzen die Verwendung des geometrischen Mittels, falls der Parameter n des van Genuchten-Modells kleiner als zwei ist, und des arithmetischen Mittels, falls $n \geq 2$.

In MUSIC wird das von Zurmühl empfohlene Verfahren zur Abschätzung von ungesättigter Leitfähigkeit, Luftpermeabilität, relativem Diffusionskoeffizienten und effektiver Wärmeleitfähigkeit verwendet.

3.2 Zeitdiskretisierung

Nach der räumlichen Diskretisierung kann auf das resultierende Gleichungssystem eines der Verfahren zur Lösung gewöhnlicher Differentialgleichungen angewendet werden. Im einfachsten Fall wird hierzu auch die zeitliche Ableitung durch einen Differenzenquotienten ersetzt.

Bei der Richardsgleichung ergibt sich:

$$\begin{aligned} \frac{\bar{\theta}_{w_i}(t_j + \Delta t) - \bar{\theta}_{w_i}(t_j)}{\Delta t} = & \\ (1 - \alpha) \left\{ \frac{1}{\Delta z_i} \left([J_w(t_j)]_{z_i - \frac{\Delta z_i}{2}} - [J_w(t_j)]_{z_i + \frac{\Delta z_i}{2}} \right) + \bar{Q}_{w_i}(t_j) \right\} + & \quad (3.10) \\ + \alpha \left\{ \frac{1}{\Delta z_i} \left([J_w(t_j + \Delta t)]_{z_i - \frac{\Delta z_i}{2}} - [J_w(t_j + \Delta t)]_{z_i + \frac{\Delta z_i}{2}} \right) + \bar{Q}_{w_i}(t_j + \Delta t) \right\} & \end{aligned}$$

Je nachdem, wie α gewählt wird, unterscheidet man drei Verfahren:

Explizites Euler-Verfahren: Es gehen nur die Werte zum alten Zeitpunkt ein ($\alpha = 0$).

Implizites Euler-Verfahren: Es gehen nur die Werte zum neuen Zeitpunkt ein ($\alpha = 1$).

Crank-Nicholson-Verfahren: Es gehen Werte vom alten und vom neuen Zeitpunkt zu gleichen Teilen ein ($\alpha = 0.5$).

Das explizite Verfahren hat den Nachteil, nur dann stabil zu sein, wenn Δt und Δz_i klein genug gewählt sind. Außerdem lässt sich damit kein gesättigter Wassertransport berechnen. Das Crank-Nicholson-Verfahren ist zwar genauer (Konvergenzordnung 2 im Gegensatz zur Konvergenzordnung 1 bei den Eulerverfahren), neigt aber zu Oszillationen. Ich werde das implizite Euler-Verfahren verwenden, da nur dieses bedingungslos stabil ist.

3.3 Behandlung der nichtlinearen Gleichungen

Durch Einsetzen des impliziten Euler-Verfahrens erhält man im Falle der Richardsgleichung für jeden Zeitschritt ein nichtlineares Gleichungssystem, das gelöst werden muß. Die Nichtlinearität ergibt sich aus der Wasserspannungskurve und der Abhängigkeit der ungesättigten Leitfähigkeit vom Matrixpotential. Besondere Beachtung muß dabei der $\theta - h_m$ -Beziehung gewidmet werden. Führt man hier eine einfache Linearisierung durch:

$$\frac{\bar{\theta}_w(t + \Delta t) - \bar{\theta}_w(t)}{\Delta t} = \frac{\bar{\theta}_w(t) + \frac{d\theta}{dh_m}(h_m(t + \Delta t) - h_m(t)) - \bar{\theta}_w(t)}{\Delta t} \quad (3.11)$$

so führt dies zu Massenbilanzproblemen.

Hornung und Messing (1984) sowie Celia et al. (1990) schlagen zur Behebung der Bilanzprobleme ein Verfahren vor, das auf dem sogenannten „Newton-Verfahren“ zur iterativen Lösung nichtlinearer Gleichungen beruht. Schreibt man das nichtlineare Gleichungssystem als:

$$u_i(x_j) = 0 \quad j = 1, 2, 3 \dots n \quad (3.12)$$

ergibt sich eine verbesserte Näherung von einer Startnäherung x_j^ν ausgehend, nach der Vorschrift:

$$u_i(x^\nu) + \sum_{j=1}^n \frac{\partial u_i(x^\nu)}{\partial x_j} \cdot (x_j^{\nu+1} - x_j^\nu) = 0 \quad (3.13)$$

Es muß also für jede Iteration ein lineares Gleichungssystem gelöst werden:

$$\begin{pmatrix} \frac{\partial u_1(x^\nu)}{\partial x_1} & \dots & \frac{\partial u_1(x^\nu)}{\partial x_n} \\ \vdots & \ddots & \vdots \\ \frac{\partial u_n(x^\nu)}{\partial x_1} & \dots & \frac{\partial u_n(x^\nu)}{\partial x_n} \end{pmatrix} \cdot \begin{pmatrix} (x_1^{\nu+1} - x_1^\nu) \\ \vdots \\ (x_n^{\nu+1} - x_n^\nu) \end{pmatrix} = - \begin{pmatrix} u_1(x^\nu) \\ \vdots \\ u_n(x^\nu) \end{pmatrix} \quad (3.14)$$

Das Newton-Verfahren eignet sich nicht nur zur Vermeidung von Massenbilanzproblemen bei der Richardsgleichung, sondern auch zur Behandlung der ebenfalls nichtlinearen Gastransportgleichung sowie des gekoppelten Gleichungssystems.

3.4 Randbedingungen

3.4.1 Allgemeines

Zur vollständigen Lösung von partiellen Differentialgleichungen sind Anfangs- und Randbedingungen notwendig.

Es können 5 Arten von Randbedingungen unterschieden werden:

Dirichlet-Randbedingung: Es ist der Wert der Funktion auf dem Rand gegeben (z.B. das Matrixpotential).

Neumann-Randbedingung: Der Gradient der Funktion ist gegeben.

Cauchy-Randbedingung: Kombination von Dirichlet- und Neumann-Randbedingung.

Fluß-Randbedingung: Die Flußdichte senkrecht zum Rand ist gegeben. (Da beim Wasserfluß $\vec{J}_w = -K_w(\theta_w)\nabla H$ ist die Fluß-Randbedingung nicht gleich der Neumann-Randbedingung.)

Lysimeter-Randbedingung (auch Ungleichungs- oder Signorini-Randbedingung): Je nach dem Werten von Matrixpotential und Wassergehalt im untersten Volumenelement wird die Randbedingung gewechselt (siehe Anhang A).

In MUSIC werden je nach Art des Randes und des Transportprozesses verschiedene, zum Teil wählbare Randbedingungen gesetzt.

3.4.2 Anfangsbedingungen

Anfangsbedingungen definieren den zeitlichen Rand des Problems. Dazu muß für den Startzeitpunkt an jedem Raumpunkt der Wert der zu berechnenden Variablen angegeben werden, bei diesem Modell sind dies Matrixpotential, Temperatur, Gasdruck und Molenbrüche der Gase.

3.4.3 Oberer Rand

Am oberen Rand einer Laborsäule oder eines Bodens sind die meteorologischen Parameter bestimmend. Bei MUSIC kann für Wasser-, Wärme- und Gastransport am oberen Rand eine Dirichlet-Randbedingung gesetzt werden. Für den Wassertransport wurde außerdem eine Flußrandbedingung vorgesehen, so daß wahlweise auch Niederschlagsintensitäten angegeben werden können.

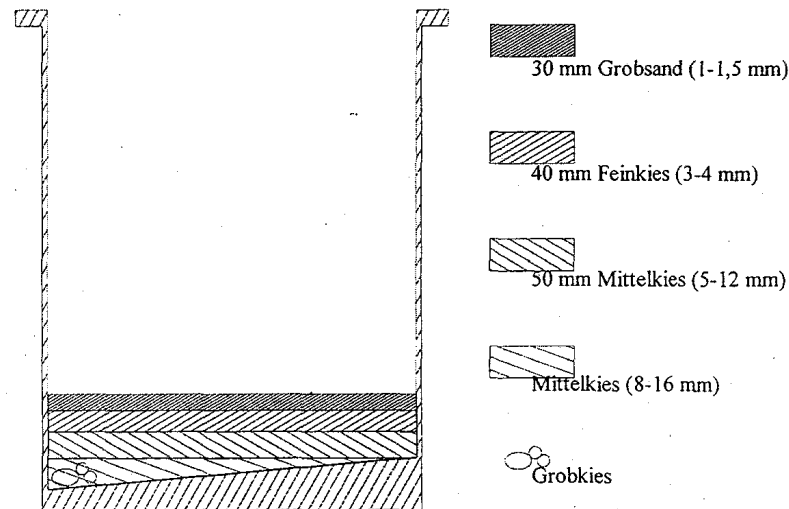


Abbildung 3.1: Aufbau des unteren Randes der Bochumer Versuchssäulen (Schulz 1995).

3.4.4 Unterer Rand

Der untere Rand ist bei der Modellierung von bodenphysikalischen Prozessen meist problematisch, da die realen Verhältnisse oft nicht mathematisch wiedergegeben werden können. Der Aufbau der Bochumer Versuchssäulen ist in Abbildung 3.1 dargestellt. Zuerst wurde eine Schicht grober Kies eingebracht, dann feinerer Kies, Grobsand und darüber das eigentliche Befüllungsmaterial. Unten ist ein Wasserabfluß eingebaut, der mit einem wassergefüllten U-Rohr gasdicht verschlossen ist.

Diese Verhältnisse können am ehesten mit einer Lysimeter-Randbedingung für den Wassertransport, einer Nullflußbedingung für den Gastransport und einer Dirichlet-Randbedingung für den Wärmetransport wiedergegeben werden.

Zu Testzwecken und damit ein Einsatz des Modells auch bei anderen Problemen möglich ist, wurden für den Wassertransport wahlweise auch eine Fluß- oder eine Dirichlet-Randbedingung und für den Gastransport eine Dirichlet-Randbedingung vorgesehen.

3.4.5 Randflüsse

Bei Dirichlet-Randbedingungen ist eine Näherung für die Flüsse über den oberen oder unteren Rand notwendig. In MUSIC wird folgende Gleichung verwendet:

$$J_{w_{oR}} = K_w(\theta_0) \cdot \frac{\bar{H}_0 - H_{oR}}{\Delta z_0/2}. \quad (3.15)$$

- $J_{w_{oR}}$: Wasserflußdichte am oberen Rand [m/s]
- $K_w(\theta_0)$: Leitfähigkeit im ersten Volumenelement [m/s]
- \bar{H}_0 : Gesamtpotential im ersten Volumenelement [m]
- H_{oR} : Gegebenes Potential am oberen Rand [m]
- Δz_0 : Höhe des ersten Volumenelementes [m]

Analog wird am unteren Rand und bei Gas- und Wärmeflüssen verfahren. Die einzige Ausnahme bildet der Wasserdampftransport.

3.4.6 Randbedingungen für Wasserdampf

Wie in Abschnitt 2.5.4 schon ausführlich erläutert, gibt es zwischen dem Transport von Wasserdampf und anderen Gasen prinzipielle Unterschiede. Das betrifft auch die Randbedingungen. Ist die Wassersättigung in den Volumenelemente am Rand hoch, so werden kaum Gase transportiert. Es können aber trotzdem erhebliche Mengen Wasser verdunsten. Ich nähere den diffusiven Wasserdampftransport über den Rand deshalb mit der Formel

$$J_{vD_{oR}} = \varepsilon D_{\text{atm}} \frac{\bar{n}_{v0} - n_{oR}}{d_l} \quad (3.16)$$

an. Dabei ist d_l ein Fittingparameter, der von der Dicke der laminaren Grenzschicht zur Atmosphäre abhängt. Der konvektive Wasserdampffluß wird wie bei den anderen Gasen formuliert.

3.5 Lösung der linearen Gleichungssysteme

Die Lösung der linearen Gleichungssysteme benötigt bei der numerischen Lösung partieller Differentialgleichungen mit Abstand die meiste Rechenzeit. Deshalb wurde eine Reihe von Verfahren entwickelt, die die spezielle Struktur der Koeffizientenmatrizen ausnutzen, um den Verbrauch an Rechenzeit und Speicherplatz zu minimieren. Grundsätzlich kann man dabei zwischen iterativen und direkten Lösern unterscheiden.

Ich habe zwei direkte und zwei iterative Lösungsverfahren ausprobiert. Das Thomas-Verfahren, eine LU-Zerlegung für Bandmatrizen beliebiger Bandbreite, das Gauß-Seidel-Verfahren und das Bikonjugierte-Gradienten-Verfahren. Während iterative Löser bei großen zwei- und dreidimensionalen Problemen deutlich schneller sind, zeigten sich die direkten Verfahren im eindimensionalen Fall klar überlegen. Dies liegt wohl daran, daß die Matrizen hier eine sehr geringe Bandbreite haben.

Das Modell verwendet deshalb das Thomas-Verfahren zur Lösung tridiagonaler Gleichungssysteme. Eine ausführliche Beschreibung findet sich bei Huwe (1992). Zur Lösung der Bandmatrizen, die bei der Berechnung des Gastransportes und des gekoppelten Gas-Wassertransportes auftreten, wird eine Variante der LU-Zerlegung benutzt, die in „Numerical Recipes in C“ (Press et al. 1992) beschrieben ist.

Beide Algorithmen wurden leicht abgewandelt, um die Vorteile, die C++ als Programmiersprache bietet, nutzen zu können. So ist es jetzt möglich, den Gleichungslöser und die Art, in der die Matrix abgespeichert wird, nachträglich zu wechseln, ohne am Programmcode grössere Änderungen vornehmen zu müssen.

3.6 Prozeßkopplungen

Die vielfältigen Wechselwirkungen zwischen einzelnen Transportprozessen im Boden führen zu einem gekoppelten Gleichungssystem, wie in Abschnitt 2.6 dargelegt. Zur numerischen Berücksichtigung solcher Kopplung gibt es mehrere Möglichkeiten. In MUSIC kommen drei verschiedene Verfahren zum Einsatz.

3.6.1 Explizite Linearisierung

Bei sehr schwachen Abhängigkeiten kann es ausreichend sein, die Veränderung erst im nächsten Zeitschritt zu berücksichtigen. Üblich ist dies vor allem bei der Berechnung von

Transportparametern, z.B. der ungesättigten Leitfähigkeit. Diese wird dann jeweils aus dem Matrixpotential und der Temperatur des aktuellen Zeitpunkts berechnet, obwohl sie bei einem voll impliziten Verfahren eigentlich aus den Werten zum neuen Zeitpunkt ermittelt werden müsste.

Explizite Linearisierung wird bei MUSIC bei der Berechnung der ungesättigten Leitfähigkeit, der volumetrischen Wärmekapazität, der Wärmeleitfähigkeit, der Luftpermeabilität und der Gasdiffusionskoeffizienten verwendet.

3.6.2 Iterative Lösung

Sind die Abhängigkeiten stärker, kann die Veränderung im Zeitschritt nicht ignoriert werden. Eine Möglichkeit besteht dann darin, die Gleichungen für jeden Transportprozeß nacheinander zu lösen. Es wird so lange iteriert, bis die Veränderung zwischen zwei Iterationen unter einen gegebenen Schwelle liegt.

Um Konvergenz zu gewährleisten, darf nicht der zuletzt errechnete Wert eingesetzt werden, vielmehr muß ein Relaxationsparameter eingeführt werden. So berechnet sich der in die Gastransportgleichung einzusetzende Wassergehalt $\theta_w(t + \Delta t)$ nach:

$$\theta_w^j = \theta_w^{j-1} + \gamma \cdot (\theta_w^{j*} - \theta_w^{j-1}) \quad (3.17)$$

- θ_w^j : Wassergehalt in der j-ten Iteration des Gastransportes [-]
- γ : Relaxationsparameter ($1 \geq \gamma > 0$)
- θ_w^{j-1} : Wassergehalt in der (j-1)-ten Iteration des Gastransportes [-]
- θ_w^{j*} : Wassergehalt aus der Lösung der Wassertransportgleichung in der j-ten Iteration [-]

Die Wahl von γ ist für die Konvergenzgeschwindigkeit von entscheidender Bedeutung. Wählt man γ zu groß, divergiert das Verfahren, wählt man γ zu klein, konvergiert es nur sehr langsam.

Der entscheidende Vorteil des iterativen Verfahrens liegt in seiner Einfachheit und der Möglichkeit, jedes Teilmodell einzeln testen zu können. So kann z.B. das Ergebnis des Wassertransportmodells mit analytischen Lösungen und bestehenden Modellen verglichen werden. Eine Überprüfung des gekoppelten Systems ist meist nur durch Massenbilanzen und Plausibilität möglich. Bei starken Wechselwirkungen kann es jedoch sehr lange dauern, bis das Verfahren konvergiert. Außerdem kann es zu Konvergenzfehlern kommen, d.h. eine Lösung wird akzeptiert, obwohl sie ein Artefakt ist.

3.6.3 Direkte Lösung

Liegt ein sehr enger Zusammenhang vor, gibt es aus Geschwindigkeitsgründen meist nur die Möglichkeit, das gekoppelte Gleichungssystem auf einmal zu lösen. Bei nichtlinearen Gleichungen ist dazu gegebenenfalls der Einsatz des Newtonverfahrens nötig. Die direkte Lösung des gekoppelten Systems geht zum Teil erheblich schneller, allerdings ist sie auch komplizierter zu programmieren und schwerer zu überprüfen.

In MUSIC wird deshalb zur Realisierung der Kopplung zwischen Wasser- und Gastransport einschliesslich Phasenwechsel sowohl das iterative Verfahren als auch die direkte Lösung eingesetzt. Die Ergebnisse können dann miteinander verglichen werden. Der Wärmetransport wird rein iterativ angekoppelt.

4 Programmtechnische Umsetzung

In diesem Kapitel sollen die wesentlichen Überlegungen dokumentiert werden, die bei der Umsetzung des Modells in ein Computerprogramm berücksichtigt wurden. Außerdem soll ein Überblick über den Aufbau des Programmes und seine Besonderheiten gegeben werden.

4.1 Vorüberlegungen

4.1.1 Programmiersprache und Betriebssystem

Bisher war es üblich, numerische Berechnungen in FORTRAN 77 zu programmieren. Diese Sprache hat insbesondere den Vorteil einer hohen Ausführungsgeschwindigkeit und der Verfügbarkeit gründlich getesteter und optimierter numerischer Programmbibliotheken. Ihr entscheidender Nachteil ist jedoch der eher kryptisch zu lesende Sourcecode und das Fehlen einer dynamischen Speicherverwaltung. Bei den hohen Speicheranforderungen zur Bearbeitung bodenphysikalischer Probleme ist jedoch besonders letzteres unverzichtbar. FORTRAN 90, die Weiterentwicklung von FORTRAN 77, hat bei weitem noch nicht den gleichen Verbreitungsgrad erreicht.

Als Alternative bietet sich das wesentlich jüngere C++ an. Dieses verbindet die ebenfalls hohe Geschwindigkeit der Programmiersprache C mit einer erleichterten dynamischen Speicherverwaltung und der Möglichkeit objektorientierter Programmierung, die gerade der Modellentwicklung besonders angemessen scheint. Es lassen sich damit strukturierte und besser nachvollziehbare Programme schreiben.

Bei der objektorientierten Programmierung werden Daten und die zu ihrer Verarbeitung notwendigen Funktionen zu Klassen zusammengefaßt. Die Art und der Aufbau der Klassen ist von besonderer Bedeutung, da ihre prinzipielle Struktur später nicht mehr so leicht zu ändern ist, die Übersichtlichkeit und Erweiterbarkeit des Programms jedoch entscheidend beeinflußt. Bei der Entwicklung einer Klassenhierarchie sollte deshalb sowohl die Struktur des Problems, als auch Anforderungen und geplante Erweiterungen berücksichtigt werden.

Das Betriebssystem UNIX ist für alle moderneren Prozessoren verfügbar. In Verbindung mit dem gnu-C-Compiler und dem Programm gnuplot zur Visualisierung der Ergebnisse, die für eine Vielzahl von Plattformen verfügbar sind, ist eine leichte Portierbarkeit des Programmcodes gewährleistet. Es sollte jedoch keine größeren Probleme bereiten, MUSIC auch auf andere Betriebssysteme (z.B. MS-DOS) zu übertragen.

4.1.2 Anforderungen an ein Computermodell

Ein Simulationsmodell soll vielfältigen Wünschen gerecht werden, die sich zum Teil widersprechen.

Das Programm soll - angesichts der begrenzten Leistungsfähigkeit jedes Computers und der sich daraus ergebenden langen Programmlaufzeiten - möglichst schnell rechnen. Es soll leicht zu bedienen sein, was insbesondere die Erfassung der Eingabedaten und die Datenausgabe betrifft. Der Sourcecode soll leicht nachvollziehbar sein, um spätere Änderungen und Erweiterungen zu ermöglichen. Die Ergebnisse, die das Programm liefert, sollen überprüfbar sein. Dies setzt eine möglichst gute Bilanzierung voraus. Außerdem ist es beim Umfang heutiger Modelle - der erst durch entsprechende Weiterentwicklungen der Computertechnik möglich gewordenen ist - auch sinnvoll, Vorkehrungen zu treffen, die die gleichzeitige Arbeit mehrerer Modellentwickler an einem Modell gestatten. Schließlich soll das Programm ohne größere Änderungen auf möglichst vielen Rechnerarchitekturen arbeiten.

Diese Anforderungen können natürlich nicht alle vollständig erfüllt werden, da z.B. eine einfache Bedienbarkeit und aufwendige Bilanzierung naturgemäß auf Kosten der Rechengeschwindigkeit geht.

4.1.3 Struktur des zu modellierenden Problems

MUSIC soll nicht nur für die Bochumer Versuchssäulen, sondern auch für „reale“-Böden anwendbar sein. Für die Entwicklung der Klassenstruktur ist es sinnvoll auch den makroskopischen Aufbau eines Bodens zu untersuchen.

Die kleinste, nicht mehr weiter unterteilbare Bodeneinheit ist das Pedon. Das Pedon ist ein Stück Boden, das ein einheitliches Bodenprofil aufweist. Dieses läßt sich in Horizonte unterteilen. Ein Horizont wird in der Bodenkunde in der Regel durch das Wirken gleicher pedogenetischer Prozesse charakterisiert. In dieser Arbeit soll darunter jedoch ein Abschnitt des Bodenprofils mit gleichen Eigenschaften (z.B. Transportfunktionen, chemische Parameter o.ä.) verstanden werden. Diese Eigenschaften werden in den zu simulierenden Zeiträumen in der Regel als statisch betrachtet.

Benachbarte Peda gleicher Bodenform bilden das Polypedon. Mehrere Polypeda lassen sich wiederum zur Pedochore zusammenfassen.

Das Pedon wird vor allem durch das Wetter sowie seine unmittelbaren Nachbarpeda beeinflusst und entwickelt sich in der Zeit. Dies betrifft besonders die zeitlich hochdynamischen physikalischen Größen Temperatur, Wasserspannung, Gaszusammensetzung und Gasdruck sowie die Transportprozesse, die deren Veränderungen hervorrufen.

4.2 Programmaufbau

Die Funktion *main*, die bei jedem C++-Programm als erstes aufgerufen wird, verarbeitet nur die Kommandozeilenparameter und legt dann ein Objekt der Klasse *ManagerClass* an. Das Manager-Objekt übernimmt die Bildschirmausgabe und überprüft, ob im nächsten Zeitschritt Randbedingungen geändert werden müssen oder ob die Simulationszeit abgelaufen ist. Es enthält das Pedon als Tochterobjekt.

Die zentrale Einheit der Modellierung bildet die Klasse *PedonClass*. Diese ist die Abbildung einer vollständigen, in sich abgeschlossenen Bodeneinheit. Dies soll insbesondere eine spätere Vernetzung mehrerer Peda über Quell-/Senkenterme zu einem Polypedon oder gar einer Pedochore ermöglichen.

Kein Teil des Pedon ist die Zeit, da diese nur einmal existieren kann und überall gleich sein muß. Die Zeit ist deshalb ein globales Objekt vom Typ *TimeClass*. Aus dem gleichen

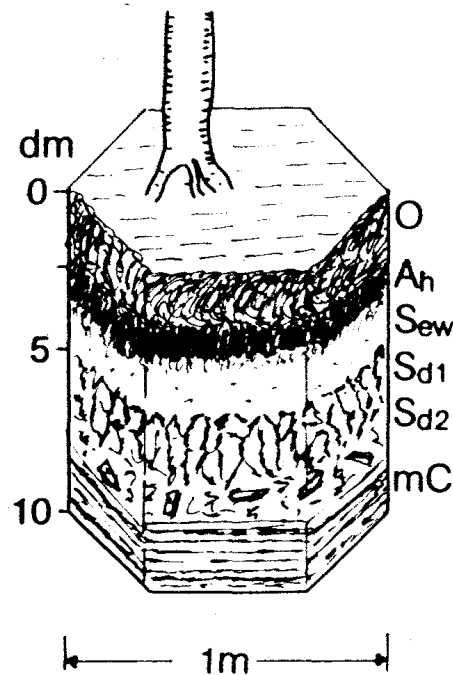


Abbildung 4.1: Beispiel eines Pedons (Stagnogley). (Schachtschabel et al. 1992)

Grund sind auch physikalische und chemische Naturkonstanten in einem globalen Objekt der Klasse *PhysicalChemistryClass* zusammengefasst.

4.2.1 Aufbau des Pedons

Die *PedonClass* ist die wichtigste Klasse von MUSIC. Sie enthält die Funktionen zur Berechnung aller Transportprozesse, die zur Zeit in MUSIC implementiert sind, also Wassertransport, Gastransport, Wärmetransport und Phasenwechsel. Dazu gehören die Lösung der Differenzialgleichungen, die Berechnung der Flüsse und der Transportparameter an den Horizontgrenzen.

Zur Verwaltung der Randbedingungen enthält jedes Pedon ein Objekt vom Typ *WeatherClass*. Die Transportparameterfunktionen und die Werte der Variablen (Temperatur, Matrixpotential...) sind in einem oder mehreren *HorizonClass*-Objekten gespeichert. Die Lösung der linearen Gleichungssysteme übernehmen spezielle Equation-Objekte, die von einer gemeinsamen Klasse (*SolverBaseClass*) abgeleitet sind und dadurch ein gemeinsames Interface haben. Dies ermöglicht den Austausch des Gleichungslösers oder der Art und Weise in der die Koeffizientenmatrix berechnet wird, ohne am eigentlichen Code von *PedonClass* etwas zu ändern. Auch zur Berechnung der Massenbilanzen gibt es spezielle Objekte (*GasBilClass*, *WaterBilClass*, *HeatBilClass*).

4.2.2 Aufbau eines Horizonts

Jedes Horizon-Objekt enthält die Daten und Funktionen, die in einem ganzen Horizont konstant sind, also Porosität, gesättigte Leitfähigkeit, Trockenraumdichte sowie Objekte zur Berechnung von ungesättigter Leitfähigkeit und pF-WG-Beziehung (*SWParClass*),

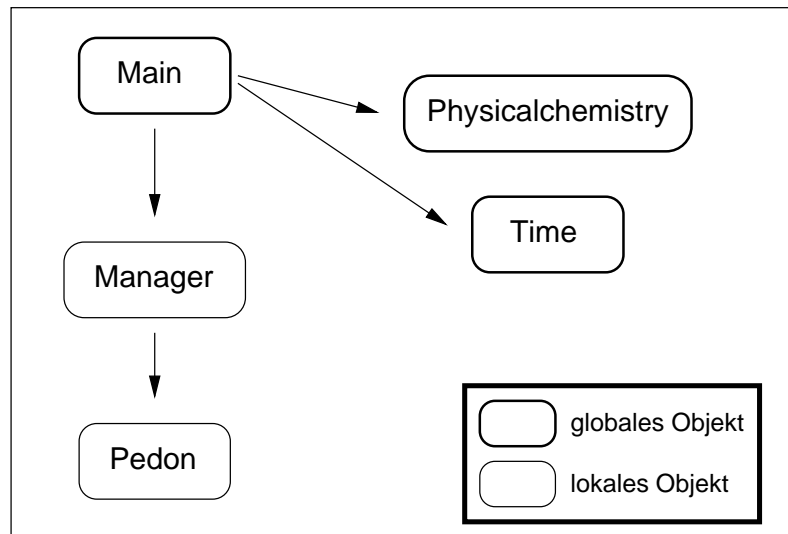
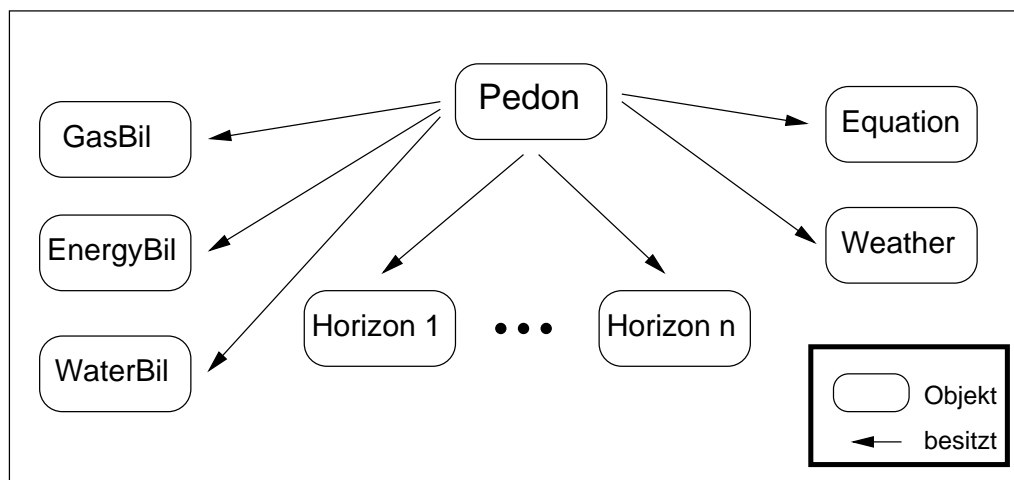


Abbildung 4.2: Schematische Darstellung der Objektstruktur von MUSIC.

Wärmeleitfähigkeit und volumetrischer Wärmekapazität (*SHParClass*) sowie Luftpermeabilität und Gastortuosität (*SGParClass*).

Abbildung 4.3: Schematische Darstellung der Objektstruktur von *PedonClass*.

Außerdem hat jeder Horizon mehrere Gridpoints. Die Gridpoints sind in TLArrays gespeichert, einer Konstruktion, die eine Mischung aus einem Array und einer - auch über die Horizontgrenzen hinweg - verketteten Liste darstellt. Damit ist sowohl eine sequentielle Abarbeitung über das ganze Profil hinweg möglich wie auch der direkte Zugriff auf einzelne Gridpoints im Array. Jeder Horizon enthält drei TLArrays Gridp (aktueller Zustand), GridpIter (letzte Iteration) und GridpOld (letzter Zeitschritt). Später könnten weitere vergangene Zeitschritte gespeichert werden um z.B. die Hysterese verschiedener Parameter besser modellieren zu können. Außerdem ist die Umstellung auf eine dynamische Diskretisierung möglich.

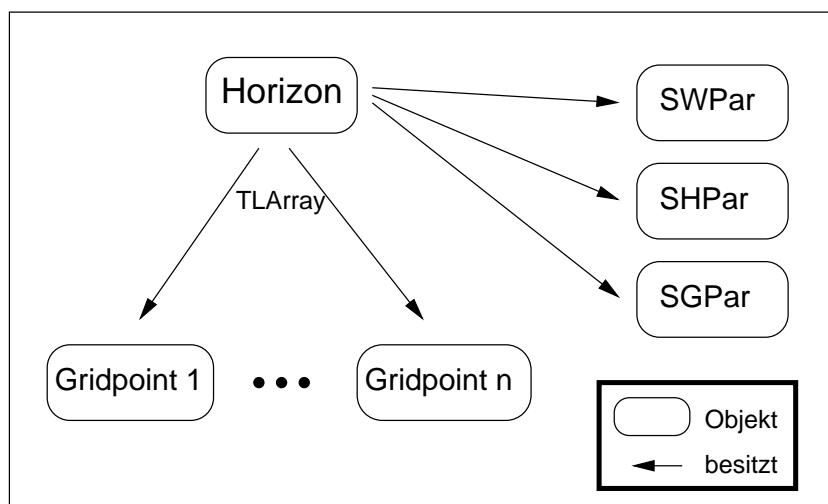


Abbildung 4.4: Schematische Darstellung der Objektstruktur von *HorizonClass*. SGPar: SoilGasParameter, SHPar: SoilHeatParameter, SWPar: SoilWaterParameter.

4.2.3 Klassenstruktur des Gridpoints

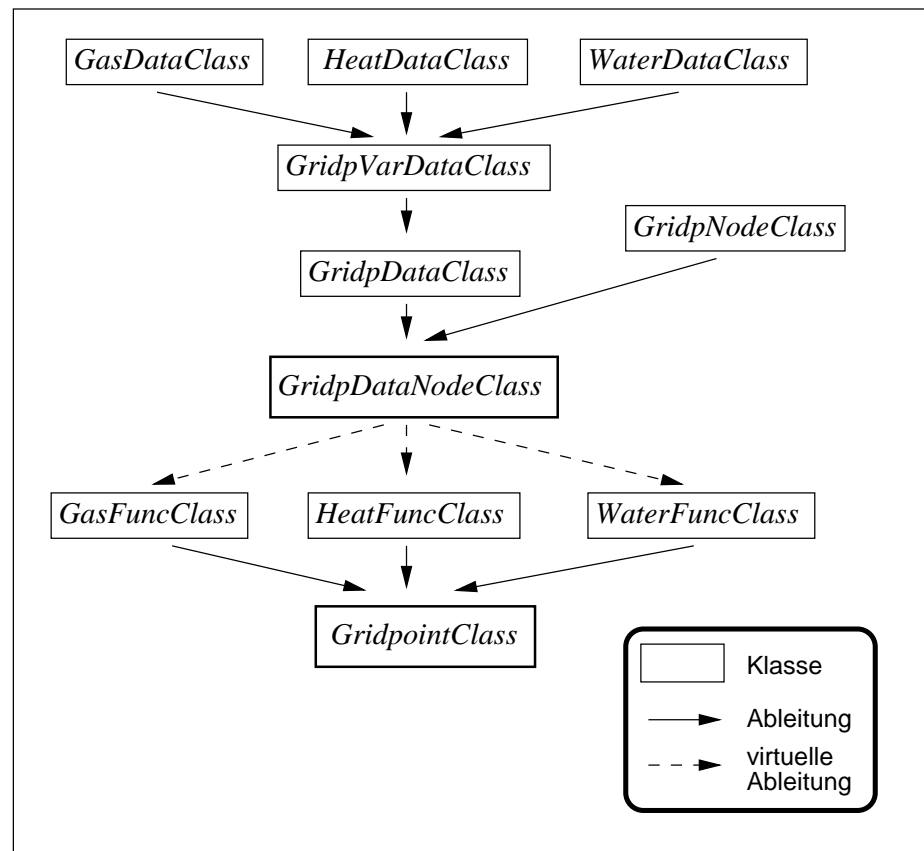
Der Gridpoint ist ein Objekt der Klasse *GridpointClass*. Diese entsteht aus einer komplexen Ableitungsstruktur, die es erleichtern soll, daß mehrere Programmierer gleichzeitig an dem Programm arbeiten können. Die an einem Diskretisierungspunkt notwendigen Daten und die notwendigen Einlese- und Ausgabefunktionen sind je nach Transportprozeß in verschiedenen Klassen zusammengefaßt, für die dann jeweils ein Programmierer verantwortlich sein kann.

Die zu speichernden Daten sind in *WaterDataClass* (Matrixpotential, vol. Wassergehalt...), *HeatDataClass* (Temperatur...) und *GasDataClass* (Druck, Molendichten...) enthalten, von denen sich *GridpointVarDataClass* ableitet. In der davon abgeleiteten *GridpointDataClass* kommen noch Daten zur Gittergeometrie (Höhe eines Teilvolumens, Distanz zur Mitte des nächsten...) hinzu, die mit Daten für die pseudo-verkettete Liste des TLArrays in *GridpointNodeClass* zur *GridpointDataNodeClass* kombiniert werden. Von dieser Klasse leiten sich virtuell die Funktionsklassen ab (*WaterFuncClass*, *HeatFuncClass*, *GasFuncClass*), die die Ein- und Ausgabe der Daten übernehmen und schließlich zur *GridpointClass* vereinigt werden.

4.3 Umsetzungsdetails

4.3.1 Parameterfunktionen

Wie schon in Abschnitt 4.2.2 erwähnt, sind die Parameterfunktionen eigene Objekte. Das erleichtert ihre Austauschbarkeit. Aus Geschwindigkeitsgründen erfolgt die Berechnung während des Programmlaufs nicht direkt, sondern durch lineare Interpolation zwischen Werten, die in Tabellen gespeichert sind. Die Tabellen können aus Dateien eingelesen werden, zum Teil aber auch bei Programmstart aus Funktionen ermittelt werden. Für die Wärmeleitfähigkeit findet das in Abschnitt 2.2.3 beschriebene Verfahren nach de

Abbildung 4.5: Darstellung der Ableitung von *GridpointClass*.

Vries Anwendung. Wasserspannungskurve und ungesättigte Leitfähigkeit können aus van Genuchten-Parametern berechnet werden. Dabei werden die Stützstellen durch eine adaptives Verfahren optimal gewählt (Anhang B).

4.3.2 Zeitschrittsteuerung

Um trotz hoher Genauigkeit Rechenzeit zu sparen, ist in MUSIC eine automatische Zeitschrittsteuerung eingebaut. Sie ist Teil von Pedon. Maximale und minimale Zeitschrittweite sind frei wählbar. Die Zeitschrittsteuerung orientiert sich bisher ausschließlich am Wassertransport. Bei einer zu großen Veränderung des Wassergehalts oder einem Überschreiten des maximalen Massenbilanzdefizits (beide Grenzwerte sind einlesbar) wird die Zeitschrittweite reduziert. Das gleiche passiert, wenn die internen Iterationen nicht konvergieren (Newtonverfahren, iterative Kopplung). Muß eine Zeitschrittweite, die im letzten Zeitschritt erhöht wurde, sofort wieder gesenkt werden, wartet das Programm einige Zeitschritte (zur Zeit 10) bevor es einen erneuten Versuch zur Erhöhung der Schrittweite macht.

4.3.3 Ein- und Ausgabe

Die Eingabe der Parameter erfolgt in MUSIC durch Datenfiles. Beim Einlesen werden spezielle Comment-Klassen verwendet, die es ermöglichen, an jeder Stelle in der Eingabedatei beliebige Kommentarzeilen einzugeben. Dies erleichtert die Lesbarkeit der Dateien erheblich. Kommentarzeilen muß ein % vorangestellt werden. In Anhang C ist ein Überblick über die verschiedenen Steuerdateien sowie ein Beispieldatensatz enthalten.

Die Dateiausgabe ist flexibel steuerbar. Zur räumlichen Analyse der Ergebnisse können Profile ausgegeben werden, bei denen auch ein Tiefenintervall angegeben werden kann, um die Datenmenge zu reduzieren. Um einen besseren Überblick über die zeitliche Entwicklung zu bekommen, können die Daten in bestimmten Tiefen in wählbaren Zeitabständen in jeweils eigene Dateien geschrieben werden, ebenso wie die aktuellen und kumulativen Flüsse über die Ränder. Die Ausgabe kann sowohl in bestimmten Zeitintervallen als auch zu vorgegebenen Zeiten erfolgen. Bei der Ausgabe bestimmter Tiefen ist auch noch eine Ausgabe zu jedem Zeitschritt möglich, um Oszillationen kontrollieren zu können.

Am Bildschirm werden während des Laufs von MUSIC die aktuelle Zeit, der Zeitschritt, die Anzahl der abgearbeiteten Zeitschritte und relative Massenbilanzen für den letzten Zeitschritt und seit Beginn der Simulation angezeigt.

Bei Programmende erzeugt MUSIC automatisch ein Restartfile, dessen Format mit dem der Datei für die Anfangsbedingungen übereinstimmt, so daß eine Fortsetzung der Berechnung an diesem Punkt möglich ist.

Wichtige Steuerungsbefehle können auch über Kommandozeilenparameter eingegeben werden. Dies betrifft die Art der zu simulierenden Prozesse und der auszugebenden Daten. Außerdem können die Namen der Hauptausgabe- und Haupteingabedatei geändert und die Bildschirmausgabe kann zur Batchverarbeitung abgeschaltet werden. Zum Debugging lassen sich auch Meldungen über Konvergenz der Iterationsverfahren und Anzahl der Iterationsschritte zuschalten. `music -h` zeigt eine Beschreibung der verfügbaren Kommandozeilenparameter.

4.3.4 Randbedingungen

Ein abrupter Wechsel von Temperatur, Luftdruck oder Gaszusammensetzung ist in der Natur nicht zu erwarten. Deshalb wird bei diesen Variablen zwischen den angegebenen Werten linear interpoliert. Bei den Wasserflüssen oder dem Matrixpotential ist dies nicht der Fall.

5 Überprüfung des Modells

Je komplizierter ein Computermodell ist, um so wahrscheinlicher ist es, daß Ergebnisse falsch sind oder numerische Artefakte produziert werden. Die Aussagefähigkeit eines Modells hängt also ganz entscheidend davon ab, wie gründlich es getestet wurde.

Zum Testen eines Computermodells gibt es verschiedene Möglichkeiten.

- Berechnung von Massenbilanzen.
- Prüfung der Ergebnisse auf Plausibilität.
- Vergleich mit den Berechnungen anderer Modelle.
- Vergleich von Berechnungen mit analytischen Lösungen.

5.1 Massenbilanzen

Die Berechnung von Massenbilanzen hat bei der Entwicklung eines Computermodells zwei Funktionen. Massenbilanzen sind ein entscheidender Indikator für Programmierfehler und sie ermöglichen eine Qualitätskontrolle von Ergebnissen, zu deren Errechnung die Lösung nichtlinearer Gleichungssysteme notwendig sind. Bei dieser entstehen zwangsläufig mehr oder weniger große Massenbilanzdefizite. Durch Verwendung des Newton-Verfahrens werden diese zwar verringert, aber nicht vollständig beseitigt. Auch zur Zeitschrittsteuerung sind Massenbilanzen wichtig.

In MUSIC sind drei Arten von Massenbilanzen realisiert. Relative globale Bilanzen, bei denen der Massenbilanzfehler seit Beginn der Simulation auf den Sollwert bezogen wird, relative globale, Bilanzen bei denen der Massenbilanzfehler im letzten Zeitschritt auf den Sollwert bezogen wird und absolute lokale Bilanzen, bei denen für jedes Volumenelement eine Massenbilanz für den letzten Zeitschritt berechnet wird. Die ersten beiden Arten werden für Wasser, Gase und Energie berechnet, die letztere nur für Wasser und Gase. Die lokalen Bilanzen dienen vor allem zu Debugging-Zwecken und sind über eine Compiler-Option abschaltbar.

5.2 Analytische Lösungen

Der beste Weg zum Testen eines Modells ist der Vergleich mit analytischen Lösungen. Dazu werden am Modell Randbedingungen eingestellt, für die eine analytische Lösung vorliegt, mit der die Berechnungsergebnisse dann verglichen werden. Limitiert wird dieses Verfahren durch die Verfügbarkeit analytischer Lösungen.

Bei MUSIC können auf diese Weise nur einzelne Teilprozesse getestet werden. Für den komplett gekoppelten Transport sind keine Lösungen verfügbar.

5.2.1 Wassertransport

Für die Infiltration von Wasser in einen homogenen Boden mit über das Profil konstantem Anfangswassergehalt θ_{w_i} gibt es eine quasi-analytische Lösung der Richardsgleichung von Philip (Kutilek und Nielsen 1994). Das Wassergehaltsprofil läßt sich demnach mit einer unendlichen Reihe beschreiben:

$$z(\theta_w, t) = \sum_{i=1}^{\infty} \eta_i(\theta_w) \cdot t^{i/2} \quad (5.1)$$

Die Funktionen $\eta_i(\theta_w)$ lassen sich aus der Diffusivität $D(\theta_w)$, der hydraulischen Leitfähigkeit $K_w(\theta_w)$ und $\eta_{n-1}(\theta_w)$ berechnen. Die kumulative Infiltration $I(t)$ und die Infiltrationsrate $J_w(t)$ erhält man mit:

$$I(t) = \int_{\theta_{w_i}}^{\epsilon} z d\theta = S \cdot t^{1/2} + (A_2 + K_w(\theta_{w_i})) \cdot t + A_3 \cdot t^{3/2} + \dots + A_n \cdot t^{n/2} \quad (5.2)$$

$$J_w(t) = \frac{1}{2} S \cdot t^{-1/2} + (A_2 + K_w(\theta_{w_i})) + \frac{3}{2} A_3 \cdot t^{1/2} + \dots + \frac{n}{2} A_n \cdot t^{n/2-1} \quad (5.3)$$

mit

$$A_n = \int_{\theta_{w_i}}^{\epsilon} \eta_n(\theta) d\theta; \quad S = A_1$$

S bezeichnet man als Sorptivität.

Haverkamp et al. (1977) haben mehrere Wassertransportmodelle getestet und dabei auch die quasi-analytische Lösung von Philip verwendet. Sie geben mit dieser Lösung berechnete Wassergehaltsprofile zu drei Zeitpunkten sowie die Parameter A_1, \dots, A_4 für einen Tonboden (Yolo Light Clay) und einen Sandboden an.

Mit dem Wassertransportteil von MUSIC wurde die Infiltration in beide Böden simuliert. Die von Haverkamp et al. (1977) angegebenen hydraulischen Parameter der Böden sind in Anhang D angegeben.

Für den Yolo Light Clay wurden als Anfangs- und Randbedingungen

$$\begin{aligned} h_m &= -599.97 \text{ cm} & \text{für } t < 0 & z \geq 0 \\ h_m &= 0.0 \text{ cm} & \text{für } t \geq 0 & z = 0 \\ h_m &= -599.97 \text{ cm} & \text{für } t \geq 0 & z = 300 \text{ cm} \end{aligned}$$

und für den Sand

$$\begin{aligned} h_m &= -61.5 \text{ cm} & \text{für } t < 0 & z \geq 0 \\ h_m &= -20.73 \text{ cm} & \text{für } t \geq 0 & z = 0 \\ h_m &= -61.5 \text{ cm} & \text{für } t \geq 0 & z = 100 \text{ cm} \end{aligned}$$

verwendet.

Die räumliche Diskretisierung erfolgte in 1 cm Abständen. Als Zeitschritt wurde beim Yolo Light Clay $\Delta t = 40 \text{ s}$ für $t \leq 5 \cdot 10^5 \text{ s}$ und $\Delta t = 500 \text{ s}$ für $t > 5 \cdot 10^5 \text{ s}$ und beim Sand $\Delta t = 5 \text{ s}$ verwendet.

Der relative Massenbilanzfehler lag mit $1 \cdot 10^{-14}$ für den Yolo Light Clay und $5 \cdot 10^{-15}$ für den Sand im Bereich der Rechengenauigkeit des Computers. Die Rechenzeit betrug auf einem Pentium 90 unter Linux 28 Minuten für den Yolo Light Clay und 7 Sekunden für den Sand.

In Abbildung 5.1 und 5.3 sind die Wassergehaltsprofile zusammen mit den Vergleichswerten aus Haverkamp et al. (1977), in Abbildung 5.2 und 5.4 die kumulative Infiltration und die Infiltrationsraten dargestellt.

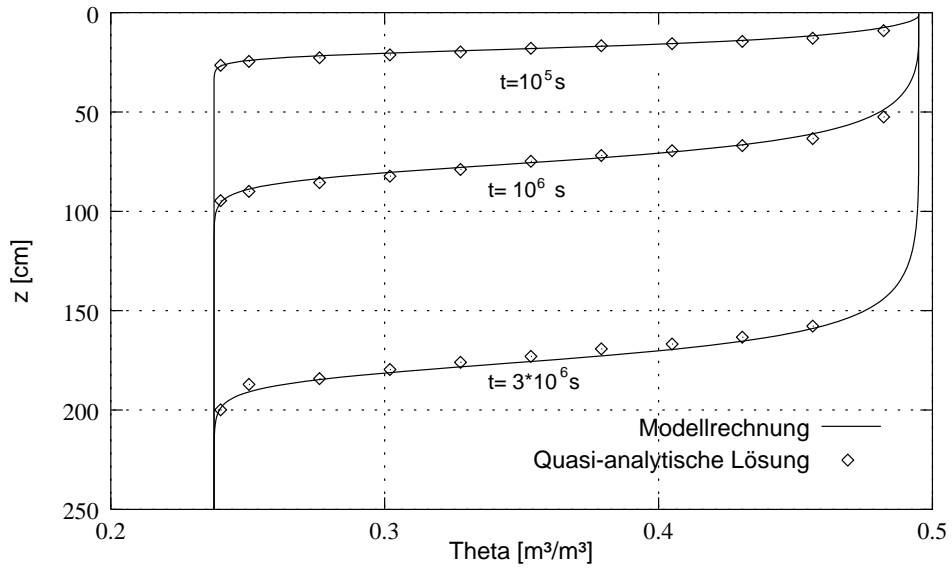


Abbildung 5.1: Vergleich von Profilen, die mit MUSIC berechnet wurden, und Werten aus der quasi-analytischen Lösung von Philip für den Yolo Light Clay.

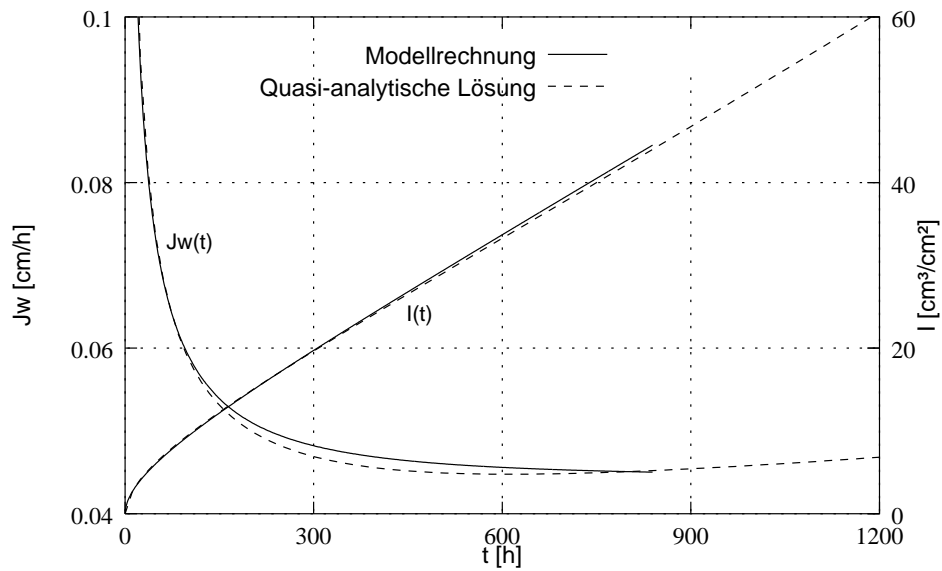


Abbildung 5.2: Vergleich der Infiltrationsraten und der kumulativen Infiltration, die mit MUSIC berechnet wurden, und der quasi-analytischen Lösung von Philip für den Yolo Light Clay.

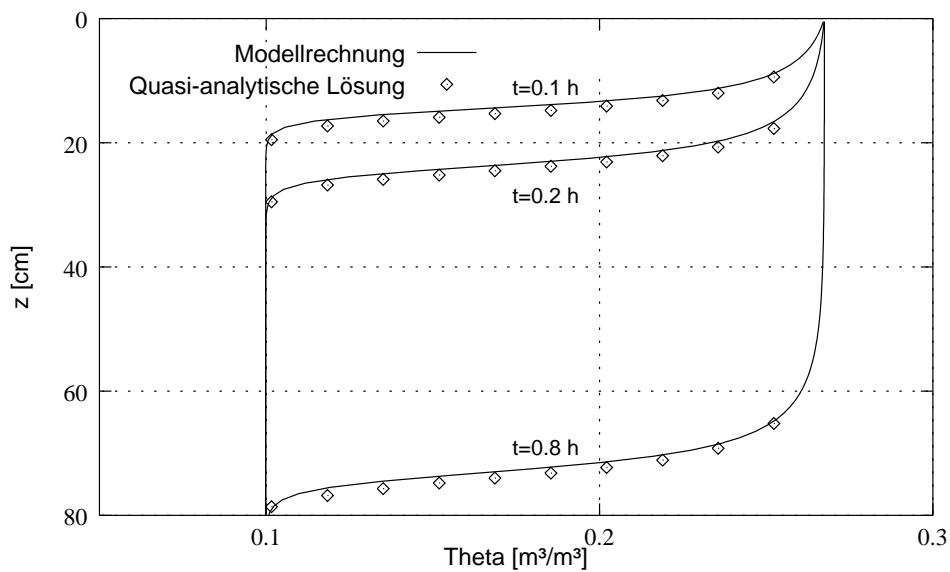


Abbildung 5.3: Vergleich von Profilen, die mit MUSIC berechnet wurden, und Werten aus der quasi-analytischen Lösung von Philip für den Sand.

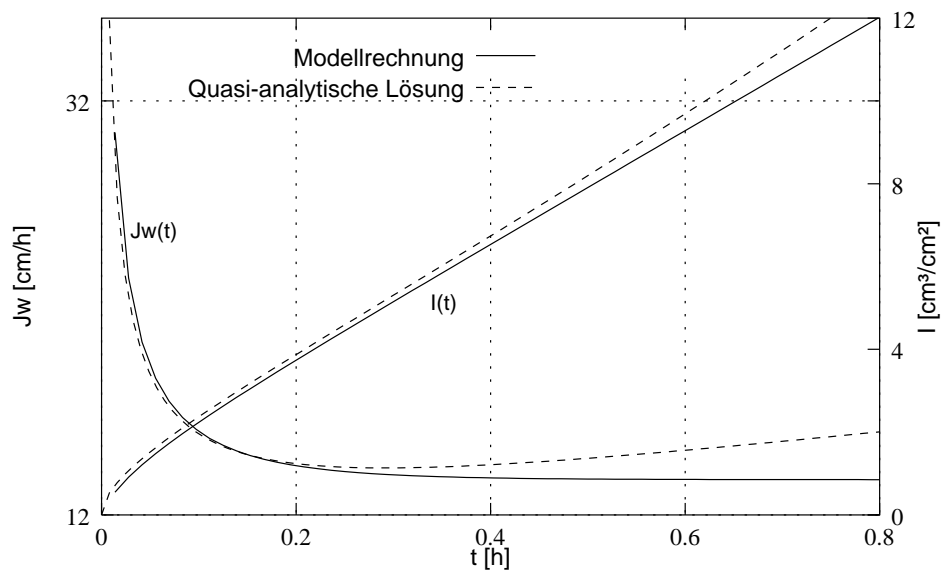


Abbildung 5.4: Vergleich der Infiltrationsraten und der kumulativen Infiltration, die mit MUSIC berechnet wurden, und der quasi-analytischen Lösung von Philip für den Sand.

Die Übereinstimmung ist in allen Fällen als gut zu bezeichnen. Geringfügige Differenzen in der Steilheit der Infiltrationsfront traten auch bei den von Haverkamp et al. (1977) getesteten Modellen auf. Bei den Infiltrationsraten ist zu beachten, daß die quasi-analytische Lösung von Philip mit einer endlichen Anzahl von Termen nur für einen begrenzten Zeitabschnitt gültig ist. Für den Yolo Light Clay ist dies bei Verwendung von 4 Termen $t < 600$ h und für den Sand $t < 0.29$ h.

5.2.2 Gastransport

5.2.2.1 Konvektiver Gastransport

Zum Testen des konvektiven Gastransportes wurde der Fluß von Luft (ohne Argon) durch eine 1 m lange Säule simuliert. Dazu wurde die Luftpermeabilität im ganzen Profil auf 10^{-11} m² und die Temperatur auf 300 K gesetzt. Am oberen Rand wurde ein Luftdruck von 1014 hPa, am unteren Rand 1013 hPa angelegt. Die räumliche Diskretisierung erfolgte in einem 1 cm-Raster. Die Simulationsdauer war zwei Minuten, die Zeitschrittweite 1 Sekunde. Bei einer Rechenzeit von 8 Sekunden auf einem Pentium 100 war der relative Massenbilanzfehler für alle Gase kleiner als $3 \cdot 10^{-13}$.

Bereits nach 20 Sekunden bleibt die Flußdichte konstant. Der simulierte Druckabfall innerhalb der Säule ist linear. Das Modell errechnet eine Viskosität der Luft von $1.85 \cdot 10^{-5}$ N s/m². Dies stimmt gut mit dem Referenzwert $1.86 \cdot 10^{-5}$ N s/m² überein, der von Lide (1995) für 300 K angegeben wird. Mit Gleichung 2.19 ergibt sich für den Gleichgewichtsfall eine Flußdichte am unteren Rand von $2.195 \cdot 10^{-3}$ mol/m² s, MUSIC berechnet $2.197 \cdot 10^{-3}$ mol/m² s.

5.2.2.2 Diffusiver Gastransport

Freijer und Leffelaar (1996) beschreiben analytische Lösungen des Fick'schen Gesetzes und der Stefan-Maxwell-Gleichungen¹ für den steady-state bei diffusivem Gastransport in einer Säule der Länge L , die an ihrem unterem Rand gasdicht ist und in der ein konstanter Abbau von O₂ zu CO₂ stattfindet. Das Verhältnis r zwischen Sauerstoffverbrauch Q_{O_2} und CO₂-Produktion Q_{CO_2} ist dabei variabel.

Die Lösung für das Fick'sche Gesetz lautet dann:

$$x_i = x_{(z=0)_i} - \frac{Q_i}{D_{ij\text{eff}}} \left(\frac{1}{2} z^2 - z \cdot L \right) \frac{RT}{p} \quad (5.4)$$

Da beim Fick'schen Gesetz die Flüsse verschiedener Gase unabhängig voneinander sind, ist die Sauerstoffkonzentration bei konstantem Q_{O_2} unabhängig von r . Für N₂ ergibt sich aus dem Fick'schen Gesetz $x_{N_2} = x_{(z=0)_{N_2}} = \text{konstant}$.

¹Die Stefan-Maxwell-Gleichungen

$$\sum_{\substack{j=1 \\ j \neq i}}^{\nu} \left[\frac{J_{D_i} x_j - J_{D_j} x_i}{D_{ij}} \right] = - \frac{p}{RT} \frac{dx_i}{dz}$$

sind die exakte mathematische Beschreibung des Transports mehrerer Gase in einem System ohne Wände.

Für ein ternäres Gasgemisch aus O_2 , N_2 und CO_2 läßt sich folgende analytische Lösung der Stefan-Maxwell-Gleichungen ableiten:

$$x_{N_2} = x_{(z=0)N_2} \exp \left[Q_{O_2} K \left(\frac{1}{2} z^2 - z \cdot L \right) \right] \quad (5.5)$$

mit

$$K = \frac{RT}{p} \left[\frac{1}{D_{O_2 N_2}} - \frac{r}{D_{CO_2 N_2}} \right] \quad (5.6)$$

$$x_{O_2} = x_{(z=0)O_2} + a K^{-1} x_{(z=0)N_2} \left\{ \exp \left[Q_{O_2} K \left(\frac{1}{2} z^2 - z \cdot L \right) \right] - 1 \right\} - Q_{O_2} c \left(\frac{1}{2} z^2 - z \cdot L \right) \quad (5.7)$$

mit

$$a = \frac{RT}{p} \left[\frac{1}{D_{O_2 CO_2}} - \frac{1}{D_{O_2 N_2}} \right] \quad (5.8)$$

$$c = \frac{RT}{p} \left[\frac{1-r}{D_{O_2 CO_2}} \right] \quad (5.9)$$

$$x_{CO_2} = 1 - x_{O_2} - x_{N_2} \quad (5.10)$$

Um die isobaren Bedingungen zu gewährleisten, die für eine Anwendung der Stefan-Maxwell-Gleichungen notwendig sind, wurde bei der Berechnung mit MUSIC eine sehr große Permeabilität gewählt. Die Simulationsparameter sind in Tabelle 5.1 gegeben. Es wurden Profile für drei verschiedene Werte von r berechnet.

Der Massenbilanzfehler ist mit bis zu $4 \cdot 10^{-6}$ relativ groß, da mit hoher Permeabilität bei großem Zeitschritt gerechnet wurde. Da nur die Gleichgewichtslösung interpretiert werden soll, ist dies jedoch nicht von Bedeutung. Die Rechenzeit lag mit einem Pentium 100 bei 6 Minuten. Abbildung 5.5 bis 5.7 zeigen die Profile für O_2 , CO_2 und N_2 zusammen mit den analytischen Lösungen.

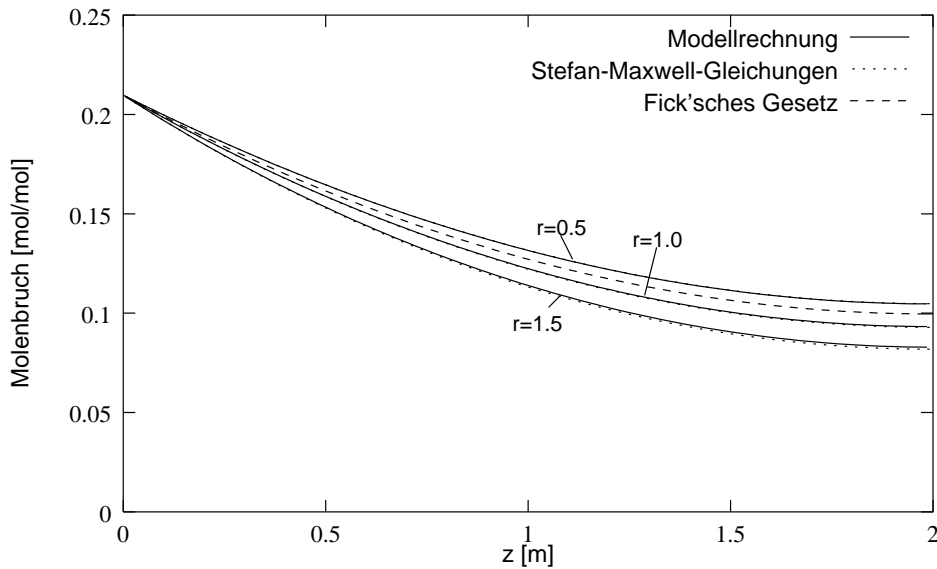


Abbildung 5.5: Berechnete Molenbrüche und Vergleichswerte für O_2 .

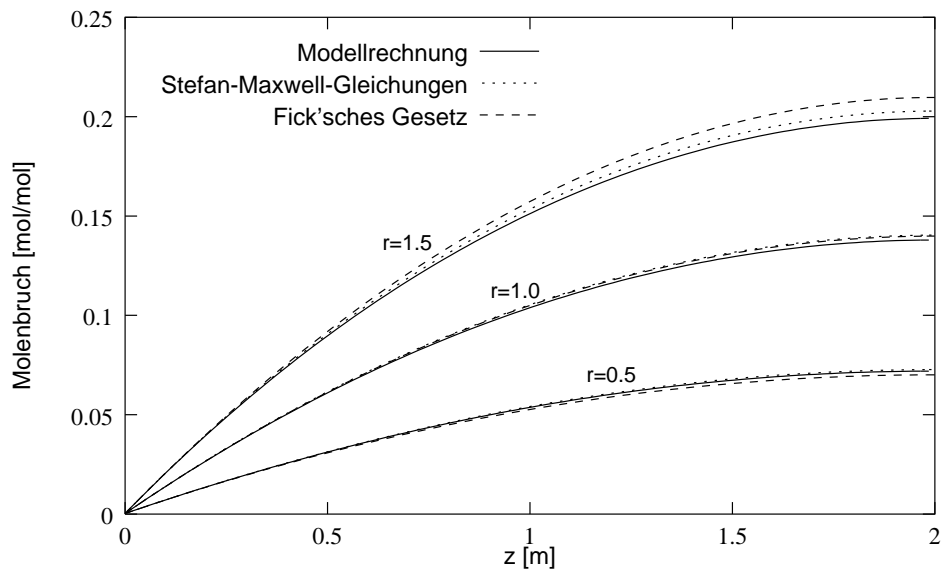
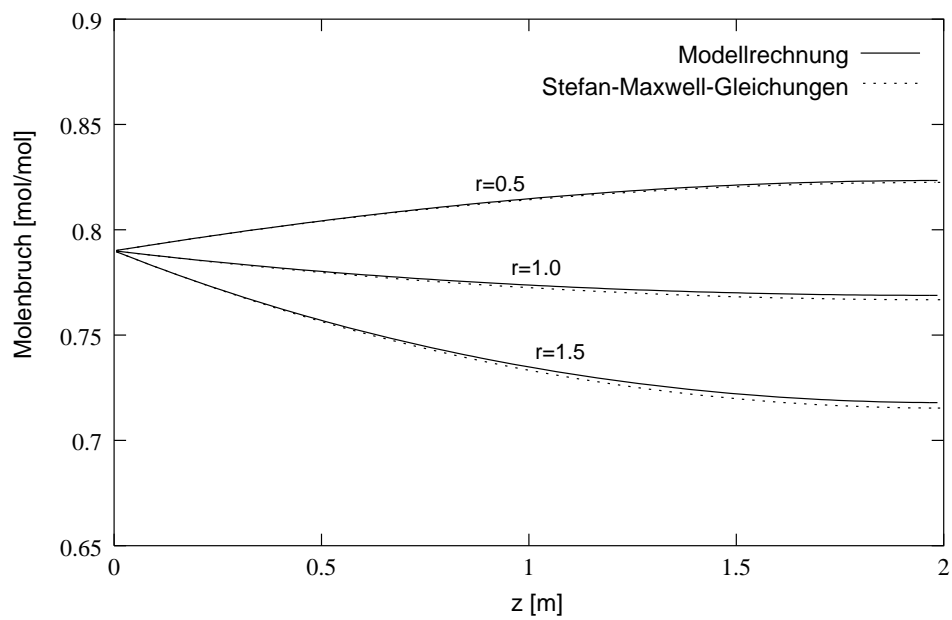
Abbildung 5.6: Berechnete Molenbrüche und Vergleichswerte für CO₂.Abbildung 5.7: Berechnete Molenbrüche und Vergleichswerte für N₂.

Tabelle 5.1: Für die Simulation des diffusiven Gastransportes verwendete Parameter.

Parameter	Wert	Einheit
T	20.0	$^{\circ}C$
p	1000.0	hPa
R	8.31441	$J/molK$
k_g	10^{-9}	m^2
ξ_g	0.1	–
$x_{(z=0)CO_2}$	0.0003	mol/mol
$x_{(z=0)O_2}$	0.2097	mol/mol
$x_{(z=0)N_2}$	0.7900	mol/mol
Q_{O_2}	0.4	mol/m^3d
r	0.5, 1.0, 1.5	–
$D_{O_2CO_2}^*$	1.388	m^2/d
$D_{N_2CO_2}^*$	1.397	m^2/d
$D_{O_2N_2}^*$	1.771	m^2/d
Δz	1.0	cm
Säulenlänge	2.0	m
Δt	0.1	d
Simulationsdauer	365.0	d

* mit MUSIC berechnet.

Die mit MUSIC berechneten Werte liegen sehr nahe an den Profilen, die mit den Stefan-Maxwell-Gleichungen berechnet wurden. Im Gegensatz zum reinen Fick'schen Gesetz werden auch die Konzentrationsverläufe von O_2 und N_2 gut wiedergegeben. Das Ausmaß der Übereinstimmung ist erstaunlich, da MUSIC ja nicht die Stefan-Maxwell-Gleichungen, sondern eine Kombination aus konvektivem Gastransport und einer modifizierten Fick'schen Diffusion zur Berechnung der Lösung verwendet.

5.2.3 Wärmetransport

Gibt es keinen Phasenwechsel von Wasser und keine Pyritoxidation, dann ist die Form der Wärmetransportgleichung 2.51 gleich der der Advektions-Dispersions-Gleichung. van Genuchten und Alves (1982) haben verschiedene analytische Lösungen der Advektions-Dispersions-Gleichung zusammengestellt.

Für konstante Wasserflußdichte und die Anfangs- und Randbedingungen

$$T = T_i \quad \text{für} \quad t < 0 \quad z \geq 0$$

$$T = T_0 \quad \text{für} \quad t \geq 0 \quad z = 0$$

$$\lim_{z \rightarrow \infty} \frac{\partial T}{\partial z} = 0$$

gibt es die analytische Lösung:

$$T(z, t) = T_i + (T_0 - T_i) \cdot A(z, t) \quad (5.11)$$

mit

$$A(z, T) = \left(\frac{1}{2} \operatorname{erfc} \left[\frac{C_s z - C_w J_w t}{2\sqrt{\lambda C_s t}} \right] + \frac{1}{2} \exp \left(\frac{C_w J_w z}{\lambda} \right) \operatorname{erfc} \left[\frac{C_s z + C_w J_w t}{2\sqrt{\lambda C_s t}} \right] \right) \quad (5.12)$$

Tabelle 5.2: Für die Simulation des Wärmetransports verwendete Parameter.

Parameter	Wert	Einheit
λ	2.0	$J/m\ s\ K$
C_s	1.9	$J/m^3\ K$
T_i	0.0	$^{\circ}C$
T_0	20.0	$^{\circ}C$
Δz	1.0	cm
Säulenlänge	5.0	m
Δt	0.001	d
Simulationsdauer	1.0	d

Zur Simulation des Wärmetransportes mit dem Wärmetransportteil von MUSIC wurde eine sehr lange Bodensäule verwendet, um eine quasi-semiinfinit Säule zu erhalten. Die Simulationsparameter sind in Tabelle 5.2 zusammengefaßt. Als untere Randbedingung wurde $T = T_i$ verwendet. Mit dem Programm Maple V wurden aus der analytischen Lösung Vergleichswerte für $t = 0.5\ d$ und $t = 1.0\ d$ berechnet.

Der Energiebilanzfehler ist mit $2 \cdot 10^{-13}$ im Bereich der Rechengenauigkeit. Ein Pentium 100 brauchte für die Berechnung 5 Minuten. Die Ergebnisse der Simulation sind in Abbildung 5.8 dargestellt. Die von MUSIC berechnete Lösung und die analytische Lösung stimmen sehr gut überein.

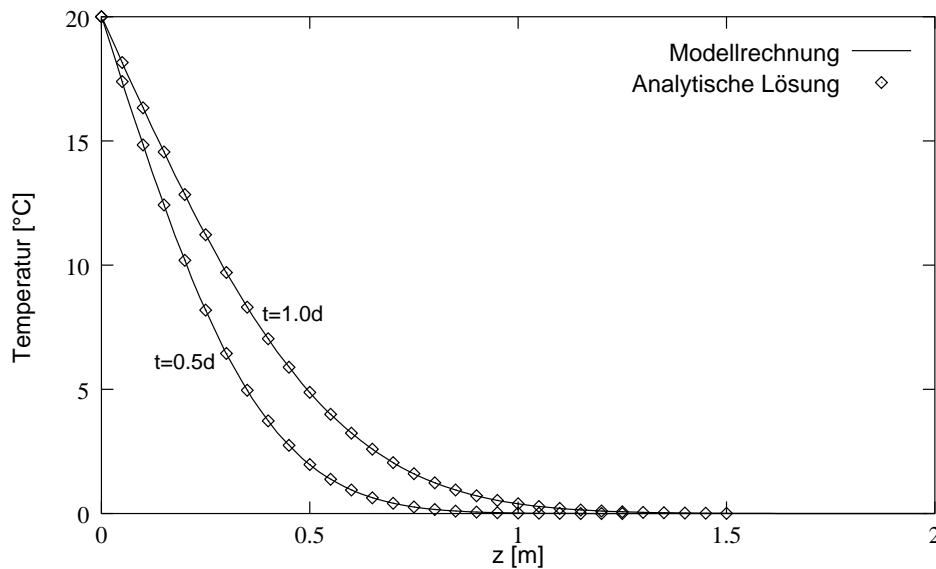


Abbildung 5.8: Vergleich zwischen simuliertem Temperaturprofil und analytischer Lösung.

6 Anwendungsbeispiel

Im letzten Kapitel wurde die prinzipielle Korrektheit der mit MUSIC durchgeführten Berechnungen überprüft, im folgenden soll nun mit Beispielrechnungen die Leistungsfähigkeit von MUSIC demonstriert werden.

6.1 Parameter

Für die folgenden Berechnungen wurde ein Datensatz verwendet, der aus Messungen an Probenmaterial der Laborsäulen in Bochum hervorgegangen ist. Das Material läßt sich nur sehr schwer verarbeiten, da es sich um Feinsand handelt, der fast keine bindenden Bestandteile enthält. Die Ergebnisse waren deshalb zum Teil sehr ungenau. Sie wurden für die vorliegende Arbeit kritisch überprüft, so daß der vorliegende Datensatz für Beispielrechnungen genügen sollte. Die Parameter sind in Abbildung 6.1 und 6.2 sowie in Tabelle 6.1 wiedergegeben.

Parameter	Wert	Einheit
K_s	$3.82 \cdot 10^{-4}$	m/s
ε	0.427	m^3/m^3
Quarzanteil	0.95	m^3/m^3
Anteil anderer Mineralien	0.04	m^3/m^3
Anteil organischer Substanz	0.01	m^3/m^3
Formfaktor g_a für die Bodenteilchen	0.144	–
θ_k	0.12261	m^3/m^3
van Genuchten-Mualem-Parameter		
α	0.0245	–
n	5.7945	–
θ_r	0.1226	–
τ	1.4220	–

Tabelle 6.1: Transportparameter des Säulenmaterials

6.2 Modellierung eines Lysimeters

Zur Untersuchung der Kopplung zwischen Wasser- und Gastransport wurden drei Szenarien eines 1.5 m hohen Lysimeters simuliert.

- Szenario I: Der Wassertransport wird mit der Richardsgleichung berechnet.
- Szenario II: Es wird gekoppelter Wasser- und Gastransport berechnet. Der Druck am oberen und unteren Rand wird konstant auf 1013 mbar gesetzt.

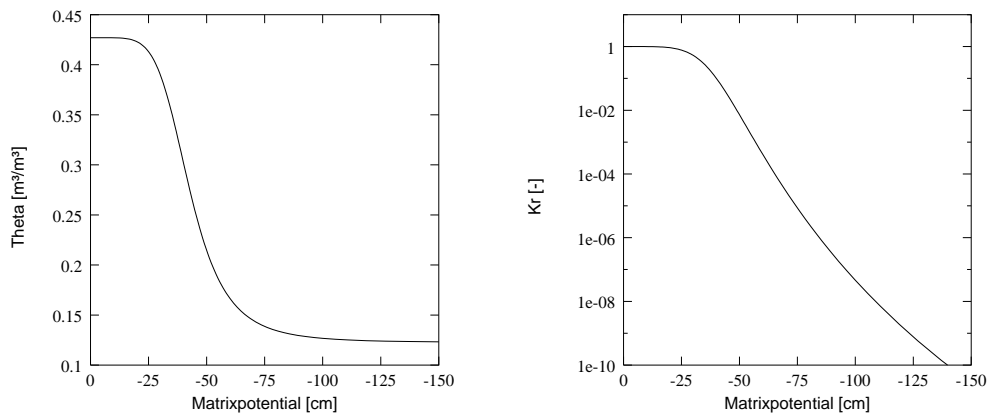
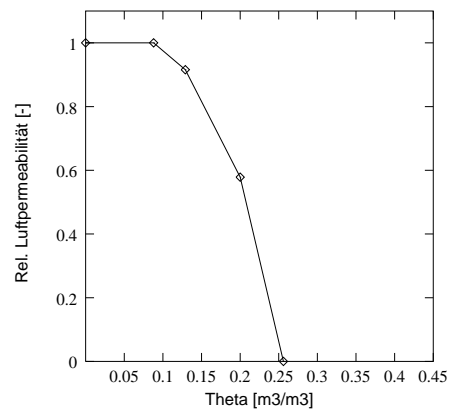


Abbildung 6.1: Wasserspannungskurve (links) und relative Wasserleitfähigkeit (rechts) des Säulenmaterials

Abbildung 6.2: Relative Luftpermeabilität des Säulenmaterials



- Szenario III: Wie Szenario II. Der Druck am oberen und unteren Rand wird jedoch aus einer Datei mit Meßwerten eingelesen.

Die Szenarien II und III wurden durch direkte Lösung des gekoppelten Gleichungssystems für Wasser- und Gastransport berechnet. Um die Richtigkeit der Lösung zu überprüfen, wurden die ersten 20 Tage auch mit iterativ gekoppeltem Wasser- und Gastransport gerechnet. Die Übereinstimmung zwischen beiden Varianten war hervorragend, die iterativ gekoppelte Variante war aber wesentlich langsamer.

Auf eine Simulation unter Berücksichtigung des Wärme- und Wasserdampftransportes wurde verzichtet. Die Berechnung läuft zwar stabil und mit guten Bilanzen, sie beansprucht jedoch extrem viel Rechenzeit. Für die Simulation von 10 Tagen benötigt ein Pentium 100 etwa 24 Stunden.

Als Anfangsbedingung wurde für alle drei Szenarien ein Matrixpotential von -80 cm, ein Luftdruck von 1013 mbar und eine Temperatur von 20° C verwendet. Am oberen Rand wurde eine Flußrate von 2 mm/d vorgegeben, am unteren Rand eine Lysimeterrandbedingung verwendet. Für alle Szenarien wurde ein Zeitraum von einem Jahr mit variabler Zeitschrittweite simuliert. Die Diskretisierung erfolgte in 1 cm-Schritten. Massenbilanzen und Rechenzeiten sind in Tabelle 6.2 zusammengefaßt, die wichtigsten Ergebnisse in Abbildung 6.3 bis 6.11 dargestellt.

	Szenario I	Szenario II	Szenario III
relative Massenbilanz			
Wasser	$+8.9 \cdot 10^{-11}$	$+1.3 \cdot 10^{-11}$	$+1.4 \cdot 10^{-10}$
CO ₂	-	$-2.4 \cdot 10^{-10}$	$-2.5 \cdot 10^{-9}$
O ₂	-	$-2.4 \cdot 10^{-10}$	$+1.0 \cdot 10^{-9}$
N ₂	-	$-2.4 \cdot 10^{-10}$	$+1.0 \cdot 10^{-9}$
Rechenzeit	4min	32min	11h 16min

Tabelle 6.2: Massenbilanzen und Rechenzeiten der verschiedenen Szenarien

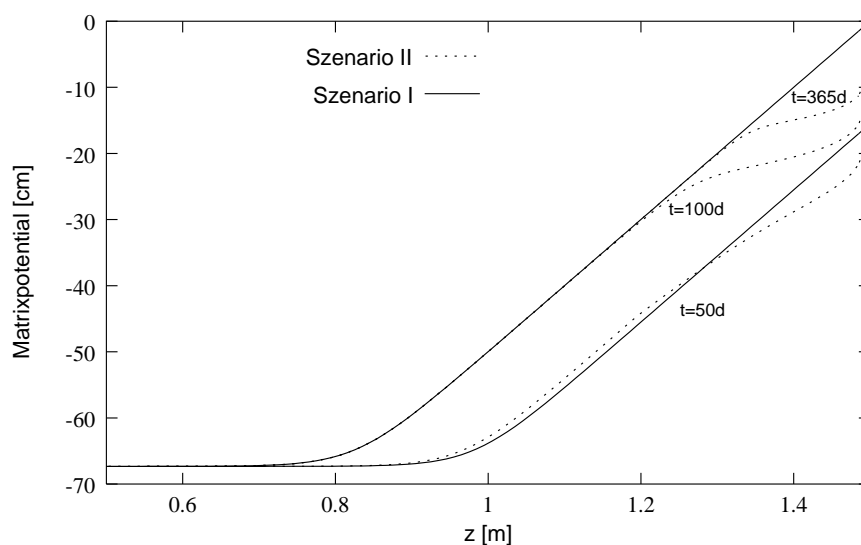


Abbildung 6.3: Entwicklung des Matrixpotentials im unteren Teil des Lysimeters bei Szenario I und II.

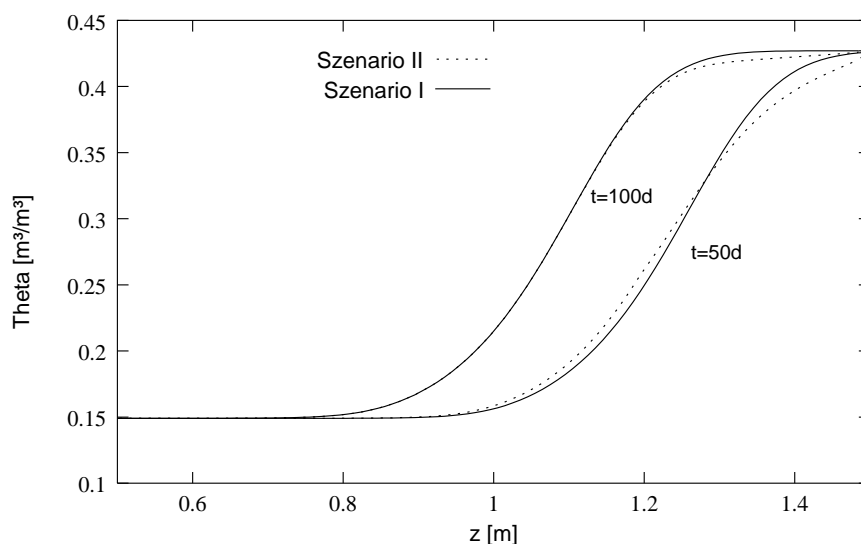


Abbildung 6.4: Verlauf des vol. Wassergehalt im unteren Teil des Lysimeters bei Szenario I und II.

Sobald bei Szenario II am unteren Rand ein Wassergehalt von 25.6 Prozent überschritten wird, sinkt die Luftpermeabilität auf Null und es kommt zu Lufteinschluß. Eine weitere Erhöhung des Wassergehaltes ist nur durch Kompression der Bodenluft zu erreichen, so daß es zu einem leichten Wasserstau kommt (Abbildung 6.3, 6.4). Wie Abbildung 6.6 zeigt, steigt der Druck in der Bodenluft an. Die eingeschlossene Luft kann durch Diffusion entweichen, der Luftdruck sinkt deshalb langsam wieder (Abbildung 6.5), gleichzeitig steigt das Matrixpotential an. Bei Szenario I ändert sich dagegen das Matrixpotential ab dem 100. Tag nicht mehr. Das Modell berechnet einen leicht erhöhten CO_2 -Gehalt der eingeschlossenen Luft. Dies läßt sich mit dem niedrigeren Diffusionskoeffizienten von CO_2 im Vergleich zu N_2 und O_2 erklären.

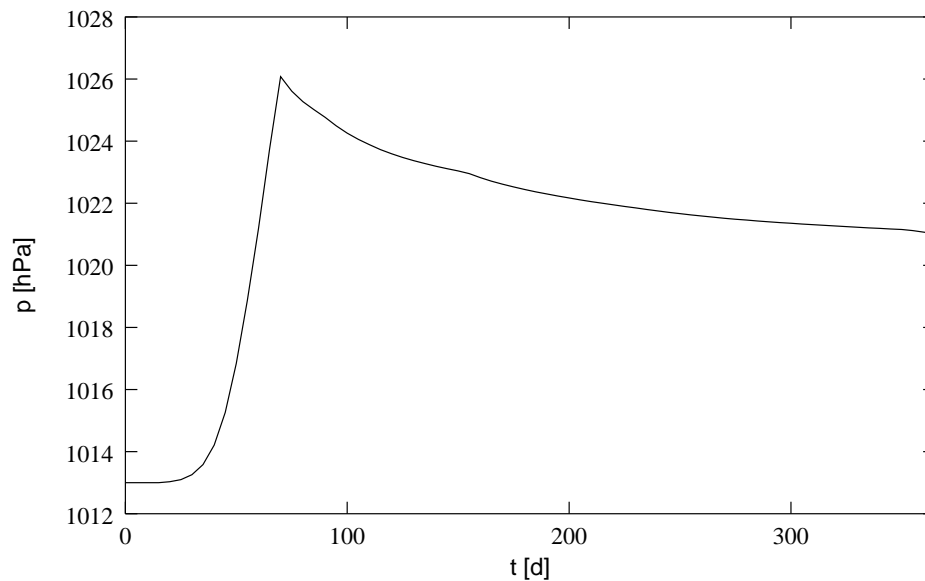


Abbildung 6.5: Entwicklung des Luftdrucks im untersten Volumenelement bei Szenario II.

Der Luftdruck im Lysimeter gleicht sich bei Szenario III sehr schnell dem Außendruck an, die Schwankungen werden jedoch etwas gedämpft. Es ist deutlich zu erkennen, daß der Luftdruck im untersten Volumenelement auch hier spätestens ab dem fünfzigsten Tag als Folge des Lufteinschlusses gegenüber der Umgebung erhöht ist (Abbildung 6.8).

Beim Vergleich der Sickerungsraten der drei Szenarien fällt auf, daß die Kopplung von Wasser- und Gastransport zu einem früheren Beginn der Sickerung und einem gedämpften Anstieg der Sickerungsraten auf den Maximalwert führt (Abbildung 6.9). Eine genauere Analyse der Ergebnisse zeigt, daß die Sickerung bei Szenario II und III um drei Tage früher beginnt, als bei Szenario I. Der Gastransport über den oberen Rand erfolgt nahezu ausschließlich konvektiv. Am unteren Rand fällt die Flußdichte von anfänglich sehr hohen Werten steil ab, sobald es zu Lufteinschluß kommt und der Gastransport deshalb nur noch diffusiv möglich ist (Abbildung 6.11).

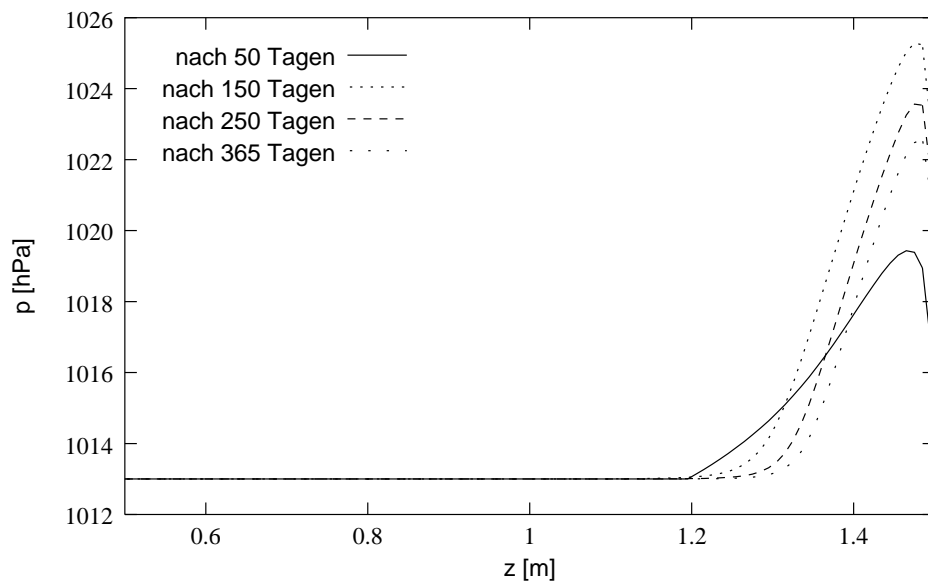


Abbildung 6.6: Druckverlauf im Profil bei Szenario II.

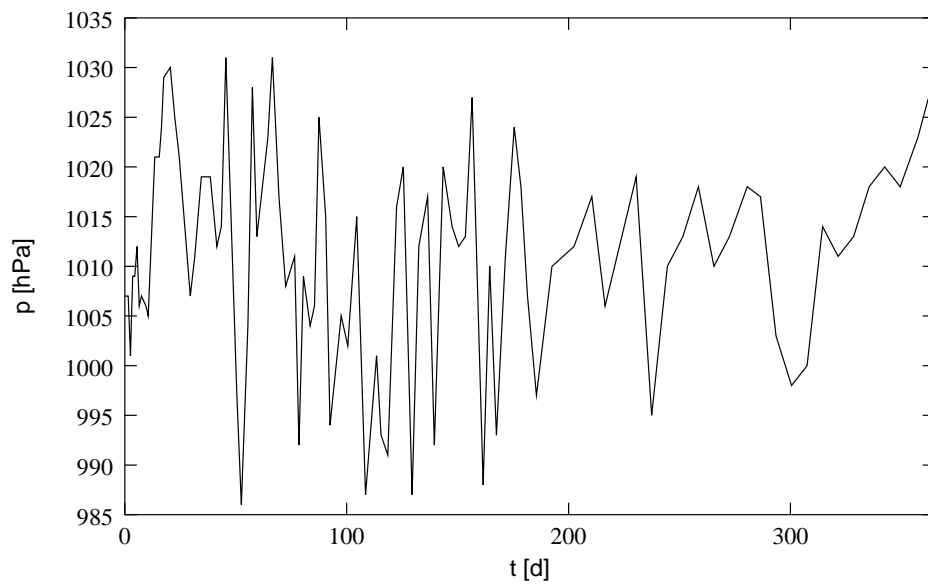


Abbildung 6.7: Vorgegebene Randbedingung für die Entwicklung des Luftdrucks in Szenario III.

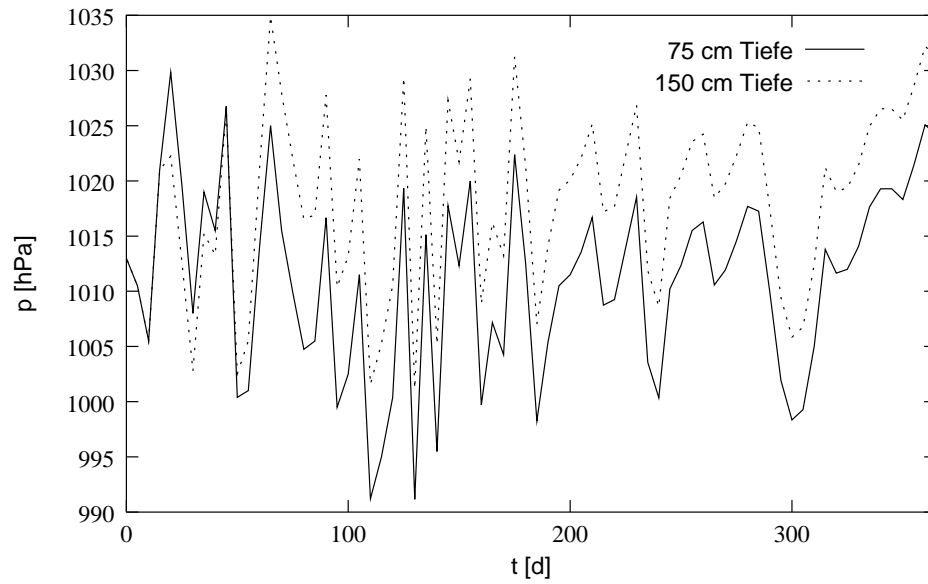


Abbildung 6.8: Entwicklung des Luftdrucks in der Mitte der Säule und im untersten Volumenelement bei Szenario III.

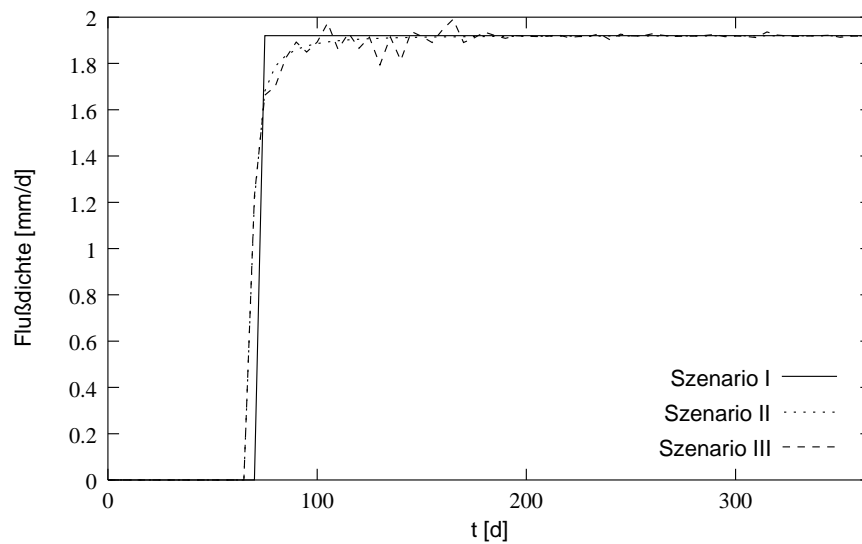


Abbildung 6.9: Vergleich der Sickerungsraten bei den unterschiedlichen Szenarien.

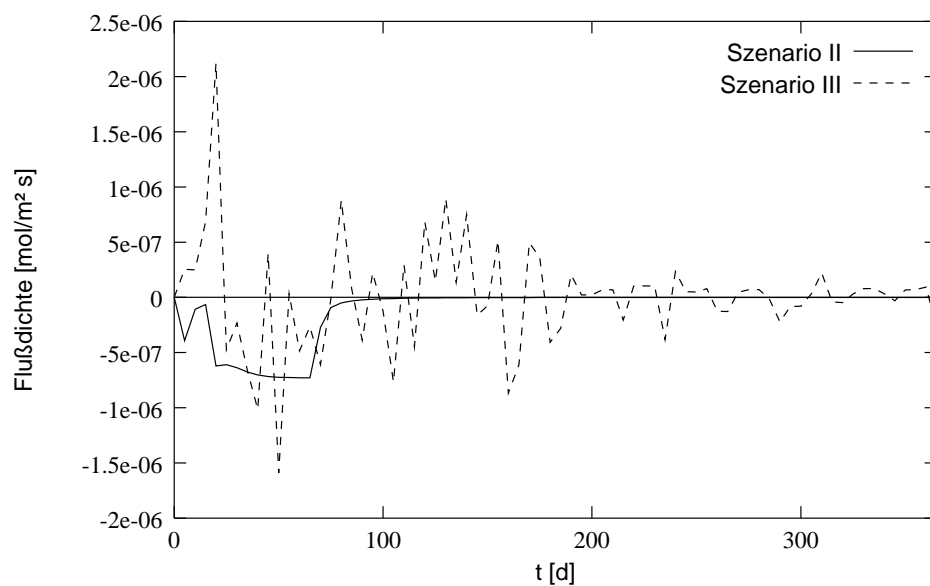


Abbildung 6.10: Gasflußdichte am oberen Rand bei Szenario II und III.

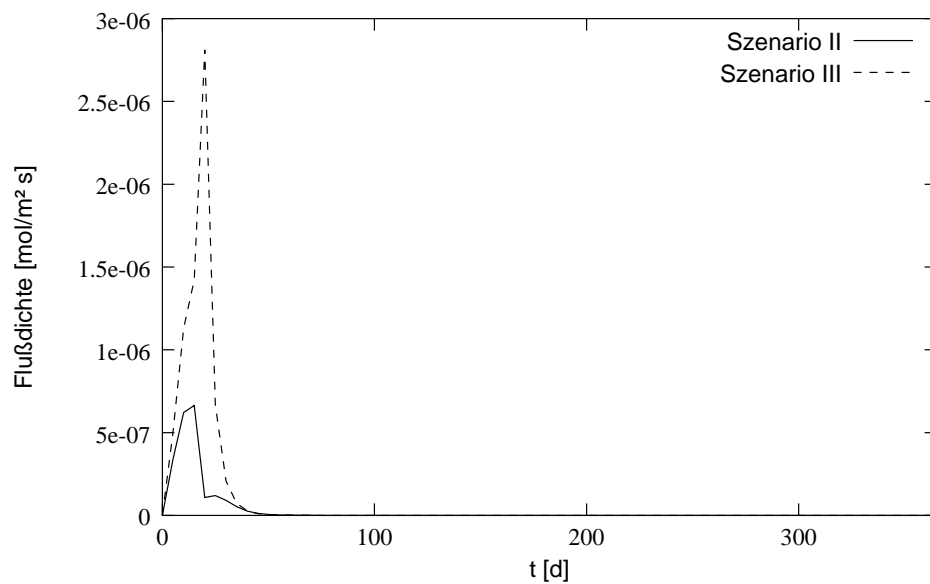


Abbildung 6.11: Gasflußdichte am unteren Rand bei Szenario II und III.

7 Zusammenfassung und Ausblick

Das Ziel dieser Arbeit war die Erstellung einer Modellvorstellung für den Transport von Wasser, Wärme und Gasen in einem porösen Medium und die Umsetzung dieser Modellvorstellung in ein Computerprogramm. Im folgenden soll das Erreichte kritisch untersucht und noch ausstehende Arbeiten aufgezeigt werden.

7.1 Bodenphysikalische Grundlagen

Bei der Entwicklung des physikalisch-chemischen Modelles zeigte sich, daß es Defizite bei der physikalischen Beschreibung der Prozesse gibt. Dies betrifft vor allem folgende Bereiche:

- Bei der Wasserspannungskurve und der Beziehung zwischen Luftpermeabilität und Wassergehalt treten Hystereseeffekte auf. Obwohl die Bedeutung dieser Effekte allgemein anerkannt ist, gibt es keine überzeugenden Ansätze zur Modellierung dieses Phänomens.
- Die Beschreibung des Gastransportes in Böden bedarf weiterer Untersuchungen. Es gibt zwar eine theoretisch gut fundierte Theorie, diese ist jedoch sehr kompliziert und auf reale dynamische Prozesse kaum anwendbar. Vereinfachte Näherungen wären wünschenswert.
- Das Zusammenspiel zwischen Wasser- und Gastransport sollte experimentell näher untersucht werden. Interessant wären insbesondere eine Klärung der Bedeutung des Transports von Luftblasen und gelösten Gasen und der Vorgänge beim Einschluß von Luft.
- Philip und de Vries (1957) haben zwar eine Möglichkeit aufgewiesen, die komplizierten Wechselwirkungen zwischen Wärmetransport und Wasserdampftransport grob zu quantifizieren, für ein dynamisches Modell ist diese Beschreibung jedoch unbefriedigend.

Die entwickelte Modellvorstellung stellt daher nur einen ersten Versuch dar. Sie kann jedoch als Gerüst für eine weitere Untersuchung des Zusammenwirkens der verschiedenen Teilprozesse verwendet werden.

7.2 Bewertung der Modellierung

Die Umsetzung der Modellvorstellung in ein Computerprogramm war nur teilweise erfolgreich. Eine ausbaufähige Programmstruktur wurde entwickelt und Funktionen zur numerischen Lösung aller Transportgleichungen implementiert. Eine Funktion zur Simulation

der Pyritoxidation wurde eingebaut, jedoch noch nicht getestet. Der Vergleich von Modellierungsergebnissen mit analytischen Lösungen führte zu sehr befriedigenden Ergebnissen. Die direkte Lösung des gekoppelten Wasser- und Gastransportes funktioniert zuverlässig und mit akzeptabler Geschwindigkeit. Bei der Anwendung an einem einfachen Beispiel lieferte das Modell plausible Ergebnisse.

Die Kopplung des Wasser-/Gastransportes mit dem Wärmetransport durch ein iteratives Verfahren stellte sich jedoch als extrem zeitaufwendig heraus. Eine Berechnung längerer Simulationszeiträume ist damit kaum möglich. Abhilfe könnte hier nur die direkte Lösung des gesamten gekoppelten Gleichungssystems unter Einbeziehung des Wärmetransportes schaffen. Weitere Testläufe und der Vergleich mit experimentellen Daten sind notwendig.

7.3 Erweiterungsmöglichkeiten

Bereits bei der Programmierung von MUSIC wurden Überlegungen für spätere mögliche Erweiterungen angestellt. Denkbar wären:

- Eine Verbesserung der Zeitschrittsteuerung, die zur Zeit noch relativ simpel realisiert ist. Besonders eine Berücksichtigung des Gastransportes wäre notwendig.
- Der Einbau einer adaptiven räumlichen Diskretisierung. Zuvor ist jedoch eine Entwicklung von Kriterien notwendig, die angeben, wann eine Verdichtung des Gitters bei dem gekoppelten System notwendig ist.
- Beim Wasser- und Gastransport könnten Hysteresemodelle eingebaut werden.
- Die Ankopplung oder der Einbau eines Lösungstransportmodelles.
- Mehrere Bodensäulen könnten über Quell-/Senkenterme zu einer Art Polypeton verknüpft werden.

7.4 Aussagefähigkeit und Anwendungsmöglichkeiten

Alle bodenphysikalischen Transportmodelle benötigen eine Vielzahl von Transportparametern. Bei MUSIC reicht dies von der Wasserspannungskurve bis zur Dicke der laminaren Grenzschicht zur Atmosphäre. Selten sind diese Parameter durch Messungen hinreichend genau bestimmbar. Bei einigen ist dies sogar aus theoretischen Gründen unmöglich, z.B. bei der Wasserspannungskurve aufgrund der Hysterese. Die meisten Parameter werden daher in der Regel durch Kalibrierung des Modells an Meßdaten ermittelt. Dabei stellt sich jedoch die Frage nach der Eindeutigkeit dieser Parameterbestimmung.

Ein weiteres Problem stellt die Formulierung der Randbedingungen dar. Die Wechselwirkungen an den Rändern natürlicher Systeme sind komplizierter, als dies mathematisch darstellbar ist. Auch bei Laborsäulen ist es schwierig den Rand so zu gestalten, daß eine Modellierung möglich ist. Zudem erfüllen weder Laborsäulen noch natürliche Systeme die Forderung nach Homogenität zumindest innerhalb eines Horizontes. Beim Befüllen der Säulen entstehen Schichtungen und bei natürlichen Böden gibt es Wurzelbahnen, Regenwurmgänge und ähnliches mehr. Dies führt zur Ausbildung bevorzugter Fließpfade.

All diese Probleme machen es meiner Meinung nach zur Zeit unmöglich, mit Prozeßmodellen Prognosen zu treffen. Dies ist aber kein Grund, prinzipiell auf ihre Erstellung

zu verzichten. Prozeßmodelle können dazu dienen, die vorhandenen Vorstellungen über Transportmechanismen in Böden zu integrieren und die Folgen der Wechselwirkungen zwischen Prozessen zu untersuchen. Auch zur Planung von Experimenten können sie gute Dienste leisten. Außerdem können sie zu Schulungszwecken verwendet werden, um die in Böden ablaufenden Prozesse zumindest qualitativ zu veranschaulichen.

Für MUSIC sind, neben der Verwendung zur Simulation der Transportprozesse in Abraum aus dem Braunkohletagebau, eine Vielzahl von Anwendungsbereichen denkbar, z.B. die Abschätzung des Beitrags des Wasserdampftransportes zum Gesamtwärmetransport oder die Abschätzung der Bedeutung des Wasserdampftransportes im Vergleich zum Transport flüssigen Wassers bei der Eislinsenbildung in Permafrostböden.

Literaturverzeichnis

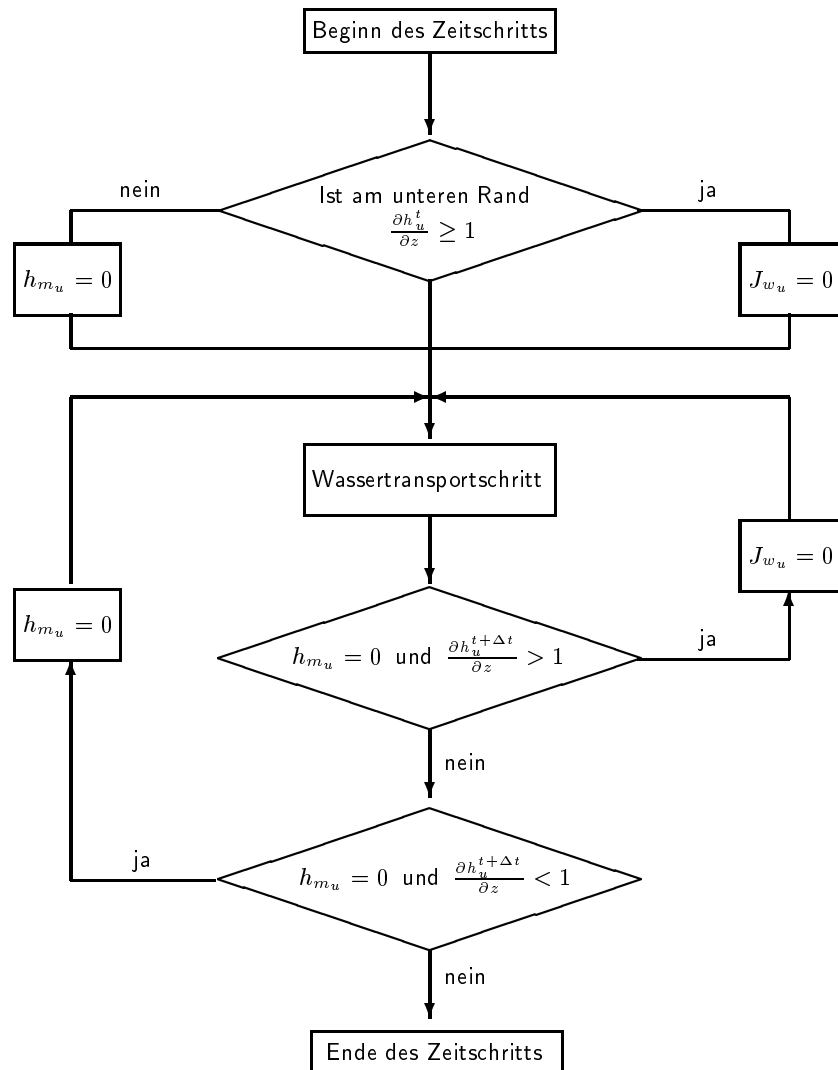
- Altfelder, S. 1994. Numerische Simulation des Wasser- und Stofftransportes in der ungesättigten Bodenzone eines Lysimeters. Bericht. Ruhr-Universität Bochum, Stadtwerke Mönchengladbach GmbH.
- Atkins, P. W. 1990. Physikalische Chemie. 1. Auflage. VCH Verlagsgesellschaft mbH.
- Baehr, A. L., und R. J. Baker. 1995. Use of a reactive gas transport model to determine rates of hydrocarbon biodegradation in unsaturated porous media. *Water Resour. Res.* 31:2877–2882.
- Blom, T. J. M., und S. R. Troelstra. 1972. A simulation model of the combined transport of water and heat produced by a thermal gradient in porous media. Report 6. dept. of Theoretical Production Ecology, Agricultural University Wageningen.
- Celia, M. A., E. T. Boutoulas, und R. L. Zarba. 1990. A general mass-conservative numerical solution for the unsaturated flow equation. *Water Resour. Res.* 26:1483–1496.
- Cunningham, R. E., und R. J. J. Williams. 1980. *Diffusion in Gases and Porous Media*. Plenum Press, New York.
- de Marsily, G. 1986. *Quantitative Hydrogeology*. Academic Press, Inc.
- de Vries, D. A. 1958. Simultaneous transfer of heat and moisture in porous media. *Trans. Amer. Geophys. Union* 39:909–916.
- De Vries, D. A. 1963. Thermal properties of soils. p. 210–235. *In* W. R. van Wijk (ed.) *Physics of Plant Environment*. North Holland, Amsterdam.
- Durner, W. 1991. Vorhersage der hydraulischen Leitfähigkeit strukturierter Böden. *Bayreuther Bodenkundliche Berichte*, 20.
- Dury, O., und R. Schulin. 1996. Dependence of unsaturated flow and transport properties on the solute surface tension - laboratory experiments and modeling. *In* W. Durner, H. J., und M. Cislerova. (ed.) *European Workshop on Advanced Methods to Determine Hydraulic Properties of Soils*. Department of Hydrology, University of Bayreuth.
- Findikakis, A. N., und J. O. Leckie. 1979. Numerical simulation of gas flow in sanitary landfills. *Journal of the Environmental Engineering Division* 105:927–945.
- Freijer, J. I., und P. A. Leffelaar. 1996. Adapted fick's law applied to soil respiration. *Water Resour. Res.* 32:791–800.

- Haubold, M. 1994. Coupled transports of gases, water and heat in unsaturated soil. p. 115–119. BITÖK-Forschungsbericht. Universität Bayreuth, Bayreuther Forum Ökologie 15.
- Haubold, M., und B. Huwe. 1995. Messung und Modellierung des Gasaustauschs zwischen Waldboden und Atmosphäre. Geotechnica-Fachbuch.
- Haverkamp, R., M. Vauclin, J. Touma, P. J. Wierenga, und G. Vachaud. 1977. A comparison of numerical simulation models for one-dimensional infiltration. *Soil Sci. Soc. Am. J.* 41:285–294.
- Hornung, U., und W. Messing. 1984. Poröse Medien - Methoden und Simulation. Beiträge zur Hydrologie, Kirchzarten.
- Huwe, B. 1992. WHNSIM Version 2 - Ein Modell zur Simulation des Wasser-, Wärme- und Stickstoffhaushalts von Standorten mit unterschiedlicher Nutzung. Abteilung Bodenphysik. Bayreuth.
- Jasper, J. J. 1972. The surface tension of pure liquid compounds. *J. Phys. Chem. Ref. Data* 1:841–1009.
- Jaynes, D. B., und A. S. Rogowski. 1983. Applicability of fick's law to gas diffusion. *Soil Sci. Soc. Am. J.* 47:425–430.
- Jin, Y., und W. A. Jury. 1996. Characterizing the dependence of gas diffusion coefficient on soil properties. *Soil Sci. Soc. Am. J.* 60:66–71.
- Jury, W. A., W. R. Gardner, und W. H. Gardner. 1991. *Soil physics*. 5th ed. John Wiley & Sons, New York.
- Kutilek, M., und D. R. Nielsen. 1994. *Soil hydrology*. Catena-Verlag, Cremlingen-Destedt.
- Leßmöllmann, M. 1994. Bestimmung der Oxidationsraten von pyrithaltigen Sedimenten. Diplomarbeit. Ruhr-Universität Bochum.
- Lide, D. R. (ed.) 1995. *CRC Handbook of Chemistry and Physics*. 76th ed. CRC Press.
- Lindgren, M., und A. Rasmuson. 1994. Evaluation of water and gas transport in layered soil covers for coal ash deposits: 2D-calculations and impact of a weak zone. *Water, Air, and Soil Pollut.* 77:97–114.
- Marrero, T. R., und E. A. Mason. 1972. Gaseous diffusion coefficients. *J. Phys. Chem. Ref. Data* 1:3–118.
- Mason, E. A., A. P. Malinauskas, und R. B. Evans III. 1967. Flow and diffusion of gases in porous media. *J. Chem. Phys.* 46:3199–3216.
- Milly, P. C. 1984. A linear analysis of thermal effects on evaporation from soil. *Water Resour. Res.* 20:1075–1085.
- Ott, J. 1996. Parameter des Gastransports in natürlichen und künstlichen Böden. Diplomarbeit. Universität Bayreuth.

- Philip, J. R., und D. A. de Vries. 1957. Moisture movement in porous materials under temperature gradients. *Trans. Amer. Geophys. Union* 38:222–232.
- Potsch, M. 1996. Messungen der Luftpermeabilität zur flächenhaften Erfassung von Verdichtungserscheinungen - Eignung und Fallbeispiel. Diplomarbeit. Universität Bayreuth.
- Press, W. H., S. A. Teukolsky, W. T. Vetterling, und B. P. Flannery. 1992. *Numerical recipes in C*. 2nd ed. Cambridge University Press.
- Schachtschabel, P., H.-P. Blume, G. Brümmer, K.-H. Harge, und U. Schwertmann. 1992. *Lehrbuch der Bodenkunde*. 13. Auflage. Enke.
- Schulz, J. 1995. Aufbau von Säulenversuchen zur Untersuchung der Pyritoxidation in Braunkohlentagebausedimenten. Diplomarbeit. Ruhr-Universität Bochum, Universität/GH Essen.
- Thorstenson, D. C., und D. W. Pollock. 1989a. Gas transport in unsaturated porous media: The adequacy of fick's law. *Reviews Geophysics* 27:61–78.
- Thorstenson, D. C., und D. W. Pollock. 1989b. Gas transport in unsaturated zones: Multicomponent systems and the adequacy of fick's laws. *Water Resour. Res.* 25:477–507.
- van Genuchten, M. T., und W. J. Alves. 1982. Analytical solutions of the one-dimensional convective-dispersive solute transport equation. U.S. Department of Agriculture, Technical Bulletin No. 1661.
- VDI (ed.) 1974. *VDI-Wärmeatlas*. 2. Auflage. VDI-Verlag.
- Weischet, W. 1991. *Einführung in die Allgemeine Klimatologie*. 5. Auflage. Teubner Studienbücher.
- Wisotzky, F. 1994. Untersuchungen zur Pyritoxidation in Sedimenten des Rheinischen Braunkohlenreviers und deren Auswirkungen auf die Chemie des Grundwassers. Besondere Mitteilung zum Deutschen Gewässerkundlichen Jahrbuch Nr. 58. Landesumweltamt Nordrhein-Westfalen, Essen.
- Zurmühl, T. 1994. Validierung konvektiv-dispersiver Modelle zur Berechnung des instationären Stofftransports in ungestörten Bodensäulen. *Bayreuther Bodenkundliche Berichte*, 36.

A. Lysimeter-Randbedingung

Der untere Rand eines Lysimeters hat ganz besondere Eigenschaften. Da die Kiesfüllung am unteren Rand der Säule nicht in der Lage ist, Wasser gegen die Schwerkraft zu halten und ein Matrixpotential aufzubauen, ist ein Rückfluß von Wasser in die Säule nicht möglich. Einen Fluß aus der Säule heraus gibt es, falls $\nabla H_u = \frac{\partial(h_{m_u} + h_{a_u})}{\partial z} - 1 < 0$. Altfelder (1994) verwendet den folgenden Algorithmus um den unteren Rand eines Lysimeters zu simulieren ($h_u = h_{m_u} + h_{a_u}$). Er führt auch Gründe an, warum es zu keinen Endlosschleifen bei Verwendung dieses Verfahrens kommt. Dies bestätigt sich auch in der Praxis.



B. Adaptive Spline-Approximation

Die Funktion $f(x)$ soll im Intervall $(a;b)$ durch eine stückweise lineare Funktion $s_i(x)$ mit $i=n$ Stützstellen approximiert werden. Eine gute Approximation erhält man mit folgendem Verfahren (aus der Vorlesung „Numerische Mathematik für Naturwissenschaftler“ von Prof. Leugering an der Universität Bayreuth):

Angenommen $\text{MAX}(f,t[i-1],t[i],c[i],d[i])$ ist eine Prozedur, die eine Stelle $c[i]$ zurückliefert, an der die Differenz zwischen $f(x)$ und der linearen Interpolation zwischen $y[i-1] = f(t[i-1])$ und $y[i] = f(t[i])$ im Intervall $(t[i-1];t[i])$ den maximalen Wert $d[i]$ annimmt. Dann führt folgender Algorithmus zum Ziel:

```
{
  t[0] = a;
  t[1] = b;
  y[0] = f(t[0]);
  y[1] = f(t[1]);
  MAX(f,t[0],t[1],c[1],d[1]);
  for (k=1;k<n;k++)
  {
    dummy = 0.;
    for (j=1;j<(k+1);j++)
    {
      if (d[j] > dummy)
        i = j;
    }
    for(j=k;j>i;j--)
    {
      t[j+1] = t[j];
      y[j+1] = y[j];
      d[j+1] = d[j];
      c[j+1] = c[j];
    }
    t[i+1] = t[i];
    y[i+1] = y[i];
    t[i] = c[i];
    y[i] = f(c[i]);
    MAX(f,t[i-1],t[i],c[i],d[i]);
    MAX(f,t[i],t[i+1],c[i+1],d[i+1]);
  }
}
```

Eine Funktion MAX lässt sich einfach realisieren. Man berechnet die Differenz zwischen $f(x)$ und der linearen Interpolation zwischen $y[i-1]$ und $y[i]$ für eine bestimmte Anzahl Punkte (z.B. 10) im Intervall $(t[i-1];t[i])$ und akzeptiert die maximale Differenz an einem dieser Punkte als maximale Differenz im Intervall.

```
void MAX(f,alpha,beta,c,d)
{
    k = 11;
    h = (beta - alpha)/k;
    for (i=0;i<(k+1);i++)
        z[i] = f(alpha + i*h);
    for (i=1;i<k;i++)
        z[i] = fabs(z[i] - (i*z[k] + (k-i)*z[0])/k);
        // Betrag der Differenz zwischen Funktionswert und linearer
        // Interpolation
    d = 0.;
    for (i=1;i<k;i++)
    {
        if (z[i] > d)
        {
            d = z[i];
            c = alpha + i*h;
        }
    }
}
```

C. Eingabe-Dateien

Nachfolgend ist ein kompletter Beispielsatz Eingabedateien wiedergegeben. Die Dateinamen sind nicht festgelegt, sondern können frei gewählt werden. Die Simulation wird dann mit

```
music -f <Haupteingabedatei>
```

gestartet. Ist kein Dateiname mit `-f` angegeben wird versucht `'Music.dat'` als Haupteingabedatei zu verwenden.

Haupteingabedatei 'Music.dat'

```
% Haupteingabedatei
% Zu berechnenden Transportfunktionen (Bit 1: Wassertransport,
% Bit 2: Waermetransport, Bit 3: Gastransport, Bit 4: Wasserdampftransport,
% Bit 5: Pyritoxidation, Bit 6: Wasser- und Gastransport direkt gekoppelt)
47
% Datei mit den Daten zur Zeitsteuerung
Music.time
% Datei mit den Pedonaten
Music.pedon
```

Zeit-Eingabedatei 'Music.time'

```
% Zeitsteuerung
% Zeit beim Start der Simulation [d]
0.0
% Ende der Simulation [d]
1.0
% Startzeitschritt [d]
0.000001
% Minimaler Zeitschritt [d]
0.000001
% Maximaler Zeitschritt [d]
0.1
% Nach wievielen Zeitschritten soll auf den Bildschirm ausgegeben werden?
5
% Wie soll das Profil ausgegeben werden
% (0=nicht, 1=Alle .. Tage, 2=Nach einer einzulesenden Tabelle)
1
```

```
% Intervall in dem das Profil ausgegeben wird [d]
0.1
% Wie soll in bestimmten Tiefen ausgegeben werden (0=nicht, 1=Alle ..Tage,
% 2=Nach einer einzulesenden Tabelle, 3=nach jedem Zeitschritt)
1
% Intervall in dem die Tiefenstufen und Randfluesse ausgegeben werden [d]
0.001
```

Pedondaten-Eingabedatei 'Music.Pedon'

```
% Pedondaten
% Datei mit den Wetterdaten
Music.weather
% Anzahl der Horizonte
1
% Datei mit dem Gittergeometriedaten
Music.geom
% Datei mit den Daten des ersten Horizonts
Music.hori
% Evtl. Datei des zweiten Horizonts...
% Datei mit den Anfangsbedingungen
Music.startup
% Transportkoeffizient fuer den lateralen Energieverlust
0.0
% Dicke der laminaren Grenzschicht am oberen Rand [cm]
1.0
% Dicke der laminaren Grenzschicht am unteren Rand [cm]
1.0
% Konvergenzkriterium fuer die maximale Aenderung des Wassergehaltes
% beim Newton-Verfahren [m3/m3]
1.0e-14
% Konvergenzkriterium fuer die maximale Aenderung der Molendichte beim
% Newton-Verfahren [mol/m3]
5.0e-11
% Maximale Iterationszahl beim Newton-Verfahren
50
% Maximale Wassergehaltsaenderung in einem Zeitschritt [m3/m3]
1.0e-5
% Maximales Massenbilanzdefizit fuer Wasser in einem Zeitschritt [-]
1.0e-9
% Konvergenzkriterium fuer die maximale Aenderung des Druckes
% bei iterativer Kopplung [Pa]
1e-9
% Konvergenzkriterium fuer die maximale Aenderung des Wassergehaltes
% bei iterativer Kopplung [m3/m3]
1e-12
```

C. Eingabe-Dateien

```
% Konvergenzkriterium fuer die maximale Aenderung des Phasenwechsels
% bei iterativer Kopplung [mol/m^3]
3e-11
% Konvergenzkriterium fuer die maximale Aenderung des Phasenwechsels
% bei iterativer Kopplung [K]
1e-12
% Maximale Iterationszahl bei der iterativen Kopplung
25
% Datei in die die Profile ausgegeben werden sollen
Music.erg.profil
% Intervall fuer die Profilausgabe [cm]
0.0
% Soll in bestimmten Tiefen ausgegeben werden? (0=nein,1=ja)
1
% Zahl der Ausgabediefen
3
% Datei in die die Fluesse ueber die Raender ausgegeben werden
Music.erg.flow
% Ausgabediefe  Ausgabedatei
% [cm]
0.0001      Music.erg.0
5.0         Music.erg.5
10.0        Music.erg.10
```

Horizontdaten-Eingabedatei 'Music.hori'

```
% Horizontdaten
% K_s [m/s]
3.82e-4
% Porositaet [m^3/m^3]
0.427
% Trockenraumdichte [g/cm3]
1.5
% Schalter Wasser-Transportparameter (1=Tabelle einlesen, 2=van Genuchten
% Parameter)
2
% Anzahl Diskretisierungsintervalle fuer die Wasser-Transportparameter-
% Interpolationstabelle
100
% VG-Theta_r [m^3/m^3]
0.1226
% VG-alpha [-]
0.0245
% VG-n [-]
5.7945
```

```

% VG-Tau [-] (falls unbekannt => Tau = 0.5)
1.4220
% Schalter Waerme-Transportparameter (1=Tabelle einlesen, 2=Parameter fuer
% Abschaetzung nach de Vries)
2
% Anzahl Diskretisierungsintervalle fuer die Waermetransportparameter-
% Interpolationstabelle
100
% vol. Wassergehalt, ab dem Wasser nicht mehr als kontinuierliches Medium
% betrachtet werden kann (nach de Vries ca. 0.03 fuer Sand, 0.05 bis 0.10
% fuer feintexturierte Boeden) [m^3/m^3]
0.03
% volumetrischer Quarzanteil [m^3/m^3]
0.89
% volumetrischer Anteil sonstiger Mineralien [m^3/m^3]
0.11
% volumetrischer Anteil organischer Substanz [m^3/m^3]
0.0
% Formfaktor fuer die Bodenteilchen (z.B. 0.125)
0.144
% Feldkapazitaet [m^3/m^3]
0.13
% Anzahl der Werte in der Luftpermeabilitaetstabelle
6
% Tabelle fuer die Luftpermeabilitaet
% Theta[m^3/m^3]   Luftpermeabilitaet [m^2]
0.0                8.3e-12
0.088              8.3e-12
0.129              7.6e-12
0.20               4.8e-12
0.256              0.0
0.427              0.0

```

Randbedingungs-Eingabedatei 'Music.weather'

```

% Randbedingungen
% Typ der oberen Randbedingung fuer den Wassertransport
% (0: Flussrandbedingung, 1: Matrixpotential gegeben)
0
% Typ der unteren Randbedingung fuer den Wassertransport
% (0: Flussrandbedingung, 1: Matrixpotential gegeben,
% 2: Lysimeterrandbedingung)
2
% Typ der unteren Randbedingung fuer den Gastransport
% (0: Nullflussbedingung, 1: Gaszusammensetzung gegeben)
0

```

C. Eingabe-Dateien

```
% Anzahl verschiedener Randbedingungen
2
% Zeit Niederschlag Temperatur (Druck Molenbrueche rH)
%
% oben unten oben
% [d] [mm/d] [C] [C] [hPa] [-] [-] [-] [%]
0.0 1.0 20.0 20.0 1013 0.0003 0.2097 0.7900 50
2.0 1.0 20.0 20.0 1013 0.0003 0.2097 0.7900 50
```

Gittergeometrie-Eingabedatei 'Music.geom'

```
% Gittergeometrie
% Anzahl der Volumenelemente im ersten Horizont
10
% Unterer Rand der Elementarvolumen [cm]
1.0
2.0
3.0
4.0
5.0
6.0
7.0
8.0
9.0
10.0
```

Anfangsbedingungen-Eingabedatei 'Music.startup'

```
% Anfangsbedingungen
% Matrixpot Temperatur Druck Molenbrueche
% [cm] [C] [hPa] [-] [-] [-]
-20.0 20.0 1013 0.0003 0.2097 0.7900
-19.0 20.0 1013 0.0003 0.2097 0.7900
-18.0 20.0 1013 0.0003 0.2097 0.7900
-17.0 20.0 1013 0.0003 0.2097 0.7900
-16.0 20.0 1013 0.0003 0.2097 0.7900
-15.0 20.0 1013 0.0003 0.2097 0.7900
-14.0 20.0 1013 0.0003 0.2097 0.7900
-13.0 20.0 1013 0.0003 0.2097 0.7900
-12.0 20.0 1013 0.0003 0.2097 0.7900
-11.0 20.0 1013 0.0003 0.2097 0.7900
```

D. Hydraulische Parameter der Beispielböden

D.1. Yolo Light Clay

$$K_w = K_s \cdot \frac{A}{A + |h_m|^\beta}; \quad K_s = 4.428 \cdot 10^{-2} \text{ cm/h}, \quad A = 124.6, \quad \beta = 1.77 \quad (\text{D.1})$$
$$\theta_w = \frac{\alpha(\theta_s - \theta_r)}{\alpha + (\ln |h_m|)^\beta} + \theta_r; \quad \left. \begin{array}{l} \theta_s = 0.495, \quad \theta_r = 0.124, \\ \alpha = 739, \quad \beta = 4 \end{array} \right\} \begin{array}{l} \text{für } h_m < -1 \text{ cm} \\ \text{für } h_m \geq -1 \text{ cm} \end{array}$$
$$\theta = \theta_s \quad \text{für } h_m \geq -1 \text{ cm}$$

D.2. Sand

$$K_w = K_s \cdot \frac{A}{A + |h_m|^\beta}; \quad K_s = 34 \text{ cm/h}, \quad A = 1.175 \cdot 10^6, \quad \beta = 4.74 \quad (\text{D.2})$$
$$\theta_w = \frac{\alpha(\theta_s - \theta_r)}{\alpha + |h_m|^\beta} + \theta_r; \quad \theta_s = 0.287, \quad \theta_r = 0.0075, \quad \alpha = 1.611 \cdot 10^6, \quad \beta = 3.96$$

E. Visualisierung der Ergebnisse mit 'gnuplot'

Das frei verfügbare Programm **gnuplot** ist ein ideales Hilfsmittel zur Visualisierung von Modellierungsergebnissen. Für diese Arbeit wurde **gnuplot** in der Version 3.6 verwendet, die zwar nur als Beta-Version verfügbar ist, aber sehr stabil arbeitet. Die letzte Beta-Version ist auf der CD-ROM zu dieser Arbeit enthalten.

Der Befehl zum Erstellen eines Plots mit **gnuplot** lautet:

```
plot [xmin:xmax] [ymin:ymax] "Filename" index i using a:b with lines
```

Mit **index** kann dabei ein bestimmter Datensatz aus einer Datei ausgewählt werden. Bei MUSIC sind die Ausgabedateien, in die Profile ausgegeben werden, so gestaltet, daß jeder Zeitpunkt für **gnuplot** einen eigenen Datensatz darstellt. **a** und **b** sind die Spalten der Eingabedatei, die gegeneinander geplotet werden sollen. Die Option **with lines** sorgt dafür, daß die Datenpunkte mit Geraden verbunden werden.

Der **plot**-Befehl bietet noch weitere Möglichkeiten. Nähere Informationen finden sich in der ausführlichen Online-Dokumentation zu **gnuplot**.

F. Anmerkungen zum Quellcode

Der Source-Code von MUSIC ist auf mehrere Dateien verteilt. Die Klassen-Definitionen sind in Dateien mit der Endung `.hh` enthalten, die Definitionen der Methoden in Dateien mit der Endung `.cc` und Inline-Funktionen in Dateien mit der Endung `.icc`. Die Dateinamen stimmen weitgehend mit den Klassennamen überein, die in den Kapitel 4 erwähnt werden. Die Klassen zur Lösung linearer Gleichungssysteme befinden sich im Verzeichnis `equation`.

Im Verzeichnis `test` sind die Eingabe- und Ergebnisdateien, die für die Beispiel- und Testberechnungen in dieser Arbeit verwendet wurden. Die Dateien in den Unterverzeichnissen `diffgas` und `waerme` sind jedoch nur nach Änderungen im Quellcode lauffähig. Die notwendigen Änderungen sind in `README`-Dateien beschrieben.

G. Inhalt der CD-ROM

Im Verzeichnis `bin` befinden sich lauffähige Versionen von `MUSIC` und `gnuplot` für die Betriebssysteme Linux und DIGITAL Unix. Im Verzeichnis `src` befinden sich tar-Archive mit dem Sourcecode von `MUSIC` und der letzten Beta-Version von `gnuplot`. Der komplette Sourcecode von `MUSIC` befindet sich auch in ungepackter Version im Verzeichnis `music`. Allerdings mußten hier die Dateinamen auf die in DOS üblichen 8 Buchstaben verkürzt werden. Eine Postscript-Version dieser Diplomarbeit befindet sich im Verzeichnis `diplarb`, allerdings sind darin nicht alle Abbildungen enthalten.

Ich versichere, daß ich diese Arbeit selbstständig verfaßt und keine anderen als die angegebenen Hilfsmittel und Quellen verwendet habe.

Bayreuth, 7. Oktober 1996

(Olaf Ippisch)