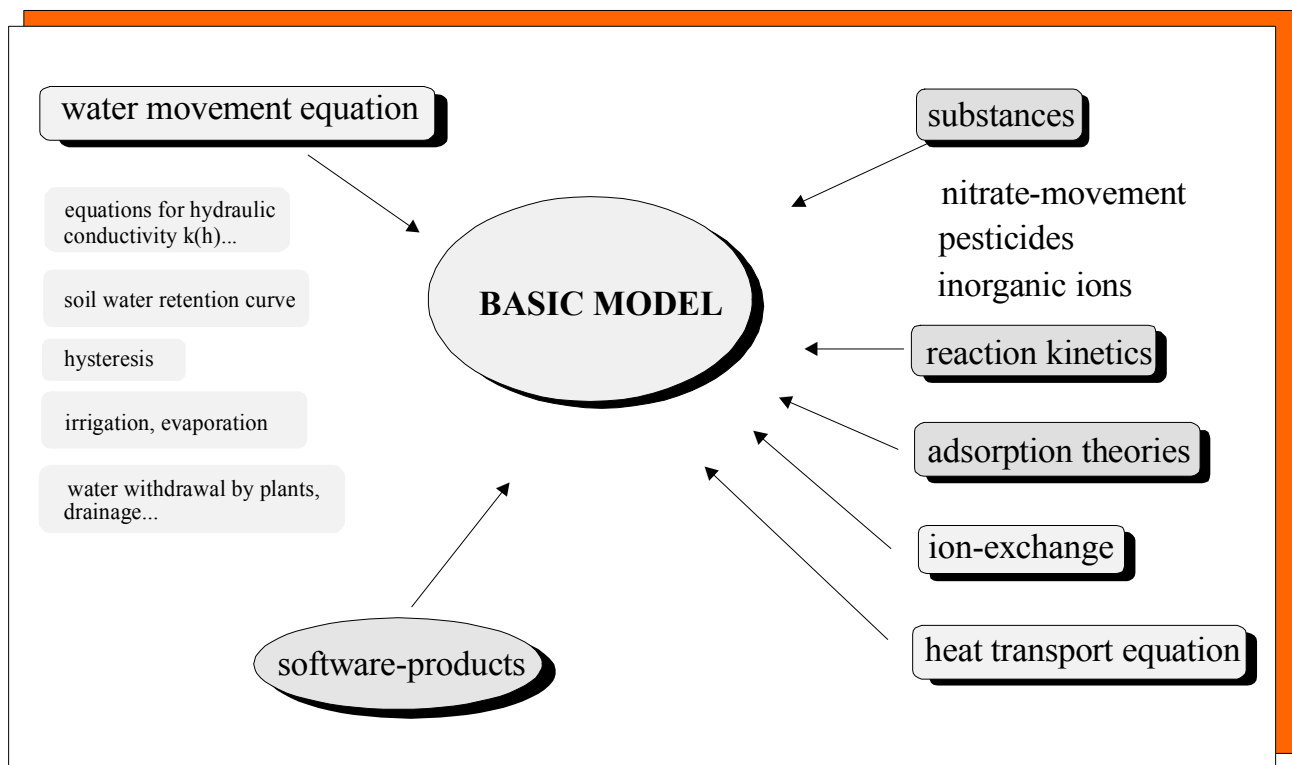


Bodenphysik (Vertiefung)



G. Kammerer
W. Loiskandl

SS 2005

INHALTSVERZEICHNIS

INHALTSVERZEICHNIS	2
ABBILDUNGSVERZEICHNIS	6
TABELLENVERZEICHNIS	8
ALLGEMEINES ZUR LEHRVERANSTALTUNG	9
Allgemeine Angaben	9
Lehrziel	10
Lehrinhalt	10
Verwandte Lehrveranstaltungen des Instituts	10
Empfohlene Literatur	10
1. GRUNDLAGEN DER WASSERBEWEGUNG IM BODEN	11
1.1 Kontinuumsbeschreibung des Bodens	11
1.1.1 Porenbegriffe	13
1.1.2 Bodengefüge	14
1.2 Einteilung des Wassers im Boden	15
1.3 Kapillarität im Boden	15
1.4 Ergänzungen zu den Potenzialen	19
1.4.1 Potenzialverläufe in Bodensäulen bei verschiedenen stationären Randbedingungen ..	22
1.4.2 Matrixpotenzial	29
1.4.3 Osmotisches Potenzial	32
1.4.4 Potenzial des Wasserdampfes	39
1.4.5 Hygroskopizität – Adsorptionswasser	45
2. RETENTIONS-KURVE UND KAPILLARES LEITVERMÖGEN	47
2.1 Allgemeines zur Wasseranteil-Matrixpotenzial-Beziehung	47
2.1.1 Effektive Sättigung S_e	49
2.2 van-Genuchten-Kurve	49
2.2.1 Funktionsgleichung	50
2.2.2 Umkehrfunktion des van-Genuchten-Modells	51
2.2.3 Erste Ableitung der van-Genuchten-Kurve	51
2.3 Abschätzung der Durchlässigkeit aus der Kornverteilung	52
2.3.1 Allgemeiner Ansatz	53
2.3.2 Formel von HAZEN (1892)	54
2.3.3 Formel von BEYER	56
2.3.4 Formel von KOZENY	57

2.4	Allgemeines zum kapillaren Leitvermögen	62
2.4.1	Definitionen	63
2.4.2	Bestimmungsmöglichkeiten.....	65
2.5	Kapillares Leitvermögen – Ansatz von MARSHALL	66
2.6	Bestimmung des relativen kapillaren Leitvermögens nach MUALEM.....	72
2.6.1	Wasserspannung-Wasseranteil-Beziehung nach BROOKS und COREY.....	76
2.6.2	Wasserspannung-Wasseranteil-Beziehung nach van GENUCHTEN	77
2.6.3	Vorgangsweise bei diskreten Messpunkten.....	79
2.7	Geschlossene Funktionen für die Retentionskurve und das kapillare Leitvermögen	87
2.7.1	Modelle für die Bodenwassercharakteristik	88
2.7.2	Modellfunktionen für das kapillare Leitvermögen	90
2.8	Bestimmung des kapillaren Leitvermögens im Labor	91
2.8.1	Versuchsanordnung mit horizontal durchströmter Bodenprobe.....	91
2.8.2	Versuchsanordnung mit vertikaler Durchströmung.....	93
2.8.3	Einheitsgradientenverfahren	94
2.9	Profilmethode [FLÜHLER, 1991] [DIRKSEN, 1999]	97
2.9.1	Auswertung nach FLÜHLER [1991].....	99
2.9.2	Auswertung nach DIRKSEN [1995]	100
3.	DATENERFASSUNG	105
3.1	Untersuchung des Bodenklimas und des Langzeitverhaltens der Sensoren	107
3.2	Einfluss wasserkonservierender Maßnahmen	111
3.3	Wasserbilanzstudie einer Rindendeponie	113
3.4	Kostenvergleich unterschiedlicher Sensoren	119
4.	SIMULATION DER WASSERBEWEGUNG UND DES STOFFTRANSPORTES IM UNGESÄTTIGTEN BODEN	120
4.1	Simulationskonzept	120
4.1.1	Simulationswerkzeug.....	121
4.1.2	Numerische Methoden.....	123
4.1.3	Festlegung der Diskretisierung (Netzgenerierung).....	126
4.2	Wasserbewegung.....	127
4.2.1	Diskretisierung der Strömungsgleichung.....	129
4.2.2	Anfangs- und Randbedingungen	133
4.2.3	Beispiele für die Modellierung der Wasserbewegung und der Randbedingungen.....	136

5. STOFFTRANSPORT.....	147
5.1 Allgemeines.....	147
5.2 Modellierung.....	149
5.3 Numerische Umsetzung im Programm LEACHM.....	153
6. WÄRMETRANSPORT.....	162
6.1 Sinusfunktion mit dem Temperaturmittel $T_a = 0$	164
6.2 Temperaturmittel $T_a \neq 0$, Maximum verschoben.....	166
6.3 Sprunghafte Temperaturänderung.....	167
7. ANHANG.....	169
7.1 Formelzeichen, Einheiten und Definitionen div. physikalischer Größen.....	169
7.1.1 SI – Internationales Einheitensystem.....	169
7.1.2 Definitionen und Formelzeichen diverser bodenphysikalischer Größen.....	170
7.1.3 Zusammenstellung von Einheiten und Größen in der Stöchiometrie.....	171
7.1.4 Umrechnung verschiedener Potenzialangaben.....	173
7.2 Beschreibung einiger physikalischer Eigenschaften und Zustandsgrößen.....	177
7.2.1 Temperatur T	177
7.2.2 Dynamische Viskosität η	177
7.2.3 Dichte des Wassers ρ_{H_2O}	180
7.2.4 Kinematische Viskosität ν	184
7.2.5 Wärmekapazität C	185
7.2.6 Spezifische Oberfläche.....	186
7.2.7 Wirksamer Korndurchmesser d_w	188
7.2.8 Oberflächenverhältniszahl OVZ	188
7.2.9 Permittivität ϵ	189
7.3 Zusammenfassung: Oberflächenspannung und Kapillarität.....	191
7.4 Berechnung des wirksamen Korndurchmessers.....	194
7.4.1 Herleitung nach KOZENY [1953].....	194
7.4.2 Mittlerer Fraktionsdurchmesser d_i	196
7.4.3 Feinste Fraktion.....	197
7.5 Beziehungen $q - d_p - d_w$	198
7.5.1 Gesetz von HAGEN und POISEUILLE.....	199
7.5.2 Äquivalenter Porendurchmesser.....	202
7.5.3 Beziehung äquivalenter Porendurchmesser d_p – wirksamer Korndurchmesser d_w	202
7.6 Boltzmann-Substitution.....	203
7.6.1 Algorithmus zur Berechnung von Werten des Wahrscheinlichkeitsintegrals.....	206
7.7 Programm zur Lösung der eindimensionalen Diffusionsgleichung.....	208

7.8 Herleitung der Zustandsgleichung eines idealen Gases	210
7.8.1 Wärmeenergie als kinetische Energie.....	210
7.8.2 Zustandsgleichung eines idealen Gases.....	211
7.9 Beispiel einer Kurvenanpassung	212
LITERATURVERZEICHNIS	215

ABBILDUNGSVERZEICHNIS

Abbildung 1-1:	Kontrollvolumen.....	11
Abbildung 1-2:	Repräsentatives Elementarvolumen (REV).....	12
Abbildung 1-3:	Formen des Makrogefüges [ARBEITSGRUPPE BODEN, 1996].....	14
Abbildung 1-4:	Grenzflächenausbildung Luft – Wasser um zwei kugelförmige Bodenfeststoffe (OR und WRAITH, 1997).....	16
Abbildung 1-5:	Hängende Wassersäulen unterschiedlicher Höhe in einer Kapillare.....	17
Abbildung 1-6:	Äquivalente Pore (OR und WRAITH, 1997).....	17
Abbildung 1-7:	Kapillare Steighöhe $h(r)$ und wassergefüllter Querschnitt Δn_i eines Kapillarenbündels in verschiedenen Höhen über dem freien Wasserspiegel (nach FLÜHLER [1991]).....	18
Abbildung 1-8:	a) kapillare Steighöhe als Funktion des Sättigungsgrades b) Flächenanteile der Porengrößenklassen an der Gesamtporenfläche .	19
Abbildung 1-9:	hydrostatischer Zustand in einer Bodensäule.....	22
Abbildung 1-10:	ungesättigter Ruhezustand in einer Bodensäule.....	23
Abbildung 1-11:	Fluss im gesättigten Zustand.....	23
Abbildung 1-12:	Fluss im ungesättigten Zustand.....	24
Abbildung 1-13:	Verlauf der Teilpotenziale beim Einheitsgradientenverfahren zur Bestimmung des kapillaren Leitvermögens [KLUTE und DIRKSEN, 1986].....	31
Abbildung 1-14:	pfeffersche Zelle [VOGEL, 1999].....	33
Abbildung 1-15:	Verhalten zweier durch eine teildurchlässige Wand getrennter Flüssigkeiten....	38
Abbildung 1-16:	Fugazität von Wassermolekülen [FLÜHLER, 1991].....	40
Abbildung 1-17:	Zusammenhang relative Luftfeuchtigkeit in der Bodenluft – Druckpotenzial im Bodenwasser (ohne gelöste Salze) im Gleichgewichtszustand.....	43
Abbildung 2-1:	Kornverteilungslinie für den im Beispiel 2-1 gegebenen Boden.....	56
Abbildung 2-2:	Funktion Se^δ für verschiedene Werte δ	75
Abbildung 2-3:	Anpassungsvarianten der Brooks-und-Corey-Modellfunktion für den hohen Wasserspannungsbereich der Retentionskurve.....	85
Abbildung 2-4:	relatives kapillares Leitvermögen nach MUALEM und MARSHALL für die im Beispiel 2-5 gegebene Bodenwassercharakteristik.....	87
Abbildung 2-5:	Versuchseinrichtung zur Bestimmung des kapillaren Leitvermögens mit horizontal durchströmter Bodenprobe [HILLEL, 1998].....	92
Abbildung 2-6:	Versuchsschema für die Bestimmung des kapillaren Leitvermögens mit vertikal durchströmter Bodenprobe [KLUTE, 1965].....	93
Abbildung 2-7:	Prinzipskizze für die Bestimmung des kapillaren Leitvermögens nach dem Einheitsgradientenverfahren [KLUTE und DIRKSEN, 1986].....	95
Abbildung 2-8:	Druckpotenzial- und Wasseranteilsverlauf über die Tiefe.....	100
Abbildung 2-9:	Gemessener zeitlicher Verlauf des Wasseranteiles in den einzelnen Bodentiefen [DIRKSEN, 1999].....	101
Abbildung 2-10:	Verlauf des Gesamtpotenzials H über die Tiefe für einzelne Zeitpunkte [DIRKSEN, 1999].....	102
Abbildung 2-11:	Abhängigkeit des kapillaren Leitvermögens vom Wasseranteil (für alle Tiefen) [DIRKSEN, 1999].....	104
Abbildung 3-1:	Messsystem.....	105
Abbildung 3-2:	mit Messsensoren bestücktes Bodenprofil.....	106

Abbildung 3-3:	Datenerfassung und Messsensoren	107
Abbildung 3-4:	Tägliche Mittelwerte 1993	108
Abbildung 3-5:	April 1993	109
Abbildung 3-6:	Kalibrierkurven für einen Blocksensoren bei unterschiedlichen Temperaturen	110
Abbildung 3-7:	temperaturkompensierte Messwerte	111
Abbildung 3-8:	Bodenwasser in der Wurzelzone und akkumulierter Niederschlag für die Vegetationsperiode 1991	112
Abbildung 3-9:	Bodentemperatur in 5 cm Tiefe im Vergleich zur Lufttemperatur	113
Abbildung 3-10:	Aufbau der Feldmessstelle	114
Abbildung 3-11:	angepasste Kalibrierfunktion und Standard-Funktionen für den Hydra-Probe-Sensor	115
Abbildung 3-12:	zeitlicher Wassergehaltsverlauf (Austrocknung) bei Verwendung vorgegebener und selbst ermittelter Eichfunktionen	115
Abbildung 3-13:	Gemessener und simulierter zeitlicher Verlauf (April bis November 1995) des Wassergehaltes in mehreren Tiefen	116
Abbildung 3-14:	Vergleich gemessener mit den simulierten Werten	117
Abbildung 3-15:	Ausflussmenge (unterer Rand – Bodenprofil) und Niederschlag	117
Abbildung 3-16:	Fluss durch die Unterkante bei einer Mächtigkeit der oberen Schicht von 1,0 m	118
Abbildung 3-17:	Fluss durch die Unterkante bei einer Mächtigkeit der oberen Schicht von 0,5 m	119
Abbildung 4-1:	Modellentwicklung	121
Abbildung 4-2:	block- und gitterzentrierte Netze	126
Abbildung 4-3:	Vorwärts- und Zentraldifferenzen-Operator	131
Abbildung 4-4:	Rückwärtsdifferenzenschema	132
Abbildung 4-5:	Crank-Nicolson-Schema	132
Abbildung 4-6:	Mit der Tiefe konstante (links) und lineare (rechts) Wurzelwasseraufnahme bei potentieller Verdunstung [FEDDES und KOOPMANS, 1995]	137
Abbildung 4-7:	Modell für den Abminderungsfaktor $\alpha(h)$ [FEDDES et al., 1978]	138
Abbildung 4-8:	Modell für den Abminderungsfaktor $\alpha(h)$ von van GENUCHTEN [zit. in FEDDES und KOOPMANS, 1995]	139
Abbildung 4-9:	Beziehung $z(h)$ für einen Sandboden bei verschiedenen stationären Aufstiegsraten q	144
Abbildung 4-10:	Kapillare Aufstiegsrate bei gegebenem Abstand des Grundwasser- spiegels von der Geländeoberfläche für einen Sandboden ($h_{oben} = -15$ bar)	144
Abbildung 4-11:	Beziehung $z(h)$ für einen Tonboden bei verschiedenen stationären Aufstiegsraten q	145
Abbildung 4-12:	Kapillare Aufstiegsrate bei gegebenem Abstand des Grundwasser- spiegels von der Geländeoberfläche für einen Tonboden ($h_{oben} \leq -15$ bar)	146
Abbildung 5-1:	Ursachen für die mikroskopische hydrodynamische Dispersion [LUCKNER und SCHESTAKOW, 1991]	147
Abbildung 5-2:	Ausbreitung infolge mechanischer Dispersion [BEAR und VERRUIJT, 1994]	149
Abbildung 5-3:	Einfluss der Wasserströmungsrichtung auf die Knotenkonzentrationen, mit deren Hilfe die örtliche Änderung der Konzentration im Knoten i ausgedrückt wird [WAGENET und HUTSON, 1989]	155

Abbildung 5-4:	Gegenüberstellung der berechneten Wasseranteil-Wasserspannungs- Beziehungen zu den Messdaten [LOISKANDL und KARNER, 1994]....	158
Abbildung 5-5:	Vergleich Messwerte – analytische Lösung – Modell	160
Abbildung 5-6:	Numerische Dispersion	161
Abbildung 7-1:	Abhängigkeit der Dichte und der dynamischen Viskosität reinen Wassers von der Temperatur.....	183
Abbildung 7-2:	Zusammenhang zwischen der Haftspannung und dem Randwinkel links: Flüssigkeit benetzt die Wand nicht Mitte: Wand wird von der Flüssigkeit teilweise benetzt rechts: vollkommene Benetzung.....	192
Abbildung 7-3:	Meniskus in einer Kapillare.....	193
Abbildung 7-4:	Kräfte- und Strömungsverhältnisse bei laminarer Strömung im Kreisrohr.....	199

TABELLENVERZEICHNIS

Tabelle 1-1:	Quantifizierung der Phasenanteile (nach FLÜHLER [1991]).....	12
Tabelle 1-2:	Porenbegriffe und deren Definition (nach FLÜHLER [1991]).....	13
Tabelle 1-3:	Komponenten des Bodenwasser-Gesamtpotenzials für verschiedene Anwendungsfälle [JURY et al., 1991]	21
Tabelle 1-4:	Abhängigkeit des osmotischen Potentials einer Steinsalzlösung und einer Zuckerlösung von der Konzentration bei 10 und bei 20 °C	36
Tabelle 1-5:	osmotischer Druck einer wässrigen Schwefelsäure bei verschiedenen Konzentrationen	45
Tabelle 2-1:	Modellfunktionen für die Bodenwassercharakteristik [nach LEIJ et al., 1997].....	89
Tabelle 2-2:	Funktionen für das relative kapillare Leitvermögen k/k_s	91
Tabelle 3-1:	Massenbilanz am Ende der Simulation.....	118
Tabelle 3-2:	Kostenvergleich unterschiedlicher Sensoren.....	119
Tabelle 4-1:	Parameterwerte für die Funktion des Abminderungsfaktors α bei der Wasser- aufnahme für einige Kulturpflanzen (h in cm WS) [FEDDES et al., 1978].....	138
Tabelle 7-1:	Liste der verwendeten Formelzeichen.....	169
Tabelle 7-2:	Zusammenstellung der Konzentrationseinheiten [nach SCHAUM, 1976]	172
Tabelle 7-3:	Einige Potenzialwerte des Bodenwassers in verschiedenen Einheiten	176
Tabelle 7-4:	Relative dynamische Viskositäten $\eta_r = \eta(t)/\eta(20\text{ °C})$ von reinem Wasser bei verschiedenen Temperaturen [ISO/TR 3666, 1998] sowie absolute Werte.....	177
Tabelle 7-5:	Dynamische Viskosität von Wasser als Funktionswert nach TRUCKEN- BRODT [1980] und Tabellenwert von BOLLRICH und PREIBLER [1992] *	179
Tabelle 7-6:	Dynamische Viskosität von Wasser als Funktionswert nach TRUCKENBRODT [1980] * und Tabellenwert im ISO/TR 3666 [1998] **	179
Tabelle 7-7:	η aus der optimierten Modellbeziehung in Anlehnung an TRUCKENBRODT [1980] und die hierfür herangezogenen Werte aus ISO/TR 3666	179
Tabelle 7-8:	Verlauf des (isobaren) Wärmeausdehnungskoeffizienten mit der Temperatur.....	181
Tabelle 7-9:	Dichte ρ_w von reinem Wasser laut ISO/TR 3666 [1998].....	181
Tabelle 7-10:	Relative Raumaufdehnung und Dichte von reinem Wasser.....	182
Tabelle 7-11:	spezifische Wärmekapazität c von Wasser [CERBE und HOFFMANN, 1994].....	186

ALLGEMEINES ZUR LEHRVERANSTALTUNG

Allgemeine Angaben

Nummer: 545 316 (neu)
545 006 (alt)

Titel: Bodenphysik (Vertiefung)

Typ: Vorlesung/Übungen (VU)

Wochenstunden: SS 2.0 ECTS: 03

Stellung im Lehrplan derzeit:

Wahlfach bzw. Wahlpflichtfach im Modul Geotechnik, Angewandte Geologie und Bodenkunde des Bereichs 2 – Querschnittsdisziplinen – der drei Magisterstudien Kulturtechnik und Wasserwirtschaft (Kennzahl 431), Wasserwirtschaft und Umwelt (Kennzahl 432) und Landmanagement, Infrastruktur und Bau-technik (Kennzahl 433)

Stellung im Lehrplan des Diplomstudiums Kulturtechnik und Wasserwirtschaft in den Studienplanversionen ab 30. September 1999:

gebundenes Wahlfach (Vertiefungsfach) im 2. Abschnitt der Studienrichtung Kulturtechnik und Wasserwirtschaft im Wahlfachkatalog C „Bodenhydrologie“ des Institutes für Hydraulik und landeskulturelle Wasserwirtschaft

weitere Lehrveranstaltungen dieses Katalogs:

Grundwasserbelastung und Grundwassersanierung
Geohydraulik
Hydraulik II
Gewässerprospektion, Bohrkunde und Brunnenausbau
EDV-Übungen zu Hydraulik und landeskultureller Wasserwirtschaft

Stellung im Lehrplan der Studienrichtung Kulturtechnik und Wasserwirtschaft in den Studienplanversionen 1996 bis 30. September 1999:

gebundenes Wahlfach (Vertiefungsfach) im 2. Abschnitt der Studienrichtung Kulturtechnik und Wasserwirtschaft im Wahlfachkatalog A „Boden – Wasser – Pflanze: Ressourcenschutz“ des Institutes für Hydraulik und landeskulturelle Wasserwirtschaft

weitere Lehrveranstaltungen dieses Katalogs:

Agrarhydrologie
Regelung des Bodenwasserhaushaltes
Bewässerungswirtschaft
Bodenerhaltung und Bodenschutz
Praktikum zur landeskulturellen Wasserwirtschaft
Ingenieurbiologie
Ökologischer Landbau

Leistungsnachweis: mündliches Referat samt Erstellung schriftlicher Unterlagen hierzu zu einem frei gewählten Thema aus dem Vorlesungsstoff

Vortragende: Ao. Univ.Prof. Dipl.-Ing. Dr. Willibald LOISKANDL und
Ass.Prof. Dipl.-Ing. Dr. Gerhard KAMMERER

Sprechstunden: Dr. Kammerer: montags von 10–12 Uhr bzw. nach telefonischer Vereinbarung
Prof. Loiskandl: montags von 15–17 Uhr und mittwochs von 10–12 Uhr.

Lehrziel

Das Fachgebiet der Bodenphysik soll an Hand von ausgewählten Kapiteln erweitert und vertieft werden. Praktische Fragestellungen werden theoretisch und experimentell beschrieben. Besonderes Augenmerk wird auf die Erhebung von bodenrelevanten Daten im Felde gelegt. Die Studierenden sollen in die Lage versetzt werden, mit den gewonnenen Daten einfache Simulationsmodelle zu erstellen und die Ergebnisse auf ihre Plausibilität zu überprüfen.

Lehrinhalt

k -Wert-Bestimmung aus der Kornverteilungskurve; Methoden zur Bestimmung von Bodenparametern (kapazitive Methode, Time-Domain-Reflectometry, Permeameter, Infiltrometer); Modelle zur Bodenwassercharakteristik und zum kapillaren Leitvermögen (BROOKS und COREY, van GENUCHTEN, MARSHALL, MUALEM u. a.); Modellierung von Wärme- und Stofftransportvorgängen (numerische Lösung der Richards-Gleichung, analytische Lösung der Diffusionsgleichung, Boltzmann-Substitution für Wärmehaushalt und Stofftransport), Fallstudien aus Messergebnissen oder Simulationen.

Verwandte Lehrveranstaltungen des Instituts

Vorausgehende Lehrveranstaltungen:

815 101 VU Bodenphysik

Ergänzende Lehrveranstaltungen:

815 312 VO Bodenwasserschutz

815 306 PR Applied Soil Physics

815 309 VO Migrationsprozesse im Boden und Grundwasserbereich

Empfohlene Literatur

JURY W, GARDNER W R, GARDNER W H. 1991. Soil Physics. John Wiley & Sons, Inc

KUTILEK M, NIELSEN D R. 1994. Soil Hydrology. Cremlingen-Destedt, Deutschland: Catena Verlag

HILLEL D. 1998. Environmental Soil Physics. London: Academic Press

1. GRUNDLAGEN DER WASSERBEWEGUNG IM BODEN

1.1 Kontinuumsbeschreibung des Bodens

Eine **Phase** mag definiert werden als gasförmige, flüssige oder feste Substanz, die im maßgeblichen Kontrollvolumen als homogen betrachtet werden kann [LUCKNER und SCHESTAKOW, 1991]. Unterschiedliche Phasen sind durch *Grenzflächen* getrennt. Aus unterschiedlichen Stoffen bestehende Phasen werden als *Mischphasen* bezeichnet (z.B. ist die aus Stickstoff, Sauerstoff, Kohlendioxid, Wasserdampf usw. bestehende Bodenluft eine Mischphase und ebenso das Bodenwasser wegen der in ihm gelösten Substanzen wie Nähr- und Schadstoffe).

Der Boden als poröses Medium ist ein *Mehrphasensystem*:

Feststoffe

Poren \Rightarrow Wasser

\Rightarrow Luft

gesättigt – Feststoffe und Wasser

ungesättigt – Feststoffe, Wasser und Luft

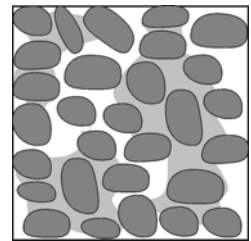


Abbildung 1-1: Kontrollvolumen

Das Kontrollvolumen muss groß genug sein, um eine Mittelung der Eigenschaften zu gestatten (Molekülgröße wird z.B. zur Kennzeichnung des Phasenanteils nicht ausreichen), zumindest 1000fach größer als eine charakteristische Pore. Meist wird eine durchgehende Verbindung der Poren angenommen. Wasser, gelöste Stoffe und Luft bewegen sich durch den zusammenhängenden Porenraum.

Mikroskopischer Maßstab – Detailbeschreibung der Bewegung in den Poren:

Navier-Stokes-Bewegungsgleichung

Hierfür ist die Kenntnis der Randbedingungen notwendig, d. h. die Geometrie der Poren muss bekannt sein \rightarrow

es ist praktisch unmöglich, die komplexe Porenstruktur zu erfassen und zu beschreiben.

Lösung: poröses Medium durch **fiktives Modell** ersetzt

- Jede Phase ist im ganzen Gebiet vorhanden
- Begrenzungen zwischen den Phasen werden ignoriert
- Annahme: physikalische Eigenschaften für jede Phase in jedem Punkt beschreibbar



Kontinuumsbeschreibung

Eine Eigenschaft in einem Punkt ist repräsentativ für ein makroskopisches Bodenvolumen (REV, repräsentatives Elementarvolumen).

Das REV ist groß im Verhältnis zu den Poren und klein im Verhältnis zum Strömungsgebiet.

mikroskopischer Maßstab \leftrightarrow makroskopischer Maßstab
Mittelung über REV

Die Größe des REV sollte so sein, dass die gemittelten Werte eine Funktion des Mittelpunktes des REV sind und nicht von der Größe des REV selbst abhängen.

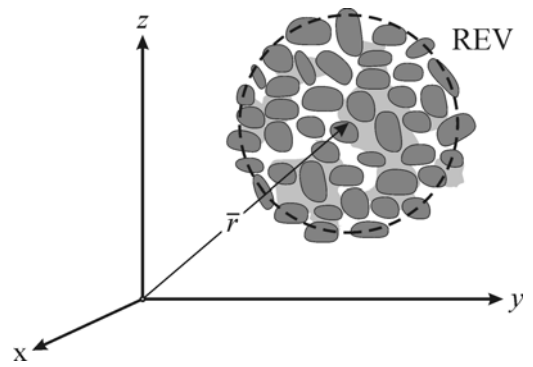


Abbildung 1-2: Repräsentatives Elementarvolumen (REV)

In der Natur sind die gemittelten Bodenkennwerte nicht vorhanden.

Beispiel: Das makroskopische Wasserleitvermögen ist ein gemitteltes Maß für den Widerstand, dem Wasserpartikel bei der Bewegung durch die Poren ausgesetzt sind. Das Tensiometerpotenzial wird für jeden Punkt (als berechenbar) angenommen. Tatsächlich kann dieses nur im wassergefüllten Porenanteil vorhanden sein.

Mikroskopisch gesehen ist der Boden nie homogen.

Makroskopisch (genügend großer Ausschnitt) kann der Boden homogen sein.

Z. B. sorgfältig, gleichförmig gepackte Säule:

- homogen, sofern die Probe größer als das REV ist → gleiche Eigenschaften
- heterogen, wenn das Probenvolumen kleiner als das REV (Größenordnung des Einzelkorns oder des Porendurchmessers) ist; die Eigenschaften variieren (zumindest teilweise).

In einem natürlichen Boden ist das REV größer als in einer Modellsäule. Strukturmerkmale (Steine, Regenwurmkanäle, Sandlinsen, Wurzeln) müssen genügend oft enthalten sein.

homogen ← → heterogen
abhängig von: Größe und Struktur
Volumen, über das gemittelt wird

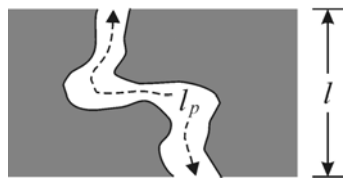
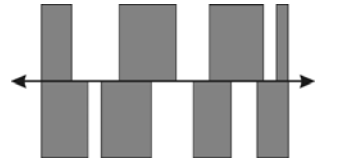
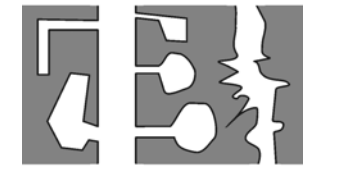
Anteile und räumliche Verteilung der drei Phasen (fest, flüssig, gasförmig) prägen die Bodeneigenschaften:
Volumen- oder Massenanteile
räumliche Anordnung

Tabelle 1-1: Quantifizierung der Phasenanteile (nach FLÜHLER [1991])

Betrachtungsweise		feste Phase (Index s)	flüssige (Index l) gasförmige Phase (a)
Massen- und Volumenanteile der Phasen	makroskopisch	m_s, ρ_d, ρ_s	n_l, m_l, s n_a e, n
	Mikroskopisch	Korngrößenverteilung Textur	Porengrößenverteilung Desorption / Sorption
Räumliche Anordnung der betreffenden Phase		Aggregation/Gefüge Struktur	Porenkontinuität und Porentortuosität Struktur / Porigkeit

1.1.1 Porenbegriffe

Tabelle 1-2: Porenbegriffe und deren Definition (nach FLÜHLER [1991])

Begriffsebene	Definition	
<i>Pore</i>	räumliche Vorstellung: Kanäle, Röhren, Gänge, Kapillare, Spaltflächen, Risse physikalische Definition: Porenraumanteil, der in einem bestimmten Wasser- spannungsbereich entwässert wird (Äquivalenzbegriff)	
<i>Porenklassen</i>	<i>Grobporen</i>	<ul style="list-style-type: none"> – kapillar nicht wirksame Poren: $d > 7 \text{ mm}$ Grenzradius $r = \text{kapillare Steighöhe } h_K$ infiltriertes Wasser fließt der Porenwand entlang – Grobporen (= Makroporen): $d > 50 \text{ }\mu\text{m}$ (entspricht einem Matrix- potenzial von $\psi_m > -6 \text{ kPa}$), enthalten das „Gravitationswasser“; sie werden innerhalb der ersten 1–2 Tage nach einem starken Regen durch Gravitation entwässert.
	<i>Mittelporen</i>	<ul style="list-style-type: none"> – Grobe Mittelporen (enthalten das für die Pflanzen leicht verwert- bare Wasser) $50 > d > 5 \text{ }\mu\text{m}$ ($-6 > \psi_m > -60 \text{ kPa}$) – feine Mittelporen (schwer verwertbares Wasser) $5 > d > 0,2 \text{ }\mu\text{m}$ ($-60 > \psi_m > -1500 \text{ kPa}$)
	<i>Fein- poren</i>	<ul style="list-style-type: none"> – Feinporen (nicht verwertbares Wasser) $d < 0,2 \text{ }\mu\text{m}$ ($\psi_m < \text{permanenten Welkepunkt}$)
<i>Porenbereiche</i>	Inter- und Intraaggregatbereich: Porenraum zwischen bzw. innerhalb der feinporigen Bereiche. Entspricht den Zonen mit „mobilem“ und „immobilem“ (stagnierendem) Wasser.	
<i>Porentortuosität</i>	Verhältnis der <i>effektiven Porenlänge</i> zur Dis- tanz zwischen Eintritts- und Austrittsöffnung $\tau = l_p / l$	
<i>Porenkontinuität</i>	Wahrscheinlichkeit, mit der in einem (imagi- nären) Querschnitt durch eine Bodenprobe Pore auf Pore trifft.	
<i>Porenuniformität</i>	Variabilität des Durchmessers (beeinflusst das Ausmaß der Hysterisis)	

Eine Größenordnung für den **Porenanteil** n kann aus theoretischen Überlegungen abgeleitet werden. Idealisiert man die Form der Bodenpartikel bzw. Primärteilchen als lauter Kugeln gleicher Größe, beträgt das Partikel- bzw. Kugelvolumen $V_s = d^3 \cdot \pi/6$. Das Kontroll- bzw. Bodenvolumen, das von den Mittelpunkten benachbarter Kugeln unter der Annahme der lockersten Packung – einer Würfelpackung – aufgespannt wird, beträgt $V = d^3$. Das Porenvolumen ergibt sich dann zu $V_p = V - V_s = d^3 - 8 d^3 \cdot \pi/48$ und der Porenanteil zu $\underline{n} = V_p/V = (d^3 - d^3 \cdot \pi/6)/d^3 = 1 - \pi/6 = \underline{0,476}$.

Bei der vermutlich dichtesten Packung (der mathematische Beweis ist laut SINGH [1998] bisher noch niemandem gelungen) – der Tetraederpackung – ist $n = 1 - \pi/(3 \times \sqrt{2}) \approx 0,260$. Obwohl natürliche Böden aus Teilchen unterschiedlichster Größe und Form mit unregelmäßiger Anordnung und Aggregation bestehen, liegt ihr Porenanteil häufig innerhalb des Bereiches $0,260 < n < 0,476$. Werte $n < 0,38$ zeigen nach HARTGE und HORN [1989] eine besonders starke Verdichtung an, solche mit $n > 0,55$ treten nur in frisch bearbeiteten A_p -Horizonten, biologisch sehr aktiven A_h -Horizonten (Waldböden) und in Ansammlungen von organischer Substanz (Rohhumus, Moder) auf. Moorböden und frische Tonablagerungen können Werte bis zu $n \approx 0,85$ erreichen.

Die **Porenstruktur** kann auf verschiedenen Ebenen definiert werden [FLÜHLER, 1991]

- bisher keine festen Konventionen
- Messbarkeit sehr schwierig
- *Desorptionskurve*: akzeptierte indirekte Form der Strukturquantifizierung

1.1.2 Bodengefüge

Unter dem **Bodengefüge** wird die räumliche Anordnung der festen Bodenbestandteile verstanden [ARBEITSGRUPPE BODEN, 1996]. Es kann in das im Gelände erkennbare *Makrogefüge* (siehe DIN 19682, Blatt 10 [1973]) und in das nur mikroskopisch erfassbare *Mikrogefüge* unterteilt werden.

Unter den Makrogefügeformen sind das **Grundgefüge**, bei dem keine Absonderung von Bodenteilchen zu Aggregaten erfolgt ist, und das **Aggregatgefüge** zu nennen, bei dem sich Gruppen von Bodeneinzelteilchen zu Aggregaten bestimmter Formen und Größen zusammenfügen. Außerdem gibt es Mischformen.

Das Grundgefüge kann weiter unterteilt werden in das *Einzelkorngefüge* (Bodenteilchen liegen lose nebeneinander), in das *Kittgefüge* (vor allem durch Eisenverbindungen können Einzelkörner pedogenetisch verfestigt werden, weiters in Karbonat-Anreicherungs-horizonten) und in das *Kohärentgefüge* (die Bodenteilchen bilden eine zusammenhaftende, nicht gegliederte Bodenmasse, deren Bestandteile meist durch kolloidale Substanzen allseitig, jedoch unterschiedlich stark, miteinander verklebt sind; typisch für nicht aggregierte, bindige Böden).

Ein *Makrogrubgefüge* in Form eines Aggregatgefüges entsteht hauptsächlich durch Schrumpfungsvorgänge (Absonderungsgefüge) (Unterformen: *Riss-*, *Säulen-* und *Schichtgefüge*). Als *Makrofeingefüge* kann ein Aggregatgefüge auch durch bodenbiologische Prozesse entstehen (Aufbaugesüge) (Unterformen: *Krümnel-*, *Subpolyeder-*, *Polyeder-*, *Prismen-*, *Plattengefüge* und *Gefügefragmente*).

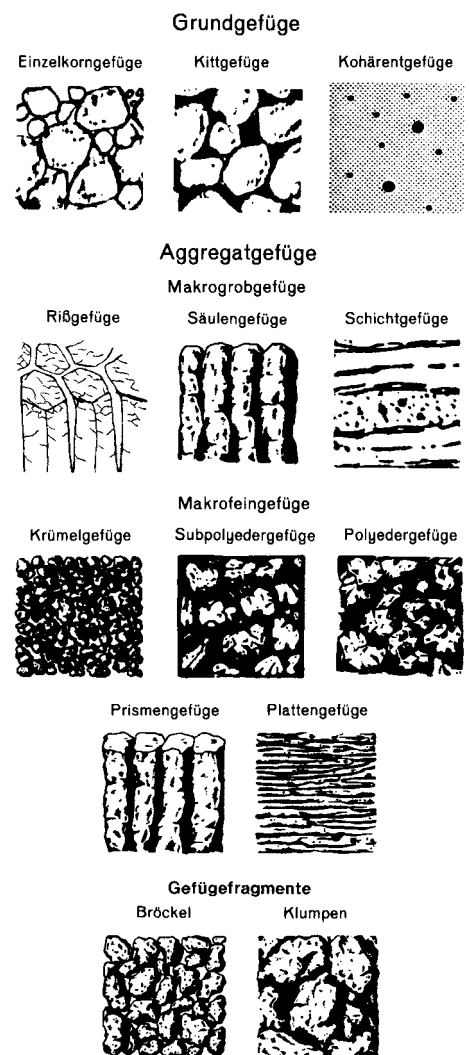


Abbildung 1-3: Formen des Makrogefüges [ARBEITSGRUPPE BODEN, 1996]

1.2 Einteilung des Wassers im Boden

Das Wasser im Boden kann grob in *Grundwasser* und in das über dem Grundwasserspiegel befindliche Wasser der *vadosen Zone* eingeteilt werden. Grundwasser ist per definitionem dadurch gekennzeichnet, dass es die Hohlräume des Bodens lückenlos ausfüllt und – verglichen mit dem atmosphärischen Luftdruck – unter gleichem oder höherem Druck steht.

Über dem Grundwasser und damit bereits in der vadosen Zone befindet sich laut DIN 4047 Bl. 3 [1971] der Kapillarraum, der in Österreich als *Kapillarsaum* bezeichnet wird. Dieser setzt sich aus einer unmittelbar an das Grundwasser anschließenden, wassergesättigten Zone – dem geschlossenen Kapillarsaum – und einem darüber befindlichen *offenen Kapillarsaum* zusammen, in dem mit zunehmendem Abstand vom Grundwasserspiegel immer feinere Poren mit Luft gefüllt sind.

Das gesamte, in Ruhe befindliche und entgegen der Schwerkraft über dem Kapillarsaum gehaltene Bodenwasser der vadosen Zone wird gemäß der zitierten Norm als *Haftwasser* bezeichnet. Es kann weiter in *Kapillarwasser* und in *Adsorptionswasser* unterteilt werden. Das Kapillarwasser wird zwar ebenso wie das Wasser des Kapillarsaumes durch Menisken gehalten, besitzt aber im Gegensatz zu diesem keine durchgehende Verbindung zum Grundwasser über wassergefüllte Poren. Das Adsorptionswasser ist direkt an die Oberfläche der Bodenteilchen angelagert und besteht aus dem durch Hydratation der Ionen an den äußeren und inneren Oberflächen der Bodenteilchen gebundenen *Hydratationswasser* und dem durch die Konzentration der Kationen in der Innenlösung *osmotisch gebundenen Wasser*.

Während das Kapillarwasser und in noch größerem Ausmaße das Adsorptionswasser infolge der ausgeübten starken Kräfte mehr oder weniger in Ruhe verharrt (und insbesondere der Verdunstung ausgesetzt sein kann), unterliegt das in der vadosen Zone mitunter auftretende *Sickerwasser* hauptsächlich der Schwerkraft und bewegt sich demgemäß abwärts.

Ein mehr oder weniger dichter, über dem Grundwasserleiter und nahe der Bodenoberfläche (bis 1,5 m unter GOK) befindlicher Bodenhorizont, in dem das aus darüber befindlichen, durchlässigeren Schichten zuströmende Sickerwasser nur durch die Schwerkraft allein nicht weitertransportiert werden kann, bildet bei ausreichenden Niederschlägen eine Stausohle aus. Das demnach nur zeitweilig über der Stausohle auftretende, oberflächennahe und unter positivem Druck stehende Wasser wird als *Stauwasser* bezeichnet.

1.3 Kapillarität im Boden

Eine Zusammenfassung der engstens miteinander verbundenen physikalischen Erscheinungen der Oberflächenspannung und der Kapillarität, die in anderen Lehrveranstaltungen abgehandelt werden, ist im Anhang auf Seite 191 zu finden.

Im Boden wird die Flüssigkeit durch die Feststoffoberfläche begrenzt, mit der Auswirkung, dass zwei (oder mehrere) unterschiedliche Krümmungsradien auftreten. Die komplexe Geometrie des Porenraumes führt zu mannigfaltigen Kombinationen von Grenzflächen, Kapillaren und Porenwinkel, um die Wasserfilme gebildet werden. Das Ergebnis ist eine Vielfalt von Luft-Wasser- und Feststoff-Wasser-Benetzungswinkel. Die Krümmung unregelmäßiger Grenzflächen kann durch die zwei Hauptkrümmungsradien beschrieben werden.

Das Wasser wird im Poreninneren von Kapillarkräften gehalten; im Nahbereich der Porenwand

vergrößert die Adsorption die Bindungskräfte, die bei den unmittelbar an der Feststoffoberfläche haftenden Wassermolekülen schließlich gewaltige Ausmaße erreichen (siehe S. 46). Das Verhalten der Wasserfilme bei sehr geringem Wassergehalt bedarf daher einer gesonderten Betrachtung.

Beispiel 1-1: Wasser zwischen zwei kugelförmigen Bodenfeststoffen.

$$\Delta p = \sigma \cdot \left(\frac{1}{r_1} + \frac{1}{r_2} \right)$$

r_i ist negativ für konvexe Grenzflächen
(z. B. $r_2 < 0$)
und positiv für konkave Grenzflächen
(z. B. $r_1 > 0$)

nach LU et al. (zitiert von KUTILEK und

NIELSEN [1994]) ist $\frac{h_K'}{h_K} = C \cdot \left(\frac{1 + \cos \alpha}{\cos \alpha} \right)$

h_K' ... Steighöhe bei kugelförmiger Packung

h_K ... Steighöhe in einer Kapillare

C ... Konstante: 0,82 für Würfelpackung,
1,5 für Dreieckpackung

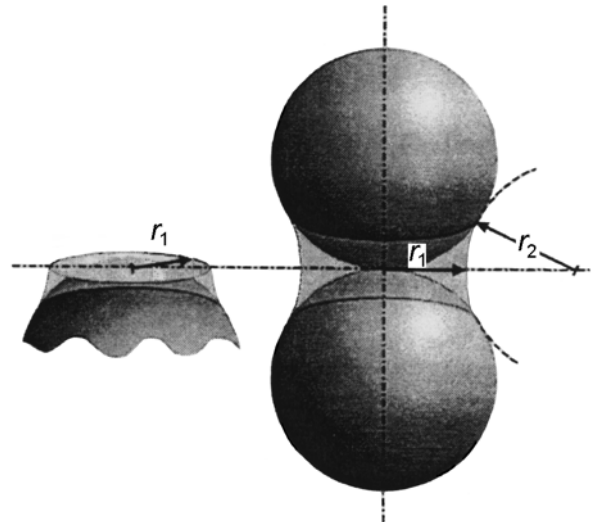


Abbildung 1-4: Grenzflächenausbildung Luft – Wasser um zwei kugelförmige Bodenfeststoffe (OR und WRAITH, 1997)

Beispiel 1-2: Hängende Wassersäule in einer Kapillare bei vollständiger Benetzung

In einer Pore bzw. Kapillare, die keinen Kontakt zu einem Wasserreservoir hat, wird das Wasser durch den oberen (1) und den unteren (2) Kapillarmeniskus gehalten [nach KUTILEK und NIELSEN, 1994]. Der Kapillardruck des oberen Meniskus ist negativ (konvexe Grenzfläche bzw. $r_1 < 0$), seine Größe lässt sich aus dem Krümmungsradius schließen; die Kapillarkraft wirkt der Schwerkraft entgegen. Je nach der Höhe der hängenden Wassersäule bzw. wie viel Wasser man die Kapillare durch Eintauchen aufnehmen ließ ergibt sich an der Unterseite ein negativer oder positiver Kapillardruck, der durch den entsprechend konvex oder konkav gekrümmten Meniskus ausgeübt wird:

$$h = \frac{p_2 - p_1}{\rho \cdot g} = \frac{2\sigma}{\rho \cdot g} \cdot \left(\frac{1}{r_2} - \frac{1}{r_1} \right)$$

Bei der zunehmenden vollständigen Benetzung des oberen Meniskus ist $r_1 = -R$;

der Benetzungswinkel $\alpha = 0$: $h = \frac{2\sigma}{\rho \cdot g} \cdot \left(\frac{1}{r_2} + \frac{1}{R} \right)$

Im Maximalfall ist der untere Meniskus durch eine konkav gekrümmte Halbkugel zu nähern ($r_2 = +R$), beide Kapillarkräfte F_k sind $\sigma \cdot 2 \cdot R \cdot \pi$ groß und wirken der Schwerkraft der hängenden Wassersäule $G = R^2 \cdot \pi \cdot h_{max} \cdot \rho \cdot g$ entgegen:

$$2F_k = 4 \sigma \cdot R \cdot \pi = G = R^2 \cdot \pi \cdot h_{max} \cdot \rho \cdot g$$

Die Maximalhöhe der Wassersäule, die in einer beidseitig der Atmosphäre ausgesetzten Kapillare gehalten werden kann, beträgt daher

$$h_{max} = 4 \sigma / (R \rho \cdot g).$$

Dasselbe Resultat hätte man natürlich auch aus $h_{max} = \frac{2\sigma}{\rho \cdot g} \cdot \left(\frac{1}{R} + \frac{1}{R}\right) = \frac{4 \cdot \sigma}{R \cdot \rho \cdot g}$ erhalten.

In der unten stehenden Zeichnung sind die durch die Kapillardrücke induzierten relativen Druckverläufe eingetragen; die Absolutdrücke sind um den Atmosphärendruck höher (und $p_{1 \text{ absolut}}$ immer positiv, und zwar im thermodynamischen Gleichgewicht mindestens so groß wie der Sättigungsdampfdruck p_s).

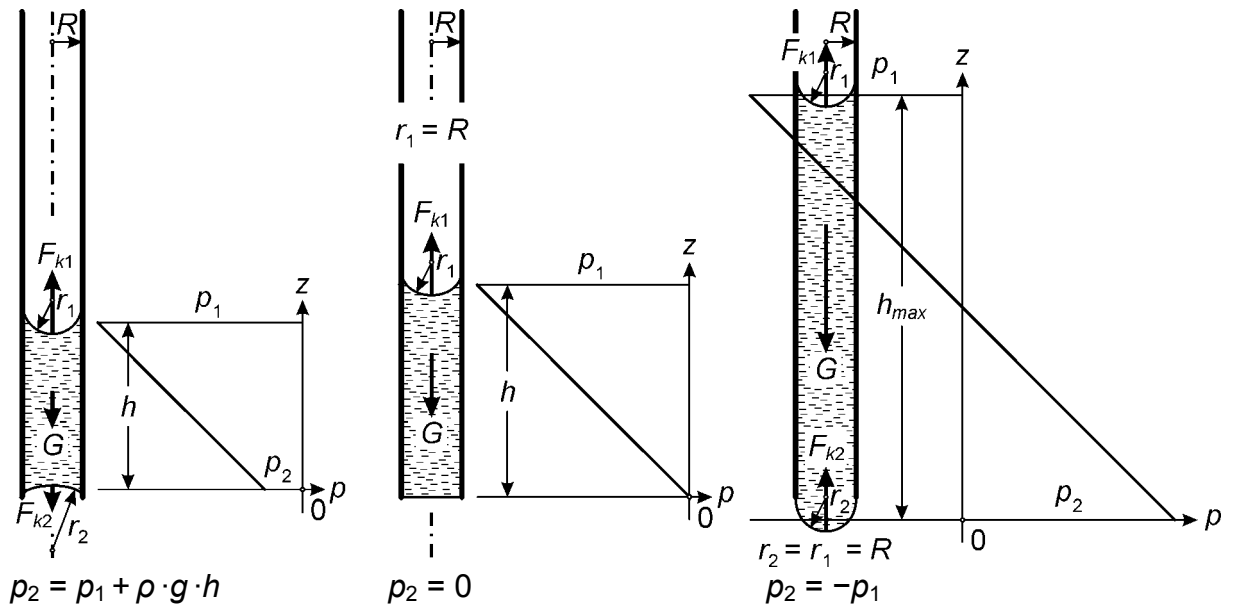


Abbildung 1-5: Hängende Wassersäulen unterschiedlicher Höhe in einer Kapillare

Da die geometrische Form der einzelnen Poren in der Regel unbekannt ist, werden die Einzelporen häufig durch kreiszylindrische Poren ersetzt, für die der *äquivalente Porendurchmesser* d_p bzw. Porenradius so definiert wird, dass er für eine kreiszylindrische Röhre mit derselben Länge denselben Fluss ergibt wie für die einzelne, beliebig geformte Pore.

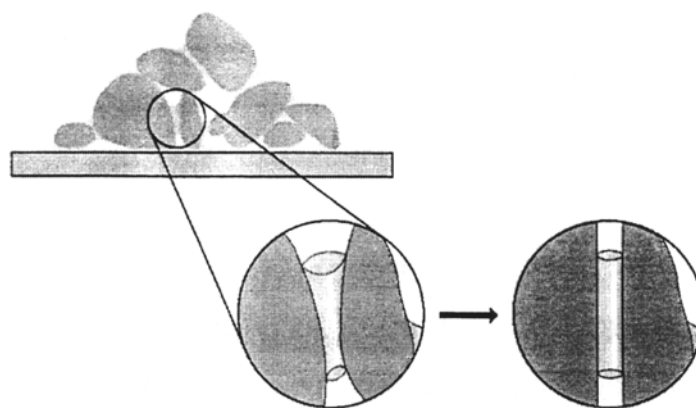


Abbildung 1-6: Äquivalente Pore (OR und WRAITH, 1997)

Gebräuchliche Modelle der Wasserspannung beruhen auf einem sehr vereinfachten Bild in Form eines Kapillarenbündels mit äquivalenten Poren. Durch das *Kapillarenbündel-Modell* wird ein Zusammenhang zwischen der Steighöhe h_K und dem Wasseranteil n_l beziehungsweise zwischen dem Porenradius r und dem Wasseranteil n_l hergestellt. Der wassergefüllte Querschnitt in einer bestimmten Höhe über dem Wasserspiegel entspricht dem Wasseranteil. Die wassergefüllten Quer-

schnittsanteile Δn_i der Porenklassen entsprechen den Volumsanteilen jener Poren, deren Radius r_K durch h_K ausgedrückt werden kann.

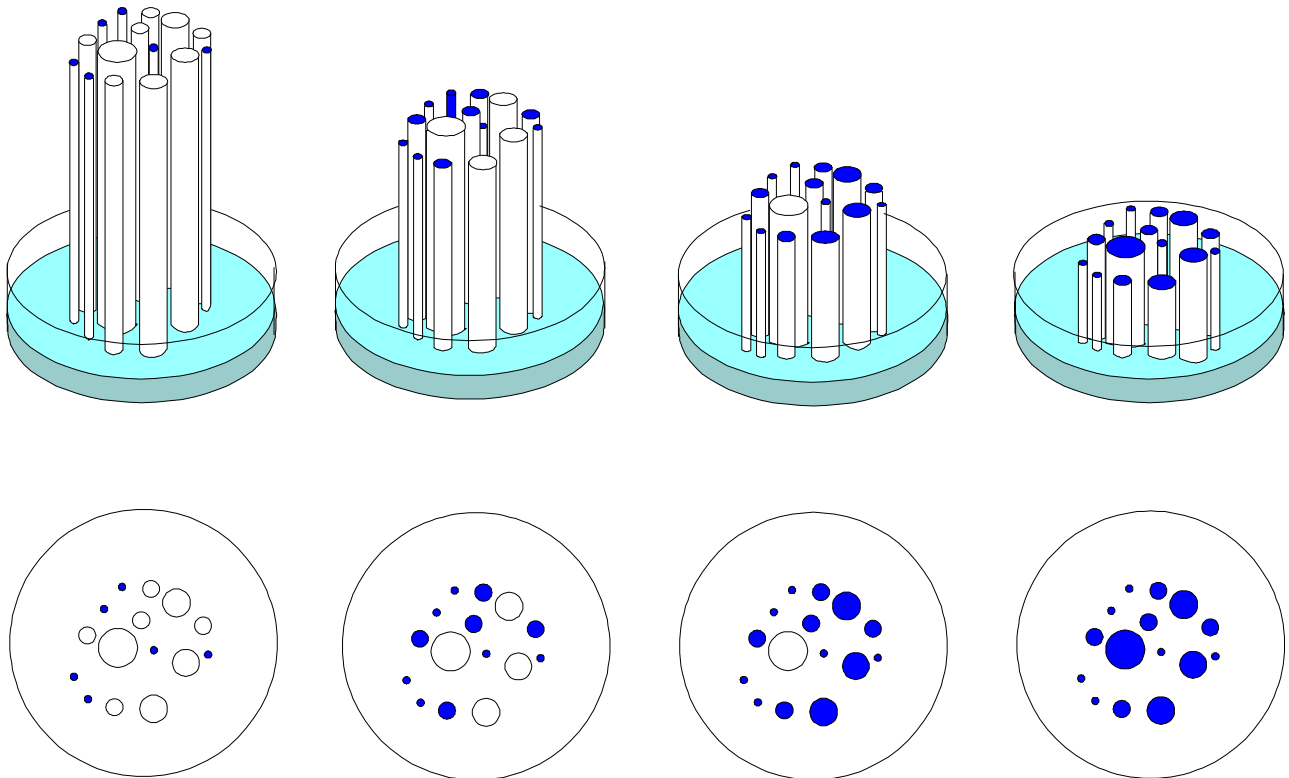


Abbildung 1-7: Kapillare Steighöhe $h(r)$ und wassergefüllter Querschnitt Δn_i eines Kapillarenbündels in verschiedenen Höhen über dem freien Wasserspiegel (nach FLÜHLER [1991])

Die Überlegungen an Hand des Kapillarenbündel-Modells können in grafischer Form entweder als Beziehung zwischen dem wassergefüllten Querschnitt und der Höhe oder als Porengrößenverteilung dargestellt werden. Die erste Beziehung ist die Summenlinie der wassergefüllten Porenanteile.

Beispiel 1-3: Ermittlung des Querschnittsanteiles wassergefüllter Poren aus der Porengrößenverteilung

Die Porengrößen d einer (fiktiven) zylindrischen Bodenprobe mit 2,5 mm Durchmesser wurden in 4 gleich große Porengrößenklassen $d_{gr i u} < d \leq d_{gr i o}$ eingeteilt und die Anzahlen k_i der Poren der jeweiligen Klassen mit dem Mikroskop ausgezählt. Das Ergebnis der Messung ist in den Spalten 1 und 2 der unten stehenden Tabelle eingetragen.

Als mittlerer Durchmesser d_i (Spalte 3) einer Porengrößenklasse i wird das arithmetische Mittel aus den beiden Grenzdurchmessern gewählt und diesem Durchmesser die Einzelporenquerschnittsfläche $d_i^2 \cdot \pi/4$ bzw. die Porenfläche der Porengrößenklasse $A_i = k_i \cdot d_i^2 \cdot \pi/4$ (Spalte 4) zugeordnet. Die Summe der Flächen der einzelnen Porengrößenklassen ΣA_i ergibt die Gesamtporenfläche A_P . Die prozentuellen Flächenanteile $n_{A i}$ der einzelnen Porengrößenklassen an der Gesamtporenfläche erhält man aus $(A_i/A_P) \times 100$ (Spalte 5); ihre Aufsummierung (Spalte 6) muss natürlich 100 %

ergeben; die einzelnen Summenwerte entsprechen dem Sättigungsgrad S_i . Die Gesamtquerschnittsfläche der Probe beträgt

$$A_{ges} = d_{Zyl}^2 \cdot \pi/4 = (2,5 \text{ mm})^2 \cdot \pi/4 = 4,909 \text{ mm}^2$$

und der Porenanteil $n_P = A_P/A_{ges} = (2,175 \text{ mm}^2)/(4,909 \text{ mm}^2) = 0,443$.

Den Anteil θ der wassergefüllten Poren an der Gesamtquerschnittsfläche erhält man durch Multiplikation des aufsummierten Flächenanteils an der Gesamtporenfläche der Korngrößenklassen von 1 bis i mit dem Porenanteil: $\theta = S \cdot n_P$ (Spalte 7). Schließlich wurde die kapillare Steighöhe h_K (in cm!) einer mittleren Pore mit dem mittleren Durchmesser d_i (in mm!) mit der Näherungsformel 7-17 abgeschätzt.

Eine übersichtliche Darstellung der Resultate bietet die Abbildung 1-8.

Klasse i	1	2	3	4	5	6	7	8
	Grenzdurchm. d_{gr}	Anzahl k_i	mittlerer Durchm. $d_i = (d_{gr i u} + d_{gr i o})/2$	Porenfläche $A_i = k_i \cdot d_i^2 \cdot \pi/4$	Flächenanteil $n_{A i} = A_i \times 100/A_P$	Sättigung $S_i = \sum n_{A i}$	Wasseranteil $\theta_i = S_i \cdot n_P$	Steighöhe $h_K = 3/d_i$
-	mm	-	mm	mm ²	%	%	%	cm
1	0,05	25	0,10	0,196	9,0	0,0	0,0	30,0
2	0,15	20	0,20	0,628	28,9	9,0	4,0	15,0
3	0,25	12	0,30	0,848	39,0	37,9	16,8	10,0
4	0,35	4	0,40	0,503	23,1	76,9	34,1	7,5
	0,45					100,0	44,3	
			$A_P = \sum A_i =$	2,175	100,0			

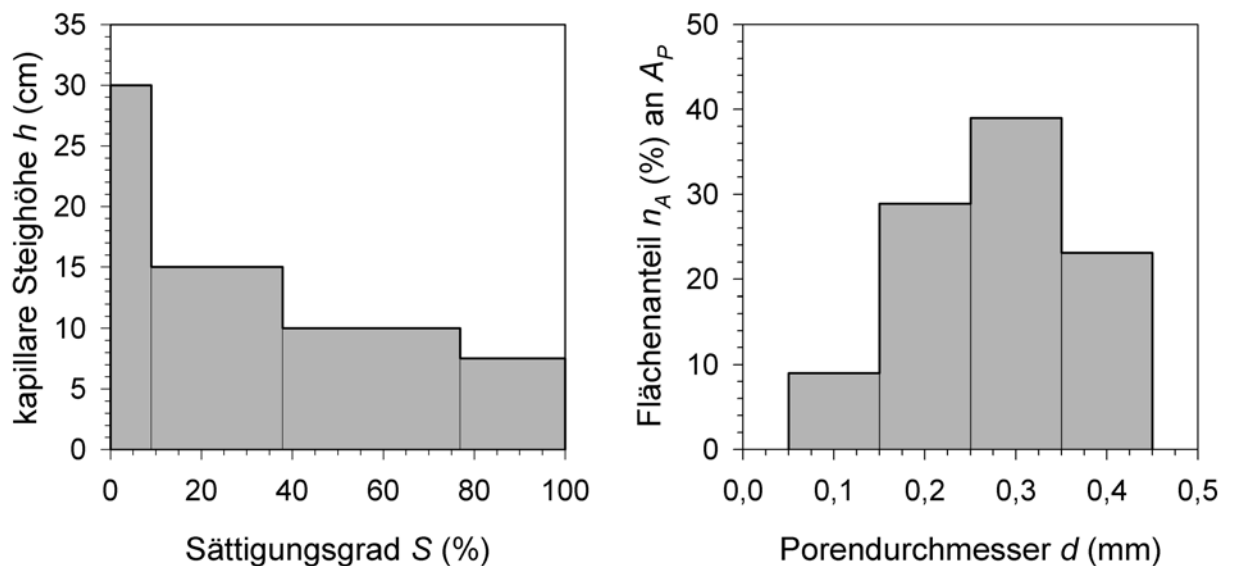


Abbildung 1-8: a) kapillare Steighöhe als Funktion des Sättigungsgrades
b) Flächenanteile der Porengrößenklassen an der Gesamtporenfläche

1.4 Ergänzungen zu den Potenzialen

Das *Bodenwasserpotenzial* ψ entspricht per definitionem jener Arbeit, die pro Einheit einer gewählten Bezugsgröße an reinem Wasser aufgewendet werden muss, um eine infinitesimale Menge Wasser von einem Bezugs- oder Ausgangssystem reversibel und isothermal in ein Zielsystem bzw. an

den betrachteten Punkt im Boden zu bewegen [SOIL SCIENCE SOCIETY OF AMERICA, 1997]. Je nachdem durch welche Eigenschaften sich das Ausgangssystem vom Zielsystem unterscheidet, kann man verschiedene Teilpotenziale definieren. Das **Gesamtpotenzial** ψ_t ergibt sich, wenn als Bezugssystem reines Wasser auf Höhe eines festzulegenden Referenzniveaus gewählt wird.

Der Unterschied im Energieinhalt ΔE zwischen einem Kontrollvolumen im Zielsystem und einem gleich großen Kontrollvolumen im Bezugssystem besitzt die Dimension der Arbeit ($M \cdot L^2 \cdot T^{-2}$) bzw. die Normeinheit Joule. Das *Potenzial* ist der Unterschied im Energieinhalt pro Einheit einer gewählten Bezugsgröße und kann als Druck, als Höhe oder als Potenzial selbst ausgedrückt werden. Bezieht man den Energieinhalt auf das Volumen des Kontrollvolumens, so entspricht die Angabe des Potenzials der Dimension des Druckes mit der Normeinheit Pa ($\psi = \Delta E/V$ mit der Normeinheit $J \cdot m^{-3} \equiv Pa$), dividiert man durch das Gewicht der Masse des Kontrollvolumens, so ergibt sich das Potenzial in Form der **Potenzialhöhe** mit der Einheit m ($\psi = \Delta E/(\rho \cdot g \cdot V)$ bzw. $J \cdot kg^{-1} \cdot m^{-1} \cdot s^2 = m$) und pro Masseneinheit ergibt sich das Potenzial selbst bzw. der Energieinhalt des Kontrollvolumens in der Einheit $J \cdot kg^{-1}$. Für das als Potenzialhöhe ausgedrückte Gesamtpotenzial ψ_t ist als Symbol der lateinische Großbuchstabe *H* üblich.

Bezüglich der Umrechnung der verschiedenen Potenzialeinheiten siehe Kapitel 7.1.4.

Die auf das Bodenwasser ausgeübten Kräfte sind unterschiedlichster Natur und können nicht mit einem einzigen Ansatz quantifiziert werden. Das Gesamtpotenzial muss daher in verschiedene Teilpotenziale aufgeteilt werden. Während das *osmotische Potenzial* ψ_o und das *Schwerkraftpotenzial* ψ_g in der Literatur übereinstimmend definiert werden, gibt es über die Aufteilung, Bezeichnungen und Definitionen des verbleibenden Potenziales deutliche Unterschiede [OR und WRAITH, 1995b]. Im weiteren soll das im Jahre 1976 formulierte Konzept der Internationalen Bodenkundlichen Gesellschaft [IBG Bulletin Nr. 49, 1976], zitiert von KASTANEK et al. [1980] wiedergegeben werden. Diesem zufolge setzt sich das für die Bodenwasserbewegung ausschlaggebende Gesamtpotenzial ψ_t aus dem osmotischen oder Lösungspotenzial ψ_o , dem Schwerkraft- oder *Gravitationspotenzial* ψ_g und dem Tensiometer- oder Druckpotenzial ψ_p zusammen:

$$\boxed{\text{Gesamtpotenzial } \psi_t = \psi_o + \psi_g + \psi_p} \quad (1-1)$$

Aus dieser Gleichung folgt unmittelbar, dass das *Tensiometer-* oder *Druckpotenzial* alle Effekte umfasst, die der Boden auf das Wasser mit Ausnahme des osmotischen und des Schwerkraftpotenziales ausübt. Es kann positiv oder negativ sein und wird vorzugsweise mit einem *Tensiometer* gemessen. Als Symbol für die Druckpotenzialhöhe ist der lateinische Kleinbuchstabe *h* üblich. Derselbe Buchstabe wird leider mitunter auch für die *Wasserspannung* verwendet, die nicht dem Druckpotenzial, sondern dem Matrixpotenzial mit umgekehrtem Vorzeichen entspricht. Da das Druckpotenzial auch positiv sein kann, geht aus dem Vorzeichen des Zahlenwertes von *h* allein nicht hervor, welche Größe mit dem Formelzeichen *h* gemeint ist.

Schon in den Urzeiten des Potenzialkonzeptes wurden die Unterschiede im Energieinhalt, die das Wasser erfährt wenn es mit der Bodenmatrix in Verbindung tritt, als *Matrixpotenzial* ψ_m bezeichnet [JURY et al., 1991]. Beim Matrixpotenzial ist der Bezugsdruck für den Bodenluftdruck definitionsgemäß gleich dem atmosphärischen Luftdruck. Mitunter ist der Bodenluftdruck jedoch höher als der atmosphärische Luftdruck, es liegt Bodenluft-Überdruck vor. Dann muss das Tensiometerpotenzial neben dem Matrixpotenzial aus einem zusätzlichen Potenzial, dem *Gasdruckpotenzial* ψ_a bestehen, weil das Tensiometer neben dem Matrixpotenzial auch den Bodenluftdruck miterfasst:

$$\psi_p = \psi_m + \psi_a \quad (1-2)$$

Im ungesättigten Boden ist das Druckpotenzial negativ, sofern kein Bodenluft-Überdruck vorliegt. Unterhalb eines eventuell vorhandenen freien Wasserspiegels weist das Bodenwasser hingegen ein Druckpotenzial auf, das definitionsgemäß >0 ist. Ein in diesem Bereich installiertes Tensiometer würde dieselbe Druckhöhe anzeigen wie ein Standrohr an jener Stelle. Das Tensiometerpotenzial ist in diesem Fall nicht von den Bindungskräften in der Bodenmatrix abhängig, sondern rührt vom hydrostatischen Druck her. Bei JURY et al. [1991] wird dieser Teil des Gesamtpotenziales nur dann als Tensiometerpotenzial bezeichnet, wenn sich der Bezugspunkt im geschlossenen Kapillarsaum befindet, liegt er unter dem Niveau des freien Grundwasserspiegels, wird er als *hydrostatisches Potenzial* ψ_h bezeichnet. Bei KASTANEK et al. [1980] wird diese Unterscheidung bei Vollsättigung nicht getroffen, und der entsprechende Teil des Gesamtpotenzials, unabhängig davon, ob er positiv oder negativ ist, als „Tensiometer- oder Druckpotenzial“ definiert.

Bei den bisherigen Teilpotenzialen ist davon ausgegangen worden, dass das Bodengerüst bzw. die *Feststoffmatrix* starr und selbsttragend ist und das Bodenwasserpotenzial bei diesen sogenannten nichtquellenden Böden unbeeinflusst von externen Kräften bleibt, weil sie zur Gänze vom Feststoffgerüst aufgefangen werden. In quellenden Böden hingegen wird das Gewicht der über dem betrachteten Punkt liegenden Feststoffe auch auf das Bodenwasser übertragen, und Änderungen im Wassergehalt können zu einer Änderung der räumlichen Lage einzelner Partikel zueinander führen, was wiederum zu Krümmungsänderungen von Grenzflächen führt. Aus diesem Grund ist das Matrixpotenzial in quellenden Böden ein weit weniger brauchbares Konzept als in starren und kann darüber hinaus meist nicht über den Wassergehalt ermittelt werden [JURY et al. 1991]. Für quellende Böden ist es daher gebräuchlich, das Matrixpotenzial in zwei Komponenten aufzuspalten, in das *Auflastpotenzial* ψ_e , das die nicht vom Bodengerüst übernommenen externen Kräfte beschreibt, und in das *Wassergehaltspotenzial* ψ_w , das den Wert des Matrixpotenziales repräsentiert, wenn weder externe Auflasten noch atmosphärische Überdrücke vorhanden sind. Die Komponenten des Gesamtpotenzials können für verschiedene Applikationen wie folgt zusammengefasst werden:

Tabelle 1-3: Komponenten des Bodenwasser-Gesamtpotenzials für verschiedene Anwendungsfälle [JURY et al., 1991]

Anwendungsfall	Komponenten
ungesättigter quellender Boden	$\psi_t = \psi_o + \psi_g + \psi_p$
	mit Bodenluft-Überdruck $\psi_t = \psi_o + \psi_g + \psi_a + \psi_m$
	zusätzlich mit Auflast $\psi_t = \psi_o + \psi_g + \psi_a + \psi_w + \psi_e$
ungesättigter starrer Boden	$\psi_t = \psi_o + \psi_g + \psi_p$
	mit Bodenluft-Überdruck $\psi_t = \psi_o + \psi_g + \psi_a + \psi_m$
gesättigter quellender Boden	$\psi_t = \psi_o + \psi_g + \psi_p$
	mit Auflast $\psi_t = \psi_o + \psi_g + \psi_h + \psi_e$
gesättigter starrer Boden	über dem Grundwasserspiegel $\psi_t = \psi_o + \psi_g + \psi_p$
	Unter dem Grundwasserspiegel $\psi_t = \psi_o + \psi_g + \psi_h$

1.4.1 Potenzialverläufe in Bodensäulen bei verschiedenen stationären Randbedingungen

Wenn im Bodenwasser kein Konzentrationsunterschied an gelösten Stoffen vorhanden ist, beträgt der Gradient des osmotischen Potenzials Null und das osmotische Potenzial selbst kann für die Wasserbewegung (in der Säule) außer acht gelassen werden. Weiters soll der Druck, unter dem die Bodenluft steht, gleich dem atmosphärischen Luftdruck sein. Das relative Gasdruckpotenzial ist dann gleich Null und das Tensiometerpotenzial entspricht dem herrschenden Matrixpotenzial. Unter diesen Bedingungen lassen sich für eine Bodensäule unter **stationären Verhältnissen** je nach der Wahl der Randbedingungen bestimmte grundlegende Potenzialzustände und -verläufe angeben, von denen einige nun exemplarisch vorgestellt werden sollen.

Hydrostatischer Zustand:

Wenn sich das Bodenwasser in der gesamten wassergesättigten, unten geschlossenen Säule in Ruhe befindet, darf über die Tiefe kein Gradient des Gesamtpotenzials vorhanden sein. An der freien Wasserspiegeloberfläche (Oberkante der Bodensäule) ist das Druckpotenzial definitionsgemäß gleich Null. Da das Gravitationspotenzial mit der Tiefe abnimmt, muss das Druckpotenzial im selben Ausmaß zunehmen. Über die gesamte Tiefe herrscht positiver Druck.

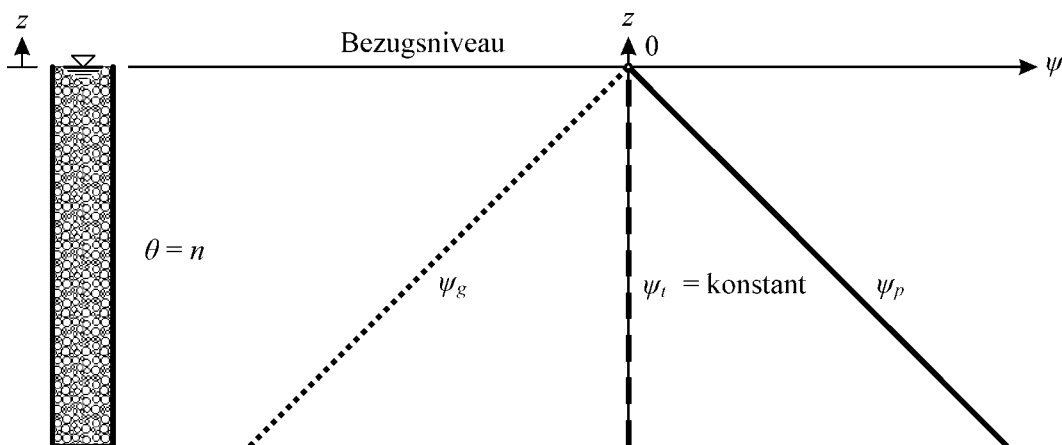


Abbildung 1-9: hydrostatischer Zustand in einer Bodensäule

Ungesättigter Ruhezustand:

Wie zuvor muss das Gesamtpotenzial konstant sein. Die unten offene Säule steht bei den gewählten Randbedingungen an der Unterkante unter atmosphärischem Druck, das Druckpotenzial muss daher dort gleich Null sein. Weil das Gravitationspotenzial nach oben hin linear zunimmt (bei 1 m Höhe nimmt die Potenzialhöhe ψ_g genau um 1 m zu), muss das Druckpotenzial im selben Maß nach oben hin linear abnehmen, d. h. die Wasserspannung nimmt zu. Die Wassergehaltsverteilung entspricht der Wasseranteil-Matrixpotenzial-Beziehung (Bodenwassercharakteristik). Weist der Boden bzw. die Bodenwassercharakteristik einen geschlossenen Kapillarsaum auf, beginnt die ungesättigte Bodenzone nicht auf der Höhe des freien Grundwasserspiegels, sondern des geschlossenen Kapillarsaumes.

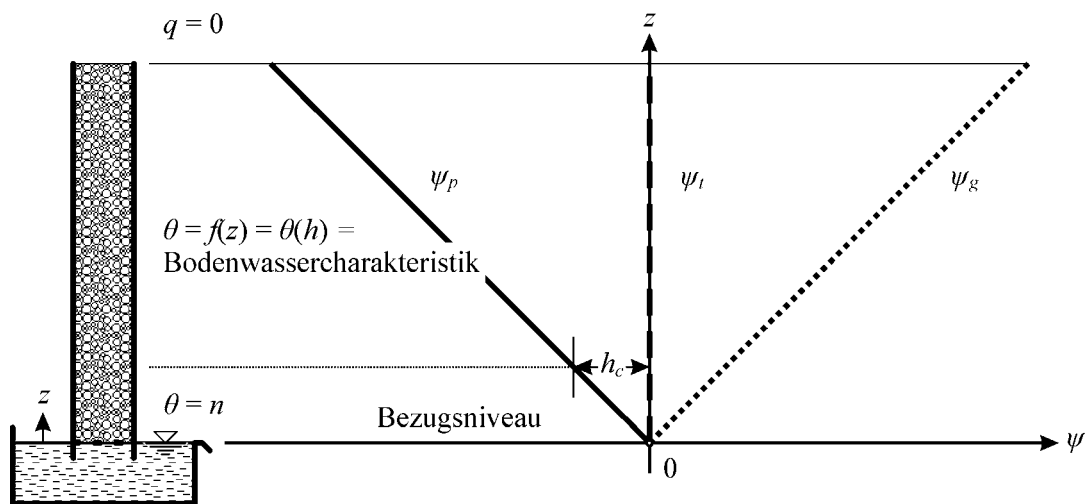


Abbildung 1-10: ungesättigter Ruhezustand in einer Bodensäule

Fluss im gesättigten Zustand:

Wenn auf eine zuvor gesättigte, unten offene Bodensäule gerade soviel Wasser aufgebracht wird, dass kein Überstau entsteht, entspricht die aufgebrachte, infiltrierende Menge genau dem Durchlässigkeitsbeiwert k_s . Das Druckpotenzial ist an der Oberfläche und an der Unterkante der Säule Null.

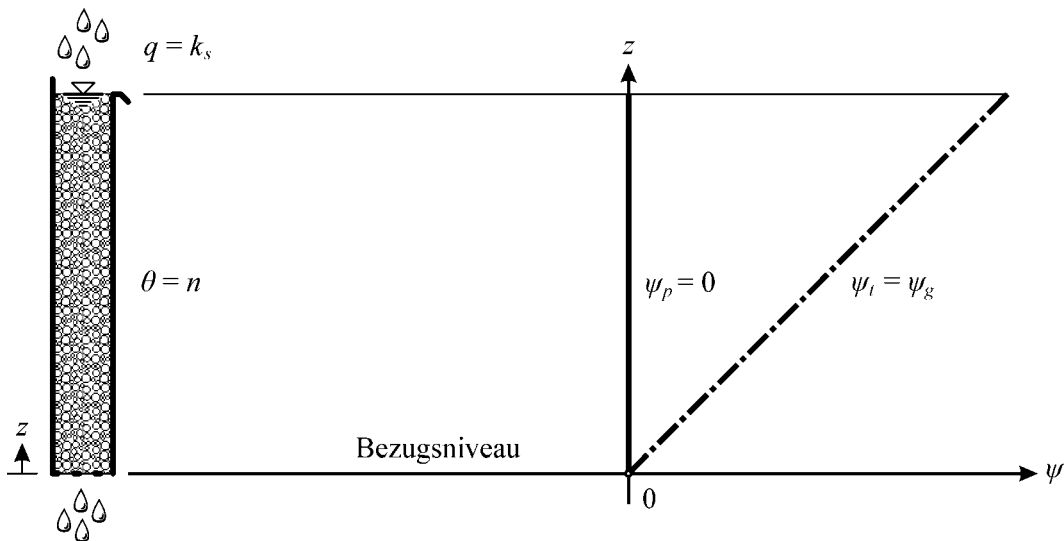


Abbildung 1-11: Fluss im gesättigten Zustand

Da die Säule über die gesamte Höhe gesättigt bleibt, ist das Leitvermögen konstant. Nach dem Kontinuitätsgesetz muss in jedem Querschnitt derselbe Fluss vorhanden sein, somit muss nach dem Gesetz von DARCY auch der Gradient des Gesamtpotenzials konstant und das Gesamtpotenzial daher linear sein. Da auch das Gravitationspotenzial linear verläuft, muss das Druckpotenzial ebenfalls linear zwischen den beiden gegebenen Werten am oberen und unteren Ende der Säule verlaufen über die gesamte Tiefe gleich Null sein.

Fluss im ungesättigten Zustand:

Es wird eine gleichbleibende, kleinere Menge aufgebracht als es dem Durchlässigkeitsbeiwert entspricht. Unter der Annahme, dass der Boden einen geschlossenen Kapillarsaum aufweist, muss er im unteren Bereich der Säule wassergesättigt sein, das kapillare Leitvermögen entspricht dort dem

Durchlässigkeitsbeiwert. Der Potenzialgradient muss daher konstant und das Druckpotenzial linear sein. Die Neigung der Druckpotenziellinie ergibt sich aus der aufgebrauchten Wassermenge. Sie ist nach oben hin geringer als beim stationären Ruhezustand (das Druckpotenzial nimmt nach oben hin weniger stark ab), die Höhe der gesättigten Zone ist daher kleiner als die Höhe des geschlossenen Kapillarsaumes beim stationären Ruhezustand.

Im darüber befindlichen, ungesättigten Bodenzone ist das kapillare Leitvermögen kleiner als k_s . Der Gradient des Gesamtpotenzials muss daher größer sein; die Neigung der Druckpotenziellinie geringer. Die Abnahme des Druckpotenzials wird zwar nach oben hin geringer, kann jedoch theoretisch nicht Null werden. Demzufolge nimmt ψ_p streng monoton ab; der Wassergehalt und das kapillare Leitvermögen werden nach oben hin kleiner. Der Gradient des Gesamtpotenzials muss daher größer werden, der Gradient des Druckpotenzials kleiner.

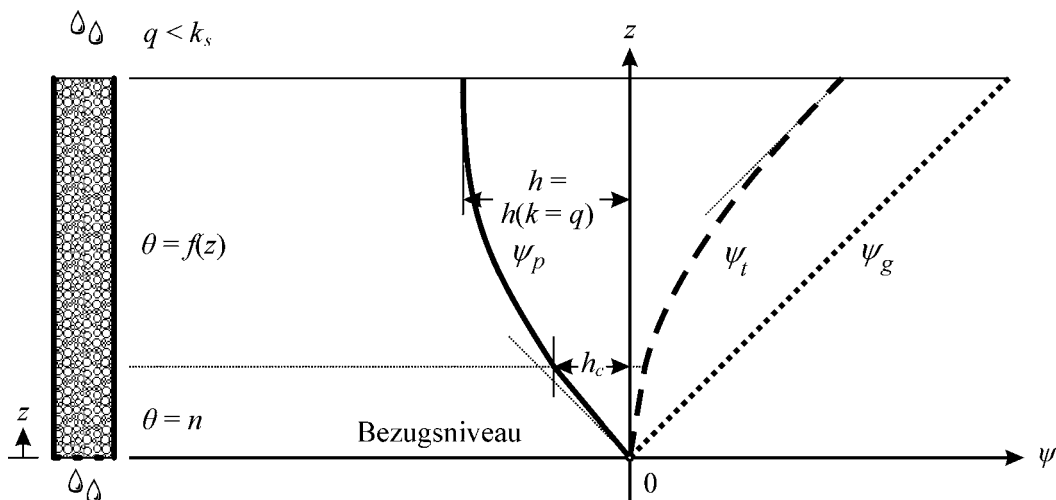


Abbildung 1-12: Fluss im ungesättigten Zustand

Beispiel 1-4: Zwei Tensiometer sind mit demselben Quecksilberreservoir verbunden.

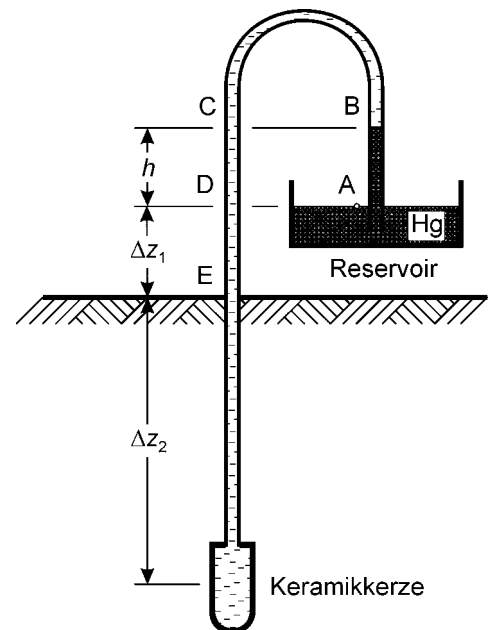
Tensiometer 1 misst in einer Tiefe von 0,4 m ($= \Delta z_2$) und Tensiometer 2 in einer Tiefe von 0,8 m. Der Quecksilberspiegel im Reservoir liegt 0,1 m über der Bodenoberfläche ($= \Delta z_1$).

Höhe der Quecksilbersäule des Tensiometers 1:

$$h_1 = 7,5 \text{ cm}$$

Tensiometer 2: $h_2 = 9,0 \text{ cm}$

- Zeichne die Potenzialverteilung (Annahme: H linear mit der Höhe).
- Gesucht ist die Höhe des Grundwasserspiegels.
- Wie sind die Quecksilbersäulen in ihrer Lage zueinander, wenn keine Wasserbewegung im Boden auftritt?



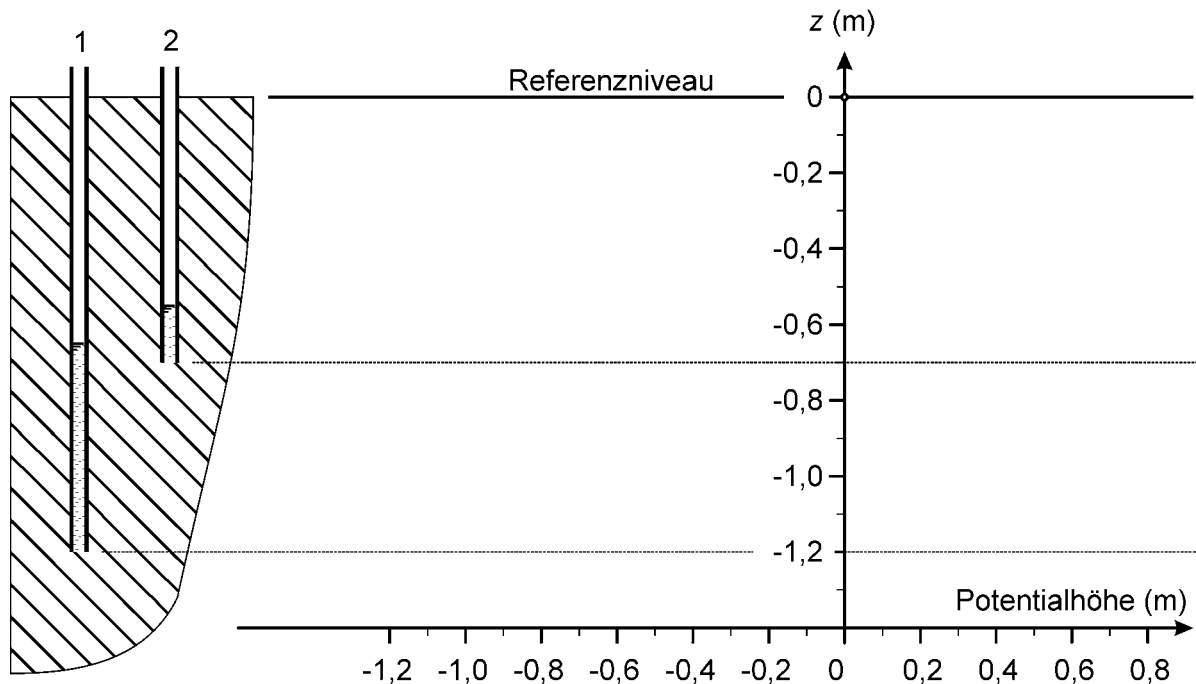
Beispiel 1-5: Zwei Standrohre sind in einem Bodenprofil abgeteuft.

Fall A) Wasserspiegel 1 und 2: $z = -0,6$ m

Fall B) Wasserspiegel 1: $z = -0,65$ m, Wasserspiegel 2: $z = -0,55$ m

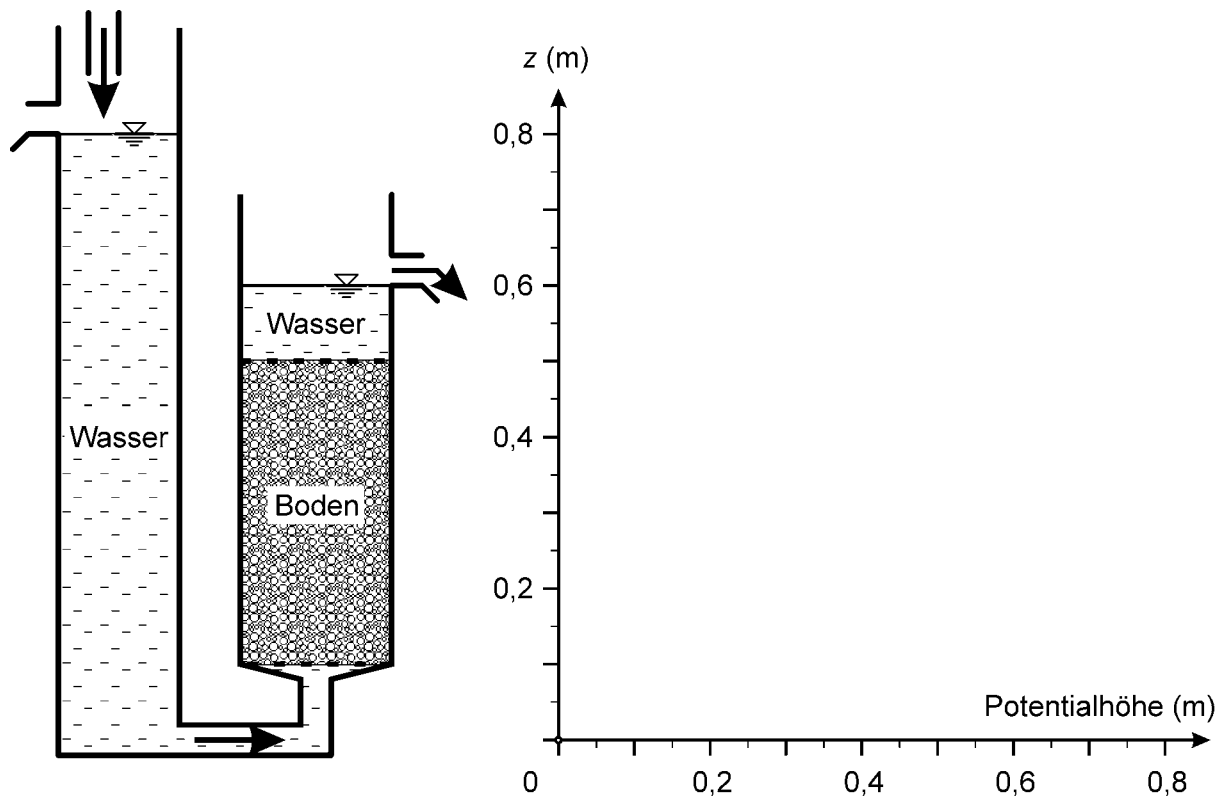
Ermitteln Sie für beide Fälle:

- das Potenzialdiagramm (Annahme: Druckpotenzial ist eine lineare Funktion der Höhe)
- die Höhe des Grundwasserspiegels
- statisches Gleichgewicht?
- in welche Richtung bewegt sich das Wasser?



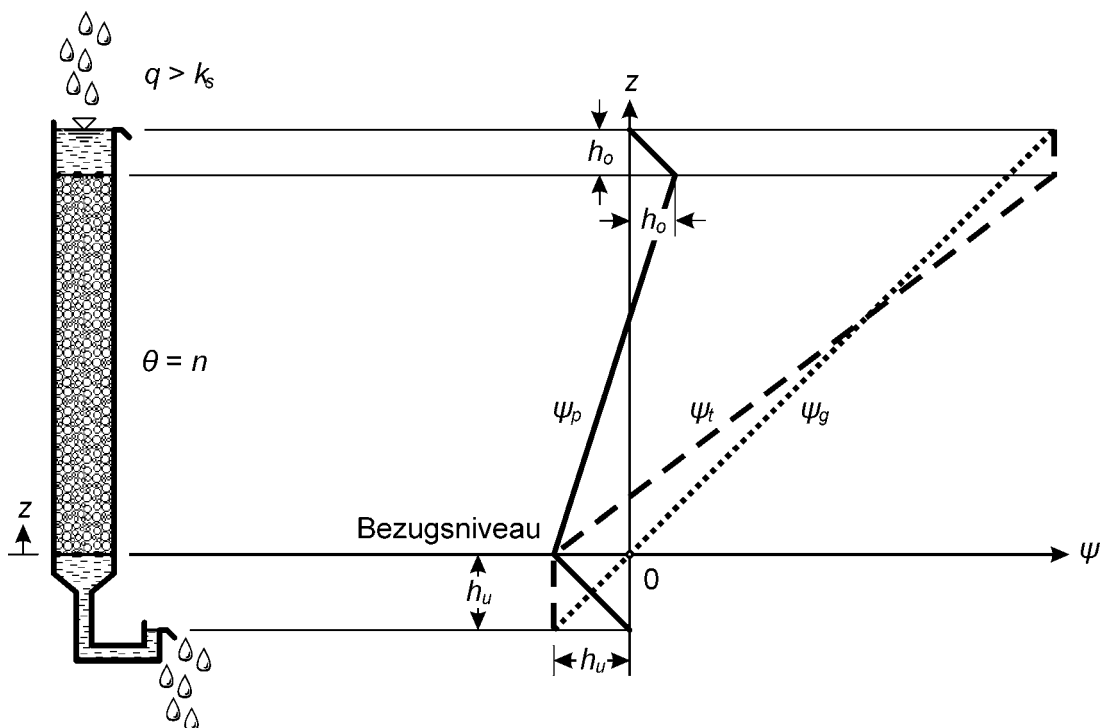
Beispiel 1-6: Simulation einer stationären gesättigten Aufwärtsbewegung von Wasser

- Zeichne ein Potenzialdiagramm entsprechend der abgebildeten Versuchsanordnung.
- Bestimme den Durchlässigkeitsbeiwert, wenn der Querschnitt der Bodenprobe $A = 100 \text{ cm}^3$ und der gemessene Durchfluss $180 \text{ cm}^3/\text{h}$ beträgt.



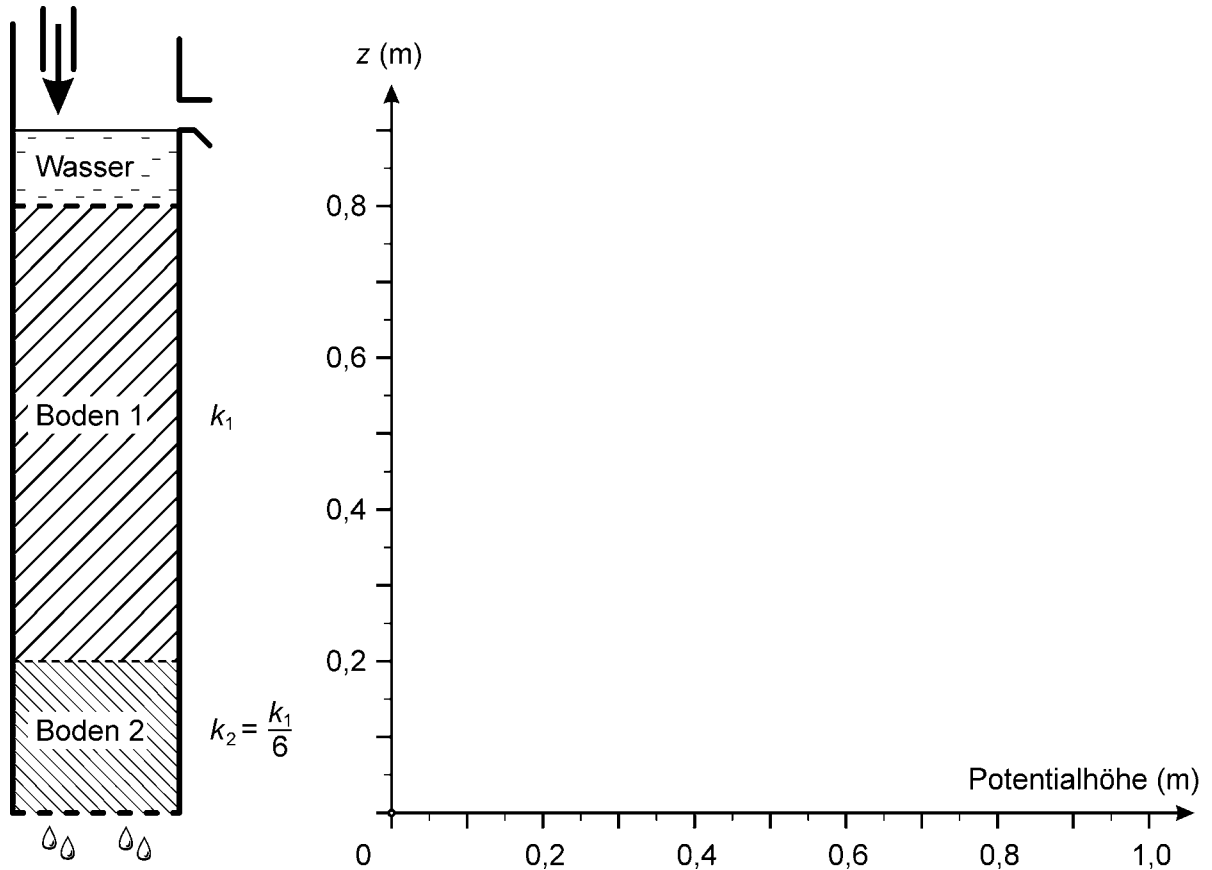
Beispiel 1-7: Einer wassergesättigten Bodensäule wird laufend von oben ausreichend Wasser zugeführt, sodass sich eine konstante Überstauhöhe ergibt.

An der Unterkante der Bodenprobe herrscht eine konstante negative Druckpotenzialhöhe h_u (Unterdruck). Wie ist der Verlauf des Gesamtpotenzials zu konstruieren?



Beispiel 1-8: Eine aus zwei Schichten bestehende, unten offene Bodensäule wird konstant überstaut. Der k -Wert der oberen Schicht ist 6-mal so groß als der der unteren Schicht.

Zeichne ein Potenzialdiagramm für die dargestellte Bodensäule unter stationären Verhältnissen!



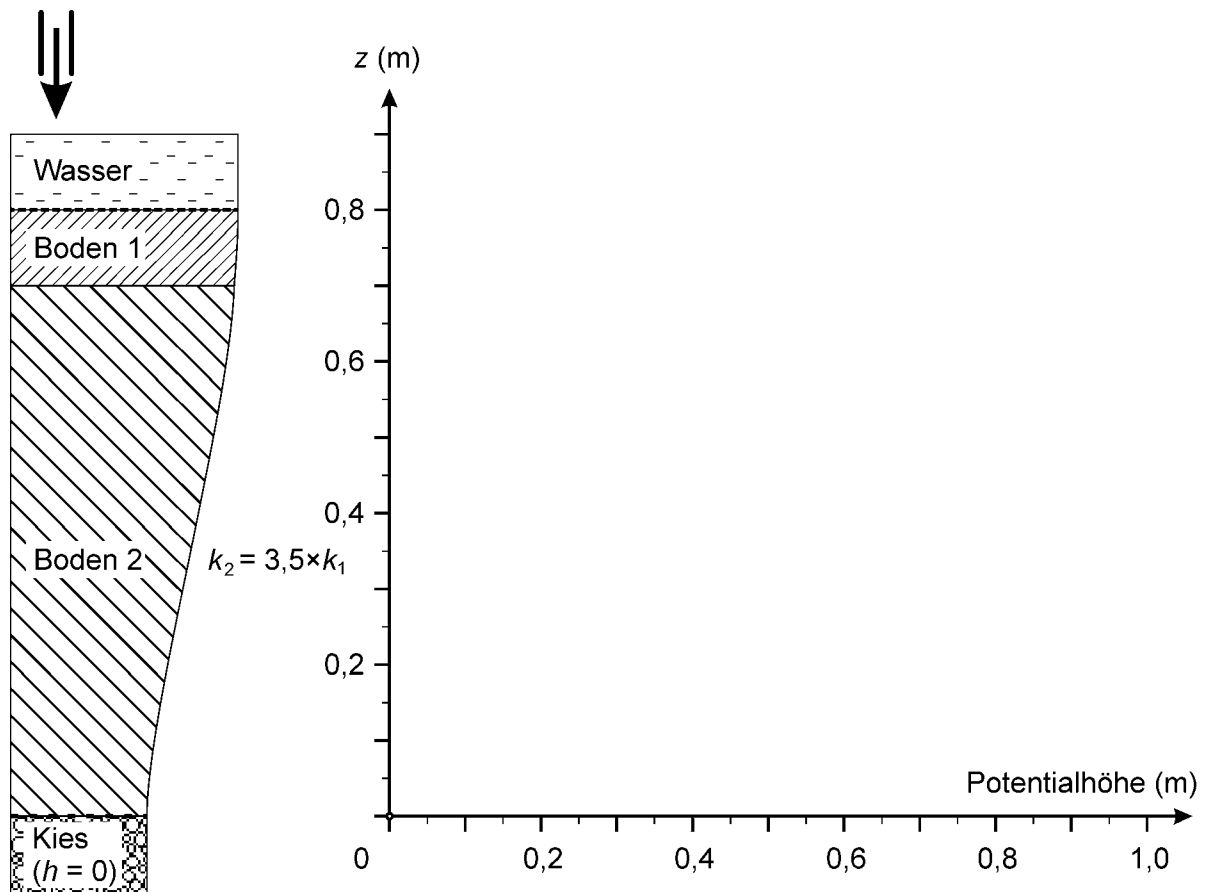
Beispiel 1-9: Das Bodenprofil eines Reisfeldes setzt sich wie folgt zusammen:

Dicke der oberen Schicht 10 cm

Dicke der unteren Schicht 70 cm

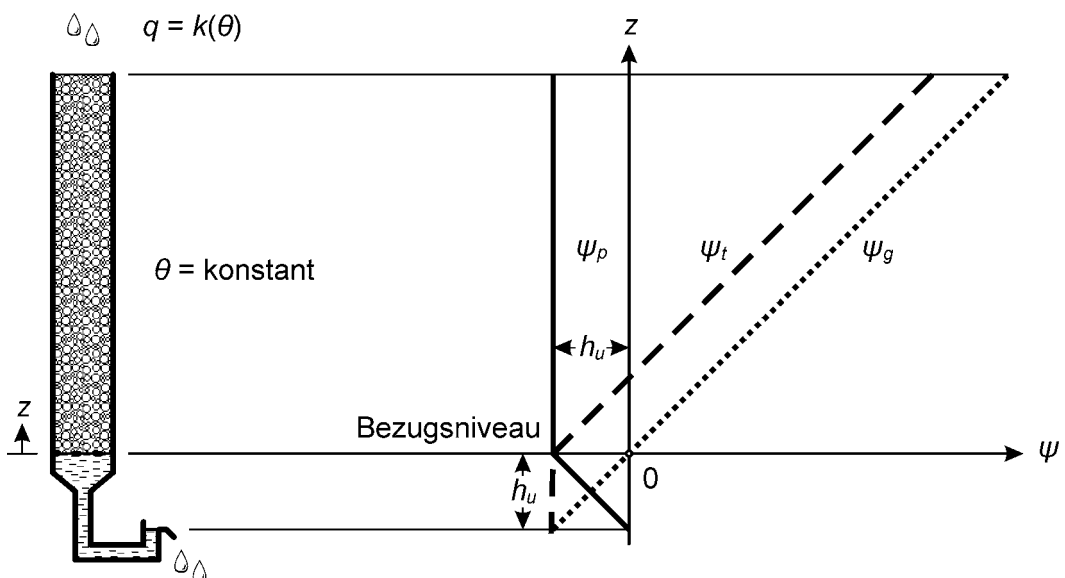
Unterhalb dieser Schichten steht Grobschotter an. Die untere Schicht hat einen 3,5fachen Durchlässigkeitsbeiwert im Vergleich zur oberen. Der Wasserstand im Feld beträgt konstant 10 cm.

- Zeichne eine Potenzialdiagramm (Annahme: der Lufteintrittswert wird nicht überschritten).
- Bestimme die Filtergeschwindigkeit, wenn der k -Wert der unteren Schicht $1,2 \times 10^{-5}$ m/s beträgt.
- Warum ist die Annahme in Punkt a) notwendig?



Beispiel 1-10: An der Unterseite einer Bodensäule herrscht eine konstante Wasserspannung h_u . Ist es möglich, durch Zufuhr eines bestimmten Volumenstromes q einen konstanten Wassergehalt über die Tiefe zu erzwingen?

Wenn der Wassergehalt über die Tiefe konstant sein soll, so müssen auch das Druckpotenzial und das kapillare Leitvermögen konstant sein. Wenn das Druckpotenzial konstant und das Schwerkraftpotenzial linear ist, muss auch das Gesamtpotenzial linear sein und der Gradient somit konstant sein und dem Gradienten des Schwerkraftpotenzials entsprechen.



Der Fluss ist daher gleich dem konstanten Produkt aus dem kapillaren Leitvermögen und dem Gradienten des Gesamtpotenzials, der 1 beträgt. Stationäre Verhältnisse liegen also nur dann vor, wenn die Menge, die zugeführt wird, genau dem kapillaren Leitvermögen entspricht, das der angelegten Wasserspannung h_u an der Unterkante zuzuordnen ist.

1.4.2 Matrixpotenzial

Wenn das osmotische Potenzial im Boden konstant und das Schwerkraftpotenzial bzw. die Höhe über dem Referenzniveau bekannt sind, verbleibt als maßgebliche Größe für den die Bodenwasserbewegung bestimmenden Gradienten des Gesamtpotenzials das Tensiometer- oder Druckpotenzial. Das Tensiometerpotenzial widerspiegelt dabei nicht nur die verschiedensten Kräfte (Oberflächen-, Adsorptions-, Quell- und Schrumpf-, Ionenanziehungs-, Dipolkräfte, elektrostatische Kräfte usw.), mit denen das Wasser in der Bodenmatrix gebunden ist und die im Matrixpotenzial ψ_m zusammengefasst sind, sondern auch den Druckunterschied, der zwischen dem Bodenluftdruck und dem atmosphärischen Luftdruck besteht und der als Gasdruckpotenzial ψ_a definiert wurde. Das Gasdruckpotenzial ist häufig gleich Null und damit das Druck- oder Tensiometerpotenzial gleich dem Matrixpotenzial; Es gibt jedoch Situationen im Labor und im Feld, wo dies nicht der Fall ist (siehe Einheitsgradientenverfahren zur Bestimmung der kapillaren Leitfähigkeit bzw. Abbildung 1-13, Drucktopf!, Komprimierung der Bodenluft durch eine vordringende geschlossene Infiltrationsfront, Kompression des Bodenskelettes und der Bodenluft durch eine Auflast, die ein Entweichen der Bodenluft nach oben hin verhindert (Befahren)).

Die wahre Größe, die die Kräfte beschreibt, mit denen das Wasser im Boden gebunden ist, ist das Matrixpotenzial (und nicht das Druckpotenzial). Die *Bodenwassercharakteristik* entspricht daher der Beziehung des Wasseranteils zum Matrixpotenzial. Allerdings weist ψ_m nur in Böden mit einer starren Struktur einen bestimmten, im allgemeinen nicht eindeutigen Zusammenhang mit dem Wassergehalt des Bodens auf [KASTANEK et al., 1980]. In quellenden Böden hängt ψ_m vom Wassergehaltspotenzial ψ_w und vom Auflastpotenzial ψ_e ab. Die Bodenwassercharakteristik (auch als Retentions- oder Rückhaltekurve bezeichnet), die eine Arbeitslinie ist, drückt eigentlich aus, wie viel Arbeit zuzuführen ist, um den Boden Wasser zu entziehen, bzw. welche Matrixpotenzialdifferenz auftritt, wenn der Wassergehalt von θ_0 auf θ_1 reduziert wird. Das Matrixpotenzial und die Bodenwassercharakteristik sind unabhängig vom äußeren Kraftfeld (Einfluss der Schwere, Zentrifugalkräfte) gültig. Im Gegensatz dazu funktioniert ein klassisches Tensiometer im schwerelosen Raum nicht.

Früher wurde der Inhalt des Begriffes „Matrixpotenzial“ durch den Begriff „Saugspannung“ abgedeckt, mit dem einzigen Unterschied, dass die Saugspannung das umgekehrte Vorzeichen besitzt und somit stets positiv ist. Anstelle der „Saugspannung“ wird heute der Begriff **Wasserspannung** für das positiv genommene Matrixpotenzial verwendet.

Schon 1976 stellte die Kommission der IBG fest, dass die Aufteilung des Gesamtpotenzials in einzelne Teilpotenziale sehr sorgfältig geschehen muss, weil sich die auf das Bodenwasser wirkenden, den einzelnen Potenzialen zugeordneten mannigfaltigen Kräfte gegenseitig beeinflussen können. Dieser Schwierigkeit ist man im Glossary of Soil Science Terms [SOIL SCIENCE SOCIETY OF AMERICA, 1997] insofern aus dem Weg gegangen, als man das Gesamtpotenzial aus osmoti-

schem, Schwerkraft- oder Gravitationspotenzial, Matrixpotenzial (bzw. hydrostatischem Potenzial) und dem Gasdruckpotenzial zusammengesetzt hat –

über dem Grundwasserspiegel $\psi_t = \psi_o + \psi_g + \psi_m + \psi_a$

und unter dem Grundwasserspiegel $\psi_t = \psi_o + \psi_g + \psi_h + \psi_a -$,

und nicht wie traditionell üblich aus osmotischem, Schwerkraft- und Druckpotenzial (Gleichung 1-1). Eine weitere Unterteilung einzelner Komponenten erfolgte nicht. Der Begriff des Druckpotenzials kommt übrigens überhaupt nicht vor.

Beispiel 1-11: Zeichne den Potenzialverlauf (ψ_g , ψ_a , ψ_m , ψ_t und insbesondere das Potenzial, das ein Tensiometer anzeigen würde, nämlich ψ_p !) für jeden der unten angeführten Fälle bzw. Stadien in einer 5 cm hohen Stechzylinderprobe und in der Filterplatte auf, die sich beide in einem Druckplattenapparat befinden!

- a1) Es wird angenommen, dass die Probe soeben aus einem Wasserbad genommen wurde bzw. vollkommen überstaut war und somit noch vollgesättigt auf die Filterplatte gesetzt wird.
- a2) Es wird angenommen, dass die Probe aus a1) ausreichend Zeit vorfand um so viel Wasser an die Filterplatte abzugeben, dass ein neuer Gleichgewichtszustand erreicht ist und somit kein Fluss mehr vorliegt.
- a3) Es wird nicht angenommen, dass die Probe im wassergesättigten Zustand auf die Filterplatte gesetzt wurde, sondern dass sie nach dem Kapillarimeterversuch mit der letzten Druckstufe $\psi_p = 20$ cm WS an der Probenunterkante aus der Filternutsche genommen und auf die Filterplatte im Druckmembranapparat gesetzt wurde.
- b1) Unmittelbar nachdem die Probe aus a1) auf die Filterplatte gesetzt wurde (ein zwischenzeitlicher Gleichgewichtszustand wird nicht abgewartet), wird ein Luftdruck von 50 cm WS im Drucktopf angelegt.
- b2) Die Probe aus a2) wurde soeben mit 50 cm WS Luftdruck beaufschlagt.
- b3) Die Probe aus a3) wurde soeben mit 50 cm WS Luftdruck beaufschlagt.
- c) Nach geraumer Zeit ist ein neuer Gleichgewichtszustand bei 50 cm WS Gasdruckpotenzial erreicht und der Versuch somit abgeschlossen.

Beispiel 1-12: Die abgebildete Messanordnung A dient zur Bestimmung der kapillaren Leitfähigkeit nach dem Einheitsgradientenverfahren. Die mariottesche Flasche bzw. die Höhe der Unterkante des Lufteintrittsrohres, die Austrittsöffnung und der Gasdruck wurden dermaßen eingestellt, dass bei beiden Tensiometern eine gleiche Druckhöhe h (negativ) auftrat und damit ein konstanter Druck über die Höhe der Bodenprobe anzunehmen ist.

Zeichnen Sie die Schwerkraft-, Druck-, Matrix- und Gasdruckpotenzialverteilung, wenn die Unterkante der Bodenprobe bzw. die Oberseite der unteren Filterplatte als Vergleichsebene herangezogen wird und die unten angeführten Werte gemessen wurden!

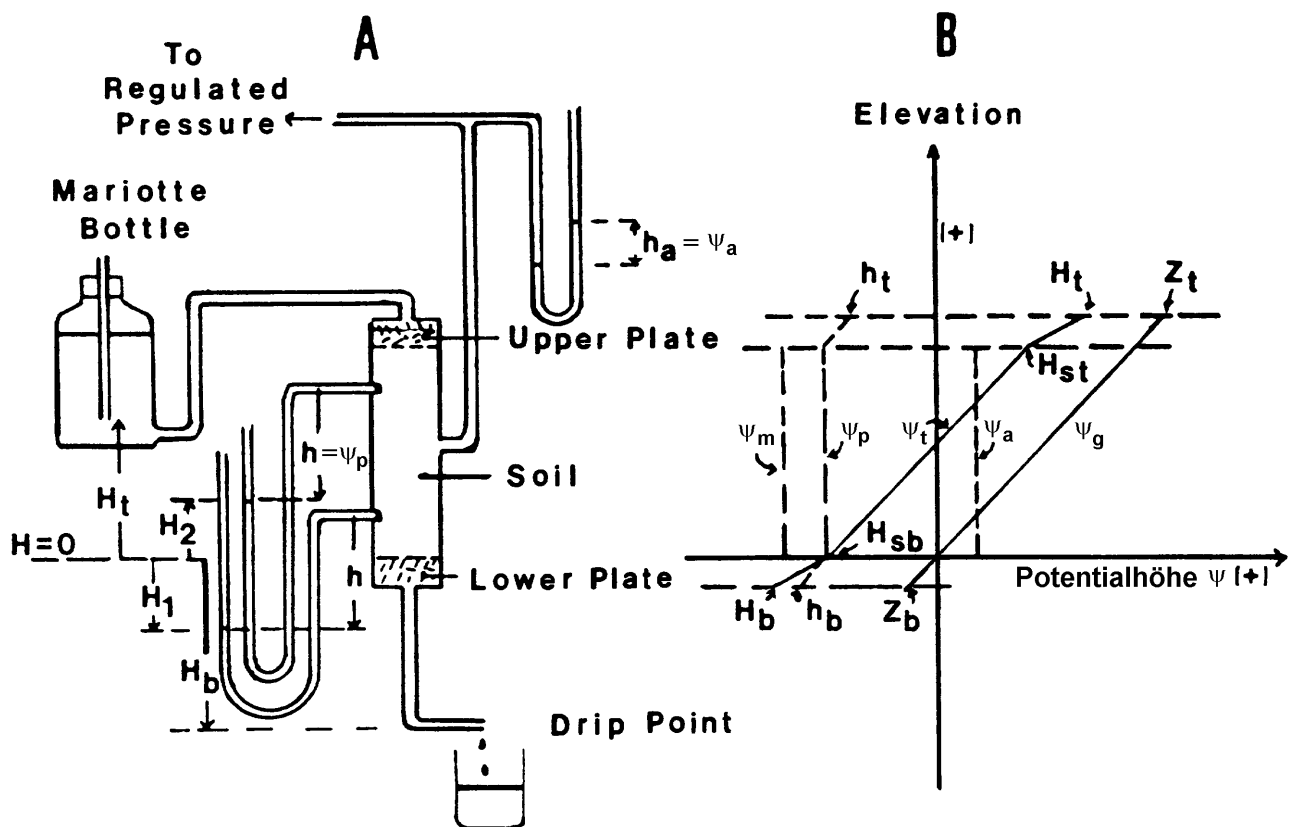


Abbildung 1-13: Verlauf der Teilpotenziale beim Einheitsgradientenverfahren zur Bestimmung des kapillaren Leitvermögens [KLUTE und DIRKSEN, 1986]

$[L]$ = m	Höhe der Bodenprobe
$[h]$ = m	vorhandene Druckhöhe in beiden Tensiometern
$[H_t]$ = m	Höhe der Unterkante des Lufteintrittsrohres über der Vergleichsebene bzw. Gesamtpotenzial an der Oberseite der oberen Filterplatte (unter der Annahme, dass die Strömung zwischen diesen beiden Punkten verlustfrei erfolgt)
$[H_b]$ = m	Höhe des Austrittspunktes (Abtropfpunktes) unter der Vergleichsebene (negativ) bzw. Gesamtpotenzial an der Unterseite der unteren Filterplatte (unter der Annahme, dass die Strömung zwischen diesen beiden Punkten verlustfrei erfolgt)
$[d]$ = m	Dicke der beiden Filterplatten
$[h_a]$ = m	Gasdruck in der Bodenluft

Das Gravitationspotenzial ψ_g beträgt auf der Höhe der vereinbarten Vergleichsebene (Unterkante der Bodenprobe bzw. die Oberkante der unteren Filterplatte) Null und steigt nach oben hin bis zur Oberseite der oberen Filterplatte ($\psi_g = L + d = Z_t$) mit der Neigung 1 und fällt mit derselben Neigung bis zur Unterseite der unteren Filterplatte ($\psi_g = -d = Z_b$).

Das Druckpotenzial ψ_p ist über die Höhe der Bodenprobe konstant und weist den (negativen) Wert h auf. Zieht man vom gegebenen Gesamtpotenzial an der Oberseite der oberen Filterplatte H_t das Gravitationspotenzial $Z_t = L + d$ ab, verbleibt das Druckpotenzial h_t an dieser Stelle: $h_t = H_t - L - d$. Zwischen diesem Punkt und dem Wert h an der Unterkante der oberen Filterplatte kann linear verbunden werden. Ebenso erhält man das Druckpotenzial an der Unterseite der unteren Filterplatte h_b ,

indem man vom gegebenen Gesamtpotenzial H_b das Gravitationspotenzial, das ist die negativ genommene Dicke d der unteren Filterplatte ($Z_b = -d$), abzieht: $h_b = H_b + d$. Zwischen diesem Wert des Druckpotenzials und dem Wert h an der Oberseite der unteren Filterplatte ist wieder linear zu verbinden.

Das Gesamtpotenzial an der Unterseite der unteren Filterplatte ist mit dem Wert H_b gegeben, ist an der Oberseite der Platte bzw. an der Unterkante der Bodenprobe, also an der Vergleichsebene mit $\psi_g = 0$ gleich $h (= H_{sb})$, steigt von dort mit dem Gradienten 1 um den Wert L an der Oberkante der Bodenprobe auf $H_{st} = h + L$ an und weist an der Oberseite der oberen Filterplatte schließlich den gegebenen Wert H_t auf. Das Gasdruckpotenzial ψ_a ist konstant über die Höhe der Bodenprobe und weist die Größe h_a auf.

Das Matrixpotenzial ψ_m schließlich wird aus der umgeformten Gleichung 1-2 ermittelt

$$\psi_m = \psi_p - \psi_a \quad \text{bzw.} \quad h_m = h - h_a$$

$[h_m] = m$ Matrixpotenzialhöhe (die Wasserspannung entspricht der Matrixpotenzialhöhe mit umgekehrten Vorzeichen)

Da sowohl h als auch h_a über die Tiefe konstant sind, ist auch h_m konstant. Weil h_a stets positiv eingestellt wird, ist das Matrixpotenzial kleiner als h und die Wasserspannung tatsächlich größer als der Tensiometerdruck.

1.4.3 Osmotisches Potenzial

Aufgrund des Dipol-Moments der Wassermoleküle üben diese mit dem sie umgebenden elektrischen Feld eine gewisse Anziehungskraft auf gelöste Ionen aus und umgekehrt, sodass die Wassermoleküle das Bestreben haben, sich um die Ionen herum zu gruppieren und damit ihren Energiestatus zu verringern [JURY et al., 1991]. Steht eine Salzlösung mit einer höheren Konzentration in Verbindung mit einer Lösung niedrigerer Konzentration, setzt unweigerlich eine Bewegung des gelösten Stoffes vom Ort der höheren Konzentration zum Ort der niedrigeren und gleichzeitig ein Fluss des Wassers in umgekehrte Richtung ein, bis beide Orte dasselbe osmotische Potenzial aufweisen (*Isotonie*). Unterschiede im osmotischen Potenzial an zwei Orten werden daher immer ausgeglichen, selbst dann, wenn die Gesamtpotenziale beider Orte gleich sind und sich auch zeitlich nicht ändern.

Eine Ausnahme bilden jedoch vor allem zwei natürliche Gegebenheiten, bei denen eine Diffusionsbarriere eine *Migration* der gelösten Stoffe verhindert: die Oberfläche der Pflanzenwurzeln und die Phasengrenze flüssig – gasförmig bzw. der Übergang des Bodenwassers zur Bodenluft bzw. zur freien Atmosphäre [KOOEVAAR, 1983]. Während die Pflanzenwurzel als nicht ganz dichte semipermeable Wand anzusehen ist, gehen an der Phasengrenze zwar Wassermoleküle in den gasförmigen Zustand über, nicht jedoch die gelösten Salze, sodass durch die Verdunstung in der verbleibenden Lösung eine Aufkonzentration erfolgt.

Das Bezugssystem für das osmotische Potenzial enthält definitionsgemäß reines Wasser. Da Arbeit verrichtet werden muss, um Wasser aus dem vorhandenen System in ein Bezugssystem, das sich nur durch die Abwesenheit von gelösten Ionen unterscheidet, überzuführen (das Wasser muss der Lösung entzogen werden), ist der Energiestatus des Bodenwassers bzw. des vorhandenen Systems kleiner als des Bezugssystems und das osmotische Potenzial ψ_o immer negativ.

Bei der Ermittlung des osmotischen Potentials ist vom *osmotischen Druck Π* auszugehen, der per definitionem immer positiv ist. Eine anschauliche Erklärung für den osmotischen Druck liefert die *pfeffersche Zelle* [VOGEL, 1999]. Man schließt hierfür ein Gefäß mit einem Steigrohr durch eine semipermeable Wand ab, füllt es mit der betrachteten Lösung und stellt es in ein größeres Gefäß mit reinem Wasser. Allmählich dringt Wasser durch die Wand in die Zelle und bringt die Lösung im Rohr zum Steigen, bis der hydrostatische Druck der Flüssigkeitssäule im Rohr ein weiteres Eindringen verhindert. Dieser Druck ist dann gleich dem osmotischen Druck der Lösung.

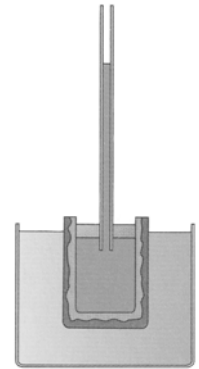


Abbildung 1-14: Pfeffersche Zelle [VOGEL, 1999]

Beim Aufprall auf die semipermeable Membran üben die gelösten Moleküle genau den gleichen Druck aus, als sei das Lösungsmittel nicht vorhanden und sie schwebten als Gasteilchen im leeren Raum. Der osmotische Druck ist also genauso groß wie der Druck eines Gases gleicher Teilchenzahldichte. Makroskopisch ausgedrückt lautet dieses Gesetz von van't HOFF wie die ideale Gasgleichung [VOGEL, 1999] [JURY et al., 1991]

$$\hat{\Pi} = C_{SL} \cdot R \cdot T \quad (1-3)$$

- [$\hat{\Pi}$] = Pa Näherungswert für den osmotischen Druck
 [C_{SL}] = mol·m⁻³ Molarität, (Stoffmengen-)Konzentration der Salzlösung. Wenn der gelöste Stoff in Ionen dissoziiert, ist dies bei der Stoffmengenkonzentration zu berücksichtigen. Na⁺Cl⁻ z. B. erzeugt den doppelten osmotischen Druck, als wenn es in Form von NaCl-Molekülen gelöst wäre.
 [R] = J·K⁻¹·mol⁻¹ ≡ Pa·m³·K⁻¹·mol⁻¹ universelle Gaskonstante; $R = 8,314510 \text{ J} \cdot \text{K}^{-1} \cdot \text{mol}^{-1}$
 [T] = K Temperatur in Kelvin

Eine Abschätzung des osmotischen Druckes einer gesättigten Bodenwasserlösung ist mit Hilfe einer Messung der *elektrischen Leitfähigkeit* möglich [OR und WRAITH, 1997a]:

$$\hat{\Pi} = 36 \cdot EC_S \quad (1-4)$$

- [$\hat{\Pi}$] = kPa osmotischer Druck einer gesättigten Lösung
 [EC_S] = dS·m⁻¹ elektrische Leitfähigkeit einer gesättigten Lösung

Beispiel 1-13: Berechne näherungsweise den osmotischen Druck einer 0,01-molaren Salzsäure-Lösung bei einer Temperatur von 300 K (= 26,85 °C) [JURY et al., 1991].

Die Molarität wird normalerweise in mol·dm⁻³ angegeben, d. h. eine 0,01-molare Lösung besitzt 0,01×10³ mol Salzsäure pro m³ Lösung. Aus Formel 1-3 ergibt sich

$$\hat{\Pi} = 10 \times 8,3145 \times 300 = 24900 \text{ Pa} = 0,249 \text{ bar.}$$

Wenn in einem Liter 0,01 mol Salzsäure enthalten ist, sind gleichzeitig 0,01 mol H⁺-Ionen und 0,01 mol Cl⁻-Ionen dissoziiert enthalten. Das heißt, dass der osmotische Druck von 0,249 bar sowohl vom Wasserstoff- als auch vom Chlorid-Ion verursacht wird. Der osmotische Druck 0,01-molarer Salzsäure beträgt daher 2×0,249 bar = 0,499 bar.

Das osmotische Potenzial ψ_o kann als Folge des osmotischen Druckes Π angeschrieben werden als

$$\boxed{\psi_o = -\frac{\Pi}{\rho_{SL}}}$$

$[\psi_o]$ = J·kg⁻¹ osmotisches Potenzial

$[\Pi]$ = Pa osmotischer Druck

$[\rho_{SL}]$ = kg·m⁻³ Dichte der Salzlösung, zumeist nur geringfügig größer als die reinen Wassers

bzw. mit der Näherung für Π $\hat{\psi}_o = -\frac{C_{SL} \cdot R \cdot T}{\rho_{SL}}$ (1-5)

$[\hat{\psi}_o]$ = J·kg⁻¹ angenähertes Potenzial in der Einheit der auf die Masse bezogenen Energie

MICHEL und RADCLIFFE [1995] haben in einem Fachartikel die funktionelle Abhängigkeit des osmotischen Potenzials von der Lösungskonzentration und der Temperatur für insgesamt vier verschiedene Stoffe – Mannitol (ein 6-wertiger Alkohol), Natriumchlorid, Kaliumchlorid und für Zucker – in einem Softwareprogramm dargestellt. Ausgangspunkt für die Ermittlung von ψ_o ist die Näherungsgleichung 1-5. Im Folgenden steht der Index SL für die Lösung, L für das Lösungsmittel und S für den Stoff; bezüglich der Konzentrationseinheiten siehe Tabelle 7-2.

Das Verhältnis des gesuchten exakten Wertes ψ_o zum Näherungswert $\hat{\psi}_o$ wurde durch die Einführung eines dimensionslosen osmotischen Koeffizienten φ berücksichtigt. Ein Problem stellte die Angabe der Lösungskonzentration dar, die in Gl. 1-5 durch die Molarität festgelegt ist. Eine Stofflösung bestehend aus der Lösungsmittelmasse m_L und der Stoffmasse m_S besitzt bei unterschiedlicher Temperatur unterschiedliche Dichte und damit unterschiedliches Lösungsvolumen. Das bedeutet, dass die Molarität der Lösung (Quotient aus Stoffmenge und Lösungsvolumen; die Stoffmasse m_S ist das Produkt der Stoffmenge n und der molaren Masse: $m_S = n \cdot M$) temperaturabhängig ist. Hingegen ist die Molalität (Quotient aus Stoffmenge und Lösungsmittelmasse) konstant. MICHEL und RADCLIFFE geben daher die gewünschte Lösungskonzentration durch die Molalität an. Zur Umrechnung der Molalität in die Molarität benötigt man die Massenkonzentration oder Partialdichte des Lösungsmittels ρ_L :

$$\frac{\text{Stoffmenge}}{\text{Lösungsvolumen}} = \frac{\text{Stoffmenge}}{\text{Lösungsmittelmasse}} \times \frac{\text{Lösungsmittelmasse}}{\text{Lösungsvolumen}} \quad \text{bzw.} \quad \frac{n}{V_{SL}} = \frac{n}{m_L} \times \frac{m_L}{V_{SL}}$$

oder $\text{Molarität} = \text{Molalität} \times \text{Partialdichte}$

Um ρ_L ermitteln zu können, müsste das Lösungsvolumen V_{SL} und die Wassermasse m_L bekannt sein (nebenbei gilt $\rho_L = m_L/V_{SL} = \rho_{SL} - \rho_S = (m_S + m_L)/V_{SL} - m_S/V_{SL}$); dann kann aber die Molarität unmittelbar angegeben werden: $\text{Molarität} = \text{Molalität} \times m_L/V_{SL}$. Eine Berechnung von ρ_L ist selbst dann nicht möglich, wenn neben der Molalität auch die Dichte der Lösung bekannt ist (die zwei Gleichungen $\text{Molalität} = m_S/(M \cdot m_L)$ und $\rho_{SL} = (m_S + m_L)/V_{SL}$ beinhalten drei Unbekannte). Die beiden Autoren haben nun die Partialdichte des Lösungsmittels durch das Produkt aus der Dichte reinen Wassers und einem Korrektorkoeffizienten ersetzt, der im osmotischen Koeffizienten φ berücksichtigt und damit aus der Gleichung eliminiert wurde. Zur Formulierung der Abhängigkeit der Dichte von der Temperatur t in °C benutzten sie ein Polynom vierten Grades (vergl. Anhang ab S. 213):

$$\rho_W = 998,7 + 659,68 \times 10^{-4} \cdot t - 872,2 \times 10^{-5} \cdot t^2 + 756,6 \times 10^{-7} \cdot t^3 - 449 \times 10^{-9} \cdot t^4.$$

Für das gesuchte Potenzial erhält man schließlich

$$\psi_o = -C_{SL}^* \cdot R \cdot T \cdot \rho_W \cdot \varphi \quad (1-6)$$

$[\psi_o]$ = Pa osmotisches Potenzial, als Druck angegeben
 $[C_{SL}]^*$ = mol·kg⁻¹ Molalität; Konzentration der Salzlösung
 $[R]$ = J·mol⁻¹·K⁻¹ universelle Gaskonstante, $R = 8,314510 \text{ J} \cdot \text{mol}^{-1} \cdot \text{K}^{-1}$.

Die beiden Autoren benutzten R in der Form
 $R = 8,314510 \times 10^{-6} \text{ m}^3 \cdot \text{MPa} \cdot \text{mol}^{-1} \cdot \text{K}^{-1}$ ($1 \text{ m}^3 \cdot \text{MPa} \equiv 1 \text{ MJ}$)

$[T]$ = K Temperatur in Kelvin
 $[\rho_w]$ = kg·m⁻³ Dichte reinen Wassers, geringfügig temperaturabhängig
 $[\varphi]$ = dim.los osmotischer Koeffizient. Da $\rho_L = \rho_w \cdot V_L/V_{SL}$ bzw. $m_L/V_{SL} = (m_L/V_L) \cdot (V_L/V_{SL})$ ist, lautet die theoretische Bestimmungsgleichung für den osmotischen Koeffizienten nach MICHEL und RADCLIFFE $\varphi = \frac{\psi_o}{\hat{\psi}_o} \cdot \frac{V_L}{V_{SL}}$.

Die Hauptschwierigkeit bestand in der Eruiierung der osmotischen Koeffizienten (für unterschiedliche Temperaturen), die MICHEL und RADCLIFFE teilweise aus Literaturwerten und zum Teil aus eigenen Untersuchungen gewonnen wurden. Der funktionale Zusammenhang mit der Temperatur wurde schließlich im Programm SPMM zusammengefasst. Stellvertretend seien die Resultate für eine Steinsalzlösung und eine Zuckerslösung bei unterschiedlichen Konzentrationen und bei den zwei Temperaturen 20 °C und 10 °C in der Tabelle 1-4 angeführt. Eine wichtige Erkenntnis aus den Werten dieser Tabelle ist die beträchtliche Größenordnung des osmotischen Potenzials schon bei relativ geringen Konzentrationen ($1 \text{ MPa} \equiv 10 \text{ bar} \approx 100 \text{ m WS}$).

Beispiel 1-14: Bei welcher Speisesalzkonzentration (Zimmertemperatur) entspricht das osmotische Potenzial etwa dem Tensiometerpotenzial beim Welkepunkt?

Häufig wird angenommen, dass der Welkepunkt etwa bei einer Wasserspannung von 15 bar bzw. einem Matrixpotenzial von $\psi_m = -15 \text{ bar}$ im Boden auftritt (ob Pflanzen bei einem Tensiometerdruck $p_t = 15 \text{ bar}$ und $\Pi = 0$ gleichermaßen Welkerscheinungen zeigen wie bei $p_t = 0$ und $\Pi = 15 \text{ bar}$, sei dahingestellt). Setzt man im Programm SPMM für die Temperatur $t = 20 \text{ °C}$, für den gelösten Stoff NaCl, für das osmotische Potenzial $\psi_o = -1,5 \text{ MPa}$ und für das gewünschte Volumen der Lösung $V_{SL} = 1000 \text{ ml}$ ein, so ergibt die Berechnung 19,5 g Speisesalz pro 1000 ml Lösung. Typisches Meerwasser weist etwa 36 g/l auf (siehe S. 182).

Im Vergleich zur erforderlichen Konzentration von 19,5 g/l NaCl für ein osmotisches Potenzial von -15 bar ist eine physiologische Kochsalz-Lösung mit etwa 9 g/l NaCl *isotonisch* [VOGEL, 1999].

Beispiel 1-15: Welchen osmotischen Druck bewirkt ein Bewässerungswasser mit Zimmertemperatur, in dem nur die Ionen Natrium und Chlorid enthalten sind, Chlorid allerdings in der höchstzulässigen Konzentration und Natrium in einer anteilmäßig dem Speisesalz entsprechenden?

In den Empfehlungen für Bewässerungswasser [1992] findet sich in Tabelle 7 für die unterste Kategorie „starke Schädigung durch Chloride“ ein Gehalt von > 280 mg/l. Da Natrium eine relative Atommasse von $A_r(\text{Na}) = 22,990$ und Chlor eine solche von $A_r(\text{Cl}) = 35,453$ besitzt, muss in Salzwasser

$$280 \times 22,990 / 35,453 = 181,6 \text{ mg/l Natrium}$$

enthalten sein. Es sind also $280 + 181,6 = 461,6$ mg/l bzw. weniger als ein halbes Gramm Speisesalz in einem Liter Lösung enthalten. Im Vergleich dazu weist typisches Meerwasser einen Gehalt von 36 g Salz pro Liter Meerwasser auf (siehe S. 182) (osmotisches Potenzial dieses Meerwassers bei 15 °C, wenn der gesamte Salzgehalt auf NaCl beruhen würde: -27,3 bar). Für die Eingabe im Programm von MICHEL und RADCLIFFE ist das Verhältnis g Salz / g Wasser erforderlich; es ist daher zu ermitteln, mit wie viel g Wasser das Speisesalz aufzufüllen ist, um 1000 ml Lösung zu erhalten. Da die genaue Dichte von Salzwasser mit der gegebenen Konzentration zwar unbekannt, aber jedenfalls größer ist als die reinen Wassers, müssen 462 mg gelöstes Speisesalz weniger als 0,46 ml Volumen einnehmen. Das Wasservolumen beträgt demnach rund 999,6 ml und die Masse $999,6 \times 0,99821 = 997,81$ g (Dichte von reinem Wasser bei 20 °C siehe Tabelle 7-9 auf S. 181). Das Massenverhältnis in der Lösung beträgt demnach $0,46157 / 997,81 = 0,0004626$ g NaCl / g H₂O. Das Programm SPMM liefert für diese Konzentration einen osmotischen Druck von 0,04 MPa bzw. 0,4 bar. Allerdings ist der Berechnungsansatz im Programm bei geringen Konzentrationen mit einem größeren Fehler behaftet.

Ob die hohe Natrium-Konzentration von rund 180 mg/l im Bewässerungswasser eine Pflanzenschädigung hervorrufen würde, hängt nicht zuletzt vom SAR-Wert ab.

Durch die Einbeziehung des osmotischen Potenzials müssen zwei unterschiedliche Bedingungen für den stationären Ruhezustand der Wasserkomponente formuliert werden [KOOOREVAAR, 1983]:

Grundsätzlich findet gemäß der Potenzialtheorie dann kein Fluss statt, wenn kein Gradient des Gesamtpotenzials (das osmotische Potenzial miteinschließend) vorhanden ist. Daraus würde folgen, dass zwischen Punkten mit unterschiedlichem osmotischem Potenzial, aber gleichem Gesamtpotenzial (der Unterschied im osmotischen Potenzial entspricht dem Unterschied im Druck- und/oder Schwerkraftpotenzial zwischen den zwei Punkten) keine Strömung vorliegt. Wenn sich die gelösten Salze bzw. die Lösung frei im Boden bewegen können, wird jedoch immer durch die Diffusion eine Bewegung von Salzpartikel zum Punkt mit der geringeren Konzentration und im Gegenzug eine Bewegung des Wassers vom Punkt mit der geringeren Konzentration zum Punkt mit der höheren Konzentration stattfinden, sodass sich über kurz oder lang ein Konzentrationsausgleich einstellt. Ein stationärer Ruhezustand liegt also nur dann vor, wenn im gesamten betrachteten Gebiet konstantes osmotisches Potenzial herrscht. Da auch das Gesamtpotenzial konstant sein muss, muss daher auch das hydraulische Potenzial als Summe des Druck- und des Schwerkraftpotenzials konstant sein.

Sind die Punkte durch eine semipermeable Barriere getrennt, so genügt es, wenn das Gesamtpotenzial gleich ist. Das osmotische Potenzial kann hierbei durchaus unterschiedlich sein. Das ist z. B. in trockenen Tonböden der Fall, wobei das Bodenwasser in isolierten kleinen Poren oder Doppelschichten gespeichert ist und über die Gasphase transportiert werden müsste.

Ein interessantes Verhalten zeigen zwei Flüssigkeiten mit unterschiedlichen Lösungskonzentrationen, wenn sie durch eine semipermeable Wand getrennt sind, die Wasser ungehindert und Salze bzw. gelöste Stoffe sehr eingeschränkt durchtreten lässt [KOOREVAAR, 1983] (Abbildung 1-15). Aufgrund des osmotischen Potenzialgradienten bewegt sich eine Teilmenge des reinen Wassers relativ rasch durch die Membran und führt zu unterschiedlichen Wasserständen in den Behälterhälften. Die Wasserspiegeldifferenz entspricht dem Unterschied der osmotischen Potentiale der beiden Flüssigkeiten. Gleichzeitig setzt eine langsame diffusive Bewegung des gelösten Stoffes von der hoch konzentrierten Lösung in das reine Wasser ein. Nachdem durch die Wasserbewegung relativ rasch ein Ausgleich in den beiden Gesamtpotenzialen erfolgt ist, ist immer noch ein erheblicher Unterschied in den Lösungskonzentrationen vorhanden. Der gelöste Stoff wandert daher weiterhin von der Lösung mit der höheren Konzentration zu der mit der geringeren und bewirkt gleichzeitig eine geringe Wasserströmung, die die Veränderungen im osmotischen Potenzial laufend ausgleicht. Erst nach längerer Zeit ist in beiden Lösungen dieselbe Konzentration und derselbe Wasserspiegel vorhanden, sodass kein Transport mehr durch die teildurchlässige Trennwand erfolgt.

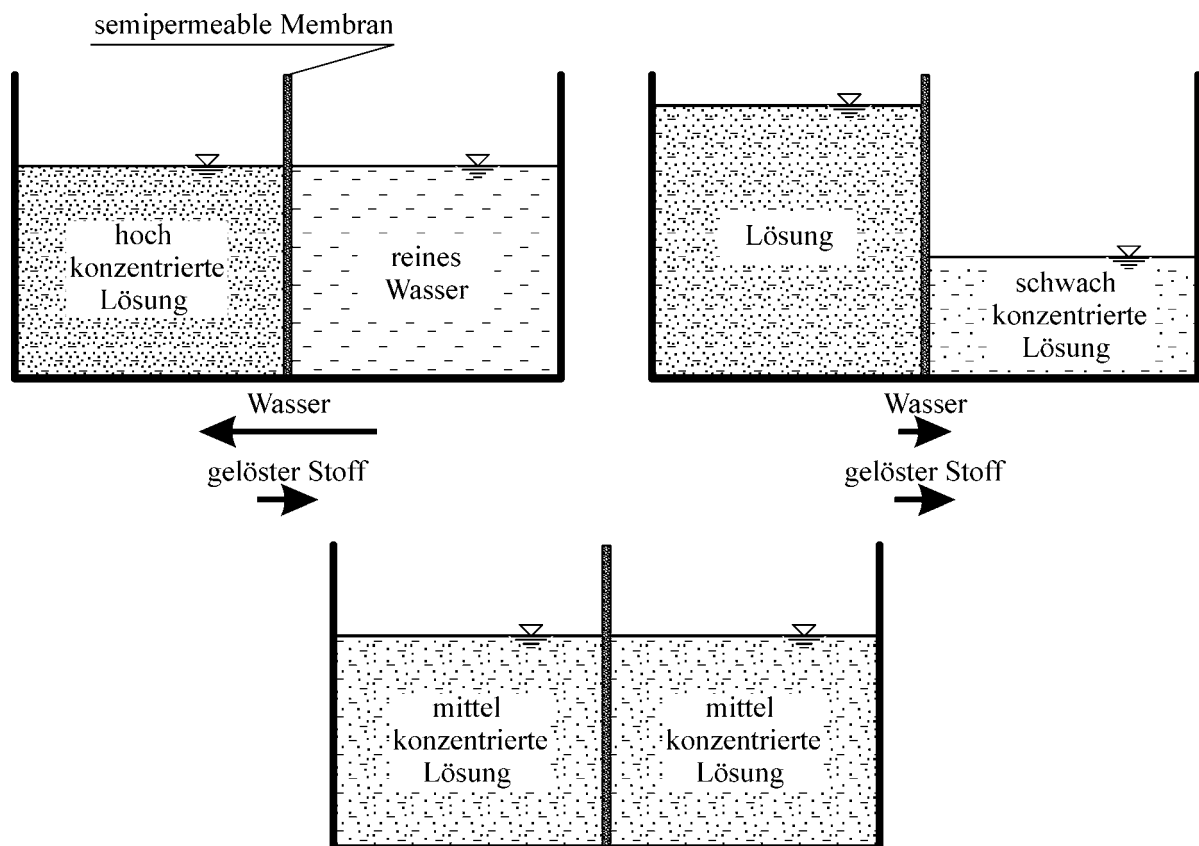


Abbildung 1-15: Verhalten zweier durch eine teildurchlässige Wand getrennter Flüssigkeiten

Es gibt seit langem Bestrebungen, den Messbereich von Tensiometern über eine Wasserspannung von etwa 8 m hinaus durch Verwendung von osmotischen Flüssigkeiten beträchtlich zu vergrößern.

Jene scheiterten bislang an der unzureichenden Haltbarkeit der semipermeablen Membranen zur Verhinderung der Migration der großmolekularen Ionen in den Boden.

1.4.4 Potenzial des Wasserdampfes

Das Wasser im Boden (als auch in den Spaltöffnungen der Blätter) liegt im allgemeinen in der flüssigen Phase als Bodenwasserlösung (bzw. als Pflanzensaft) und in der Gasphase als Wasserdampf vor. Dämpfe sind per definitionem Gase, die entweder mit ihrer flüssigen Phase in Verbindung stehen (Nassdampf) oder sich in der Nähe ihrer Verflüssigung befinden [HOHMANN, 1971]. Sie unterscheiden sich demnach von den sonstigen, nicht kondensierenden Gasen dadurch, dass sie im betrachteten Druck- und Temperaturbereich – also z. B. unter Atmosphärenbedingungen – als reine flüssige oder feste Phase ausfallen können.

Das für die Bewegung des flüssigen Wassers im Boden grundlegende Potenzialkonzept kann auch als Basis für den Phasenübergang und für den Transport in der Gasphase angesehen werden. Der Transport des Wasserdampfes in der Gasphase beruht so wie der Transport von Komponenten von Gasgemischen im Allgemeinen auf zwei Prozessen. Während die treibende Kraft für die Konvektion (auch als *Massenfluss* bezeichnet) der Gradient des Gasgesamtdruckes ist, beruht die Diffusion auf dem Gradienten des Wasserdampfpartialdruckes, kurz des *Dampfdruckes* p [HILLEL, 1998]. Der Dampfdruck p ist auch eine wesentliche Zustandsgröße für die quantitative physikalische Beschreibung des Phasenüberganges bzw. der Verdunstung, doch ist hierfür die Kenntnis des kompletten thermodynamischen Systems erforderlich. Deshalb wird im weiteren – im Gegensatz zur Wasserbewegung in der flüssigen Phase – auf eine Beschreibung bzw. physikalische Modellierung des Phasenüberganges verzichtet und die Bewegung von Stoffen in der Gasphase nur im Rahmen des Stofftransportes behandelt (siehe Kapitel 5.2). Mit dem weiter unten vorgestellten Potenzial des Wasserdampfes kann ohne ein dynamisches Modell allerdings ausgesagt werden, ob ein Nettofluss zwischen der flüssigen und der Gasphase stattfindet oder nicht.

Reines, flüssiges Wasser befindet sich in einem Gefäß, das nach oben gegen die Atmosphäre geöffnet sei, und bilde eine freie Oberfläche aus. Wenn gleich viele Moleküle die Flüssigkeitsoberfläche verlassen und in den gasförmigen Zustand der Umgebungsluft übertreten wie umgekehrt Wasserdampfmoleküle in der feuchten Luft kondensieren und in die Flüssigkeit im Gefäß eintreten (der Nettofluss zwischen den Phasen beträgt Null), ist die Luft unmittelbar über der Wasseroberfläche wasserdampfgesättigt. Der Partialdruck des Wasserdampfes entspricht definitionsgemäß dem *Sättigungsdampfdruck* p_s über einer freien Wasseroberfläche. Ist der aktuelle Dampfdruck p bei derselben Temperatur hingegen niedriger, ist die Luft ungesättigt; das Potenzial des Wasserdampfes ist kleiner als das des flüssigen Wassers. Das Verhältnis p/p_s wird als *relative Luftfeuchtigkeit* RH bezeichnet. Die Wassermoleküle in der flüssigen Phase werden so lange verdampfen bzw. in die Gasphase übertreten, bis wieder ein neues Potenzialgleichgewicht hergestellt bzw. bis wieder der Sättigungsdampfdruck erreicht ist. Die *Fugazität* von Wassermolekülen, also die Tendenz sich aus der Flüssigkeit zu befreien, hängt von der Temperatur, dem Atmosphärendruck, dem Potenzial des Wassers in der flüssigen Phase und dem Fremdstoffgehalt in der Oberfläche ab. Das im Meniskus einer Kapillaren gehaltene Wasser besitzt infolge der Oberflächenspannung ein negatives Druckpotenzial $\psi_p < 0$ bzw. ein kleineres Gesamtpotenzial als eine freie Oberfläche und muss demnach geringere Fugazität aufweisen. Dementsprechend ist über einem Meniskus auch der Dampfdruck

geringer [FLÜHLER, 1991]. Dasselbe gilt auch für osmotische Lösungen. Das wird durch die folgende Abbildung 1-16 veranschaulicht und durch die anschließende Herleitung physikalisch belegt.

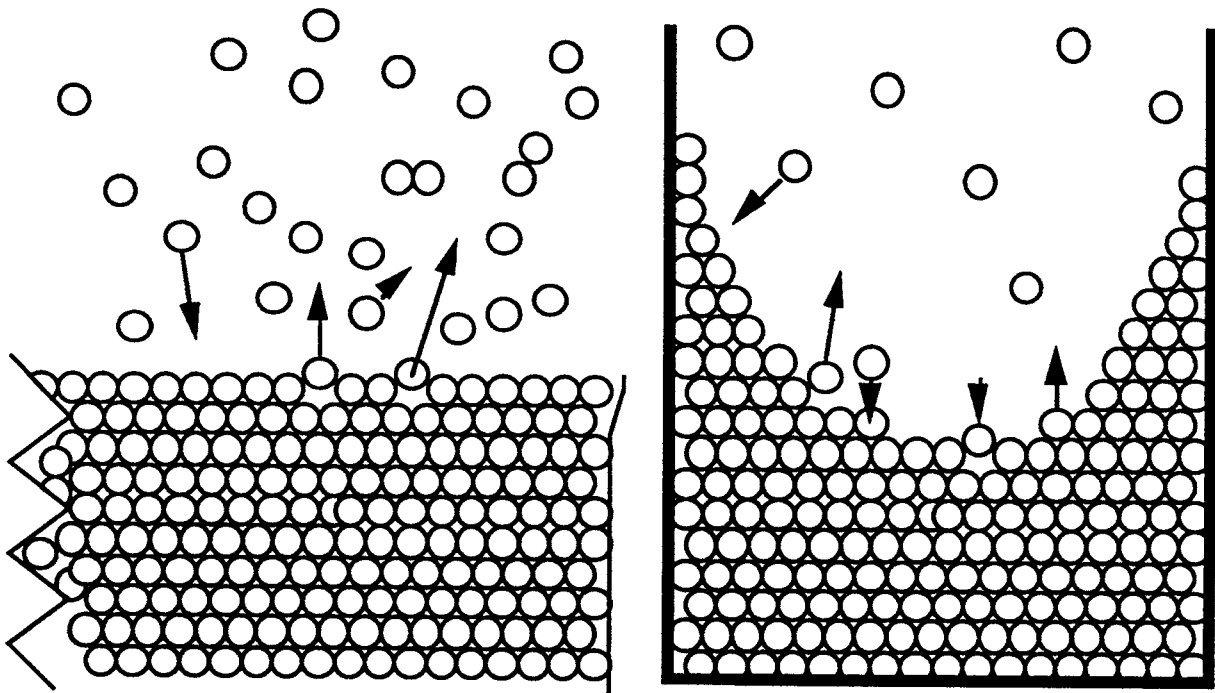


Abbildung 1-16: Fugazität von Wassermolekülen [FLÜHLER, 1991]

MARSHALL et al. [1996] leiten die Zusammenhänge zwischen dem reduzierten Sättigungsdampfdruck und dem Tensiometerdruck bzw. dem osmotischen Druck mit Hilfe eines sehr anschaulichen Gedankenmodells her. VOGEL [1999] beschreibt denselben Sachverhalt unmittelbar als Lehrsatz der kinetischen Gastheorie, wonach das Verhältnis der Teilchenzahldichten und damit der Partialdrücke an zwei Orten eine Funktion der Differenz der potentiellen Energien an diesen beiden Orten gemäß der Boltzmann-Verteilung ist. Im folgenden soll allerdings die Herleitung von KOOREVAR et al. [1983] nachvollzogen werden.

Dem Potenzialkonzept zufolge findet genau dann kein Nettofluss zwischen der flüssigen und der gasförmigen Phase statt, wenn das Gesamtpotenzial in beiden Phasen gleich ist. Wasserdampf besteht aus reinem Wasser und hat definitionsgemäß ein osmotisches Potenzial gleich Null. Sein Gesamtpotenzial ist daher nur durch den Dampfdruck und durch seine Lage im Schwerfeld definiert. Das Druckpotenzial eines Fluids mit veränderlicher Dichte lautet

$$\psi_p = \int \frac{1}{\rho} dp. \quad (1-7)$$

Das ideale Gasgesetz wird nun dazu benutzt, die Dichte als eine Funktion des Druckes darzustellen und im Potenzial zu ersetzen:

$$p \cdot V = n \cdot R \cdot T \quad \rightarrow \quad n = \frac{p \cdot V}{R \cdot T}$$

[p]	= Pa	Dampfdruck
[V]	= m ³	Volumen
[n]	= mol	Stoffmenge
[R]	= J·mol ⁻¹ ·K ⁻¹	universelle (molare) Gaskonstante; R = 8,314510 J·mol ⁻¹ ·K ⁻¹
[T]	= K	Temperatur

In die Beziehung für die Dichte $\rho = \frac{n \cdot M}{V}$

$[M] = \text{kg} \cdot \text{mol}^{-1}$ molare Masse; für Wasserdampf: $M = 18,015 \times 10^{-3} \text{ kg} \cdot \text{mol}^{-1}$ (siehe Formel 7-1)
 $[\rho] = \text{kg} \cdot \text{m}^{-3}$ Dichte

wird der aus dem Gasgesetz gewonnene Ausdruck für n eingesetzt

$$\rho = \frac{p \cdot V}{R \cdot T} \cdot \frac{M}{V} = \frac{p \cdot M}{R \cdot T}$$

und damit das Druckpotenzial (1-7) formuliert: $\psi_p = \int \frac{R \cdot T}{p \cdot M} dp$.

Für das Gesamtpotenzial $\psi_{t \text{ Dampf}} = \psi_p + \psi_g$

ergibt sich daher:
$$\psi_{t \text{ Dampf}} = \int \frac{R \cdot T}{p \cdot M} dp + g \cdot z = \frac{R \cdot T}{M} \cdot \ln p + g \cdot z + C. \quad (1-8)$$

C ist hierbei eine Integrationskonstante, die sich aus dem Vergleichsniveau für den Energieinhalt ergibt. Ist der Partialdruck des Wasserdampfes gleich dem Sättigungsdampfdruck ($p = p_S$), muss Gleichung 1-8 für $\psi_{t \text{ Dampf}}$ genau das Gesamtpotenzial an einer freien Wasserspiegeloberfläche $\psi_{t \text{ flüssig}}$ liefern, weil nur unter dieser Bedingung kein Phasen-Nettofluss stattfindet (was wegen $p = p_S$ gefordert ist). Durch diese Gleichsetzung kann C bestimmt werden durch

$$\psi_{t \text{ flüssig}} = g \cdot z = \psi_{t \text{ Dampf}} = \frac{R \cdot T}{M} \cdot \ln p_S + g \cdot z + C. \quad (1-9)$$

$$C = -\frac{R \cdot T}{M} \cdot \ln p_S. \quad (1-10)$$

Gl. 1-10 in 1-8 eingesetzt liefert
$$\psi_{t \text{ Dampf}} = \frac{R \cdot T}{M} \cdot \ln \left(\frac{p}{p_S} \right) + g \cdot z. \quad (1-11)$$

Damit ist der funktionale Zusammenhang zwischen dem Dampfgesamtpotenzial und der relativen Luftfeuchtigkeit hergestellt. Für die Gegebenheiten des Bodenwassers ist das Gesamtpotenzial der freien Wasserspiegeloberfläche ($\psi_{t \text{ flüssig}} = g \cdot z$) durch jenes des Bodenwassers, also der Summe aus Druckpotenzial und osmotischem Potenzial zu ersetzen. Wenn kein Nettofluss zwischen den Phasen auftreten soll, muss an der Phasengrenze zwischen der Bodenwasserlösung und der Bodenluft ebenfalls ein Gleichgewicht herrschen, also

$$\left[\frac{1}{\rho_w} \cdot (p_T - \Pi) = \frac{R \cdot T}{M} \cdot \ln \left(\frac{p_S^*}{p_S} \right) \right]. \quad (1-12)$$

$[p_T] = \text{Pa}$ Tensiometerdruck, im allgemeinen negativ
 $[\Pi] = \text{Pa}$ osmotischer Druck (immer positiv)
 $[p_S^*] = \text{Pa}$ reduzierter Sättigungsdampfdruck über einem Kapillarmeniskus der Bodenwasserlösung

Die Auflösung der Gleichung 1-12 nach dem Verhältnis des reduzierten Sättigungsdampfdruckes zum Sättigungsdampfdruck über einer freien Oberfläche liefert

$$\frac{p_S^*}{p_S} = \exp \left(\frac{p_T - \Pi}{\rho_w} \cdot \frac{M}{R \cdot T} \right) \quad (1-13)$$

und für den reduzierten Sättigungsdampfdruck

$$p_S^* = p_S \cdot \exp \left(\frac{p_T - \Pi}{\rho_w} \cdot \frac{M}{R \cdot T} \right).$$

Um zu konkreten Werten für das Verhältnis p_S^*/p_S zu gelangen, wird eine Temperatur von 20 °C bzw. $20 + 273,15 = 293,15$ K gewählt. Die Dichte von Wasser beträgt hierfür laut Tabelle 7-9 $\rho_w = 998,20 \text{ kg}\cdot\text{m}^{-3}$, $R = 8,314510 \text{ J}\cdot\text{mol}^{-1}\cdot\text{K}^{-1}$ und $M_{\text{H}_2\text{O}} = 18,015 \times 10^{-3} \text{ kg}\cdot\text{mol}^{-1}$ (laut Formel 7-1). Das Einsetzen dieser Größen in die Gleichung 1-13 liefert

$$\ln\left(\frac{p_S^*}{p_S}\right) = \frac{p_T - \Pi}{998,20} \cdot \frac{18,015 \times 10^{-3}}{8,314510 \times 293,15} \text{ Pa}^{-1}$$

$$\ln\left(\frac{p_S^*}{p_S}\right) = 7,404 \times 10^{-9} \text{ Pa}^{-1} \cdot (p_T - \Pi)$$

bzw.
$$\boxed{\frac{p_S^*}{p_S} = \exp(7,404 \times 10^{-9} \text{ Pa}^{-1} \cdot (p_T - \Pi))} \quad \text{für } t = 20 \text{ °C.} \quad (1-14)$$

Der Quotient aus p_S^* und p_S darf nicht mit der relativen Luftfeuchte RH verwechselt werden. Er beschreibt lediglich, wie sich p_S^* und p_S bei bestimmten Tensiometer- und osmotischen Drücken p_T und Π zueinander verhalten – unabhängig davon, wie groß der aktuelle Dampfdruck p tatsächlich ist. Die Kenntnis von p_T und Π und Gleichung 1-14 reichen nicht aus, um RH zu ermitteln; hierfür müssen alle bestimmenden Parameter für den Phasenübergang und der gesamte aktuelle thermodynamische Zustand bekannt sein. Für einen speziellen Zustand allerdings, nämlich wenn die Nettoverdunstung Null ist und demzufolge zwischen dem Bodenwasser und dem Wasserdampf in der Boden- bzw. in der Atmosphärenluft Gleichgewicht herrscht, kann aus der mathematischen Beschreibung des Phasenübergangs eine sehr einfache Beziehung abgeleitet werden. Für diesen Spezialfall – und nur für diesen – gilt

$$RH \equiv \frac{p}{p_S} \times 100 = \frac{p_S^*}{p_S} \times 100. \quad (1-15)$$

$[RH]$	= %	relative Luftfeuchtigkeit
$[p]$	= Pa	aktueller Dampfdruck in der Boden- bzw. in der Atmosphärenluft
$[p_S]$	= Pa	Sättigungsdampfdruck über einer freien Oberfläche reinen Wassers
$[p_S^*]$	= Pa	reduzierter Sättigungsdampfdruck

Ist der aktuelle Dampfdruck p in der Bodenluft kleiner als der reduzierte Sättigungsdampfdruck p_S^* und demzufolge auch $RH/100 < p_S^*/p_S$, verdunstet Bodenwasser, während es bei $p_S^* < p < p_S$ schon zur Kondensation bzw. Taubildung im Boden kommt, in der freien Atmosphäre über einer freien Wasseroberfläche hingegen immer noch Verdunstung stattfinden kann.

Die sehr kleine Konstante im Exponenten der Gleichung 1-14 bewirkt, dass der reduzierte Sättigungsdampfdruck selbst bei sehr großen Wasserspannungen bzw. sehr kleinen (stark negativen) Tensiometerdrücken und sehr großen osmotischen Drücken nur wenig kleiner ist als der Dampfdruck über einer freien Wasseroberfläche. Umgekehrt bedürfen selbst hohe Luftfeuchtigkeiten (p nahe p_S^*) bereits gewaltiger Wasserspannungen für ein Gleichgewicht, wie in der nachfolgenden Abbildung 1-17 ersichtlich ist. Wenn der vorhandene aktuelle Dampfdruck p in der Bodenluft kleiner ist als der reduzierte Sättigungsdampfdruck p_S^* (das Gesamtpotenzial ist in der flüssigen Phase ist kleiner als dasjenige in der Gasphase) und das mit negativem Vorzeichen behaftete Tensiometerpotenzial größer (bzw. die Saugspannung kleiner) wird, nähert sich der reduzierte Sättigungsdampfdruck stärker p_S , die Untersättigung, die Fugazität, der Phasenübergang von der Flüssigkeit in den Dampfzustand und letztlich die Nettoverdunstung steigt; umgekehrt kommt die Nettoverdunstung zum Erliegen, wenn p_T sinkt und sich p_S^* dem aktuellen Dampfdruck und damit dem Gleichgewichtszustand nähert.

Der Boden kann das Wasser schon bei geringsten Untersättigungen (z. B. infolge des advektiven Eindringens trockenerer Luftmassen) nicht mehr in der flüssigen Phase halten, und der mit der Untersättigung sehr stark steigende Potenzialunterschied sorgt (bei ausreichender thermischer Energiezufuhr) für ein ebenso starkes Ansteigen der Nettoverdunstung. An und für sich wäre – wie bereits festgehalten – die Verdunstung von einer freien Oberfläche (mit $p_T = 0$) immer größer als von einem Meniskus einer Kapillaren mit hängender Wassersäule [MARSHALL et al., 1996], doch der schlechte diffusive und advektive Abtransport des Wasserdampfes sorgt genau so wie bei der CO_2 -Konzentration dafür, dass die relative Feuchtigkeit der Bodenluft zumeist wesentlich höher liegt als in der freien Atmosphäre.

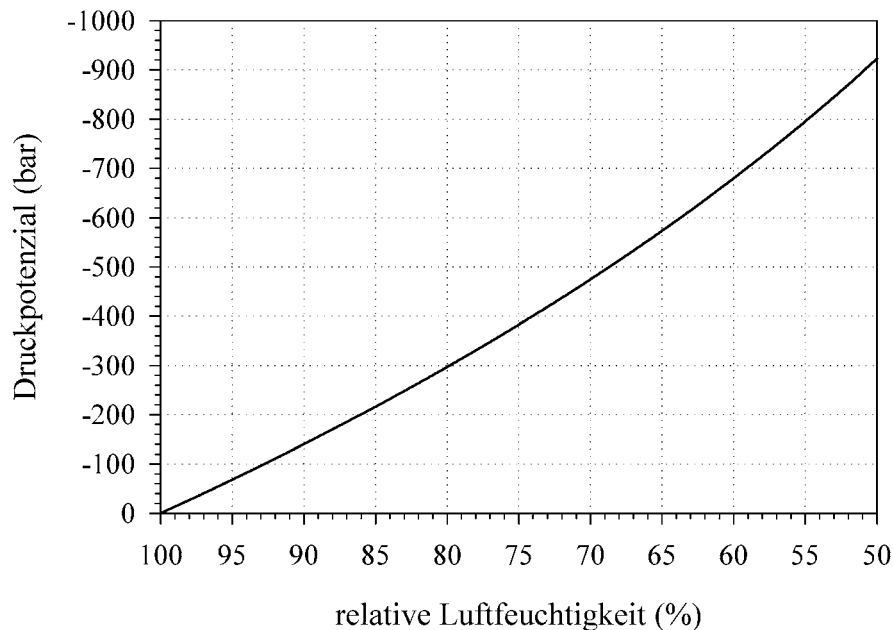


Abbildung 1-17: Zusammenhang relative Luftfeuchtigkeit in der Bodenluft – Druckpotenzial im Bodenwasser (ohne gelöste Salze) im Gleichgewichtszustand

Beispiel 1-16: Mit welcher relativen Luftfeuchtigkeit ist in der Bodenluft zu rechnen, wenn der Bodenwassergehalt etwa dem Welkepunkt entspricht?

Setzt man den Welkepunkt bei 15 bar an und nimmt man ferner an, dass kein osmotischer Druck vorhanden ist und Bodenluft und Bodenwasser im Potenzialgleichgewicht sind, so entspricht die relative Luftfeuchtigkeit dem Verhältnis des reduzierten Sättigungsdampfdruckes zum Sättigungsdampfdruck gemäß Gleichung 1-14

$$\frac{p}{p_s} = \exp(7,404 \times 10^{-9} \times (-15 \times 10^5)) = 0,989 = 98,9 \%$$

Beim Sättigungsdampfdruck sind Flüssigkeit und Dampf im Gleichgewicht. Um ein Flüssigkeitsmolekül aus dem Inneren in den Außenraum zu bringen, muss Arbeit aufgewendet werden [VOGEL, 1999]. Moleküle, deren kinetische Energie zur Verrichtung dieser Arbeit ausreicht, können durch die Oberfläche austreten. Eine Temperaturerhöhung hat zur Folge, dass mehr Moleküle die Austrittsarbeit aufbringen können. Die Wahrscheinlichkeit dafür liefert die Boltzmann-Verteilung. Daher steigt der Sättigungsdampfdruck mit der Temperatur steil und immer steiler an. Die Dampfdruckkurve lässt sich entsprechend ihrer kinetischen Herkunft aus der Boltzmann-Verteilung darstellen als

$$p_S = b \cdot e^{-W/(k \cdot T)}$$

$[p_S]$	= Pa	Sättigungsdampfdruck
$[b]$	= Pa	Konstante, kann noch geringfügig von der Temperatur abhängen
$[W]$	= J	Verdampfungsenergie, bezogen auf ein Molekül
$[T]$	= K	Temperatur
$[k]$	= $J \cdot K^{-1}$	Boltzmann-Konstante, $k = 1,38066 \times 10^{-23} J \cdot K^{-1}$

Die Abhängigkeit des Sättigungsdampfdrucks p_S über einer freien Oberfläche reinen Wassers wird von SMITH [1992] und auch von ALLEN et al. [1998] durch folgende Funktion angegeben:

$$p_S = 610,8 \cdot \exp\left(\frac{17,27 \cdot t}{t + 237,3 \text{ °C}}\right) \quad (1-16)$$

$[p_S]$	= Pa	Sättigungsdampfdruck
$[t]$	= °C	Temperatur

Bei einer Temperatur von 20 °C beträgt der Sättigungsdampfdruck lediglich 2338 Pa (≈ 23 mbar), bei 0 °C bloß 611 Pa (≈ 6 mbar). In 20 ° warmer Luft, die sich mit einer unmittelbar darunter liegenden freien Wasseroberfläche im Gleichgewichtszustand befindet, sind also bei einem Atmosphärendruck von $p_{at} = 1000$ hPa (= 1 bar) lediglich 23 von 1000 Gasmolekülen H_2O -Moleküle (nach dem Gleichverteilungssatz ist die mittlere Energie aller Molekülarten gleich – das heißt jedes Molekül bewirkt denselben Partialdruck –, womit sich die Partialdrücke einzelner Gasgemischkomponenten zum Gesamtdruck genau so verhalten wie die Teilchenanzahl der Komponente zur Gesamtteilchenanzahl [VOGEL, 1999]). Trotzdem ist Wasserdampf hinter Stickstoff, Sauerstoff und Argon und noch vor Kohlendioxid das vierthäufigste Gas in der Atmosphäre.

Bei der Verdunstung eines Moleküls müssen die Bindungskräfte in der flüssigen Phase überwunden werden. Wasser besitzt also im gasförmigen Zustand einen größeren Energieinhalt als im flüssigen. Die Differenz wird in der Thermodynamik als Verdampfungsenthalpie bezeichnet, in der Wasserwirtschaft besser als *latente Energie* λ bekannt. λ ergibt sich nach der makroskopisch-thermodynamischen Betrachtungsweise hauptsächlich aus der Neigung der Sättigungsdampfdruckkurve und wird durch die Clausius-Clapeyron-Gleichung beschrieben [VOGEL, 1999]:

$$\lambda = T \cdot \frac{dp_S}{dT} \cdot \left(\frac{1}{\rho_{\text{Dampf}}} - \frac{1}{\rho_{\text{FL}}} \right)$$

$[\lambda]$	= $J \cdot kg^{-1}$	Verdampfungsenthalpie; auf die Masseneinheit bezogene latente Energie
$[T]$	= K	Temperatur des Dampfes und der Flüssigkeit
$[p_S]$	= Pa	(Sättigungs-)Dampfdruck
$[dp_S/dT]$	= $Pa \cdot K^{-1} \equiv J \cdot m^{-3} \cdot K^{-1}$	Neigung der Sättigungsdampfdruckkurve
$[1/\rho_{\text{Dampf}}]$	= $m^3 \cdot kg^{-1}$	spezifisches Volumen des Dampfes (Kehrwert der Dichte des Dampfes)
$[1/\rho_{\text{FL}}]$	= $m^3 \cdot kg^{-1}$	spezifisches Volumen der Flüssigkeit (Kehrwert der Flüssigkeitsdichte)

Die von der Temperatur abhängige spezifische Verdampfungsenergie setzt sich demnach aus einem kleineren äußeren Anteil, der dazu verbraucht wird um das ursprüngliche Volumen auf das Volumen des Dampfes auszudehnen, und einem gut zehnmal so großen inneren Anteil zusammen, der zur Überwindung der Molekularkräfte benötigt wird.

SMITH [1992] führt folgende Funktion $\lambda(t)$ für Wasser an:

$$\lambda = 2,501 - (2,361 \times 10^{-3}) \cdot t \quad (1-17)$$

$[\lambda]$	= $MJ \cdot kg^{-1}$	Verdampfungsenthalpie; auf die Masseneinheit bezogene latente Energie
-------------	----------------------	---

[t] = °C Lufttemperatur

Aufgrund der geringen Temperaturabhängigkeit kann λ häufig konstant angenommen werden. Für $t = 20\text{ °C}$: $\lambda = 2,45\text{ MJ/kg}$.

Die zur Aufrechterhaltung der Verdunstung notwendige latente Energie kann kurzfristig aus dem System entzogen werden, muss jedoch mittelfristig permanent zugeführt werden. Neben der Druckenergie spielen daher insbesondere die Wärmeenergie und die Strahlungsenergie eine maßgebliche Rolle für die Größe der Verdunstung.

Abschließend ist zu bemerken, dass das klassische Potenzialkonzept der Bodenphysik zur vollständigen Beschreibung des Phasenüberganges bzw. der Verdunstung unzulänglich ist. Selbst wenn keine weiteren Energieformen beteiligt wären, reicht es nur aus um festzustellen, ob ein Netto-Phasenübergang stattfindet oder nicht; eine quantitative Aussage über den Fluss ist jedoch nicht möglich.

1.4.5 Hygroskopizität – Adsorptionswasser

Unter stationären Verhältnissen steht in abgeschlossenen Behältern die Dampfspannung der eingeschlossenen Luft im Gleichgewicht mit dem osmotischen Druck der sich ebenfalls im Inneren befindlichen Flüssigkeit. Bei hoch konzentrierten Flüssigkeiten können mitunter sehr hohe Druckwerte erreicht werden.

Diese Eigenschaft macht man sich bei der Bestimmung der Wasseranteil-Matrixpotenzial-Beziehung im Bereich $< -15\text{ bar}$ zunutze und stellt im Labor in einem Exsikkator einen Dampfspannungsausgleich zwischen einer wässrigen Schwefelsäure und der daneben platzierten Bodenprobe her. Die Konzentrationen der Schwefelsäure entsprechen bei 20 °C den Werten in der Tabelle 1-5 [ÖNORM L 1063, 1988]

Tabelle 1-5: osmotischer Druck einer wässrigen Schwefelsäure bei verschiedenen Konzentrationen

wässrige Schwefelsäure in Volumsprozent	Osmotischer Druck	
	in pF	in bar
3,3	4,5	32
10	4,7	50
30	5,6	400
50	6,1	1250

Als **Hygroskopizität** des Bodens (nach MITSCHERLICH) wird nach ÖNORM L 1064 [1988] der im Dampfspannungsgleichgewicht mit 10%iger H_2SO_4 (entspricht einer Wasserspannung von 50 bar) stehende Massenwassergehalt verstanden. Laut DIN 4047 Bl. 3 [1971] ist dann die zwischen dem Boden und der Schwefelsäure befindliche Luft zu 96% mit Wasserdampf gesättigt. Die Versuchsdurchführung ist in der Norm genau beschrieben.

Der bei der Hygroskopizität vorhandene Wassergehalt entspricht in etwa dem Gehalt an Adsorptionswasser im Boden. Eine andere Abgrenzung zwischen Kapillarwasser und Adsorptionswasser ist mittels der Benetzungswärme, die durch den Energieverlust des Wassers bei der Anlagerung an die Bodenpartikel entsteht und nur beim Adsorptionswasser auftritt [KASTANEK, 1998], möglich.

BUSCH et al. [1993] merken an, dass der Festlegung absoluter Grenzen zwischen fest gebundenem Adsorptionswasser und lose gebundenem Kapillarwasser keine allzu große Bedeutung zukommt, weil zwischen beiden Zuständen kein schroffer, sondern ein kontinuierlicher Übergang besteht. Die Adsorption von Wasser an Feststoffoberflächen ist generell von elektrostatischer Natur [HILLEL, 1998]. Die elektromolekulare Anziehungskraft, die von der negativ geladenen Oberfläche der Mineralkörner auf den adsorbierten Wasseranteil ausgeübt wird, ist sehr groß (mehr als tausend MPa), nimmt aber mit wachsendem Abstand vom Korn rasch ab. Die absolute Größe des Druckes und damit der Bindungskräfte ist in einer gewissen Entfernung vor allem von der chemischen Zusammensetzung des Wassers abhängig. Bei reinem Wasser erfolgt in der fest adsorbierten Schicht kein Ladungsausgleich, während dieser Ausgleich bei Wasser mit hohem Salzgehalt fast vollständig eintritt. Der durchströmte Querschnitt der Porenkanäle ist deshalb bei feinkörnigen Erdstoffen ganz wesentlich vom gelösten Salzgehalt im Bodenwasser abhängig und für Luft bzw. Mineralöle größer als für normales Bodenwasser. Durch die gewaltigen Wasserspannungen an den Kornoberflächen wird der Adsorptionsfilm stark verdichtet und praktisch zum Bestandteil der festen Phase. In einer etwas größeren Entfernung vom Bodenkorn hat das angelagerte Wasser die Konsistenz hochviskoser Flüssigkeiten, und erst in einer etwas größeren Entfernung von mehr als etwa 5×10^{-7} m geht es kontinuierlich in Wasser mit normalen Eigenschaften über.

FLÜHLER [1991] schreibt, dass der (durch Adsorption gebundene) Wasserfilm des ofentrockenen Bodens praktisch monomolekular ist und ein Druckpotenzial von etwa -600 MPa aufweist, während die Filmdicke bei Potenzialen von $-1,5$ MPa (Welkepunkt) bereits 10 bis 20 nm ($= 20 \times 10^{-9}$ m) erreicht (ob dieser Film zur Gänze durch Adsorptionskräfte gehalten wird, sei dahingestellt).

Beispiel 1-17: Ein kleiner Stechzylinder mit einer Bodenprobe und eine Schale mit einer gesättigten NaCl-Lösung werden nebeneinander in einen abgeschlossenen, luftdichten Behälter gestellt und der Gleichgewichtszustand abgewartet. Der osmotische Druck der Salzlösung beträgt 300 bar [KOOREVAAR, 1983].

- a) Wie groß ist die relative Luftfeuchtigkeit im Behälter?
- b) Wie groß ist das Druckpotenzial in der Bodenprobe, wenn die Salzkonzentration im Bodenwasser vernachlässigbar ist?

Im Gleichgewichtszustand muss das Wasser in der Salzlösung, in der Luft und im Boden dasselbe Gesamtpotenzial besitzen. Wählt man die Höhe der freien Oberfläche der Salzlösung (diese soll mit der Oberkante der Bodenprobe übereinstimmen) als Bezugs- und als Vergleichsebene, muss dort gelten

$$\psi_o \text{ Salzlösung} = \psi_t \text{ Salzlösung} = \psi_t \text{ Wasserdampf} = \psi_t \text{ Boden} = \psi_p = -300 \text{ bar.}$$

An einer freien Oberfläche ist der Tensiometerdruck Null. Aus Formel 1-14 folgt

$$p_s^* / p_s = \exp(7,404 \times 10^{-9} \text{ Pa}^{-1} \times (-3 \times 10^7 \text{ Pa})) = 0,801.$$

Wegen des Gleichgewichtszustandes ist $p = p_s^*$ und demnach $RH = p_s^* / p_s$. Die relative Luftfeuchte im Behälter und in der Bodenluft beträgt also 80% .

Wenn die Salzkonzentration im Bodenwasser vernachlässigbar ist, muss in der Bodenprobe ein Druckpotenzial von -300 bar herrschen.

2. RETENTIONS-KURVE UND KAPILLARES LEITVERMÖGEN

2.1 Allgemeines zur Wasseranteil-Matrixpotenzial-Beziehung

Die Matrixpotenzial-Wasseranteil-Beziehung beschreibt den Zusammenhang zwischen dem Wassergehalt und dem Energiezustand des Wassers als Folge der Einwirkung des Bodens bzw. der mit ihm in ursächlichem Zusammenhang stehenden Kräfte (insbesondere Kapillar- und Adsorptionskräfte).

Für die Matrixpotenzial-Wasseranteil-Beziehung existieren verschiedene, mehr oder weniger synonyme Bezeichnungen; u. a. Rückhaltekurve, Retentionsfunktion, Saugspannungs-Wassergehaltskurve, SW-Linie, Bodenwassercharakteristik oder pF-Kurve; hingegen ist die Bezeichnung Druckpotenzial-Wasseranteil-Beziehung streng genommen nicht korrekt. Dem Potenzialkonzept der Bodenphysik zufolge setzt sich nämlich das *Druck-* oder *Tensiometerpotenzial* ψ_p aus dem *Matrixpotenzial* ψ_m und aus dem *Gasdruckpotenzial* ψ_a zusammen ($\psi_p = \psi_m + \psi_a$). Das Gasdruckpotenzial ist zwar unter natürlichen Bedingungen häufig Null, kann aber im Labor experimentell (bei konstantem ψ_p) auf nahezu jeden beliebigen Wert gesetzt werden und ist daher keinesfalls eine vom Wasseranteil abhängige typische Bodeneigenschaft. Die wahre Größe, von der der Wassergehalt im ungesättigten Boden abhängt, ist also das Matrixpotenzial, und nicht das Druckpotenzial. Aus denselben Überlegungen bleibt die Beziehung auch auf negative ψ_m -Werte beschränkt, sie ist im *Grundwasserbereich* ($\psi_p \geq 0$) ungültig. Dort wird das Druckpotenzial nicht von Matrix- oder Gasdruckkräften verursacht, sondern von den hydrostatischen bzw. hydrodynamischen Verhältnissen. Das Tensiometer- oder Druckpotenzial wird demzufolge von manchen Autoren im Grundwasserbereich gar nicht als solches, sondern als *hydrostatisches Potenzial* ψ_h bezeichnet.

Die Rückhaltekurve ist in erster Linie von der Porengrößenverteilung des Bodens abhängig. Sie kann direkt durch Labor- und Feldmethoden und indirekt durch Transferfunktionen ermittelt werden. Meistens werden nur sekundäre Desorptionskurven untersucht.

- Die **Bestimmung im Labor** erfolgt grundsätzlich an ungestörten Stechzylinderproben durch stufenweise Erhöhung des Matrixpotentials auf vorgegebene Werte und der Ermittlung der zugehörigen Wassergehalte, also der Gewinnung von Wertepaaren (h_i, θ_i) der Funktion $\theta = f(h)$. An Versuchseinrichtungen stehen z. B. das Kapillarimeter nach FISCHER für den Matrixpotentialhöhenbereich $0 \geq \psi_m \geq -2$ m (je nach Apparatur und Raumhöhe, theoretisch nur durch den Sättigungsdampfdruck limitiert) und Druckplattenapparaturen zur Verfügung, wobei die Niederdrucktöpfe für Drücke bis 5 bar zugelassen sind und demzufolge Matrixpotenzialhöhen im Bereich $-0,1 \text{ bar} \geq \psi_m \geq -5 \text{ bar}$ eingestellt werden können, während die Hochdrucktöpfe bis 15 bar zugelassen sind. Es gibt auch Höchstdrucktöpfe mit Zellulose-Membranen mit $p_{zul} = 100$ bar. In der Haines-Apparatur werden Druckzellen verwendet – meistens die sogenannten Tempe-Zellen mit $p_{zul} = 1$ bar –; sie ist daher eine Alternative zum Kapillarimeter. Für sehr große Wasserspannungen können auch Dampfspannungsgleichgewichte mit Lösungen bekannten osmotischen Potentials hergestellt werden (siehe Hygroskopizität nach MITSCHERLICH in Kap. 1.4.5).
- **Im Feld** werden Wertepaare der Retentionsfunktion durch simultane Messung der Wasser-spannung und des Wassergehaltes bestimmt. Nachdem es (noch) keine Messgeräte gibt, die

sowohl den Wassergehalt als auch die Wasserspannung im Boden messen können, sind mehrere unterschiedliche Sensoren erforderlich. Diese sollten räumlich nahe beieinander angeordnet werden, um Einflüsse von Inhomogenitäten nicht zu verschärfen, und vorzugsweise in derselben Tiefe. Allerdings sollen die Messungen meistens auch anderen Zwecken als der Retentionsfunktion dienen, und dann gibt es oft Gründe, die gegen die Anordnung der Wasserspannungs- und der Wassergehaltmessung in derselben Tiefe sprechen (z. B. Unstetigkeit von θ an Schichtgrenzen, Zentraldifferenz für die Gradientenbildung usw.). In diesen Fällen ist immer eine gewisse räumliche Interpolation erforderlich. Wenn man Glück hat, treten unter natürlichen Verhältnissen (Monitoring) während des Messzeitraumes ausgeprägte Sorptions- oder Desorptionsphasen mit Bodenzuständen von sehr feucht (θ_{fs}) bis sehr trocken (θ_r) auf. Auf eventuelle Einflüsse der Hysterese ist zu achten. Erwischt man im Trockengebiet nicht gerade ein stärkeres Niederschlagsereignis, bleiben die Schwankungen des Wassergehaltes bzw. der Wasserspannung auf einen kleinen Bereich beschränkt. Dann kommt man nicht umhin, ein Experiment mit künstlicher Aufsättigung durchzuführen.

- **Indirekte Verfahren** sollten nur dann herangezogen werden, wenn weder Labor- noch Feldmessungen verfügbar sind. Neben dem primären Zusammenhang zur Porengrößenverteilung hängt die Retentionsfunktion mehr oder weniger ausgeprägt von folgenden Eigenschaften bzw. Einflussgrößen ab: Korngrößenverteilung, Trockendichte, Textur, Bodenart, Humusgehalt oder Anteil des organischen Kohlenstoffs. Der mathematisch-physikalische Zusammenhang zwischen einer üblicherweise hydraulischen Eigenschaft des Bodens als abhängiger Variablen und unabhängigen Argumenten, die grundlegende Eigenschaften des Bodens beschreiben, wird als *Pedotransferfunktion* (PTF) bezeichnet [HILLEL, 1998]. PTFs werden z. B. im Software-Programm ROSETTA vom USDA-ARS George E. Brown, Jr. Salinity Lab [SCHAAP, 1999] benützt, um die Parameter der van-Genuchten-Funktion zu bestimmen. Eine kleine Auswahl an PTFs bietet auch das Programm LEACHM (siehe Beispiel 5-1 auf Seite 156). Eine einfachere Vorgangsweise für die Abschätzung der Retentionsfunktion wird u. a. im Beispiel 4-4 (Kapillaraufstieg) auf Seite 139 vorgestellt. PTFs wurden numerisch durch multiple Regression mit normalerweise einfachen Funktionen an einer beträchtlichen Anzahl an Datensätzen aufgestellt. Ein neueres numerisches Verfahren sind so genannte *künstliche neuronale Netzwerke*, mit denen ganz allgemein eine mathematische Beziehung zwischen vorhandenen Daten und gesuchten Daten hergestellt werden kann und die sich daher auch zur indirekten Bestimmung der Retentionsfunktion bzw. von PTFs eignen [PACHEPSKY et al., 1996] [TAMARI und WÖSTEN, 1999]. Die optimale Verknüpfung der einzelnen Daten zur gesuchten Größe basiert nahezu ausschließlich auf statistischen Überlegungen und erfordert ein intensives Training mit einer sehr hohen Anzahl an Datensätzen.

Ein kontinuierlicher Funktionsverlauf kann aus diskreten Messpunkten durch Interpolation (Linearinterpolation, Splines) oder durch Anpassung von Modellkurven erreicht werden. In diesem Kapitel werden des weiteren nur Modellfunktionen behandelt und prinzipiell davon ausgegangen, dass zwischen dem Matrixpotenzial und dem Wasseranteil eine umkehrbar eindeutige Beziehung besteht. Es wird also weder zwischen der primären Drän- bzw. Entwässerungsfunktion [BUSCH, LUCKNER und TIEMER, 1993], der Hauptentwässerungsfunktion, der Hauptbewässerungsfunktion noch zwischen den Anpassungsdrän- und -bewässerungsfunktionen (engl. scanning curves) unterschieden bzw. von jeglichem hystereseem Verhalten abgesehen. Geht man von der

Existenz eines *geschlossenen Kapillarsaumes* aus, so bleibt der Wassergehalt von Beginn des Entwässerungsvorganges so lange konstant und entspricht in erster Näherung dem Porenanteil n , bis der *Lufttrittspunkt* h_e überschritten wird. In weiterer Konsequenz müsste man die Rückhaltekurve dann in zwei Bereiche bzw. Funktionen teilen - in einen, in dem der Wasseranteil konstant ist und in einen, in dem er eine Funktion des Matrixpotenziales ist -, was bei manchen Modellen auch geschieht.

Unter der Vielzahl an Modellen wird nur die sehr bekannte van-Genuchten-Kurve exemplarisch näher vorgestellt, obwohl viele andere vielleicht die gleiche Würdigung verdienen würden. Einen Überblick über weitere bekannte Funktionen bietet Kapitel 2.7.

2.1.1 Effektive Sättigung Se

Die meisten Modelle für die Bodenwassercharakteristik liefern nicht den Wasseranteil direkt, sondern die effektive Sättigung:

$$Se(\theta) = \frac{\theta - \theta_r}{\theta_s - \theta_r} \quad (2-1)$$

- [Se] = dim.los effektive Sättigung
- [θ] = dim.los Wasseranteil; dessen Dimension ist genau genommen der Quotient aus zwei Raummaßen ($\theta = V_w/V$), z. B. $\text{cm}^3 \cdot \text{cm}^{-3}$, und damit sehr wohl dimensionsbehaftet
- [θ_r] = dim.los Restwasseranteil; Modellparameter. θ_r ist jener Wasseranteil im Boden, der entweder vom Fließpfad abgeschnitten ist (dead-end pores) oder wegen der starken Adsorption an die Bodenmatrix nicht zum Fluss der wässrigen Phase beiträgt.
- [θ_s] = dim.los Sättigungswasseranteil; ebenfalls nur ein Modellparameter. θ_s entspricht näherungsweise dem Porenanteil n , obwohl davon ausgegangen werden kann, dass nur zu Beginn der primären Entwässerungskurve sämtliche Poren wassergesättigt sind. Unter natürlichen Bedingungen ist θ_s wegen Lufteinschlüssen oder gelöster Luft etwa 5 bis 10 % kleiner als n [van GENUCHTEN et al., 1991]

Umgekehrt ergibt sich der Wasseranteil aus der effektiven Sättigung durch

$$\theta(Se) = \theta_r + Se(\theta_s - \theta_r) \quad (2-2)$$

2.2 van-Genuchten-Kurve

Im Gegensatz zum Zweibereichsmodell von Brooks und Corey kennt das Modell von van GENUCHTEN keinen eigenen Bereich der Vollsättigung ($0 \leq h \leq h_e$). Im Allgemeinen entspricht θ daher nur für $h=0$ der Vollsättigung θ_s . Für den speziellen Fall $n \rightarrow \infty$ gilt zwar $\theta = \theta_s$ für $0 \leq h \leq 1/\alpha$, jedoch sind dann zwei der drei Formparameter durch den geschlossenen Kapillarsaum vorbestimmt ($n \rightarrow \infty$ für die Ausformung eines Knickes an der Stelle des Lufttrittspunktes und α für die Höhe des geschlossenen Kapillarsaumes). Überdies ist der verbleibende Parameter m derjenige, der die Form der Kurve am wenigsten beeinflusst, sodass Datensätze mit ausgeprägtem Lufttrittspunkt nur völlig unzureichend durch das van-Genuchten-Modell approximiert werden können. Umgekehrt ist oft aus numerischen Gründen C^1 -Stetigkeit gefordert und man nimmt dafür lieber in Kauf, dass der Wasseranteil bei Matrixpotenzialwerten unterhalb des Lufttrittspunktes ($h \leq h_e$) ein wenig von der Vollsättigung abweicht.

Mittlerweile wurden einige Erweiterungen des van-Genuchten-Modells publiziert. Mit der Variante von VOGEL und CISLEROVA [1988], die in der Software HYDRUS implementiert ist, lassen sich

Böden mit geschlossenem Kapillarsaum wesentlich besser simulieren. Mit dem multimodalen van-Genuchten-Modell [DURNER, 1992] können Retentionsbeziehungen nachgebildet werden, die mehrere Wendepunkte bzw. Krümmungswechsel aufweisen.

2.2.1 Funktionsgleichung

Das van-Genuchten-Modell lautet in seiner klassischen dreiparametrischen Form [van GENUCHTEN, 1980] (zur Beschreibung des Wasseranteils θ sind mit θ_r und θ_s zwei weitere und damit insgesamt 5 Parameter erforderlich)

$$Se(h) = \left[\frac{1}{1 + (\alpha \cdot h)^n} \right]^m$$

oder

$$Se(h) = (1 + (\alpha \cdot h)^n)^{-m} \quad (2-3)$$

bzw.

$$\theta(h) = \theta_r + (\theta_s - \theta_r) \cdot \left[\frac{1}{1 + (\alpha \cdot h)^n} \right]^m$$

- | | | |
|-----|--------------------|---|
| [h] | = cm | negativ genommene Matrixpotenzialhöhe; oft als Wasserspannung oder Kapillardruckhöhe bezeichnet; stets positiv |
| [α] | = cm ⁻¹ | Formparameter; beschreibt ungefähr wie stark sich die Kurve an die Vollsättigung anschmiegt. Für den Fall $n \rightarrow \infty$ entspricht α dem Kehrwert des geschlossenen Kapillarsaumes: $\alpha = 1/h_e$ ($n \rightarrow \infty$)
Da h positiv ist, sind nur positive Werte für α sinnvoll. Zu beachten ist ferner, dass α nicht dimensionslos ist, sondern von der Dimension von h abhängt. |
| [n] | = dim.los | Formparameter, beschreibt etwa die Krümmung der Kurve |
| [m] | = dim.los | Formparameter; gibt an, wie stark sich die Kurve an $Se = 0$ bzw. θ_r anschmiegt. Oft wird $m = 1 - 1/n$ gesetzt. |

Vor allem in der älteren Literatur wird h häufig mit dem fachlich ein wenig umstrittenen Begriff *Kapillardruckhöhe* (capillary pressure head) bezeichnet. Wenn man bedenkt, dass sich die Bodenwassercharakteristik oft noch unterhalb des *Welkepunktes* bzw. bei einer Matrixpotenzialhöhe $\psi_m > -150$ m – einem Wert, der vom Energiezustand des Adsorptionswassers noch weit entfernt liegt – eng an den *Restwassergehalt* θ_r anschmiegt und damit bei der Entwässerung praktisch ausschließlich Kapillarkräfte überwunden wurden, erscheint diese Bezeichnung gerechtfertigt. Noch dazu ist der Ansatz nach van GENUCHTEN zur Modellierung der Beziehungen im sehr trockenen bzw. im *Adsorptionswasserbereich* sowieso kaum geeignet, sodass der einschränkende Begriff der „Kapillardruckkurve“ eher zutrifft als der allgemeinere der Wasseranteil-Matrixpotenzial-Beziehung.

Leider wird der Kleinbuchstabe h in der Literatur auch für die Druckhöhe verwendet. Das stets negative Matrixpotenzial ψ_m bzw. die dem Betrag nach gleich große, positive Kapillardruckhöhe h sind unter der Annahme, dass kein Gasdruckpotenzial vorliegt ($\psi_m = 0$), dem Betrag nach gleich groß wie die Druckhöhe, die Druckhöhe ist jedoch dann negativ und weist damit gegenüber der Kapillardruckhöhe das umgekehrte Vorzeichen auf. Man sollte sich daher immer vergewissern, welche der beiden Größen mit dem Formelzeichen h in der Literaturstelle gemeint ist.

Statistisch und rein mathematisch gesehen sind die beiden Kurvenparameter n und m deutlich voneinander abhängig, sodass oft quasi ein überbestimmtes System vorliegt, das durch Elimination eines Parameters bereinigt werden kann. Aus mathematischen Gründen (siehe Kapitel 2.6.2) wird oft die Einschränkung

$$m = 1 - 1/n$$

getroffen und auf diese Weise ein Freiheitsgrad der van-Genuchten-Kurve eliminiert:

$$Se(h) = \left[\frac{1}{1 + (\alpha \cdot h)^n} \right]^{1 - \frac{1}{n}} \quad (2-4)$$

Die S-W-Linie nach RYBAKOWA [LUCKNER und SCHREIBER, 1980] kann ebenfalls als ein Spezialfall der van-Genuchten-Kurve mit $m = 1$ gesehen werden. Sie lautet

$$Se(h) = (1 + C \cdot h^D)^{-1} \quad (2-5)$$

und ihre inverse Funktion:

$$h(Se) = \left(\frac{1 - Se}{C \cdot Se} \right)^{\frac{1}{D}}$$

Bei beiden Spezialfällen ist zu beachten, dass sich für das einfachere Modell andere Parameterwerte aus der Kurvenanpassung ergeben als wie bei der dreiparametrischen van-Genuchten-Kurve. Wenn man z. B. nach der Bestimmung von α , n und m der Meinung ist, dass die zweiparametrische Funktion ausreicht, genügt es nicht, m einfach wegzulassen. Nach einer neuerlichen Kurvenanpassung von α und n wird man feststellen, dass sowohl α als auch n andere Werte annehmen.

2.2.2 Umkehrfunktion des van-Genuchten-Modells

Für die inverse Funktion geht man am besten von der Funktion 2-3 aus

$$Se^{-1/m} = 1 + (\alpha \cdot h)^n$$

$$\alpha \cdot h = (Se^{-1/m} - 1)^{1/n}$$

um

$$h(Se) = \frac{1}{\alpha} \cdot (Se^{-1/m} - 1)^{1/n} \quad (2-6)$$

bzw. $h(\theta) = \frac{1}{\alpha} \cdot \left(\left(\frac{\theta - \theta_r}{\theta_s - \theta_r} \right)^{\frac{-1}{m}} - 1 \right)^{\frac{1}{n}}$ oder $h(\theta) = \frac{1}{\alpha} \cdot \left(\left(\frac{\theta_s - \theta}{\theta_s - \theta_r} \right)^{\frac{1}{m}} - 1 \right)^{\frac{1}{n}}$ zu erhalten.

Die Umkehrfunktion der zweiparametrischen Funktion ($m = 1 - 1/n$) lautet

$$h(Se) = \frac{1}{\alpha} \cdot (Se^{n/(1-n)} - 1)^{1/n} \quad (2-7)$$

Als Funktion des Wasseranteils: $h(\theta) = \frac{1}{\alpha} \cdot \left(\left(\frac{\theta - \theta_r}{\theta_s - \theta_r} \right)^{\frac{n}{1-n}} - 1 \right)^{\frac{1}{n}}$.

2.2.3 Erste Ableitung der van-Genuchten-Kurve

Die Bodenwasserkapazität C , die als Neigung der Bodenwassercharakteristik bzw. durch $C = d\theta/dh$ definiert ist, ergibt sich für die van-Genuchten-Kurve durch Ableitung der Funktionen 2-2 und 2-3

$$\theta(Se) = \theta_r + Se \cdot (\theta_s - \theta_r) \quad Se(h) = (1 + (\alpha \cdot h)^n)^{-m}$$

$$\frac{d\theta}{dSe} = \theta_s - \theta_r \quad \frac{dSe}{dh} = -m \cdot (1 + (\alpha \cdot h)^n)^{-m-1} \cdot n \cdot (\alpha \cdot h)^{n-1}$$

und durch die Anwendung der Kettenregel $\frac{d\theta}{dh} = \frac{d\theta}{dSe} \cdot \frac{dSe}{dh}$

zu $\frac{d\theta}{dh} = (\theta_s - \theta_r) \cdot (-m) \cdot (1 + (\alpha \cdot h)^n)^{-m-1} \cdot n \cdot (\alpha \cdot h)^{n-1}$

bzw. zu $\frac{d\theta}{dh} = \frac{(\theta_r - \theta_s) \cdot m \cdot n \cdot (\alpha \cdot h)^{n-1}}{(1 + (\alpha \cdot h)^n)^{m+1}}$.

Für $h = 0$ liefert die Ableitung Null, das heißt dass die Tangente an die van-Genuchten-Kurve im Punkt $(\theta_s, h = 0)$ senkrecht auf die θ -Achse steht. Nichtsdestotrotz existiert der geschlossene Kapillarsaum mit Ausnahme des Spezialfalles $n = \infty$ nicht, denn für alle $h > 0$ (z. B. $h = 1$ mm) ist $\theta < \theta_s$.

Für den Limes der Ableitung für $h \rightarrow \infty$ ist der Ausdruck $\frac{h^{n-1}}{(1 + (\alpha \cdot h)^n)^{m+1}}$ zu untersuchen. Die Regel von L'HOSPITAL ergibt für die Ableitung des Zählers und des Nenners:

$$\frac{(n-1) \cdot h^{n-2}}{(m+1) \cdot (1 + (\alpha \cdot h)^n)^m \cdot n \cdot (\alpha \cdot h)^{n-1} \cdot \alpha} = \frac{n-1}{(m+1) \cdot n \cdot \alpha^n} \cdot \frac{1}{h \cdot (1 + (\alpha \cdot h)^n)^m}$$

Jetzt ist der Ausdruck $h \cdot [1 + (\alpha \cdot h)^n]^m$ zu untersuchen. Für $n \geq 1$ ist $1 + (\alpha \cdot h)^n$ für $h \rightarrow \infty$ größer als 1, womit der Term $[1 + (\alpha \cdot h)^n]^m$ für $m > 0$ größer oder gleich 1 sein muss. Im Produkt $h \cdot [1 + (\alpha \cdot h)^n]^{m+1}$ strebt h gegen Unendlich, während der Grenzwert des zweiten Multiplikanden mindestens 1 beträgt. Die Ableitung beträgt also auch für $h \rightarrow \infty$ ($\theta \rightarrow \theta_r$) unter den Einschränkungen $n \geq 1$ und $m > 0$ (beides wird in der Praxis immer eingehalten) Null.

2.3 Abschätzung der Durchlässigkeit aus der Kornverteilung

Bilden die Bodenpartikel ein Einzelkorngefüge, so kann die Porenstruktur ausreichend genau durch die Korngrößenverteilung beschrieben werden. Um eine mathematische Beziehung zwischen der Korngrößenverteilung und der Durchlässigkeit aufzustellen, können zwei grundverschiedene Wege beschritten werden: Pedotransferfunktionen wurden aus rein numerisch-statistischen Ansätzen an Hand von großen Datenmengen abgeleitet, während die physikalischen Ansätze vom Strömungsgeschehen in der Porenstruktur ausgingen. Im weiteren werden nur funktionale Beziehungen nachvollzogen, die auf physikalischen Modellen beruhen.

Das Modell von KOZENY-CARMAN betrachtet den von der spezifischen Oberfläche O/V_s verursachten Strömungswiderstand als maßgebliche Größe für die Durchlässigkeit und verwendet demgemäß den *wirksamen Korndurchmesser* d_w . Andere physikalische Ansätze gehen vom Fluss in einer Einzelpore – beschrieben durch das Gesetz von HAGEN-POISEUILLE – aus und trachten jenen äquivalenten Korndurchmesser zu finden, dessen zugehörige Pore in der entsprechenden Anzahl genau denselben Fluss ergibt wie das aus verschiedenen großen Körnern gebildete Porensystem. Weil man in beiden Fällen praktisch zu denselben Beziehungen zwischen der Durchlässigkeit und einem äquivalenten Korndurchmesser gelangt, soll als Überbegriff für d_w bei der Methode von KOZENY und für den äquivalenten Korndurchmesser bei den Verfahren, die aus einer einzelnen Pore bzw. aus dem Gesetz von HAGEN und POISEUILLE abgeleitet wurden, der *effektive Korndurchmesser* d_e eingeführt werden.

Der effektive Korndurchmesser d_e ist nicht exakt definiert, doch folgt aus der obigen Beschreibung unmittelbar, dass darunter jene Teilchengröße zu verstehen ist, mit der ein fiktiver Boden, gebildet aus lauter gleich großen Partikeln, die gleiche Durchlässigkeit ergibt wie der Boden mit seinen unterschiedlich großen Teilchen.

In der Literatur existiert eine Vielzahl an Verfahren zur Berechnung der Durchlässigkeit aus der Kornverteilung. Zu nennen sind z. B. jene nach HAZEN, SLICHTER, TERZAGHI, BEYER, SAUERBREI, KRÜGER, KOZENY, ZUNKER, USBR usw.. Die einzelnen Methoden unterscheiden sich insbesondere in der Anzahl der neben der Kornverteilung zur Beschreibung der Porenstruktur verwendeten Parameter. Einen Vergleich der Verfahren präsentierten unter anderen VUKOVIC und SORO [1992]. Für die untersuchte Datenmenge aus Feldmessungen ergaben die Verfahren nach

KRÜGER und ZAMARIN die besten Werte für k_s , jene nach SLICHTER und USBR die schlechtesten. Eine allgemeine Wertung der Verfahren sollte hieraus jedoch nicht abgeleitet werden.

Ein Ansatz, der auf hydraulischen und statistischen Überlegungen beruht und in dem der minimale Porenkanaldurchmesser ein wesentliches Element bildet, wird von BUSCH et al. [1993] skizziert.

In den folgenden Kapiteln wird zuerst der allgemeine Ansatz und dann im einzelnen die Verfahren von HAZEN, von BEYER und von KOZENY vorgestellt, und zwar die Hazen-Formel deswegen, weil sie relativ einfach aufgebaut ist und mit wenigen Parametern auskommt, die Beyer-Formel wegen ihrer eindeutig definierten Abhängigkeit von der Ungleichkörnigkeit und die Kozeny-Formel allein schon wegen ihres klar dokumentierten physikalischen Ansatzes.

2.3.1 Allgemeiner Ansatz

Wenn man annimmt, dass die Poren mit dem äquivalenten Porendurchmesser d_p zylindrisch sind und die Strömung in ihnen laminar erfolgt, muss das Gesetz von HAGEN und POISEUILLE (siehe Kapitel 7.5.1 im Anhang) und Gleichung 7-33 zutreffen:

$$q = \frac{n \cdot g \cdot I \cdot d_p^2}{32 \cdot \nu} \quad (2-8)$$

$[q]$	$= \text{m} \cdot \text{s}^{-1}$	Durchflussrate, Filtergeschwindigkeit
$[n]$	$= \text{dim.los}$	Porenanteil (gesättigte Strömung)
$[d_p]$	$= \text{m}$	Äquivalentdurchmesser der Pore
$[I]$	$= \text{dim.los}$	Gradient der Gesamtpotenzialhöhe
$[\nu]$	$= \text{m}^2 \cdot \text{s}^{-1}$	kinematische Viskosität des Strömungsmediums

Der Äquivalentdurchmesser der Poren d_p kann als eine Funktion des effektiven Korndurchmessers d_e , des Porenanteils n und weiterer spezifischer Eigenschaften (Kornform, Heterogenität, Ungleichförmigkeit usw.), deren Einfluss in der Konstanten C zusammengefasst werden soll, betrachtet werden [VUKOVIC und SORO, 1992]:

$$d_p = \sqrt{C \cdot f(n) / 32} \cdot d_e \quad (2-9)$$

In Gleichung 2-8 wird d_p gemäß 2-9 substituiert

$$q = \frac{g}{\nu} \cdot C \cdot n \cdot f(n) \cdot d_e^2 \cdot I, \quad (2-10)$$

die vom Porenanteil abhängigen Terme werden durch die Einführung von $\varphi(n) = n \cdot f(n)$ zusammengefasst und die Gleichung für q dem Gesetz von DARCY gegenübergestellt. Für den Durchlässigkeitsbeiwert erhält man schließlich den Ausdruck

$$k_s = \frac{g}{\nu} \cdot C \cdot \varphi(n) \cdot d_e^2 \quad (2-11)$$

Tatsächlich ist C keine Konstante, sondern eine Funktion mehrerer Eigenschaften: $C = \varphi_1(s)$ (insbesondere Ungleichförmigkeitsgrad, Kornform, mineralogische Zusammensetzung, Verdichtungsgrad, Tongehalt usw.); für den effektiven Korndurchmesser d_e wird verschiedentlich d_{10} , d_{17} , d_{20} , d_w oder eine spezielle Funktion der Kornverteilung gesetzt.

VUKOVIC und SORO [1992] kommen in der bereits zitierten Literatur zum Schluss, dass für $\varphi(n)$

am besten die von KOZENY stammende Funktion $\varphi(n) = \frac{n^3}{(1-n)^2}$

verwendet wird. Eine ähnliche Empfehlung für die Ermittlung von d_e wurde nicht abgegeben.

2.3.2 Formel von HAZEN (1892)

$$k_s = C_H \cdot \gamma \cdot d_e^2 \quad (2-12)$$

$[k_s]$	= $\mathbf{m \cdot d^{-1}}$	Durchlässigkeitsbeiwert
$[d_e]$	= \mathbf{mm}	effektiver Korndurchmesser; zumeist wird $d_e = d_{10}$ gesetzt
$[C_H]$	=	Empirischer Koeffizient; nach HAZEN abhängig vom Tonanteil: für reine, enggestufte Sande: $800 < C_H < 1200$ (Maximalwert für sehr rein und sehr enggestuft) für tonige und weitgestufte Sande: $400 < C_H < 800$ (Minimalwert für sehr tonig und weitgestuft)
$[\gamma]$	=	Korrektur für die Wassertemperatur bzw. für die Abhängigkeit der Zähigkeit von der Temperatur: $\gamma = 0,70 + 0,03 \cdot t$ t in °C

Häufig wird der Koeffizient C_H in Abänderung zu HAZEN als Funktion des prozentuellen Porenanteils dargestellt:

$$C_H = 400 + 40 \cdot (p - 26) \quad (\text{Formel von LANGE})$$

Für $t = 10$ °C, $C_H = 860$ (genauer wohl 864) und k_s in cm/s ergeben die Koeffizienten und die Temperaturkorrektur insgesamt rund 1 und die Formel von HAZEN vereinfacht sich zu

$$k_s = d_{10}^2 \quad (2-13)$$

$[k_s]$	= $\mathbf{cm \cdot s^{-1}}$	Durchlässigkeitsbeiwert
$[d_{10}]$	= \mathbf{mm}	Korndurchmesser, der von 10 Massenprozent unterschritten wird

HAZEN überprüfte seine Formel vor allem an Filtersanden, also nur an sehr speziellen „Böden“ mit Einzelkorngefüge. Er hat daher den Gültigkeitsbereich der Formel durch Grenzwerte für d_e und für den Ungleichförmigkeitsgrad U beschränkt:

$$0,1 \text{ mm} < d_e < 3 \text{ mm}$$

$$U = d_{60}/d_{10} < 5$$

Bei guter Wahl des Koeffizienten C dürfte die Anwendbarkeit der Formel deutlich über den empfohlenen Gültigkeitsbereich hinaus gehen.

In der dimensionsfreien Form lautet die Hazen-Gleichung [VUKOVIC und SORO, 1992]

$$k_s = \frac{g}{\nu} \cdot C_H^* \cdot \varphi(n) \cdot d_e^2 \quad (2-14)$$

$[k_s]$	= $\mathbf{cm \cdot s^{-1}}$	Durchlässigkeitsbeiwert
$[g]$	= $\mathbf{cm \cdot s^{-2}}$	Fallbeschleunigung
$[\nu]$	= $\mathbf{cm^2 \cdot s^{-1}}$	kinematische Zähigkeit; bei 10 °C ist $\nu = 1,31 \times 10^{-2} \text{ cm}^2/\text{s}$
$[C_H^*]$	= dim.los	modifizierter Hazen-Beiwert; oft mit $C_H^* = 6 \times 10^{-4}$ angenommen
$[d_e]$	= \mathbf{cm}	effektiver Korndurchmesser, für die Hazen-Formel wird zumeist $d_e = d_{10}$ gesetzt

Die vom Porenanteil abhängige Funktion $\varphi(n)$ kann entsprechend der Formel von LANGE durch

$$\varphi(n) = (1 + 10 \times (n - 0,26)) \quad (2-15)$$

$[n]$ = dim.los Porenanteil

ausgedrückt werden. Unter diesen Voraussetzungen erhält man

$$k_s = 0,449 \times (1 + 10 \times (n - 0,26)) \times d_{10}^2 \quad (2-16)$$

$[k_s]$	= $\mathbf{cm \cdot s^{-1}}$	Durchlässigkeitsbeiwert
$[d_{10}]$	= \mathbf{mm}	Korndurchmesser mit 10 Massenprozent Durchgang

Durch den Vergleich der beiden Formeln 2-13 und 2-16 lässt sich errechnen, dass die Formel 2-16 für den Porenanteil $n = 0,38$ in die Formel 2-13 übergeht.

Beispiel 2-1: Mittels Grobsiebung, Feinsiebung und Schlämmanalyse wurde folgende Kornverteilung eines schluffigen Sand-Bodens mit sehr hohem Grobanteil bestimmt. Ermittle die Durchlässigkeit nach HAZEN!

Korngröße d (mm)	Summenlinie (%)	Korngröße d (mm)	Summenlinie (%)	Korngröße d (mm)	Summenlinie (%)
60,0	100,00	2,0	30,33	0,02	3,36
22,0	84,94	1,0	25,66	0,006	1,48
16,0	69,32	0,63	21,83	0,002	0,89
11,2	56,23	0,2	14,95	0,000	0,00
8,0	47,63	0,125	11,82		
4,0	37,66	0,063	8,95		

Die nebenstehenden Punkte der Kornverteilungslinie sind in einem Diagramm mit logarithmischer x-Achse einzutragen (siehe Abbildung).

Aus der unten abgebildeten Kornverteilungslinie sind dann die Werte für $d_{60} = 12,1$ mm, $d_{50} = 8,7$ mm und $d_{10} = 0,083$ mm abzulesen.

Nimmt man d_{10} als effektiven Durchmesser d_e an, wird der empfohlene Gültigkeitsbereich für die Hazen-Formel $0,1 \text{ mm} < d_e < 3 \text{ mm}$ vom vorhandenen Boden mit $d_e = 0,083$ mm nicht eingehalten. Darüber hinaus beträgt die Ungleichkörnigkeit $U = d_{60}/d_{10} = 12,1/0,083 = U = 146$, sodass auch der Gültigkeitsbereich $U < 5$ weit überschritten wird.

Der Boden ist übrigens trotz der sehr hohen Ungleichkörnigkeit nur als intermittierend gestuft zu bewerten, weil die Krümmungszahl C_c des Bodens

$$C_c = \frac{d_{30}^2}{d_{60} \cdot d_{10}} = 3,6 \quad \text{beträgt.}$$

Laut ÖNORM B 4400 [1978] zeigen Bodenarten mit intermittierend gestufter Korngrößenverteilung einen treppenartigen Verlauf der Körnungslinie, die auf das Fehlen oder Zurücktreten einer oder mehrerer Korngrößenbereiche hinweist.

Unterstellt man trotz allem die Anwendbarkeit der Hazen-Formel, ergibt sich für die Formel 2-12

$$k_s = C_H \cdot \gamma \cdot d_e^2$$

mit $C_H = 400$ (für sehr weit gestuft wegen $U = 146$), γ für 20°C (Zimmertemperatur) $= 0,70 + 0,03 \times 20 = 1,3$ und mit $d_e = d_{10} = 0,083$ mm

$$k_s = 400 \times 1,3 \times 0,083^2 = 3,6 \text{ m/d}$$

Obwohl die Korngrößenverteilung des Bodens die empfohlenen Anwendungsgrenzen der Hazen-Formel weit überschreitet, ergab sich eine gute Übereinstimmung mit dem an einer ungestörten Probe desselben Bodens im Labor gemessenen k -Wert.

KORNVERTEILUNG

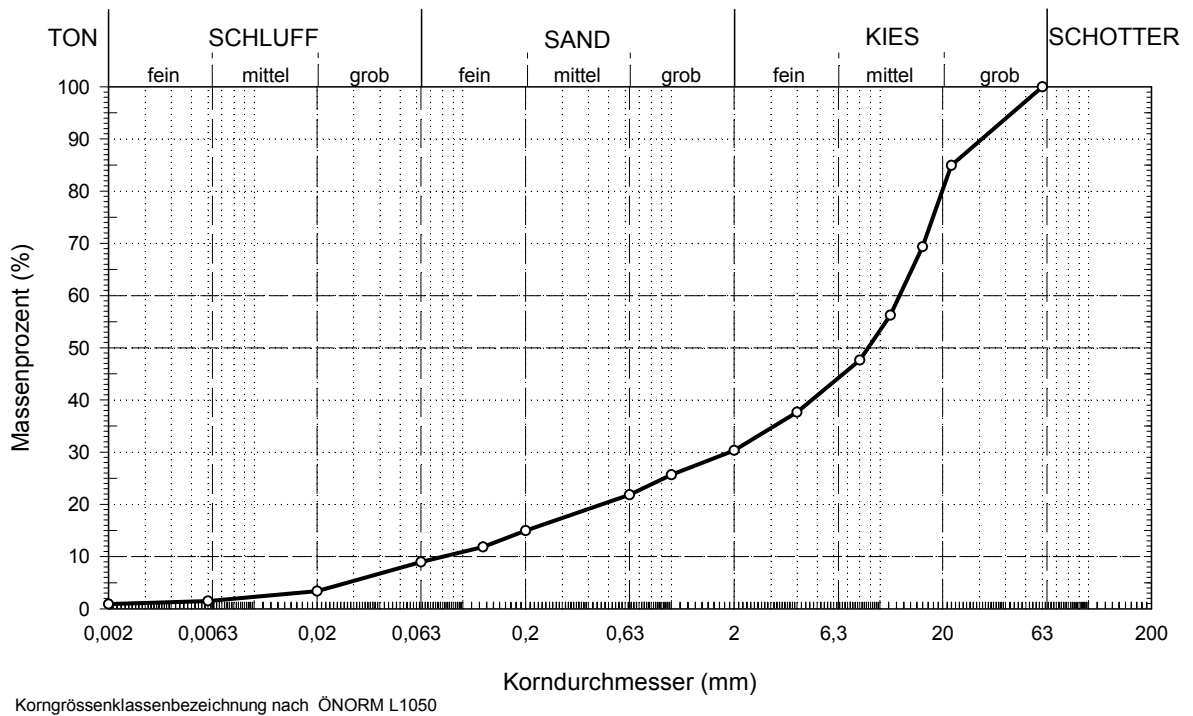


Abbildung 2-1: Kornverteilungslinie für den im Beispiel 2-1 gegebenen Boden

2.3.3 Formel von BEYER

Im Gegensatz zu HAZEN hat BEYER seine Formel für natürlich gelagerte, durch den Glazialdruck verfestigte deutsche Sandböden entwickelt und validiert. Am Aufbau in der von BEYER publizierten Form ist kein Unterschied zur Hazen-Formel zu erkennen:

$$k_s = C_B \cdot d_e^2 \quad (2-17)$$

$[k_s] = \text{m} \cdot \text{s}^{-1}$ Durchlässigkeitsbeiwert
 $[d_e] = \text{mm}$ effektiver Korndurchmesser; zumeist wird $d_e = d_{10}$ gesetzt
 $[C_B]$ Empirischer Koeffizient; hängt nach BEYER streng von der Ungleichkörnigkeitszahl U ab. Diese Abhängigkeit wurde von BEYER in einem Nomogramm dargestellt und kann durch die Beziehung
 $C_B = 4,5 \times 10^{-3} \times \log(500/U)$ genähert werden.

Im Gegensatz zur Hazen-Formel findet nicht der Porenanteil Eingang in den empirischen Koeffizienten, sondern die Ungleichkörnigkeit. Die Abhängigkeit des k -Wertes vom Porenanteil ist sicher stärker als die von der Ungleichkörnigkeit, doch besteht auch ein enger Zusammenhang zwischen der Ungleichkörnigkeit und dem Porenanteil, sodass in den Fällen, bei denen der Porenanteil nicht bekannt ist, die aus der Kornverteilung ermittelbare Ungleichkörnigkeit ein guter Ersatz ist.

In der dimensionsfreien Form lautet die Beyer-Formel [VUKOVIC und SORO, 1992]

$$k_s = \frac{g}{\nu} \cdot C_B^* \cdot d_{10}^2 \quad (2-18)$$

$[k_s] = \text{cm} \cdot \text{s}^{-1}$ Durchlässigkeitsbeiwert
 $[g] = \text{cm}/\text{s}^2$ Fallbeschleunigung
 $[\nu] = \text{cm}^2/\text{s}$ kinematische Zähigkeit; bei 10 °C ist $\nu = 1,31 \times 10^{-2} \text{ cm}^2/\text{s}$

$$[C_B^*] = \text{dim.los} \quad \text{modifizierter Beyer-Beiwert}$$

$$C_B^* = 6 \times 10^{-3} \times \log(500/U)$$

Als Gültigkeitsbereich wird für die Beyer-Formel

$$0,06 \text{ mm} < d_e < 3 \text{ mm} \quad \text{und} \quad 1 < U < 20 \quad \text{angegeben.}$$

2.3.4 Formel von KOZENY

Leider ist überhaupt keine Formel bekannt, die sowohl den Porenanteil n als auch die Ungleichkörnigkeit U in funktionalen Zusammenhang zu k setzt. Ähnlich wie in der Hazen-Formel findet die Ungleichkörnigkeit bzw. die Korngrößenverteilung eine indirekte Berücksichtigung in der bekannten Formel von KOZENY, allerdings nicht in Form eines Koeffizienten, sondern in der Bestimmung des effektiven Korndurchmessers d_e . Dieser ist bei KOZENY nicht einfach jener Durchmesser, der von einem bestimmten Massenanteil unterschritten wird (Siebdurchgang), sondern der aus einer Fraktionierung und speziellen Mittelung gewonnene wirksame Korndurchmesser d_w [VUKOVIC und SORO, 1992]. Das gesamte Verfahren von KOZENY beruht im Gegensatz zu anderen in erster Linie auf physikalisch-theoretischen Prinzipien und weniger auf statistische Untersuchungen. Eine eingehende Analyse des sogenannten Kozeny-Carman-Ansatzes existiert von AHUJA et al. [1989] (zitiert von OR und WRAITH [1997b]).

Ausgangspunkt der Überlegungen von KOZENY [1953] (zumindest in seinem Buch aus dem Jahr 1953) ist nicht der Fluss in einer einzelnen zylindrischen Pore nach HAGEN und POISEUILLE, sondern dass die spezifische Oberfläche O/V_s als die auf das Feststoffvolumen V_s bezogene Oberfläche O der kugelförmig gedachten Feststoffe und die vom Porenanteil abhängige Porengeschwindigkeit maßgeblichen Einfluss auf den Fließwiderstand und damit die Durchlässigkeit ausüben. Darauf aufbauend entwickelte er eine Formel, die den Porenanteil n und O/V_s enthält. Da die spezifische Oberfläche durch den wirksamen Korndurchmesser d_w per definitionem ausgedrückt werden kann, ist als effektiver Durchmesser bei KOZENY d_w zu verwenden.

KOZENY [1953] benutzte als Grundlage zwar nicht das Gesetz von HAGEN und POISEUILLE (es wird im entsprechenden Buchabschnitt mit keiner Silbe erwähnt), gelangte aber dennoch aus der Dimensionsbetrachtung, die er 1927 anstellte [KOZENY, 1927], zu etwa denselben Beziehungen wie die allgemeine Herleitung im Kapitel 2.3.1, wie gleich anhand der von KOZENY [1953] nahezu unverändert übernommenen Folgerungen gezeigt wird. Daraus folgen indirekt dieselben Annahmen und Gesetzmäßigkeiten über den Fluss in einer Pore wie bei HAGEN und POISEUILLE.

Mit den Größen O/V_s und d_w (siehe Anhang 7.2.6 bzw. 7.2.7) lässt sich der von KOZENY aufgestellte Zusammenhang zwischen der Kornverteilung und der Durchlässigkeit kompakt nachvollziehen. Dass die Größe des Widerstandes bzw. der Reibungskraft F pro Volumseinheit des strömenden Mediums V_l , den der Boden dem Fluid entgegensetzt und der mit F/V_l bezeichnet werde, von der Größe der Oberfläche der Bodenteilchen in der Volumseinheit der strömenden Flüssigkeit abhängt, ist laut KOZENY evident. Ist O die Oberfläche der Bodenteilchen, so ist die auf das Volumen der strömenden Flüssigkeit (bei Vollsättigung ist $V_l = V_p$) bezogene Oberfläche $O/V_p = O/(n \cdot V)$ wenn V das Gesamtvolumen des Bodens ist. Ferner wird der bezogene Widerstand F/V_l von der mittleren Porengeschwindigkeit abhängen. Ist Δs die Länge einer Stromröhre (den Feststoffanteil miteinschließend) vom Querschnitt ΔA , so beträgt der Inhalt der vollgefüllten Poren $V_p = n \cdot \Delta s \cdot \Delta A$ und

folglich der lichte Querschnitt für den Wasserdurchgang $V_p/\Delta s = n \cdot \Delta s \cdot \Delta A/\Delta s = n \cdot \Delta A$. Also ist die mittlere Porengeschwindigkeit

$$v_p = \frac{Q}{n \cdot \Delta A} = \frac{q}{n}$$

Endlich wird der bezogene Widerstand F/V_l auch von der Zähigkeit der Flüssigkeit η abhängen. Soll nun der Ausdruck

$$F/V_l = f(O, v_p, \eta)$$

die Dimension Kraft/Volumen = $M \cdot L^{-2} \cdot T^{-2}$ haben, so ist dies nur möglich, wenn

$$F/V_l = c \cdot (O/V_p)^2 \cdot v_p \cdot \eta \quad (2-19)$$

gesetzt wird und in diesem Ausdruck c eine reine Zahl (dimensionsloser Beiwert) bedeutet. KOZENY führte nun den Begriff des Dispersitätsgrades ein, der nichts anderes ist als die auf das Feststoffvolumen bezogene spezifische Oberfläche

$$O/V_s = \frac{\text{Kornoberfläche } O}{\text{Feststoffvolumen } (1-n) \cdot V}$$

Weil weiters $O/V_p = O/(n \cdot V)$ und damit

$$O/V_p = \frac{O \cdot (1-n)}{V \cdot (1-n) \cdot n} = O/V_s \cdot \frac{(1-n)}{n} \quad (2-20)$$

ist, folgt aus 2-19 (mit $v_p = \frac{q}{n}$)
$$F/V_l = c \cdot (O/V_s)^2 \cdot \frac{(1-n)^2}{n^3} \cdot q \cdot \eta \quad (2-21)$$

Um nun den Zusammenhang zwischen dem Widerstand F und der Durchlässigkeit herzustellen, muss man diese Gleichung dem Gesetz von DARCY gegenüberstellen. Im Darcy-Gesetz wird das Potenzialgefälle $I = d\psi/ds$ üblicherweise als Ableitung der Potenzialhöhe H bzw. des auf das Gewicht der Masse bezogenen Energieinhaltes $\psi = \Delta E/(\rho \cdot g \cdot V)$ nach dem Weg mit der Dimension L verstanden, sodass I die Dimension $L \cdot L^{-1}$ besitzt. Der zum Bezugssystem relative Energieinhalt mit der Dimension der Arbeit, den ein bestimmtes Kontrollvolumen an Flüssigkeit V_l an einer bestimmten Stelle im Potenzialfeld innehat, beträgt daher $\Delta E = \psi \cdot \rho_l \cdot g \cdot V_l$ und die dem Widerstand F entsprechende Kraft, die nötig ist, um das Kontrollvolumen in die Richtung von s zu bewegen, ist daher $F = d\Delta E/ds = g \cdot V_l \cdot d(\psi \cdot \rho_l)/ds$. Für dichtebeständige Fluide ergibt sich damit der Widerstand mit $d\psi/ds = I$ zu $F = \rho_l \cdot g \cdot V_l \cdot I$ und der auf das Volumen der Flüssigkeit bezogene Widerstand zu

$$F/V_l = \rho_l \cdot g \cdot I \quad (2-22)$$

mit der Dimension Kraft/Volumen = $M \cdot L^{-2} \cdot T^{-2}$.

Die beiden Ausdrücke für F/V_l aus den Gleichungen 2-21 und 2-22 werden nun gegenübergestellt

$$c \cdot (O/V_s)^2 \cdot \frac{(1-n)^2}{n^3} \cdot q \cdot \eta = \rho_l \cdot g \cdot I$$

Die entstandene Gleichung wird nach q aufgelöst, die dynamische Viskosität noch durch die kinematische ersetzt ($\eta = \rho_l \cdot \nu$)

$$q = \frac{g}{c \cdot (O/V_s)^2 \cdot \nu} \cdot \frac{n^3}{(1-n)^2} I$$

und durch Vergleich mit $q = k_s \cdot I$

$$\boxed{k_s = \frac{g}{c \cdot (O/V_s)^2 \cdot \nu} \cdot \frac{n^3}{(1-n)^2}} \quad (2-23)$$

$[k_s]$	= $m \cdot s^{-1}$	Durchlässigkeitsbeiwert
$[g]$	= $m \cdot s^{-2}$	Fallbeschleunigung
$[\nu]$	= $m^2 \cdot s^{-1}$	kinematische Viskosität des Bodenwassers
$[n]$	= dim.los	Porenanteil
$[c]$	= dim.los	Beiwert; KOZENY [1953] führt an, dass für $1/c$ nach Versuchen von DONAT etwa 70 bei sehr scharfkantigen Sanden gesetzt werden kann, welcher Wert mit der Rundung der Körner bis auf etwa 400 bei Kugeln wächst. Der Beiwert c ist

also insbesondere von der Kornform abhängig, aber auch von der Tortuosität. CARMAN hat hingegen im Jahre 1937 den Wert $1/5$ für $1/c$ vorgeschlagen [BEAR und VERRUIJT, 1994]. Jüngere Literaturangaben [VERRUIJT, 1970] [VUKOVIC und SORO, 1992] stimmen mit dem Wert von CARMAN überein, sodass wohl die Angabe von KOZENY [1953] ($1/c = 70-400$) zu verwerfen ist.

abgeleitet. Diese Gleichung für die Durchlässigkeit ist die von KOZENY in seinem Buch [1953] angegebene Beziehung. Laut KOZENY ist sie in ihrer Abhängigkeit vom Porenvolumen wiederholt überprüft und für Sande gut zutreffend gefunden worden [DONAT, 1929].

Die Herleitung der Beziehung 2-23 kann man auch in DIN 66126 Teil 1 [1989] (zitiert in DIN-Taschenbuch 133 [1997]) nachlesen. Wie schon aus dem Titel der Norm – Bestimmung der spezifischen Oberfläche disperser Feststoffe mit Durchströmungsverfahren, Grundlagen – vermuten lässt, dient die Gleichung dort nicht zur Bestimmung der Durchlässigkeit, sondern über die Messung der Durchlässigkeit zur Bestimmung der spezifischen Oberfläche.

Für sehr feine Böden muss laut KOZENY in der Gleichung 2-23 der Rauminhalt des adsorbierten Wassers berücksichtigt werden, indem das von ihm beanspruchte Porenvolumen n_0 berücksichtigt und jenes vom beweglichen Wasser erfüllte mit $n - n_0$ bezeichnet wird (siehe auch S. 46). Dann sei für die Durchlässigkeit

$$k_s = \frac{g}{c \cdot (O/V_s)^2 \cdot v} \cdot \frac{(n - n_0)^3}{(1 - n)^2} \quad \text{zu setzen.}$$

Mit Hilfe der Beziehung 7-10 – $O/V_s = 6/d_w$ –, mittels der die spezifische Oberfläche durch den wirksamen Korndurchmesser ersetzt werden kann

$$\frac{1}{(O/V_s)^2} = \frac{d_w^2}{36},$$

und der Zusammenfassung der beiden Konstanten $(1/c) \cdot (1/36)$ als Kozeny-Beiwert $C_K \cdot (1/c = 36 \cdot C_K)$ lässt sich die Gleichung 2-23 von KOZENY [1953] in die allgemeine Gleichung zur Bestimmung der Durchlässigkeit aus der Kornverteilung laut Kapitel 2.3.1 überführen

$$k_s = \frac{g}{v} \cdot C_K \cdot \frac{n^3}{(1 - n)^2} \cdot d_w^2 \quad (2-24)$$

- $[k_s] = \mathbf{m \cdot s^{-1}}$ Durchlässigkeitsbeiwert
- $[d_w] = \mathbf{m}$ wirksamer Korndurchmesser; Berechnung siehe unten
- $[g] = \mathbf{m \cdot s^{-2}}$ Fallbeschleunigung, $g = 9,81 \text{ m/s}^2$
- $[v] = \mathbf{m^2 \cdot s^{-1}}$ kinematische Viskosität; für Wasser bei 20°C : $v = 1,01 \times 10^{-6} \text{ m}^2/\text{s}$ (siehe Anhang S. 184)
- $[C_K] = \text{dim.los}$ Beiwert; VUKOVIC und SORO geben für die Gleichung in der vorliegenden Form einen Koeffizienten von $C_K = 8,3 \times 10^{-3}$ an. VERRUIJT [1970] nennt den Wert $C_K = 1/180 = 5,55 \times 10^{-3}$, womit man genau den von CARMAN vorgeschlagenen Wert für $1/c = 36/180 = 1/5$ erhält.
- $[n] = \text{dim.los}$ Porenanteil

Der k -Wert ist laut Gleichung 2-24 insbesondere von der Stoffgröße der dynamischen Viskosität abhängig. Die dem k -Wert entsprechende, von der Viskosität unabhängige Größe ist bekanntlich die *Permeabilität* mit dem Zusammenhang

$$k_s = \frac{\kappa \cdot \rho \cdot g}{\eta} = \frac{\kappa \cdot g}{v}$$

- $[k_s] = \mathbf{m \cdot s^{-1}}$ Durchlässigkeitsbeiwert, k -Wert

$[\kappa]$	$= \text{m}^2$	Permeabilität
$[\rho]$	$= \text{kg} \cdot \text{m}^{-3}$	Dichte des strömenden Mediums bzw. Fluids
$[g]$	$= \text{m} \cdot \text{s}^{-2}$	Fallbeschleunigung
$[\eta]$	$= \text{kg} \cdot \text{m}^{-1} \cdot \text{s}^{-1} \equiv \text{Pa} \cdot \text{s}$	dynamische Viskosität des Fluids
$[v]$	$= \text{m}^2 \cdot \text{s}^{-1}$	kinematische Viskosität des Fluids

Für die Permeabilität ergibt sich damit die kompakte Beziehung

$$\kappa = C_K \cdot d_w^2 \cdot \frac{n^3}{(1-n)^2}$$

Diese Gleichung ist in den USA als **Kozeny-Carman-Gleichung** bekannt. OR und WRAITH [1997b] geben an, dass die Gleichung ursprünglich von KOZENY im Jahre 1927 aufgestellt wurde und von Poren einheitlicher Größe und Anordnung ausging und auf dem Gesetz von HAGEN und POISEUILLE fußt. Das Modell ist laut HILLEL [1998] von CARMAN [1939] maßgeblich erweitert worden. Der Begriff des wirksamen Korndurchmessers dürfte von ZUNKER eingeführt worden sein; jedenfalls findet sich ein entsprechender Verweis bei KOZENY [1953].

Die Berechnung des wirksamen Korndurchmessers wird im Anhang (Kapitel 7.4) ausführlich diskutiert. Hier soll daher nur das derzeit übliche Verfahren vorgestellt werden. d_w in der Formel von KOZENY 2-24 wird gemäß VUKOVIC und SORO [1992] mit Verweis auf KOZENY berechnet

aus
$$\frac{1}{d_w} = \frac{1}{m_s} \cdot \sum_{i=1}^p \frac{\Delta m_i}{d_i} \quad (2-25)$$

$[d_w]$	$= \text{m}$	wirksamer Korndurchmesser; Bezüglich der Berechnung im Detail siehe unten
$[p]$	$= \text{dim. los}$	Anzahl der Korngrößenklassen bzw. -fraktionen
$[\Delta m_i]$	$= \text{g}$	Teilmasse der Korngrößenfraktion mit dem Index i (= Masse des Siebrückstandes). Die Summe aller Teilmassen ergibt die Gesamtmasse der Probe m_s :

$$\sum_{i=1}^p \Delta m_i = m_s$$

$[m_s]$	$= \text{g}$	Gesamtmasse der Feststoffpartikel einer Bodenprobe
$[d_i]$	$= \text{mm}$	mittlerer Durchmesser – genauer gesagt wirksamer Durchmesser – der Fraktion mit dem Index i . Mit Ausnahme der feinsten Fraktion wird d_i üblicherweise aus dem harmonischen Mittel

$$\frac{1}{d_i} = \frac{1}{2} \cdot \left(\frac{1}{d_{i \text{ unten}}} + \frac{1}{d_{i \text{ oben}}} \right)$$

berechnet, obwohl KOZENY eine andere Formel vorschlug.

Für den mittleren Durchmesser der feinsten Fraktion wird in Ermangelung an publizierten Alternativen zumeist die Extrabehandlung gemäß Gl. 7-26 (siehe hierzu Kapitel 7.4.3 im Anhang) gewählt:

$$\frac{1}{d_1} = \frac{3}{2} \cdot \frac{1}{d_{1 \text{ oben}}}$$

$[d_{i \text{ oben}}]$	$= \text{mm}$	oberer Grenzdurchmesser der betreffenden Fraktion.
$[d_{i \text{ unten}}]$	$= \text{mm}$	unterer Grenzdurchmesser der betreffenden Fraktion (mit dem Index i).
$[d_{1 \text{ oben}}]$	$= \text{mm}$	oberer Grenzdurchmesser der feinsten Fraktion. Nachdem im allgemeinen der kleinste beim Pipetteverfahren verwendete Grenzdurchmesser $d_{gr1} = 0,002 \text{ mm}$ ist und die feinste Fraktion somit der Tonfraktion entspricht, die alle Teilchen mit $0 < d \leq 0,002 \text{ mm}$ umfasst, ist zumeist $d_{1 \text{ oben}} = 0,002 \text{ mm}$ zu setzen.

Zusammenfassend ist festzustellen, dass man für den wirksamen Durchmesser eines Bodens, gebildet aus den mittleren Durchmessern der Fraktionen, die dem harmonischen Mittel der Fraktionsgrenzen entsprechen, und der Extrabehandlung der feinsten Fraktion laut VUKOVIC und SORO [1992] sowie der Gewichtung der einzelnen Fraktionen nach deren Massenanteil folgende Formel erhält

$$\frac{1}{d_w} = \frac{1}{m_s} \cdot \left[\frac{3}{2} \cdot \frac{\Delta m_1}{d_{1\text{ oben}}} + \sum_{i=2}^p \frac{\Delta m_i}{2} \cdot \left(\frac{1}{d_{i\text{ unten}}} + \frac{1}{d_{i\text{ oben}}} \right) \right] \quad (2-26)$$

Üblicherweise werden die Verhältnisse ΔKV_i der Teilmassen der einzelnen Fraktionen Δm_i zur Gesamtmasse m_s gebildet, sodass die Kornverteilung in dimensionslosen Massenanteilen KV angegeben werden kann:

$$\Delta KV_i = \frac{\Delta m_i}{m_s}, \quad \sum_{i=1}^p \Delta KV_i = 1$$

Dann geht Gleichung 2-26 über in

$$\boxed{\frac{1}{d_w} = \frac{3}{2} \cdot \frac{\Delta KV_1}{d_{1\text{ oben}}} + \sum_{i=2}^p \frac{\Delta KV_i}{2} \cdot \left(\frac{1}{d_{i\text{ unten}}} + \frac{1}{d_{i\text{ oben}}} \right)} \quad (2-27)$$

$[\Delta KV_i]$ = dim.los Massenanteil der Korngrößenfraktion mit dem Index i an der Gesamtmasse (= (Siebdurchgang oberer Grenzdurchmesser in % minus Siebdurchgang unterer Grenzdurchmesser in %)/100).

$[\Delta KV_1]$ = dim.los Massenanteil der feinsten Fraktion

Die Zusammenfassung der gegebenen Konstanten ($g = 9810 \text{ mm/s}^2$, $\nu = 1,01 \text{ mm}^2/\text{s}$, $C_K = 8,3 \times 10^{-3}$, Umrechnungsfaktor von mm/s auf m/d = $86400/1000 = 86,4$) liefert für den k -Wert nach KOZENY

$$k_s = 6965 \cdot \frac{n^3}{(1-n)^2} \cdot d_w^2.$$

$[k_s]$ = $\mathbf{m \cdot d^{-1}}$ Durchlässigkeitsbeiwert in m/d

$[d_w]$ = \mathbf{mm} wirksamer Korndurchmesser in mm

Beispiel 2-2: Für den in Beispiel 2-1 angegebenen Boden wurde im Labor der Porenanteil bestimmt. Er beträgt $n = 0,35$. Ermittle die Durchlässigkeit nach KOZENY!

Für die Ermittlung der spezifischen Oberfläche und des wirksamen Korndurchmessers nach KOZENY ist die untenstehende Tabelle hilfreich. Wie im Anhang ausgeführt, unterscheidet sich die Behandlung der letzten (feinsten) Fraktion nach VUKOVIC und SORO nicht von allen übrigen Fraktionen, wenn man als absoluten Kleinstdurchmesser bzw. Untergrenze der Fraktion 0,001 mm setzt.

Korngröße d (mm)	Summenlinie d. Massenanteile (%)	1/mittl. Korngröße d. Fraktion $1/d_{mi}$ (mm ⁻¹)	Massenanteil d. Fraktion Δm_i (-)	$(1/d_{mi}) \cdot \Delta m_i$ (mm ⁻¹)
60,0	100,00			
22,0	84,94	0,031	0,1506	0,00468
16,0	69,32	0,053	0,1562	0,00843
11,2	56,23	0,075	0,1309	0,00994
8,0	47,63	0,107	0,0860	0,00921
4,0	37,66	0,187	0,0997	0,01869
2,0	30,33	0,375	0,0733	0,02751
1,0	25,66	0,750	0,0467	0,03502
0,63	21,83	1,293	0,0383	0,04950
0,20	14,95	3,293	0,0688	0,22650
0,125	11,82	6,500	0,0313	0,20362
0,063	8,95	11,936	0,0287	0,34230
0,02	3,36	32,937	0,0559	1,84171
0,006	1,48	108,333	0,0188	2,04270
0,002	0,89	333,333	0,0059	1,95059
	0,00	750,000	0,0089	6,68077
		Σ	1,0000	13,45118

Der wirksame Korndurchmesser nach KOZENY d_w ergibt sich als Kehrwert der Oberflächenverhältniszahl $OVZ = 13,45118 \text{ mm}^{-1}$ (OVZ besitzt die Dimension $L^2 \cdot L^{-3}$) zu $d_w = 0,0743 \text{ mm}$.

Für Zimmer- bzw. Labortemperatur (20°C) beträgt die kinematische Viskosität $\nu = 1,01 \times 10^{-6} \text{ m}^2/\text{s}$, die Fallbeschleunigung für Wien ist $g = 9,81 \text{ m/s}^2$ und für den Kozeny-Beiwert wird $C_K = 8,3 \times 10^{-3}$ gesetzt. Mit diesen Werten und mit $n = 0,35$ erhält man nach Formel 2-24

$$k_s = \frac{9,81}{1,01 \times 10^{-6}} \times 8,3 \times 10^{-3} \times \frac{0,35^3}{(1 - 0,35)^2} \times (0,0743 \times 10^{-3})^2 = 4,52 \times 10^{-5} \text{ m/s}$$

Der k -Wert nach KOZENY beträgt also

$$k_s = 6,08 \times 10^{-4} \times 86400 = 3,9 \text{ m/d.}$$

Dieser Wert stimmt mit dem Ergebnis nach HAZEN aus Beispiel 2-1 ($k_s = 3,6 \text{ m/d}$) recht gut überein.

2.4 Allgemeines zum kapillaren Leitvermögen

Als **vadose Zone** sei jener Bereich des aus Lockermaterial bestehenden Bodens bezeichnet, der sich über einem etwaigen Grundwasserkörper und dessen geschlossenem Kapillarsaum befindet und in der Regel ungesättigte Poren aufweist. Die Bewegung des Wassers in der vadosen Zone erfolgt demnach zumeist im ungesättigten Zustand; manchmal auch unter feldgesättigten Bedingungen (z. B. Infiltration mit Überstau). Nur in seltenen Fällen ist von voller Sättigung auszugehen (z. B. Grundwasseraufspiegelung).

Das im gesättigten Bereich und insbesondere in der Grundwasserhydraulik weithin gültige Gesetz von DARCY wird erweitert, um auch für den ungesättigten Zustand als brauchbares Fließgesetz zu

dienen, indem das (geo-)hydraulische Potential durch das Potentialkonzept der Bodenphysik und der Durchlässigkeitsbeiwert als konstanter Proportionalitätsfaktor durch die vom Sättigungsgrad abhängige, variable Wasserleitfähigkeit ersetzt wird:

$$q = k \cdot I \quad \text{Gesetz von DARCY} \quad (2-28)$$

[q]	= $\text{m} \cdot \text{s}^{-1}$	Durchflussrate, Filtergeschwindigkeit; besitzt eigentlich die Dimension $\text{L}^3 \cdot \text{L}^{-2} \cdot \text{T}^{-1}$
[k]	= $\text{m} \cdot \text{s}^{-1}$	Wasserleitfähigkeit. k umfasst den Durchlässigkeitsbeiwert im Zustand voller Sättigung und das kapillare Leitvermögen bei Teilsättigung
[I]	= dim.los	Energiegefälle, Gradient der Gesamtpotenzialhöhe H . H setzt sich vornehmlich aus der Lagehöhe und der Druckhöhe zusammen. Während die Druckhöhe im Grundwasser praktisch immer positiv ist, herrscht in der vadosen Zone eine negative Druckhöhe vor.

Der Unterschied zwischen der vadosen Zone und dem Grundwasser besteht vor allem darin, dass das kapillare Leitvermögen im Gegensatz zum Durchlässigkeitsbeiwert k_s nicht konstant, sondern eine Funktion des Wassergehaltes bzw. der Wasserspannung ist und dass das Druckpotenzial (als Teilpotenzial des Gesamtpotenzials) in der ungesättigten Zone im allgemeinen nicht positiv, sondern negativ ist. Und selbst dann, wenn das Druck- oder Tensiometerpotenzial in der vadosen Zone zeitweilig positiv sein sollte, führen verbleibende Lufteinschlüsse im Porenraum dazu, dass die Durchlässigkeit kleiner bleibt als k_s . Die unter diesen Bedingungen auftretende Durchlässigkeit wird mitunter als k_{fs} -Wert bezeichnet (fs steht für „field saturated“).

Unter vielen Umständen mag die ungesättigte Wasserbewegung durch das Gesetz von DARCY ausreichend charakterisiert sein, doch keineswegs unter allen. Es soll nicht unerwähnt bleiben, dass Phänomene wie z. B. der *Makroporenfluss* oder „*Fingering*“ das Geschehen in der Praxis dominieren können.

2.4.1 Definitionen

KASTANEK et al. [1980] definieren die *Wasserleitfähigkeit* k als eine Bodeneigenschaft, die bei voller Sättigung als Durchlässigkeitsbeiwert und bei Teilsättigung als kapillares Leitvermögen bezeichnet werden kann; k ist daher ein Überbegriff zu diesen Größen. Wegen der Richtungsabhängigkeit ist \mathbf{k} eigentlich ein Tensor (mit symmetrischen Nebendiagonalelementen).

Als *Durchlässigkeitsbeiwert* k_s (oder k_{sat}) wird die Wasserleitfähigkeit des gesättigten Bodens bezeichnet. k_s kann im Feld z. B. mit der Bohrlochmethode oder durch einen Pumpversuch ermittelt werden, im Labor an ungestörten Stechzylinderproben, bei denen die Luft aus dem Porenraum vollständig verdrängt wurde. Der Durchlässigkeitsbeiwert ist maßgeblich für den Grundwasserfluss und daher die wichtigste physikalische Größe des Bodens für die Geohydraulik.

Das *kapillare Leitvermögen* wird hingegen auf den ungesättigten Boden beschränkt. Es kann als hysteresis Funktion sowohl des Wasseranteiles als auch der Wasserspannung betrachtet werden: $k = f(\theta)$ bzw. $k = f(h)$.

Als *relatives kapillares Leitvermögen* k_r wird z. B. von MUALEM [1976] das Verhältnis zwischen dem kapillaren Leitvermögen bei gegebener Wasserspannung $k(h)$ und der Wasserleitfähigkeit bei voller Sättigung k_s bezeichnet (öfter noch wird k_r als Funktion der effektiven Sättigung betrachtet: $k_r(S_e)$).

Für den *Durchlässigkeitsbeiwert unter feldgesättigten Bedingungen* k_{fs} lässt sich zwar keine strenge Definition in der Literatur finden, doch kann k_{fs} als maßgeblich für die vadoso Zone betrachtet werden, wenn die Druckpotentialhöhe größer oder gleich Null ist ($h \geq 0$). k_{fs} ist daher eine wichtige Grenzgröße für die Infiltration und kann z. B. mit einem Doppelring-Infiltrometer, mit einem Permeametersversuch oder mit der umgekehrten Bohrlochmethode bestimmt werden. Weil in der vadosen Zone unter Feldbedingungen selbst bei $h > 0$ Lufteinschlüsse bzw. Luftbläschen in den Poren verbleiben, ist k_{fs} stets deutlich kleiner als k_s . So gesehen läge es nahe, k_{fs} (und eben nicht k_s) als Grenzfall des kapillaren Leitvermögens bei $\theta = n$ bzw. $h = 0$ ($k(n)$) zu betrachten.

Je nach Disziplin sind unterschiedliche Fachausdrücke vorherrschend. Nachdem sich die Geohydraulik ausschließlich mit der Wasserbewegung im gesättigten Zustand beschäftigt und der Durchlässigkeitsbeiwert ihr wichtigster Parameter ist, liegt es auf der Hand, dass sie sich eines speziellen Begriffes bedient, der nur für diesen Zustand zutrifft. Dass hingegen in der Bodenphysik der Begriff des kapillaren Leitvermögens viel mehr Verwendung findet als der der Wasserleitfähigkeit, ist weit weniger verständlich, denn die Bodenphysik beschäftigt sich nicht nur mit der Teilsättigung, sondern auch mit dem Zustand der Vollsättigung.

Ob die Einführung des eigenen, auf die Teilsättigung beschränkten Fachausdruckes des kapillaren Leitvermögens physikalisch gerechtfertigt oder sogar bedingt ist, wird in der Literatur zum Teil kontrovers diskutiert. HILLEL [1998] stellt den Terminus „kapillares Leitvermögen“ in Frage und meint zum Adjektiv „kapillar“, dass es wahrscheinlich unnötig, ja sogar missverständlich sei, da ungesättigter Fluss genauso wenig dem Kapillarmodell entsprechen müsse wie gesättigter Fluss. Dem instationären Verhalten der Grenzflächen bzw. Kapillarmeniskens misst er für den ungesättigten Fluss nur untergeordnete Bedeutung zu (man denke z. B. an den Laborversuch zur Bestimmung des kapillaren Leitvermögens, bei dem die Kapillarkräfte nach Erreichen des Stationärzustandes für den Fluss bedeutungslos sind). Vielmehr sei die Wasserleitfähigkeit im ungesättigten Zustand vom verminderten Durchflussquerschnitt aufgrund der mehr oder weniger trocken gefallenen größeren Poren und von der größeren Tortuosität des Strömungsweges geprägt.

Vielleicht lassen sich die unterschiedlichen Standpunkte einigermaßen durch die Aussage auf einen Nenner bringen, dass die Kapillarität zwar nicht für das Leitvermögen als solches verantwortlich ist, aber indirekt für den Größenwert desselben, weil sie je nach Porenkonfiguration dafür sorgt, dass mehr oder weniger Porenquerschnittsflächen für den ungesättigten Fluss zur Verfügung stehen.

Als weiterer Kritikpunkt am Terminus des kapillaren Leitvermögens wäre hinzuzufügen, dass er das „Filmkriechen“ des Adsorptionswassers nicht umschließt, dieses jedoch ebenfalls dem ungesättigten Fluss zuzuordnen ist. Inwieweit allerdings dieser Fluss des Adsorptionswassers durch das Gesetz von DARCY beschrieben werden kann, sei dahingestellt.

Ebenfalls fraglich ist, ob die Wasserleitfähigkeit im gesättigten Zustand als Grenzfall des kapillaren Leitvermögens (bei $\theta = n$ bzw. $h = 0$) gesehen werden kann – in erster Linie wohl deshalb, weil die für den ungesättigten Zustand charakteristischen Kapillarmeniskens im voll gesättigten Boden gar nicht vorhanden sind. MUALEM [1976] benutzt die Begriffe „unsaturated hydraulic conductivity“ und „hydraulic conductivity at saturation k_{sat} “, jedoch nicht „capillary conductivity“. Das ist insofern bemerkenswert, als die Kapillarität einen wesentlichen Anteil an der Theorie in seinem Artikel einnimmt (und die Adsorptionswasserbewegung außer Acht bleibt). Jedenfalls behandelt er zumindest mathematisch k_s als Grenzfall des kapillaren Leitvermögens bei voller Sättigung. Die physikalische und terminologische Trennung zwischen der Wasserleitfähigkeit im ungesättigten und im

gesättigten Zustand wird dadurch hinfällig.

Neben den Leitfähigkeitsbegriffen bzw. Grenzfällen für k gilt es auch, diverse Strömungsgeschwindigkeitsbegriffe auseinander zu halten:

Die *Filtergeschwindigkeit* ist in der ÖNORM B 2400 [1986] definiert als Quotient aus Grundwasserdurchfluss Q und der zugehörigen Fläche des Grundwasserdurchflussquerschnitts A . Der nicht definierte, vielleicht besser zutreffende Begriff *Durchflussrate* soll als Synonym verwendet werden:

$$q = Q/A.$$

Die betrachtete Querschnittsfläche A wird von Poren, die mit Wasser und mehr oder weniger Luft gefüllt sind, und von Feststoffen eingenommen.

Die *Abstandsgeschwindigkeit* ist die Länge eines Stromlinienabschnittes, geteilt durch die Grundwasserfließzeit:

$$v \cdot A = l/t.$$

Die Abstandsgeschwindigkeit wird häufig aus Tracerversuchen ermittelt. Genau genommen ist der Weg, den ein einzelnes Teilchen zwischen der Einbringungsstelle im Boden und der Stelle, an der es später aufgespürt wird, kein Stromlinienabschnitt, sondern ein Bahnlinienabschnitt. Wenn jedoch die Abstandsgeschwindigkeit groß ist im Verhältnis zu den zeitlichen Änderungen der Strömungsbedingungen, kann die Strömung als quasistationär betrachtet und der Unterschied zwischen Strom- und Bahnlinie vernachlässigt werden, weil sie bei stationären Verhältnissen zusammenfallen. Darüber hinaus kann der genaue Weg eines Partikels durch den Boden nicht beobachtet werden. Als erste Näherung wird oft die Länge der direkten Verbindung zwischen dem Anfangspunkt und dem Endpunkt herangezogen.

Die *Porengeschwindigkeit* \bar{v} ist der Quotient aus der Durchflussrate und dem durchströmten Flächenanteil A_1 , der dem wassergefüllten Porenanteil n_1 entspricht:

$$\bar{v} = \frac{q}{n_1} \quad (2-29)$$

$[\bar{v}] = \text{m} \cdot \text{s}^{-1}$ mittlere Fließgeschwindigkeit in den Poren

$[q] = \text{m} \cdot \text{s}^{-1}$ Durchflussrate

$[n_1] = \text{dim.los}$ wassergefüllter Porenanteil

d. h. $\bar{v} = q/n$ bei Vollsättigung und $\bar{v} = Q/A_1 = q \cdot A/A_1$ bei Teilsättigung.

Die *wahre Grundwassergeschwindigkeit* ist laut ÖNORM B 2400 [1986] die tatsächliche, sowohl der Richtung als auch der Größe nach sich dauernd ändernde, praktisch nicht messbare Geschwindigkeit eines Grundwasserteilchens.

2.4.2 Bestimmungsmöglichkeiten

Grundsätzlich stehen Laborversuche, Feldversuche und indirekte Verfahren zur Auswahl. Eine ausführliche Darstellung der Methoden zur Bestimmung der ungesättigten hydraulischen Leitfähigkeit im Labor und im Feld stammt u. a. von PLAGGE [1991]. Abgesehen von theoretischen Untersuchungen sind immer in-situ-Versuche im Feld anzustreben. Im Kapitel 2.9 wird die wichtigste Feldmethode – die Profilmethode – in zwei Auswertungsvarianten vorgestellt.

Kleiner als der Aufwand für Feldversuche ist jener für Laborversuche. Die notwendige apparative Ausrüstung hängt stark vom Verfahren ab und ist besonders bei hohem Automatisierungsgrad teuer. Nachdem sowohl die entsprechenden Feld- als auch Laborversuche relativ aufwändig sind, wird k oft nur indirekt durch diverse Modellansätze bestimmt.

Das wohl einfachste Modell zur Beschreibung der porösen Struktur des Bodens, die für das kapillare Leitvermögen ausschlaggebend ist, ist der Ansatz von KOZENY-CARMAN, bei dem die Bodenporen als ein Kapillarenbündel aus lauter gleich großen zylindrischen Röhren betrachtet werden. Dieses uniforme Kapillarenbündel wurde von BURDINE [1953] durch ein Bündel unterschiedlich großer Kapillaren ersetzt, das dieselbe effektive Porengrößenverteilung besitzen wie der Boden [OR und WRAITH, 1977a]. Weil der Fluss in einer unregelmäßig geformten Pore viel weniger von einem mittleren Porenradius bzw. von der spezifischen Oberfläche abhängt als von Poren-Engstellen entlang des Strömungsweges [HILLEL, 1998], muss ein verbessertes Modell die Anzahl und Größe dieser Engstellen ebenso wie die Verbindungen von Poren unterschiedlichen Durchmessers und die Tortuosität berücksichtigen. Ein entsprechend abgeändertes Modell wurde bereits 1950 von CHILDS und COLLIS-GEORGE eingeführt. Hierbei denkt man sich das Kapillarenbündel mehrfach in Normalebenen auf die Kapillarenachse durchgeschnitten und wieder zusammengesetzt, wobei allerdings die einzelnen Stücke beliebig zueinander versetzt werden. Dieses Modell des serienparallelen Kapillarenbündels bildet die Basis für die meisten Ansätze zur modellhaften Beschreibung des kapillaren Leitvermögens bis heute, so auch für jene von MARSHALL oder MUALEM oder BHABANI und KLUITENBERG [1995]. In sehr trockenen Böden wird die Wasserbewegung nicht von den Kapillar-, sondern von den Adsorptionskräften beherrscht. Für diesen Bereich sind die genannten Modellansätze nicht geeignet [LEIJ et al., 1997].

2.5 Kapillares Leitvermögen – Ansatz von MARSHALL

Wenn der Boden Aggregatgefüge aufweist, ist im Gegensatz zum Einzelkorngefüge nicht die Korngrößenverteilung das bestimmende Element der Porenstruktur, sondern die Wasseranteil-Matrixpotenzial-Beziehung (= Bodenwassercharakteristik, Rückhalte- oder Retentionskurve). Für die Herstellung des Zusammenhanges zwischen der Durchlässigkeit und der Porenstruktur sowie zwischen der Porenstruktur und der Wasseranteil-Matrixpotenzial-Beziehung sind mehrere Modellansätze erforderlich. Selbst wenn die Geometrie des Porenraumes exakt bekannt wäre (für sehr kleine Bodenproben ist dies mit sehr hohem Aufwand annähernd möglich), könnte die Strömung hydraulisch kaum nachvollzogen werden. Die Porengeometrie muss daher durch Modelle extrem vereinfacht und durch Transferfunktionen erfasst werden. Für die Bestimmung der Porengrößenverteilung kann praktisch nur die Retentionskurve herangezogen werden (siehe S. 14).

Das Porensystem wurde von MARSHALL (1958) grundsätzlich als serienparalleles Kapillarenbündel aufgefasst, wobei angenommen wurde, dass sich der Fluss sowohl in einer beliebigen Teilpore als auch genau an der Übertrittsstelle von einer Teilpore zur nachfolgenden durch das Gesetz von HAGEN und POISEUILLE (siehe Kapitel 7.5.1 im Anhang) für laminare Strömung durch eine Kapillare mit dem Äquivalentradius r_p beschreiben lässt (Gleichung 7-33):

$$q = \frac{n_l \cdot g \cdot d_p^2 \cdot I}{32 \cdot \nu} = \frac{n_l \cdot g \cdot \rho \cdot r^2 \cdot I}{8 \cdot \eta} \quad (2-30)$$

$[q]$	= $\text{m} \cdot \text{s}^{-1}$	Durchflussrate	
$[n_l]$	= dim.los	wassergefüllter Porenanteil;	$n_l \equiv \theta$
$[d_p]$	= m	Äquivalentdurchmesser der Pore	
$[\nu]$	= $\text{m}^2 \cdot \text{s}^{-1}$	kinematische Viskosität des Strömungsmediums;	$\nu = \eta/\rho$
$[r]$	= m	Äquivalentradius der Pore;	$r = d_p/2$
$[I]$	= dim.los	Gradient der Gesamtpotenzialhöhe	

$[\eta] = \text{kg} \cdot \text{m}^{-1} \cdot \text{s}^{-1}$ dynamische Viskosität des Strömungsmediums

Durch die Gegenüberstellung mit dem Gesetz von DARCY (2-28) erhält man für das kapillare Leitvermögen

$$k = n \cdot r^2 \cdot \frac{\rho \cdot g}{8 \cdot \eta} \quad (2-31)$$

CHILDS und COLLIS-GEORGE [1950] stellten eine von der Porengrößenverteilung eines Materials abhängige Beziehung für die Berechnung des k -Wertes auf. Bei Verbindungen von Poren mit unterschiedlicher Größe wird der Radius der kleineren Pore als äquivalente Größe angesetzt. Wird ein poröses Material durch einen Schnitt in 2 Hälften geteilt und beliebig wieder zusammengesetzt, dann gilt für den k -Wert, resultierend aus der zufälligen Verbindung von Poren unterschiedlicher Größe

$$k = M \cdot \sum_{\rho=0}^{\rho=R} \sum_{r=0}^{r=R} \delta^2 \cdot f(\rho) \cdot dr \cdot f(\delta) \cdot dr$$

δ, ρ Radien von verbundenen Poren

δ kleinerer Radius

$f(\delta) \cdot dr, f(\rho) \cdot dr$ Querschnittsanteile der Poren mit Radius r bis $r + dr$

M Radius der größten Poren

Im ungesättigten Boden ist R der Radius der größten mit Wasser gefüllten Poren

Aufbauend auf CHILDS und COLLIS-GEORGE postulierte MARSHALL [1958] eine mittlere Querschnittsfläche von Poren-Engstellen. Die Einheitsflächen der zwei geteilten Querschnittsflächen wurden so behandelt, als ob N Anteile mit der gleichen Fläche ($1/N$) und dem Porenanteil n vorhanden sind. Weiters beinhalten die Einheitsflächen Poren mit einem Radius $r_1, r_2 \dots r_N$, wobei $r_i > r_{i+1}$. Wenn die zwei Hälften wieder vereinigt werden, so wird jeder Teil der einen Oberfläche mit N Teilen der Fläche $1/N^2$ zusammengefügt. Bei der Zusammenfügung wird angenommen, dass alle Poren perfekt miteinander kommunizieren, wobei die kleinere Pore in jeder Verbindung als Porengröße betrachtet wird. Da jedoch die Verbindungen häufig nicht Pore auf Pore erfolgen, wird angenommen, dass die Kontaktflächen im Mittel den n -fachen Werten ($n = \text{Porenanteil}$) der kleineren Porenflächen entsprechen.

Für die mittlere Querschnittsfläche $\pi \cdot r_i^2$ aller Verbindungsstellen (Poren-Engstellen) konnte gezeigt werden:

$$\pi \cdot r_i^2 = \pi \cdot n \cdot N^{-2} \cdot [r_1^2 + 3 \cdot r_2^2 + \dots + (2 \cdot N - 1) \cdot r_N^2] \quad (2-32)$$

Mit
$$k = n \cdot r_i^2 \cdot \frac{\rho \cdot g}{8 \cdot \eta} \rightarrow r_i^2 = k \cdot \frac{8 \cdot \eta}{n \cdot \rho \cdot g}$$

folgt
$$k \cdot \frac{8 \cdot \eta}{\rho \cdot g} = n^2 \cdot N^{-2} \cdot [r_1^2 + 3 \cdot r_2^2 + \dots + (2 \cdot N - 1) \cdot r_N^2] \quad (2-33)$$

und weiter
$$k = n^2 \cdot N^{-2} \cdot \frac{\rho \cdot g}{8 \cdot \eta} \cdot [r_1^2 + 3 \cdot r_2^2 + \dots + (2 \cdot N - 1) \cdot r_N^2]$$

oder
$$k = \frac{1}{8} \cdot n^2 \cdot N^{-2} \cdot \frac{\rho \cdot g}{\eta} \cdot \sum_{i=1}^N (2 \cdot i - 1) \cdot r_i^2 \quad (2-34)$$

Mit Hilfe der Beziehung zwischen dem Porenradius und der Wasserspannung h ($\sigma = \text{Oberflächen- spannung}$) (Gleichung 7-16)
$$r = 2\sigma / (\rho \cdot g \cdot h_k) \quad (2-35)$$

lässt sich der Äquivalentradius r durch die Wasserspannung h ersetzen:

$$k = \frac{1}{8} \cdot n^2 \cdot N^{-2} \cdot \frac{\rho \cdot g}{\eta} \cdot \sum_{i=1}^N (2 \cdot i - 1) \cdot \frac{4 \cdot \sigma^2}{(\rho \cdot g)^2 \cdot h_i^2} \quad (2-36)$$

Die Formel von MARSHALL lautet schließlich

$$k = \frac{n^2}{N^2} \cdot \frac{\sigma^2}{2 \cdot \eta \cdot \rho \cdot g} \cdot \sum_{i=1}^N (2 \cdot i - 1) \cdot \frac{1}{h_i^2} \quad (2-37)$$

Beispiel 2-3: Formel von MARSHALL für Standardwerte:

Kennwerte von Wasser bei 10 °C:

$$\eta = 1,307 \times 10^{-3} \text{ Ns/m}^2$$

$$\rho = 9804 \text{ N/m}^3$$

$$\sigma = 0,0742 \text{ N/m}$$

$$r^2 = (2 \times 0,074 / 9810)^2 h^{-2}$$

$$r^2 = 2,276 \times 10^{-10} h^{-2}$$

$$K = \frac{1}{2} \cdot \frac{n^2 \cdot 0,0742^2}{N^2 \cdot 1,307 \times 10^{-3} \times 9804} \cdot \sum_{i=1}^N (2 \cdot i - 1) \cdot \frac{1}{h_i^2}$$

Für h_i in m:

$$k = 0,215 \times 10^{-3} \cdot n^2 \cdot N^{-2} \cdot \sum_{i=1}^N (2 \cdot i - 1) \cdot h_i^{-2} \quad (\text{m/s})$$

oder für h_i in cm:

$$k = 215 \cdot n^2 \cdot N^{-2} \cdot \sum_{i=1}^N (2 \cdot i - 1) \cdot h_i^{-2} \quad (\text{cm/s})$$

Beispiel 2-4: Gesucht ist das kapillare Leitvermögen k bei 25, 50, 75 und 100 % Sättigung mit der Methode nach MARSHALL!

Gegeben: Wasserspannung-Wasseranteil-Beziehung (aus Messungen); $n = 39\%$

h (m)	0,00	0,05	0,10	0,20	0,40	0,60	0,80	1,00	1,20	1,50	2,00	3,00	5,00
θ (%)	39,0	39,0	39,0	39,0	38,2	34,4	26,4	17,7	11,6	6,9	4,5	3,7	3,5

Anmerkung: Genau genommen sind die Werte der Retentionskurve nicht gemessen worden, sondern Funktionswerte der Rybakowa-Funktion (Funktion 2-5) mit den folgenden Parametern: $\theta_s = 39,0\%$, $\theta_r = 3,5\%$, $C = 1,50$ und $D = 4,50$. Des weiteren wurden die Wasserspannungen der untenstehenden Tabelle an den Intervallteilungsstellen nicht linear interpoliert oder aus dem Graphen gemessen, sondern aus der inversen Funktion errechnet (und auf die zwei angegebenen Stellen gerundet).

Als Porenanteil n ist in diesem Zusammenhang der Wasseranteil bei einer Wasserspannung $h = 0$ m zu betrachten: $n = \theta(h = 0) = \theta_s$. Der Wasseranteil bei Vollsättigung oder $S = 100\%$ beträgt also n bzw. $39,0\%$, bei $S = 75\%$ beträgt er $0,75 \cdot n = 29,25\%$, bei $S = 50\%$ $0,50 \cdot n = 19,50\%$ und bei $S = 25\%$ $0,25 \cdot n = 9,75\%$.

Der gesamte jeweils zutreffende Bereich (also für $S = 100\%$ $0 \leq \theta \leq 39\%$, für $S = 75\%$ $0 \leq \theta \leq 29,25\%$, für $S = 50\%$ $0 \leq \theta \leq 19,50\%$ und für $S = 25\%$ $0 \leq \theta \leq 9,75\%$) könnte nun für jede der vier verschiedenen Sättigungsgrade in eine mehr oder weniger beliebige Anzahl an gleichmäßigen Intervallen unterteilt werden, wobei für die gesamte Kurve eine Intervallanzahl zwischen 8 und 15 günstig ist und für die kleine-

ren Sättigungsgrade entsprechend weniger. Für die Sättigungsgrade 1/4, 2/4, 3/4 und 4/4 empfiehlt es sich natürlich, eine ganzzahlig durch Vier teilbare Anzahl zu wählen, weil sich dann für alle Sättigungsgrade idente Intervalle ergeben.

Wir wählen $N = 12$ (dann besteht die Retentionskurve für den kleinsten Sättigungsgrad aus 3 Intervallen; das ist i. a. ausreichend), tragen die Retentionskurve graphisch auf und entnehmen aus den jeweiligen Intervallmitten

$$\theta_i = (N - i + 1/2) \cdot n / N$$

die zugehörigen Wasserspannungen h_i . Die Werte für h können näherungsweise auch linear interpoliert werden. Für den weiteren Berechnungsablauf legt man am besten eine Tabelle an (Die Spalten nach i enthalten die Werte für $2 \cdot i - 1$).

θ_i (%)	h_i (m)	$1/h_i^2$ (m ⁻²)	S = 1,00		S = 0,75		S = 0,50		S = 0,25		
			i	$(2i-1)/h_i^2$	i	$(2i-1)/h_i^2$	i	$(2i-1)/h_i^2$	i	$(2i-1)/h_i^2$	
37,375	0,47	4,618	1	1	4,618						
34,125	0,61	2,710	2	3	8,130						
30,875	0,70	2,055	3	5	10,273						
27,625	0,77	1,673	4	7	11,708	1	1	1,673			
24,375	0,84	1,403	5	9	12,624	2	3	4,208			
21,125	0,92	1,190	6	11	13,090	3	5	5,950			
17,875	1,00	1,009	7	13	13,119	4	7	7,064	1	1	
14,625	1,09	0,845	8	15	12,675	5	9	7,605	2	3	
11,375	1,21	0,686	9	17	11,654	6	11	7,541	3	5	
8,125	1,39	0,515	10	19	9,785	7	13	6,695	4	7	
4,875	1,87	0,287	11	21	6,034	8	15	4,310	5	9	
1,625	∞	0,000	12	23	0,000	9	17	0,000	6	11	
				Σ	113,710		Σ	45,045		Σ	13,163
										Σ	1,377

Mit der in Beispiel 2-3 gewonnenen Formel für h_i in m unter Verwendung der ange-

führten Konstanten $k = 0,215 \times 10^{-3} \cdot n^2 \cdot N^{-2} \cdot \sum_{i=1}^N (2 \cdot i - 1) \cdot h_i^{-2}$

erhält man für $S = 1,00$: $k(S = 1,00) = 0,215 \times 10^{-3} \times 0,39^2 \times 12^{-2} \times 113,710 \text{ m/s}$

$$k(S = 1,00) = 1,07 \times 10^{-3} \text{ m/s}$$

für $S = 0,75$: $k(S = 0,75) = 0,215 \times 10^{-3} \times (0,39 \times 0,75)^2 \times 9^{-2} \times 45,045 \text{ m/s}$

$$k(S = 0,75) = 4,91 \times 10^{-4} \text{ m/s}$$

für $S = 0,50$: $k(S = 0,50) = 0,215 \times 10^{-3} \times (0,39 \times 0,50)^2 \times 6^{-2} \times 13,163 \text{ m/s}$

$$k(S = 0,50) = 1,76 \times 10^{-4} \text{ m/s}$$

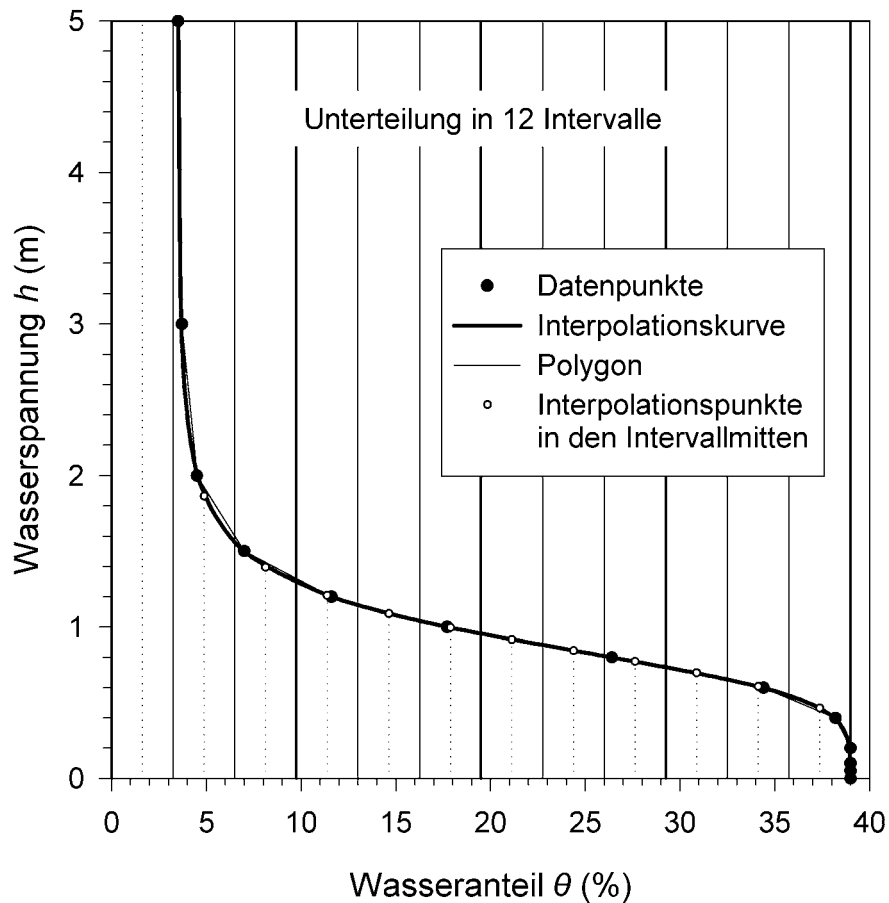
für $S = 0,25$: $k(S = 0,25) = 0,215 \times 10^{-3} \times (0,39 \times 0,25)^2 \times 3^{-2} \times 1,377 \text{ m/s}$

$$k(S = 0,25) = 2,60 \times 10^{-5} \text{ m/s}$$

Das relative kapillare Leitvermögen k_r bei einem Sättigungsgrad S als Quotient zwischen dem kapillaren Leitvermögen $k(S)$ bei diesem Sättigungsgrad und der Wasserleitfähigkeit bei voller Sättigung $k_s = k(S = 1,0)$ beträgt

$$k_r(S = 0,75) = \frac{4,910 \times 10^{-4}}{1,073 \times 10^{-3}} = 0,457 \quad k_r(S = 0,50) = \frac{1,757 \times 10^{-4}}{1,073 \times 10^{-3}} = 0,164$$

$$k_r(S = 0,25) = \frac{2,600 \times 10^{-5}}{1,073 \times 10^{-3}} = 0,024$$



Beispiel 2-5: Gesucht ist das kapillare Leitvermögen k bei 25, 50, 75 und 100 % Sättigung mit der Methode nach MARSHALL!

Gegeben: Wasserspannung-Wasseranteil-Beziehung (aus Messungen); $n = 0,33$

h (m)	0,00	0,05	0,10	0,20	0,40	0,60	0,80	1,00	1,20	1,50	2,00	3,00	5,00
θ (-)	0,330	0,330	0,330	0,330	0,330	0,323	0,292	0,227	0,156	0,105	0,048	0,041	0,040

Anmerkung: Diese Kurve wurde ebenfalls künstlich generiert. Hierfür wurden vorerst die Parameter für das Rybakowa-Modell vorgewählt ($\theta_s = 0,33$, $\theta_r = 0,035$, $C = 0,50$ und $D = 5,0$) und die Funktionswerte bestimmt. Anschließend wurden die Funktionswerte willkürlich geringfügig verändert. Das Resultat entspricht daher sicher eher einer Kurve wie sie aus Messwerten zustande gekommen sein könnte denn reine Funktionswerte.

Eine Kurvenanpassung des Rybakowa-Modells an die obigen „Messwerte“ ergab folgende Parameter: $\theta_r = 0,039215$, $C = 0,532597$ und $D = 5,142146$ ($\theta_s = 0,330$). Vergleicht man die händisch durchgezogene Kurve durch die Messwerte mit der angepassten Kurve, so stellt man fest, dass die angepasste Kurve deutliche Abweichungen von den Messwerten aufweist. Es soll daher nachstehend das Ergebnis mit der Marshall-Methode verglichen werden, wenn man a) die Wasserspannung aus der angepassten Kurve errechnet und b) die Wasserspannung linear aus den Messwerten interpoliert.

a) Wasserspannungen aus der angepassten Rybakowa-Funktion

θ_i (-)	h_i (m)	$1/h_i^2$ (m ⁻²)	S = 1,00		S = 0,75		S = 0,50		S = 0,25		
			i	(2i-1)/h _i ²	i	(2i-1)/h _i ²	i	(2i-1)/h _i ²	i	(2i-1)/h _i ²	
0,31625	0,63	2,517	1	1	2,517						
0,28875	0,80	1,576	2	3	4,729						
0,26125	0,90	1,235	3	5	6,174						
0,23375	0,99	1,029	4	7	7,203	1	1	1,029			
0,20625	1,07	0,880	5	9	7,916	2	3	2,639			
0,17875	1,15	0,759	6	11	8,344	3	5	3,793			
0,15125	1,24	0,653	7	13	8,484	4	7	4,568	1	1	0,653
0,12375	1,34	0,553	8	15	8,299	5	9	4,979	2	3	1,660
0,09625	1,49	0,452	9	17	7,687	6	11	4,974	3	5	2,261
0,06875	1,73	0,335	10	19	6,370	7	13	4,358	4	7	2,347
0,04125	2,96	0,114	11	21	2,392	8	15	1,709	5	9	1,025
0,01375	∞	0,000	12	23	0,000	9	17	0,000	6	11	0,000
				Σ	70,115		Σ	28,049		Σ	7,945
										Σ	0,677

$$k(1,00) = 0,215 \times 10^{-3} \times 0,33^2 \times 12^{-2} \times 70,115 \text{ m/s} = 4,74 \times 12^{-4} \text{ m/s}$$

$$k(0,75) = 0,215 \times 10^{-3} \times (0,33 \times 0,75)^2 \times 9^{-2} \times 28,049 \text{ m/s} = 2,19 \times 12^{-4} \text{ m/s}$$

$$k(0,50) = 0,215 \times 10^{-3} \times (0,33 \times 0,50)^2 \times 6^{-2} \times 7,945 \text{ m/s} = 7,59 \times 12^{-5} \text{ m/s}$$

$$k(0,25) = 0,215 \times 10^{-3} \times (0,33 \times 0,25)^2 \times 3^{-2} \times 0,677 \text{ m/s} = 9,15 \times 12^{-6} \text{ m/s}$$

$$k_r(0,75) = 0,462$$

$$k_r(0,50) = 0,160$$

$$k_r(0,25) = 0,019$$

b) Wasserspannungen linear interpoliert

Nach der Formel $h(\theta) = h_{i-1} + (h_i - h_{i-1}) / (\theta_i - \theta_{i-1}) \times (\theta - \theta_{i-1})$ $\theta_{i-1} \leq \theta < \theta_i$

(die Indizes beziehen sich auf die gemessenen Werte mit aufsteigendem θ) erhält man z. B. für den mittleren Wert des dritten Intervalls

$$h(0,26125) = 1,00 + (0,80 - 1,00) / (0,292 - 0,227) \times (0,26125 - 0,227) = 0,8946 \text{ m.}$$

θ_i (-)	h_i (m)	$1/h_i^2$ (m ⁻²)	S = 1,00		S = 0,75		S = 0,50		S = 0,25		
			i	(2i-1)/h _i ²	i	(2i-1)/h _i ²	i	(2i-1)/h _i ²	i	(2i-1)/h _i ²	
0,31625	0,64	2,441	1	1	2,441						
0,28875	0,81	1,524	2	3	4,572						
0,26125	0,89	1,262	3	5	6,312						
0,23375	0,98	1,041	4	7	7,289	1	1	1,041			
0,20625	1,06	0,890	5	9	8,010	2	3	2,670			
0,17875	1,14	0,769	6	11	8,464	3	5	3,847			
0,15125	1,23	0,661	7	13	8,593	4	7	4,627	1	1	0,661
0,12375	1,39	0,518	8	15	7,764	5	9	4,658	2	3	1,553
0,09625	1,58	0,401	9	17	6,810	6	11	4,406	3	5	2,003
0,06875	1,82	0,302	10	19	5,736	7	13	3,925	4	7	2,113
0,04125	2,96	0,114	11	21	2,397	8	15	1,712	5	9	1,027
0,01375	∞	0,000	12	23	0,000	9	17	0,000	6	11	0,000
				Σ	68,388		Σ	26,887		Σ	7,357
										Σ	0,644

$$k(1,00) = 0,215 \times 10^{-3} \times 0,33^2 \times 12^{-2} \times 70,115 \text{ m/s} = 4,62 \times 12^{-4} \text{ m/s}$$

$$k(0,75) = 0,215 \times 10^{-3} \times (0,33 \times 0,75)^2 \times 9^{-2} \times 28,049 \text{ m/s} = 2,10 \times 12^{-4} \text{ m/s}$$

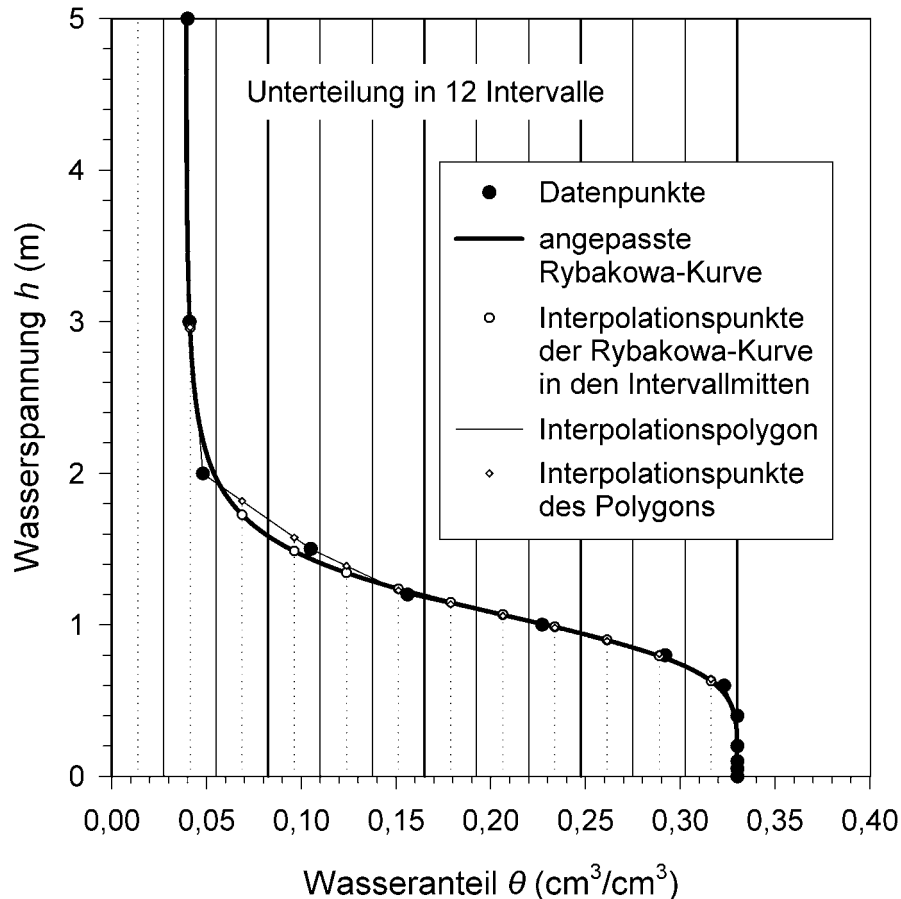
$$k(0,50) = 0,215 \times 10^{-3} \times (0,33 \times 0,50)^2 \times 6^{-2} \times 7,945 \text{ m/s} = 7,03 \times 12^{-5} \text{ m/s}$$

$$k(0,25) = 0,215 \times 10^{-3} \times (0,33 \times 0,25)^2 \times 3^{-2} \times 0,677 \text{ m/s} = 8,71 \times 12^{-6} \text{ m/s}$$

$$k_r(0,75) = 0,454$$

$$k_r(0,50) = 0,152$$

$$k_r(0,25) = 0,019$$



Im obigen Graphen sind die Unterschiede der beiden Verfahren hinsichtlich der Gewinnung eines geschlossenen Kurvenzuges deutlich zu erkennen. Während die angepasste Rybakowa-Funktion einen glatten Verlauf ergibt, der jedoch von manchen Messwerten abweicht, verläuft der Polygonzug zwar genau durch die Punkte, weist jedoch unrealistische Knicke auf. Es kann daher weder dem einen noch dem anderen Verfahren der Vorzug eingeräumt werden. Unter der Annahme, dass die Datenpunkte exakt und nicht fehlerbehaftet sind, sind Approximationsfunktionen weniger geeignet, doch ist auch eine sorgfältige Wahl unter den Interpolationsfunktionen (z. B. Form erhaltende Interpolationssplines) notwendig, um ein Ergebnis zu erzielen, das dem „wahren“ Verlauf der Retentionskurve nahe kommt.

2.6 Bestimmung des relativen kapillaren Leitvermögens nach MUALEM

Ausgangspunkt der Überlegungen von MUALEM [1976] ist die Näherung der Beziehung zwischen dem effektiven Sättigungsgrad und dem relativen kapillaren Leitvermögen durch eine Potenzfunktion, die ursprünglich von KOZENY aufgestellt und von MUALEM erweitert wurde:

$$k_r = k/k_s = Se^\alpha \quad (2-38)$$

$[k_r]$	= dim.los	relatives kapillares Leitvermögen
$[k]$	= m·s ⁻¹	kapillares Leitvermögen
$[k_s]$	= m·s ⁻¹	Durchlässigkeitsbeiwert (bei Vollsättigung)
$[Se]$	= dim.los	effektiver Sättigungsgrad

[α] = dim.los Parameter; der Wert 3,5 ergab experimentell die geringste durchschnittliche Abweichung zu verschiedenen Böden

Der effektive Sättigungsgrad unterscheidet sich vom normalen Sättigungsgrad S dadurch, dass nicht $\theta = 0$, sondern der Restwasseranteil θ_r als Bezugspunkt für den Nullwert von Se gewählt wird:

$$Se = \frac{\theta - \theta_r}{\theta_s - \theta_r} \quad (2-39)$$

[θ] = dim.los vorgegebener Wasseranteil

[θ_r] = dim.los Restwasseranteil; eigentlich nur ein Modellparameter

[θ_s] = dim.los Wasseranteil bei Vollsättigung; $\theta_s \approx n$, eigentlich nur von der Primärkurve erreicht

Ein weiterer Ansatz beruht auf der Rückhaltekurve, also auf dem Zusammenhang der Bodenwasser-spannung mit der Porengröße und somit dem Durchflusswiderstand. Der Fluss in einer Pore lässt sich nach dem Gesetz von HAGEN und POISEUILLE darstellen durch

$$Q = -\frac{\pi \cdot r^4 \cdot g}{8\nu} \cdot \frac{d\psi}{dx} \quad (2-40)$$

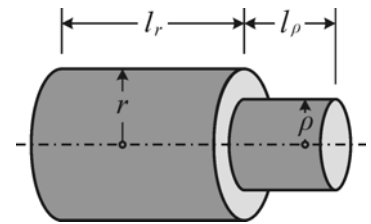
wobei ν die kinematische Viskosität und ψ das Gesamtpotenzial ($= \psi_p + \psi_g$) ist.

Möchte man nun den Fluss durch ein ganzes Porensystem beschreiben, so kann das Porensystem vereinfacht als zwei hintereinander befindliche Poren mit unterschiedlichem Radius und unterschiedlicher Länge dargestellt werden (Grundform des serienparallelen Kapillarenbündels). Sollen die beiden Poren mit den Radien r und ρ bzw. den Längen l_r und l_ρ durch eine Pore mit dem Radius R ersetzen, so muss der Fluss Q in den beiden Poren und in der Ersatzpore derselbe sein:

$$\frac{\pi \cdot r^4 \cdot g}{8\nu} \cdot \frac{\Delta\psi_r}{l_r} = \frac{\pi \cdot \rho^4 \cdot g}{8\nu} \cdot \frac{\Delta\psi_\rho}{l_\rho} = \frac{\pi \cdot \rho^4 \cdot g}{8\nu} \cdot \frac{\Delta\psi_r + \Delta\psi_\rho}{l_r + l_\rho}$$

oder mit $\Delta\psi_r + \Delta\psi_\rho = \Delta\psi$ und $l_r + l_\rho = l$:

$$R^4 \cdot \frac{\Delta\psi}{l} = r^4 \cdot \frac{\Delta\psi_r}{l_r} = \rho^4 \cdot \frac{\Delta\psi_\rho}{l_\rho}$$



Zur Erhaltung der Massenkontinuität soll die Ersatzpore dasselbe Volumen besitzen wie die beiden Einzelporen, also $R^2 \cdot l = r^2 \cdot l_r + \rho^2 \cdot l_\rho$. Nimmt man ferner an, dass sich die Längen der beiden Poren wie ihre Radien verhalten (dickere Poren sind für gewöhnlich auch länger)

$$\frac{l_r}{l_\rho} = \frac{r}{\rho} \quad (2-41)$$

so ergibt sich schließlich der Radius für die Ersatzpore: $R^2 = r \cdot \rho$.

In einem homogenen porösen Medium seien die Poren durch ihren Radius r gekennzeichnet. Der Beitrag aller Poren mit dem Radius r bzw. $r + dr$ zu θ bzw. $d\theta$ ist $f(r) \cdot dr = d\theta$, wobei $f(r)$ die Poren-

verteilungsfunktion ist. Wir haben somit $\int_{R_{min}}^R f(r) dr = \theta(R)$

und im besonderen $\int_{R_{min}}^{R_{max}} f(r) dr = \theta_s$.

Weil die flächenbezogene Porosität hier gleich der volumetrischen Porosität ist, repräsentiert $f(r) dr$ das Verhältnis der Porenfläche mit den Radien $r \rightarrow r + dr$ zur Gesamtfläche. Betrachtet man einen prismatischen Körper, so wird die Verteilung der Poren auf der Deckfläche ab einer gewissen

Länge bzw. einem gewissen Abstand Δx von der Grundfläche (x) völlig unabhängig von der Verteilung der Poren auf der Grundfläche sein. Nur die Porenflächen in Summe seien gleich. Die Wahrscheinlichkeit, dass Poren mit den Radien $r \rightarrow r+dr$ bei x auf Poren mit den Radien $\rho \rightarrow \rho+d\rho$ bei $x + \Delta x$ treffen, ist $a(r, \rho) = f(r) \cdot f(\rho) dr d\rho$.

Hier existiert keine direkte Verbindung zwischen den Poren r und ρ entlang der x -Achse. Im anderen Extrem, wenn Δx gegen Null geht, ist die Deckung hingegen vollständig. Da uns in erster Linie die Auswirkungen der Änderungen der Poren auf das hydraulische Leitvermögen interessieren, sollte Δx in derselben Größenordnung wie die Porenradien liegen. Die Wahrscheinlichkeit einer Verbindung einer Pore $r \rightarrow r+dr$ mit einer Pore $\rho \rightarrow \rho+d\rho$ ist

$$a(r, \rho) = G(R, r, \rho) \cdot f(r) \cdot f(\rho) dr d\rho.$$

$G(R, r, \rho)$ ist eine Korrekturfunktion, die der teilweisen Korrelation zwischen den Poren r und ρ bei einem gegebenen Wassergehalt $\theta(R)$ Rechnung trägt.

Weil der Beitrag der Porenkonfiguration im Körper zum Leitvermögen nicht genau abgeschätzt werden kann, werden 2 vereinfachende Annahmen getroffen:

1. Es gibt keinen Umgehungsfluss zwischen den Poren im Körper und
2. die Porenkonfiguration wird durch ein Kapillarelement-Paar ersetzt, dessen Längen proportional zu deren Radien sind: $l_r/l_\rho = r/\rho$

Die hydraulische Leitfähigkeit (als Äquivalent zur Geschwindigkeit, also Q/A) variiert mit $r \cdot \sigma$. Falls wir einen Korrekturfaktor $T(R, r, \rho) < 1$ für die Tortuosität mit berücksichtigen, ergibt der Beitrag des r - ρ -Elementes zur Leitfähigkeit

$$dk_r(r, \rho) = \frac{T(R, r, \rho) \cdot G(R, r, \rho) \cdot r \cdot \rho \cdot f(r) \cdot f(\rho) dr d\rho}{\int_{R_{min}}^{R_{max}} \int_{R_{min}}^{R_{max}} T(R_{max}, r, \rho) \cdot G(R_{max}, r, \rho) \cdot r \cdot \rho \cdot f(r) \cdot f(\rho) dr d\rho}.$$

Für einen gegebenen Wassergehalt $\theta(R)$ beträgt das zugehörige relative Leitvermögen $k_r(\theta)$

$$k_r(\theta) = \frac{\int_{R_{min}}^R \int_{R_{min}}^R T(R, r, \rho) \cdot G(R, r, \rho) \cdot r \cdot \rho \cdot f(r) \cdot f(\rho) dr d\rho}{\int_{R_{min}}^{R_{max}} \int_{R_{min}}^{R_{max}} T(R, r, \rho) \cdot G(R, r, \rho) \cdot r \cdot \rho \cdot f(r) \cdot f(\rho) dr d\rho}.$$

Weil man keine Kenntnis über die Funktionen T und G gewinnen kann, wird angenommen, dass die Tortuosität und der Korrelationsfaktor eine Potenzfunktion von θ sind und daher nur von R abhängen (der Exponent dieser Potenzfunktion ist als Modellparameter zu betrachten, für den MUALEM das Formelzeichen n verwendete; zur Vermeidung von Verwechslungen wird dieser Parameter in diesem Dokument mit δ bezeichnet). Demzufolge ist

$$k_r(\theta) = Se^\delta \cdot \frac{\int_{R_{min}}^R r \cdot f(r) dr \cdot \int_{R_{min}}^R \rho \cdot f(\rho) d\rho}{\int_{R_{min}}^{R_{max}} r \cdot f(r) dr \cdot \int_{R_{min}}^{R_{max}} \rho \cdot f(\rho) d\rho} = Se^\delta \cdot \left[\frac{\int_{R_{min}}^R r \cdot f(r) dr}{\int_{R_{min}}^{R_{max}} r \cdot f(r) dr} \right]^2 \quad (2-42)$$

Durch Anwendung des Kapillargesetzes $r = c/h$ (siehe Gl. 7-18; die Konstante kann aus beiden Integralen herausgehoben und weggekürzt werden) und $f(r) dr = d\theta$ erhält man schließlich

$$k_r(\theta) = Se^\delta \cdot \frac{\int_{\theta_s}^{\theta} (1/h) d\theta}{\int_{\theta_s}^{\theta_s} (1/h) d\theta} \quad (2-43)$$

Der Parameter δ berücksichtigt nach MUALEM die Korrelation zwischen den Poren und die Tortuosität des Strömungsweges, kann aber auch einfach als zusätzlicher Freiheitsgrad betrachtet werden, der aus einer Kurvenanpassung an Messwerte bestimmt werden kann. Daraus können sich sowohl positive als auch negative Parameterwerte ergeben, wobei Se^δ für $n < 0$ vom Wert 1 für $Se = 1$ mit kleiner werdendem Se zunimmt. Das ist noch kein physikalischer Widerspruch, solange der zweite Multiplikand im Modell entsprechend stärker abnimmt, verursacht aber mathematische Probleme für $Se \rightarrow \theta_r$ wegen $1/0^\delta = \infty$. Wie auch immer, MUALEM selbst hat bei der Überprüfung seines Modells anhand von 45 Böden ermittelt, welcher einheitliche Wert für alle 45 Böden den kleinsten Fehler ergibt und ist dabei zu dem Wert $\delta = 0,5$ gelangt. In der Tat wird δ fast immer mit diesem Wert belegt; vielleicht nicht so sehr deshalb, weil die meisten Böden kaum davon abweichen als einfach aus Mangel an Vergleichs- oder Messwerten.

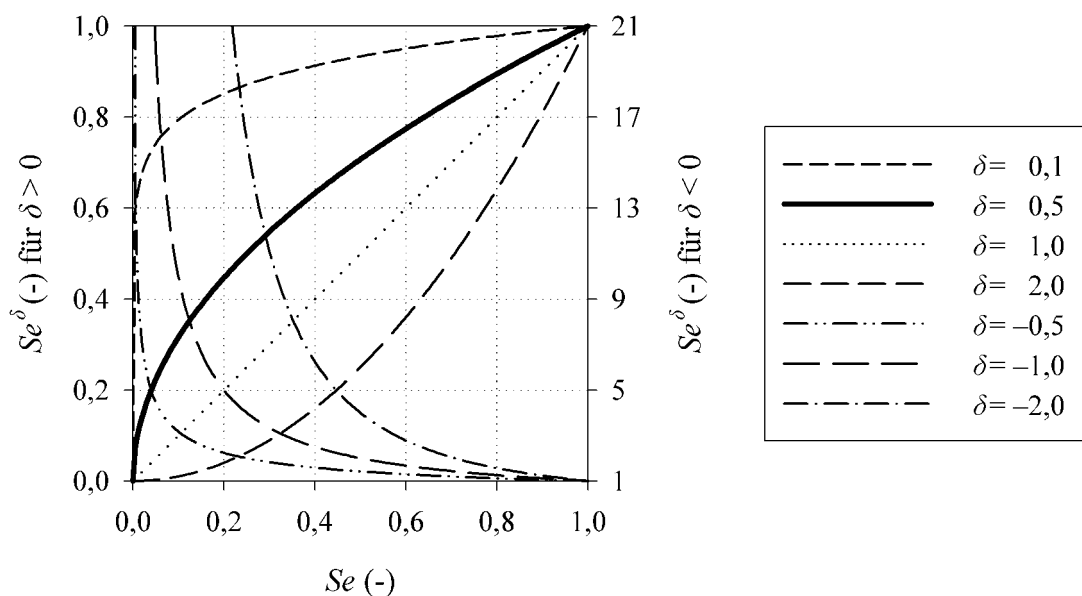


Abbildung 2-2: Funktion Se^δ für verschiedene Werte δ

Möchte man das kapillare Leitvermögen zur Gänze als Funktion der effektiven Sättigung darstellen, muss das Integral entsprechend transformiert werden. Hierfür geht man von der Beziehung 2-2

$$\theta(Se) = \theta_r + Se(\theta_s - \theta_r)$$

aus, leitet nach θ ab

$$\frac{d\theta}{dSe} = \theta_s - \theta_r$$

und erhält schließlich

$$d\theta = (\theta_s - \theta_r) \cdot dSe.$$

Umgekehrt gilt nach 2-1

$$Se(\theta) = \frac{\theta - \theta_r}{\theta_s - \theta_r},$$

sodass die untere Integrationsgrenze in der Modellfunktion 2-43 von MUALEM eigentlich überginge in

$$Se(0) = \frac{-\theta_r}{\theta_s - \theta_r}.$$

Hierzu ist zu bedenken, dass MUALEM die Existenz des Restwassergehaltes vorausgesetzt hat und h für den Bereich $0 \leq h < \theta_r$ unendlich beträgt. Der Kehrwert hiervon ist Null und das Integral von 0 bis θ_r ebenfalls Null. Es gilt also

$$\int_0^{\theta} \frac{1}{h} d\theta = \int_0^{\theta_r} \frac{1}{h} d\theta + \int_{\theta_r}^{\theta} \frac{1}{h} d\theta = 0 + \int_{\theta_r}^{\theta} \frac{1}{h} d\theta = \int_{\theta_r}^{\theta} \frac{1}{h} d\theta \quad \text{bzw.} \quad \int_0^{\theta_s} \frac{1}{h} d\theta = \int_{\theta_r}^{\theta_s} \frac{1}{h} d\theta$$

und damit

$$k_r(\theta) = Se^{\delta} \cdot \left[\frac{\int_{\theta_r}^{\theta} \frac{1}{h} d\theta}{\int_{\theta_r}^{\theta_s} \frac{1}{h} d\theta} \right]^2$$

Die zu transformierenden Integrationsgrenzen sind also θ_r , θ und θ_s , die übergehen in 0, Se und 1.

$$\text{Insgesamt ergibt die Transformation } k_r(Se) = Se^{\delta} \cdot \left[\frac{(\theta_s - \theta_r) \cdot \int_0^{Se} \frac{1}{h} dSe}{(\theta_s - \theta_r) \cdot \int_0^1 \frac{1}{h} dSe} \right]^2$$

bzw.

$$k_r(Se) = Se^{\delta} \cdot \left[\frac{\int_0^{Se} \frac{1}{h} dSe}{\int_0^1 \frac{1}{h} dSe} \right]^2 \quad (2-44)$$

2.6.1 Wasserspannung-Wasseranteil-Beziehung nach BROOKS und COREY

Ist die Matrixpotenzial-Wasseranteil-Beziehung als Funktion $\theta(h)$ gegeben, kann $k_r(\theta)$ explizit ermittelt werden. So gilt z. B. für die Gleichung nach BROOKS und COREY [1964]

$$Se = \left(\frac{h_{cr}}{h} \right)^{\lambda} \quad (2-45)$$

[h] = m Wasserspannung (und nicht die Druckpotenzialhöhe!); stets positiv

[h_{cr}] = m Modellparameter, entspricht dem Lufteintrittspunkt; stets positiv

[λ] = dim.loss Modellparameter, drückt die Steigung der Kurve aus

Die in Tabelle 2-1 angegebene Form $Se = \alpha \cdot h^{\beta}$ ist der oben stehenden Originalform gleichwertig.

$$\text{MUALEM benutzte die Darstellung} \quad Se = \left(\frac{h}{h_{cr}} \right)^{-\lambda} \quad (2-46)$$

$$k_r(Se) = Se^{\delta+2+2/\lambda} \quad \text{bzw.} \quad k_r(h) = (h/h_{cr})^{-2-\lambda \cdot (2+\delta)} \quad (2-47)$$

MUALEM schlägt nun vor, θ_r und λ aus einer Kurvenanpassung an gegebene Messdaten zu gewinnen und den Kurvenverlauf als Extrapolation für den von den Messdaten nicht erfassten Bereich zwischen jenem effektiven Sättigungsgrad Se_{min} , der der größten im Versuch angelegten Wasserspannung h_{max} entspricht, und dem Restwasseranteil $\theta_r(Se = 0)$ zu verwenden (für δ hat er 0,5 gesetzt):

$$k_r(Se) = Se^2 \cdot \frac{\left[\frac{Se_{min}}{(1+1/\lambda) \cdot h_{max}} + \int_{Se_{min}}^{Se} d \frac{Se}{h} \right]^2}{\left[\frac{Se_{min}}{(1+1/\lambda) \cdot h_{max}} + \int_{Se_{min}}^1 d \frac{Se}{h} \right]} \quad (2-48)$$

$[h_{max}] = m$ größter Wert für h von diskreten Messpunkten der Bodenwassercharakteristik
 $[Se_{min}] = \text{dim. los}$ die bei h_{max} gemessene kleinste effektive Sättigung

2.6.2 Wasserspannung-Wasseranteil-Beziehung nach van GENUCHTEN

Die Modellfunktion 2-3 für die Bodenwassercharakteristik von van GENUCHTEN lautet

$$Se(h) = [1 + (\alpha \cdot h)^n]^{-m}$$

$[Se] = \text{dim. los}$ effektive Sättigung
 $[h] = \text{cm}$ Wasserspannung; stets positiv
 $[\alpha] = \text{cm}^{-1}$ Modellparameter
 $[n] = \text{dim. los}$ Modellparameter
 $[m] = \text{dim. los}$ Modellparameter

und ihre Umkehrfunktion (2-6)
$$h(Se) = \frac{1}{\alpha} \cdot (Se^{-1/m} - 1)^{1/n} = \frac{1}{\alpha} \cdot \left(\frac{1}{Se^m} - \frac{Se^m}{Se^m} \right)^{\frac{1}{n}} = \frac{1}{\alpha} \cdot \left(\frac{1 - Se^m}{Se^m} \right)^{\frac{1}{n}}$$

Diese wird einfach für h in die Beziehung 2-44 eingesetzt:

$$k_r(Se) = Se^\delta \cdot \frac{\left[\int_0^{Se} \alpha \cdot \left(\frac{Se^{\frac{1}{m}}}{1 - Se^m} \right)^{\frac{1}{n}} dSe \right]^2}{\left[\int_0^1 \alpha \cdot \left(\frac{Se^{\frac{1}{m}}}{1 - Se^m} \right)^{\frac{1}{n}} dSe \right]} = Se^\delta \cdot \frac{\left[\int_0^{Se} \left(\frac{Se^{\frac{1}{m}}}{1 - Se^m} \right)^{\frac{1}{n}} dSe \right]^2}{\left[\int_0^1 \left(\frac{Se^{\frac{1}{m}}}{1 - Se^m} \right)^{\frac{1}{n}} dSe \right]}$$

Die Substitution von Se mit $Se = y^m$ [van GENUCHTEN, 1980] führt mittels $dSe/dy = m \cdot y^{m-1}$ zu $dSe = (m \cdot y^{m-1}) \cdot dy$, sodass das Integral im Zähler die Form

$$\int_0^{Se} \left(\frac{Se^{\frac{1}{m}}}{1 - Se^m} \right)^{\frac{1}{n}} dSe = m \cdot \int_0^{Se} \left(\frac{y}{1 - y} \right)^{\frac{1}{n}} \cdot y^{m-1} dy = m \cdot \int_0^{Se} y^{m-1+\frac{1}{n}} \cdot (1 - y)^{-\frac{1}{n}} dy$$

annimmt. Laut van GENUCHTEN stellt dieses Integral eine besondere Form der unvollständigen Beta-Funktion dar, die im allgemeinen Fall nicht durch geschlossene analytische Funktionen angegeben werden kann. Es kann jedoch leicht gezeigt werden, dass die Integration für alle ganzzahligen Werte $k = m - 1 + 1/n$ ohne Schwierigkeiten durchgeführt werden kann. Insbesondere gilt für den speziellen Fall $k = 0$

$$m = 1 - 1/n$$

und weiters
$$\int_0^{Se} \left(\frac{Se^{\frac{1}{m}}}{1 - Se^{\frac{1}{m}}} \right)^{\frac{1}{n}} dSe = m \cdot \int_0^{Se} y^0 \cdot (1-y)^{-\frac{1}{n}} dy = m \cdot \int_0^{Se} (1-y)^{-\frac{1}{n}} dy.$$

Die Substitution mit $1-y=z$, $y=1-z$, $dy/dz=-1$ und $dy=-dz$ ergibt

$$\int_0^{Se} \left(\frac{Se^{\frac{1}{m}}}{1 - Se^{\frac{1}{m}}} \right)^{\frac{1}{n}} dSe = -m \cdot \int_0^{Se} z^{\frac{1}{n}} dz = -m \cdot \left[\frac{1}{1-\frac{1}{n}} \cdot z^{1-\frac{1}{n}} \right]_0^{Se} = -|z^m|_0^{Se} = -|(1-y)^m|_0^{Se}.$$

Nun wird erneut rücks substituiert mit $y = Se^{1/m}$

$$\int_0^{Se} \left(\frac{Se^{\frac{1}{m}}}{1 - Se^{\frac{1}{m}}} \right)^{\frac{1}{n}} dSe = - \left[\left(1 - Se^{\frac{1}{m}} \right)^m \right]_0^{Se} = - \left[\left(1 - Se^{\frac{1}{m}} \right)^m - 1 \right] = 1 - \left(1 - Se^{\frac{1}{m}} \right)^m$$

Daraus folgt auch, dass das Integral im Nenner (mit den Grenzen 0 und 1)

$$\int_0^1 \left(\frac{Se^{\frac{1}{m}}}{1 - Se^{\frac{1}{m}}} \right)^{\frac{1}{n}} dSe = - \left[\left(1 - Se^{\frac{1}{m}} \right)^m \right]_0^1 = -[0-1] = 1$$

ergibt und man insgesamt

$$k_r(Se) = Se^{\delta} \cdot \left[1 - \left(1 - Se^{\frac{1}{m}} \right)^m \right]^2 \quad (m = 1 - 1/n)$$

erhält. Aufgrund der Einschränkung $m = 1 - 1/n$ sollte noch der Parameter m aus dieser Funktion entfernt werden:

$$k_r(Se) = Se^{\delta} \cdot \left[1 - \left(1 - Se^{\frac{n}{n-1}} \right)^{n-1} \right]^2. \quad (2-49)$$

Die Substitution mit der zweiparametrischen van-Genuchten-Funktion 2-4 (ohne m) samt mehrerer Umformungen führt schließlich zum relativen kapillaren Leitvermögen k_r als Funktion der Wasserverspannung h

$$k_r(h) = \frac{[1 - (\alpha \cdot h)^{n-1} \cdot (1 + (\alpha \cdot h)^n)^{1/n-1}]^2}{[1 + (\alpha \cdot h)^n]^{(1-1/n) \cdot \delta}} \quad (2-50)$$

Während θ_s am besten im Labor bestimmt wird, können α , n und θ_r aus einer Kurvenanpassung gewonnen werden. Für den Mualem-Parameter δ hingegen ist eine Kurvenanpassung nur in den seltenen Fällen möglich, in denen Versuchsergebnisse zum kapillaren Leitvermögen vorliegen. Man wählt daher zumeist einfach $\delta = 1/2$ oder nutzt anderweitige Informationen – z. B. die Bodenart – um δ näher zu bestimmen.

2.6.3 Vorgangsweise bei diskreten Messpunkten

Laut MUALEM kann die Se - h -Kurve im Messbereich hinreichend genau durch ein Polygon approximiert werden. Um die relative Leitfähigkeit $k_r(Se)$ für eine ganz bestimmte effektive Sättigung Se zu bestimmen genügt es daher, h zwischen 2 Messpunkten linear zu interpolieren:

$$h = h_i - \frac{(h_i - h_{i+1})}{(Se_{i+1} - Se_i)} \cdot (Se - Se_i) \quad Se_i \leq Se < Se_{i+1}$$

Die Empfehlung MUALEMs, das Integral im Messbereich durch die Summe aus dem Polygon und im Bereich davor durch die Extrapolation nach BROOKS und COREY zu ersetzen

$$k_r(Se) = Se^{\frac{1}{2}} \cdot \frac{\left[\frac{Se_{min}}{(1+1/\lambda) \cdot h_{max}} + \sum_1^l \left(\frac{Se_{i+1} - Se_i}{h_i - h_{i+1}} \right) \cdot \ln \left(\frac{h_i}{h_{i+1}} \right) \right]^2}{\left[\frac{Se_{min}}{(1+1/\lambda) \cdot h_{max}} + \sum_1^m \left(\frac{Se_{i+1} - Se_i}{h_i - h_{i+1}} \right) \cdot \ln \left(\frac{h_i}{h_{i+1}} \right) \right]^2}, \quad (2-51)$$

erfordert eine Kurvenanpassung des Parameters λ . Möchte man dies umgehen, muss man auch den Bereich $\theta_r < \theta < \theta_{min}$ durch eine lineare Verbindung zwischen den Punkten θ_{min}/h_{max} und θ_r/h_r ersetzen, wobei h_r näherungsweise gleich ∞ genommen wird. Für das daraus entstehende erste Glied der Summe stellt sich die Frage, welchen Wert es annimmt:

$$\frac{Se_{min} - Se_r}{\infty - h_{max}} \cdot \ln \left(\frac{\infty}{h_{max}} \right) \text{ ist unbestimmt } \rightarrow$$

$$\lim_{h_r \rightarrow \infty} \frac{Se_{min} - 0}{h_r - h_{max}} \cdot \ln \left(\frac{h_r}{h_{max}} \right) = \lim_{h_r \rightarrow \infty} \frac{Se_{min} \cdot [\ln(h_r) - \ln(h_{max})]}{h_r - h_{max}} = \lim_{h_r \rightarrow \infty} \frac{Se_{min} \cdot \ln(h_r) - Se_{min} \cdot \ln(h_{max})}{h_r - h_{max}}$$

Regel von L'HOSPITAL $\lim_{h_r \rightarrow \infty} \frac{f}{g} = \lim_{h_r \rightarrow \infty} \frac{f'}{g'}$: $\lim_{h_r \rightarrow \infty} \frac{Se_{min} \cdot \frac{1}{h_r}}{1} = \lim_{h_r \rightarrow \infty} \frac{Se_{min}}{h_r} = 0$

Das erste Glied ergibt daher 0 für $h_r \rightarrow \infty$ und kann bei genügend großem h_r weggelassen werden. Es verbleibt folglich

$$k_r(Se) = Se^{\frac{1}{2}} \cdot \frac{\left[\sum_1^l \left(\frac{Se_{i+1} - Se_i}{h_i - h_{i+1}} \right) \cdot \ln \left(\frac{h_i}{h_{i+1}} \right) \right]^2}{\left[\sum_1^m \left(\frac{Se_{i+1} - Se_i}{h_i - h_{i+1}} \right) \cdot \ln \left(\frac{h_i}{h_{i+1}} \right) \right]^2} \quad Se_{min} \leq Se \leq 1 \quad (2-52)$$

Die Intervalle müssen dabei nicht gleich groß sein.

Wird nun θ_r näherungsweise gleich 0 gesetzt, so ist $Se = S = \theta/\theta_s$

und
$$k_r(\theta) = \left(\frac{\theta}{n} \right)^{\frac{1}{2}} \cdot \frac{\left[\sum_1^l \left(\frac{\theta_{i+1} - \theta_i}{h_i - h_{i+1}} \right) \cdot \ln \left(\frac{h_i}{h_{i+1}} \right) \right]^2}{\left[\sum_1^m \left(\frac{\theta_{i+1} - \theta_i}{h_i - h_{i+1}} \right) \cdot \ln \left(\frac{h_i}{h_{i+1}} \right) \right]^2} \quad \theta_{min} \leq \theta \leq n \quad (2-53)$$

Beispiel 2-6: Gesucht ist der relative k -Wert bei 25, 50 und 75 % Sättigung

Gegeben: Wasserspannung-Wasseranteil-Beziehung (aus Messungen) aus Beispiel 2-4 (siehe untenstehende Tabelle); $n = 39\%$

Um der Empfehlung von MUALEM nachzukommen, müsste eine Kurvenanpassung der Brooks-und-Corey-Funktion an die Messwerte durchgeführt werden. Daraus würde sich nicht nur der Parameter λ nach BROOKS und COREY, sondern auch der Restwasseranteil θ_r ergeben. Im weiteren wäre dann Gleichung 2-51 zu verwenden, wobei für den Bereich von θ_r bis zum kleinsten gegebenen Wasseranteil ($\theta = 3,5\%$) die angepasste Brooks-und-Corey-Modellfunktion und für den restlichen Bereich das Messpolygon zu verwenden wäre.

Möchte man die Kurvenanpassung vermeiden, muss man vorerst den Restwasseranteil abschätzen. Graphisch ist zu ersehen, dass die Kurve im Endwert ($\theta = 3,5\%$) sehr steil ansteigt und θ_r nur wenig kleiner als $3,5\%$ sein kann (tatsächlich wurde ja für die Generierung $\theta_r = 3,5\%$ gesetzt; der Wert für $\theta(h = 5,00\text{ m})$ beträgt nur gerundet $3,5$, genauer jedoch $3,517\%$). Dennoch soll vorerst in erster Näherung unter a) der Restwasseranteil gleich Null festgelegt werden. Unter b) wird dann $\theta_r = 3,5\%$ gewählt. Die Kurve steigt so steil gegen den Restwassergehalt hin an, dass der Restwassergehalt mit dem Wassergehalt des letzten Messpunktes im Rundungsbereich zusammenfällt.

Nachdem für die geforderten Sättigungsgrade, für die das kapillare Leitvermögen bestimmt werden soll, keine Messpunkte existieren, muss man Interpolationspunkte an den Stellen der vorgegebenen Wasseranteile bzw. Sättigungsgrade einschieben. Hierfür kann man einfach linear interpolieren oder man trägt die Messpunkte in einer Zeichnung auf, verbindet die Punkte mit einem mehr oder weniger glatten Kurvenzug und entnimmt die gesuchten Wasserspannungen aus der Zeichnung (siehe Beispiel 2-4). Anzumerken ist, dass das Einfügen von zusätzlichen Zeilen in der unten stehenden Tabelle bei den linear interpolierten Werten (mit hoher Genauigkeit) die Ergebnisse aller weiteren Werte nicht beeinflusst (weil die Formel 2-53 auf der Annahme eines polygonalen Kurvenzuges beruht), während das Einfügen von graphisch möglichst gut bestimmten Werten bzw. von zusätzlichen Knickstellen zu einer besseren Approximation und damit zu genaueren Ergebnissen führt. Die graphische Ermittlung ist daher zu bevorzugen.

Sättigungsgrad $S = 0,75$: $\theta(S = 0,75) = n \cdot S = 39,0 \times 0,75 = 29,25\%$;

h aus der graphisch dargestellten Kurve (tatsächlich wurde h aus der inversen Rybkowa-Funktion errechnet): $h(\theta = 29,25) = 0,74\text{ m}$.

Linear interpoliert: $h(29,25) = 0,80 + \frac{(29,25 - 26,4)}{(34,4 - 26,4)} \times (0,60 - 0,80) = 0,73\text{ m}$

Sättigungsgrad $S = 0,50$: $\theta(0,50) = 39,0 \times 0,5 = 19,5\%$;

Graphisch: $h(\theta = 19,5) = 0,96\text{ m}$

Linear interpoliert: $h(\theta = 19,5) = 0,96\text{ m}$

Sättigungsgrad $S = 0,25$: $\theta(S = 0,25) = S \cdot n = 0,25 \times 39,0 = 9,75$;

Graphisch: $h(\theta = 9,75) = 1,29\text{ m}$

Linear interpoliert: $h(\theta = 9,75) = 1,32\text{ m}$

a) Restwasseranteil $\theta_r = 0$

Für diesen Fall ist die Formel 2-53 maßgeblich:

$$k_r(\theta) = \left(\frac{\theta}{n}\right)^2 \cdot \left\{ \frac{\sum_{i=1}^l \left(\frac{\theta_{i+1} - \theta_i}{h_i - h_{i+1}}\right) \cdot \ln\left(\frac{h_i}{h_{i+1}}\right)}{\sum_{i=1}^m \left(\frac{\theta_{i+1} - \theta_i}{h_i - h_{i+1}}\right) \cdot \ln\left(\frac{h_i}{h_{i+1}}\right)} \right\}^2 \quad \theta_{min} \leq \theta \leq n$$

An und für sich wäre von $0 < \theta \leq 1$ aufzusummieren. Wie bereits auf Seite 79 gezeigt, genügt es jedoch bei θ_{min} zu beginnen, wenn man $h(\theta_r) = \infty$ voraussetzt. Die Zeile für $i = 0$ ($\theta_r = 0 = \theta_0$) bzw. $N = 1$ wurde der Vollständigkeit halber in der unten stehenden Tabelle dennoch hinzugefügt.

Der Quotient in der untenstehenden Tabelle errechnet sich aus $\frac{\theta_{i+1} - \theta_i}{h_i - h_{i+1}}$ und das Produkt aus $\frac{\theta_{i+1} - \theta_i}{h_i - h_{i+1}} \cdot \ln(h_i/h_{i+1})$. Der Summenwert Σ_1 umfasst das Intervall $\theta_0 < \theta \leq \theta_1$, der Wert Σ_i daher $\theta_{i-1} < \theta \leq \theta_i$. Den Sättigungsgrad S erhält man aus $S(\theta) = \theta/n$. In der unten stehenden Tabelle wurde für jeden einzelnen gegebenen Wasseranteil θ_i ab $i = 1$ das relative kapillare Leitvermögen aus $k_r(\theta_i) = \sqrt{S} \cdot (\Sigma_{N=i} / \Sigma_{N=13})^2$ errechnet. $k_r(\theta_0) = k_r(0,0)$ bleibt aus der Rechnung undefiniert, muss aber wegen $h(\theta \rightarrow 0) = \infty$ Null sein. Der Produktwert für $N = 1$ wurde bereits gesondert untersucht (siehe Seite 79), er beträgt Null.

l	h_i (m)	θ_i (%)	Quotient	$\ln(h_i/h_{i+1})$	Produkt	Σ	N	S_i (-)	k_r (-)
0	∞	0,0	-	-	0	0	1	0,0	-
1	5,00	3,5	0,100	0,51083	0,05108	0,05108	2	0,0897	0
2	3,00	3,7	0,800	0,40547	0,32437	0,37545	3	0,0949	$4,461 \times 10^{-7}$
3	2,00	4,5	4,800	0,28768	1,38087	1,75633	4	0,1154	$2,658 \times 10^{-5}$
4	1,50	6,9	13,571	0,15082	2,04688	3,80321	5	0,1769	$7,202 \times 10^{-4}$
5	1,29	9,75	20,556	0,07232	1,48659	5,28980	6	0,2500	$4,014 \times 10^{-3}$
6	1,20	11,6	30,500	0,18232	5,56081	10,85061	7	0,2974	$8,471 \times 10^{-3}$
7	1,00	17,7	45,000	0,04082	1,83699	12,68760	8	0,4538	$4,403 \times 10^{-2}$
8	0,96	19,50	43,125	0,18232	7,86262	20,55022	9	0,5000	$6,318 \times 10^{-2}$
9	0,80	26,4	47,500	0,07796	3,70317	24,25339	10	0,6769	$1,929 \times 10^{-1}$
10	0,74	29,25	36,786	0,20972	7,71472	31,96811	11	0,7500	$2,828 \times 10^{-1}$
11	0,60	34,4	19,000	0,40547	7,70384	39,67195	12	0,8821	$5,328 \times 10^{-1}$
12	0,40	38,2	4,000	0,69315	2,77259	42,44453	13	0,9795	$8,646 \times 10^{-1}$
13	0,20	39,0	0,000	0,69315	0,00000	42,44453	14	1,0000	1,000
14	0,10	39,0	0,000	0,69315	0,00000	42,44453	15	1,0000	1,000
15	0,05	39,0	0,000	-	-	-	16	1,0000	1,000
16	0,00	39,0	0,000	-	-	-	16	1,0000	1

b) Restwasseranteil $\theta_r = 3,5\%$

Dafür ist die allgemeinere Formel 2-52 mit der effektiven Sättigung heranzuziehen:

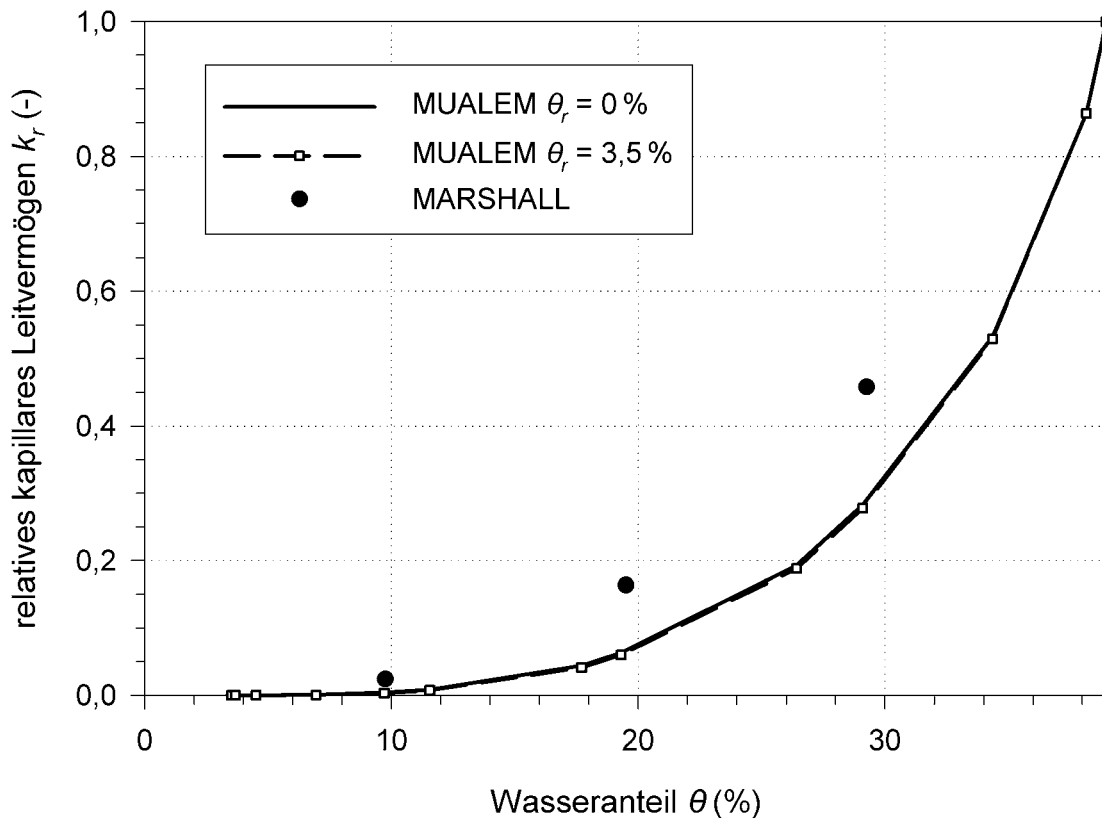
$$k_r(\text{Se}) = \text{Se}^{\frac{1}{2}} \cdot \frac{\left[\sum_1^l \left(\frac{\text{Se}_{i+1} - \text{Se}_i}{h_i - h_{i+1}} \right) \cdot \ln \left(\frac{h_i}{h_{i+1}} \right) \right]^2}{\sum_1^m \left(\frac{\text{Se}_{i+1} - \text{Se}_i}{h_i - h_{i+1}} \right) \cdot \ln \left(\frac{h_i}{h_{i+1}} \right)} \quad \theta_{\min} \leq \theta \leq n$$

Die vorderen Spalten in der untenstehenden Tabelle bleiben gleich wie bei der Tabelle für $\theta_r = 0$ (es ist egal, ob man den Quotienten mit θ oder mit Se berechnet). In der vorletzten Spalte ist nun jedoch anstelle des Sättigungsgrades S_i die effektive Sättigung Se_i zu setzen, die man aus Formel 2-1 $\text{Se}_i(\theta_i) = (\theta_i - \theta_r)/(\theta_s - \theta_r)$ erhält. Das Einschreiben einer Zeile für θ_r erübrigt sich, weil θ_{\min} gleich θ_r ist.

i	h_i (m)	θ_i (%)	Quotient	$\ln(h_i/h_{i+1})$	Produkt	Σ	N	Se_i (-)	k_r (-)
1	5,00	3,5						0,0000	0
2	3,00	3,7	0,100	0,51083	0,05108	0,05108	2	0,0056	$1,087 \times 10^{-7}$
3	2,00	4,5	0,800	0,40547	0,32437	0,37545	3	0,0282	$1,313 \times 10^{-5}$
4	1,50	6,9	4,800	0,28768	1,38087	1,75633	4	0,0958	$5,299 \times 10^{-4}$
5	1,29	9,75	13,571	0,15082	2,04688	3,80321	5	0,1761	$3,369 \times 10^{-3}$
6	1,20	11,6	20,556	0,07232	1,48659	5,28980	6	0,2282	$7,419 \times 10^{-3}$
7	1,00	17,7	30,500	0,18232	5,56081	10,85061	7	0,4000	$4,133 \times 10^{-2}$
8	0,96	19,50	45,000	0,04082	1,83699	12,68760	8	0,4507	$5,999 \times 10^{-2}$
9	0,80	26,4	43,125	0,18232	7,86262	20,55022	9	0,6451	$1,883 \times 10^{-1}$
10	0,74	29,25	47,500	0,07796	3,70317	24,25339	10	0,7254	$2,781 \times 10^{-1}$
11	0,60	34,4	36,786	0,20972	7,71472	31,96811	11	0,8704	$5,292 \times 10^{-1}$
12	0,40	38,2	19,000	0,40547	7,70384	39,67195	12	0,9775	$8,637 \times 10^{-1}$
13	0,20	39,0	4,000	0,69315	2,77259	42,44453	13	1,0000	1,000
14	0,10	39,0	0,000	0,69315	0,00000	42,44453	14	1,0000	1,000
15	0,05	39,0	0,000	0,69315	0,00000	42,44453	15	1,0000	1,000
16	0,00	39,0	0,000	-	-		16	1,0000	1

Zum Vergleich: Die Berechnung nach MARSHALL in Beispiel 2-4 hat ergeben
 $k_r(S = 0,75) = 0,457$ $k_r(S = 0,50) = 0,164$ $k_r(S = 0,25) = 0,024$.

In der Abbildung unten sind die Ergebnisse nach MARSHALL und nach MUALEM aus a) und b) eingetragen. Das relative kapillare Leitvermögen nach MUALEM ist als Funktion der effektiven Sättigung zu betrachten. Trotzdem wurde auf der Abszisse der Wasseranteil aufgetragen, um die Auswirkungen der unterschiedlichen Restwasseranteile θ_r auf die Beziehung $k_r(\theta)$ aufzuzeigen. Die beiden Kurven sind kaum voneinander zu unterscheiden, hingegen liegen die Werte nach MARSHALL deutlich höher.



Beispiel 2-7: Es ist der relative k -Wert bei 75, 50 und 25 % Sättigungsgrad zu bestimmen.

Gegeben: Wasserspannung-Wasseranteil-Beziehung aus Beispiel 2-5; $n = 0,33$

Wie aus der Zeichnung am Ende des Beispiels 2-5 zu erkennen ist, steigt die gegebene Retentionskurve im Punkt mit der größten Wasserspannung nicht ganz so steil an wie die des Beispiels zuvor. Wie im Beispiel 2-5 erwähnt, betrug der aus einer Kurvenanpassung des Rybakowa-Modells gewonnene Restwasseranteil $\theta_r = 0,039$. Wie jedoch auch festgestellt, repräsentiert das Rybakowa-Modell den aus Messungen ermittelten Verlauf der Retentionskurve kaum besser als eine lineare Verbindung der Messwerte. Die Wasserspannungen für $S = 0,25$, $0,5$ und $0,75$ werden daher linear interpoliert. Bei der Berechnung unter a) wird $\theta_r = 0,039$ festgelegt und $h_r = \infty$ angenommen, bei der unter b) die von MUALEM empfohlene Anpassung an das Brooks-und-Corey-Modell benutzt.

Sättigungsgrad $S = 0,75$: $\theta(S) = n \cdot S = 0,33 \times 0,75 = 0,2475$

$$h(\theta = 0,2475) = 1,00 + \frac{(0,2475 - 0,227)}{(0,292 - 0,227)} \times (0,80 - 1,00) = 0,937 \text{ m}$$

Sättigungsgrad $S = 0,50$: $\theta = 0,33 \times 0,5 = 0,165$; $h(\theta = 0,165) = 1,175 \text{ m}$

Sättigungsgrad $S = 0,25$: $\theta = S \cdot n = 0,25 \times 0,33 = 0,0825$; $h(\theta = 0,0825) = 1,697 \text{ m}$

a) **Restwasseranteil $\theta_r = 0,039$**

i	h_i (m)	θ_i (-)	Quotient	$\ln(h_i/h_{i+1})$	Produkt	Σ	N	Se_i (-)	k_r (-)
0	∞	0,039	-	-	0	0	1	0	0
1	5,00	0,040	0,00050	0,51083	0,000255	0,00026	2	0,0034	0
2	3,00	0,041	0,00700	0,40547	0,002838	0,00309	3	0,0069	$7,427 \times 10^{-8}$
3	2,00	0,048	0,11386	0,16429	0,018706	0,02180	4	0,0309	$2,312 \times 10^{-5}$
4	1,697	0,0825	0,11421	0,12340	0,014094	0,03589	5	0,1495	$2,523 \times 10^{-3}$
5	1,50	0,105	0,17000	0,22314	0,037934	0,07383	6	0,2268	$8,426 \times 10^{-3}$
6	1,20	0,156	0,36000	0,02105	0,007579	0,08141	7	0,4021	$4,746 \times 10^{-2}$
7	1,175	0,165	0,35429	0,16127	0,057135	0,13854	8	0,4330	$5,989 \times 10^{-2}$
8	1,00	0,227	0,32540	0,06507	0,021174	0,15972	9	0,6460	$2,119 \times 10^{-1}$
9	0,937	0,2475	0,32482	0,15807	0,051344	0,21106	10	0,7165	$2,965 \times 10^{-1}$
10	0,80	0,292	0,15500	0,28768	0,044591	0,25565	11	0,8694	$5,704 \times 10^{-1}$
11	0,60	0,323	0,03500	0,40547	0,014191	0,26984	12	0,9759	$8,867 \times 10^{-1}$
12	0,40	0,330	0,00000	0,69315	0,000000	0,26984	13	1,0000	1,000
13	0,20	0,330	0,00000	0,69315	0,000000	0,26984	14	1,0000	1,000
14	0,10	0,330	0,00000	0,69315	0,000000	0,26984	15	1,0000	1,000
15	0,05	0,330	0,00000	-	-		16	1,0000	1,000
16	0,00	0,330						1,0000	1

b) Anpassung des Brooks-und-Corey-Modells

Die Retentionsfunktion wird im Bereich $0 < Se \leq Se_{min}$ im Gegensatz zu oben nicht als Gerade durch die zwei Punkte $(0, \infty)$ und (Se_{min}, h_{max}) aufgefasst (deren Produktwert nach MUALEM Null ergibt), sondern als Brooks-und-Corey-Funktion. h_{max} ist der größte Wert für h von diskreten Messpunkten der Retentionsfunktion und Se_{min} die bei h_{max} gemessene kleinste effektive Sättigung. Man erhält mit der Modellfunktion

von BROOKS und COREY in der Form (Formel 2-1) $Se = \left(\frac{h_{cr}}{h}\right)^\lambda$,

wobei der Parameter h_{cr} physikalisch als Lufteintrittspunkt gedeutet werden kann und damit jene größte Wasserspannung ist, bei der noch Vollsättigung vorliegt, folgende Lösung von MUALEM für das relative kapillare Leitvermögen (Formel 2-51)

$$k_r(Se) = Se^{\frac{1}{2}} \cdot \left[\frac{\frac{Se_{min}}{(1+1/\lambda) \cdot h_{max}} + \sum_1^l \left(\frac{Se_{i+1} - Se_i}{h_i - h_{i+1}} \right) \cdot \ln \left(\frac{h_i}{h_{i+1}} \right)}{\frac{Se_{min}}{(1+1/\lambda) \cdot h_{max}} + \sum_1^m \left(\frac{Se_{i+1} - Se_i}{h_i - h_{i+1}} \right) \cdot \ln \left(\frac{h_i}{h_{i+1}} \right)} \right]^2$$

Als Funktion $h(\theta(Se))$ sind für die Brooks-und-Corey-Funktion insgesamt 4 Parameter erforderlich, nämlich h_{cr} , λ , θ_r und θ_s , wovon θ_s durch den Wasseranteil bei $h = 0$ m praktisch vorgegeben und daher nicht anzupassen ist. Überdies hängen h_{cr} und λ stark voneinander ab. Es überrascht daher wenig, dass die Anpassung des Modells an die gegebenen Messwerte Schwierigkeiten bereitet.

Streng genommen besteht die Modellfunktion von BROOKS und COREY aus den zwei Teilen $0 \leq h/h_{cr} \leq 1$ – für den $\theta = \theta_s$ gilt – und $h/h_{cr} > 1$. Gestückelte Funktionen sind von Standard-Regressionsprogrammen kaum zu bewältigen; die Anpassung an den ersten Teil ist im vorliegenden Fall auch gar nicht sinnvoll. Für den ersten Ver-

such der Kurvenanpassung werden daher aus der gegebenen Datenmenge alle Punkte mit θ_s entfernt (von den gegebenen 13 Punkten bleiben 8 über). Die entsprechende Regression ergab einen negativen Restwasseranteil. Nach der Einschränkung $\theta_r \geq 0$ wurden folgende Parameterwerte ausgegeben: $\theta_r = 0$, $h_{cr} = 0,6363$ und $\lambda = 1,1739$. Das Resultat ergibt einen relativ plausiblen Lufteintrittspunkt h_{cr} , aber einen völlig unbefriedigenden Verlauf um h_{max} und einen unbrauchbaren Wert für θ_r . Während also der mittlere Fehler im flachen Teil der Kurve eine recht gute Anpassung ergibt, führt er im steilen Teil zu extremen Abweichungen.

Als zweiter Versuch bietet sich eine Regression an die inverse Funktion

$$\theta(h) = \theta_r + \left(\frac{h_{cr}}{h}\right)^\lambda \cdot (\theta_s - \theta_r) \quad h > h_{cr}$$

$$h(\theta) = h_{cr} \cdot \left[\frac{\theta_s - \theta_r}{\theta - \theta_r}\right]^{\frac{1}{\lambda}} \quad \theta < \theta_s$$

an, die das Resultat $\theta_r = 0,0399$, $h_{cr} = 0,8899$ und $\lambda = 4,5042$ zeitigt. Diese Parameterwerte ergeben geringe Abweichungen um h_{max} und einen weniger guten Wert für h_{cr} – ein unbedeutendes Manko in Anbetracht des Umstandes, dass h_{cr} bei der Berechnung nach MUALEM gar nicht auftritt.

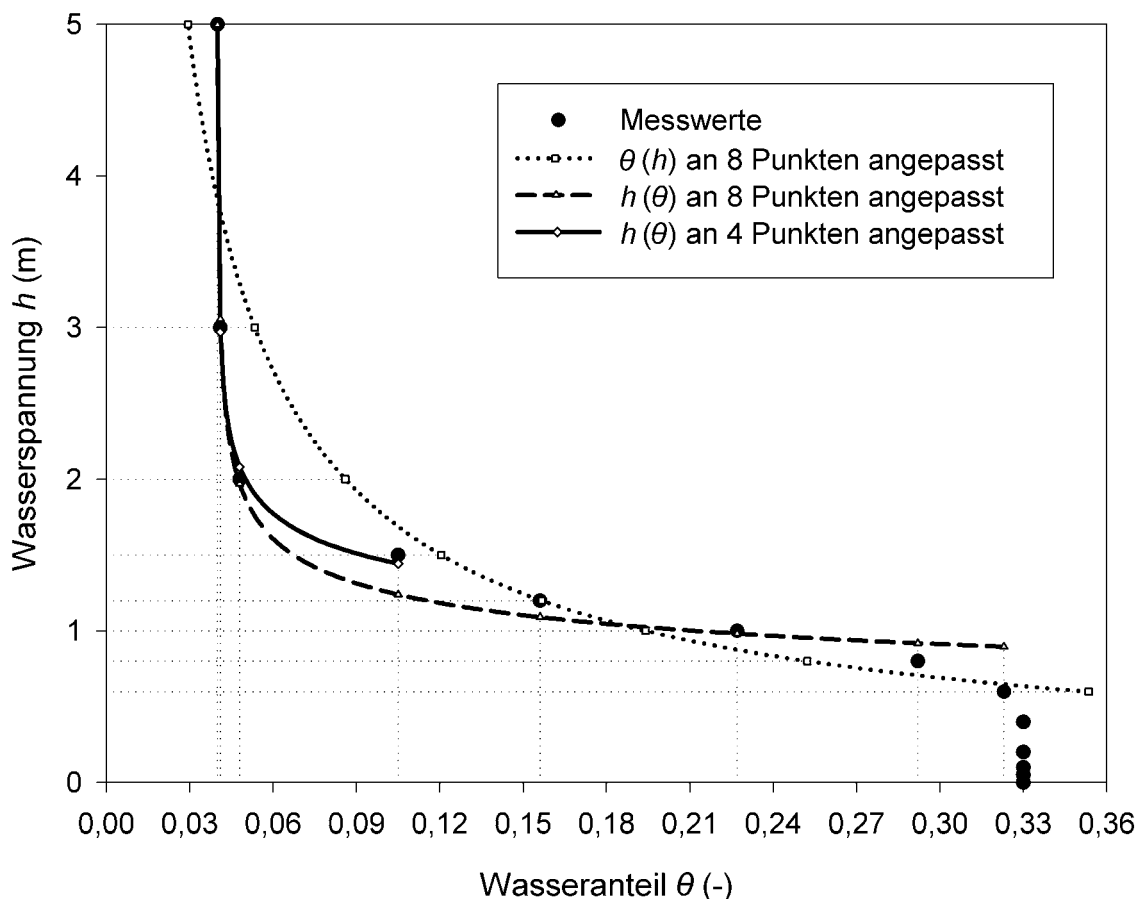


Abbildung 2-3: Anpassungsvarianten der Brooks-und-Corey-Modellfunktion für den hohen Wasserspannungsbereich der Retentionskurve

Um die Anpassung im Bereich h_{max} noch ein wenig zu verbessern, werden im dritten Versuch nur die vier höchsten Wasserspannungen herangezogen. Mit vier Punkten und drei Parametern ist klar, dass die Abweichungen klein ausfallen müssen. So lie-

fert denn die Regression die Parameterwerte $\theta_r = 0,0399$, $h_{cr} = 1,1121$ und $\lambda = 5,7208$ und im gewünschten Bereich eine gute Übereinstimmung mit den durch einen Interpolationsspline verbundenen Messwerten. Der Funktionswert h an der Stelle $\theta = 0,04$ beträgt übrigens 5,0007 m.

Abschließend zur Regression sind noch ein paar Bemerkungen notwendig. Es ist keineswegs egal, ob die Funktion $\theta(h)$ oder die inverse Funktion $h(\theta)$ angepasst wird. Während im ersten Fall Abweichungen zwischen den Modellwerten und den gemessenen θ -Werten auftreten, sind es im zweiten die h -Werte. Damit wird stillschweigend impliziert, dass im ersten Fall die Messung der θ -Werte fehlerhaft war (und diejenige der h -Werte exakt), während es im zweiten Fall genau umgekehrt ist. In der Praxis wird wohl beiden Messwerten (θ und h) ein noch dazu unterschiedlich großer Fehler zu unterstellen sein, sodass die Modellwerte sowohl in θ als auch in h abweichen dürfen. Numerisch wäre hierfür ein sehr aufwändiges Verfahren, und zwar eine gewichtete Orthogonalanpassung erforderlich, und daher begnügen sich die meisten mit einer einfachen Approximation. Doch selbst bei dieser ist zu bedenken, dass eine etwaige (und in der Praxis sehr häufige) Abhängigkeit des Fehlers Auswirkungen auf das Resultat hat und daher im Verfahren zu berücksichtigen wäre. Nebstbei wäre im gegenständlichen Fall sicherzustellen gewesen, dass die Approximationskurve durch den Anschlusspunkt zum restlichen Polygon verläuft (und die Retentionskurve nicht springt an dieser Stelle).

Mit dem Resultat aus der dritten Regression nimmt der Term $\frac{Se_{min}}{(1 + 1/\lambda) \cdot h_{max}}$ in Formel 2-51 folgenden Wert an ($Se_{min} = (0,04 - 0,0399)/(0,33 - 0,0399) = 0,000345$)

$$\frac{Se_{min}}{(1 + 1/\lambda) \cdot h_{max}} = \frac{0,000345}{(1 + 1/5,7208) \times 5,0} = 0,59 \times 10^{-4}$$

Die Tabelle aus a) ist nur geringfügig zu modifizieren:

i	h_i (m)	θ_i (-)	Quotient	$\ln(h_i/h_{i+1})$	Produkt	Σ	N	Se_i (-)	k_r (-)
0	∞	0,0399	-	-	0,000059	0,00006	1	0	0
1	5,00	0,040	0,00050	0,51083	0,000255	0,00031	2	0,0003	$8,777 \times 10^{-10}$
2	3,00	0,041	0,00700	0,40547	0,002838	0,00315	3	0,0038	$8,340 \times 10^{-8}$
3	2,00	0,048	0,11386	0,16429	0,018706	0,02186	4	0,0279	$2,279 \times 10^{-5}$
4	1,697	0,0825	0,11421	0,12340	0,014094	0,03595	5	0,1468	$2,513 \times 10^{-3}$
5	1,50	0,105	0,17000	0,22314	0,037934	0,07389	6	0,2244	$8,405 \times 10^{-3}$
6	1,20	0,156	0,36000	0,02105	0,007579	0,08147	7	0,4002	$4,741 \times 10^{-2}$
7	1,175	0,165	0,35429	0,16127	0,057135	0,13860	8	0,4312	$5,983 \times 10^{-2}$
8	1,00	0,227	0,32540	0,06507	0,021174	0,15977	9	0,6450	$2,118 \times 10^{-1}$
9	0,937	0,2475	0,32482	0,15807	0,051344	0,21112	10	0,7156	$2,964 \times 10^{-1}$
10	0,80	0,292	0,15500	0,28768	0,044591	0,25571	11	0,8690	$5,704 \times 10^{-1}$
11	0,60	0,323	0,03500	0,40547	0,014191	0,26990	12	0,9759	$8,867 \times 10^{-1}$
12	0,40	0,330	0,00000	0,69315	0,000000	0,26990	13	1,0000	1,000
13	0,20	0,330	0,00000	0,69315	0,000000	0,26990	14	1,0000	1,000
14	0,10	0,330	0,00000	0,69315	0,000000	0,26990	15	1,0000	1,000
15	0,05	0,330	0,00000	-	-	-	16	1,0000	1,000
16	0,00	0,330	-	-	-	-	-	1,0000	1

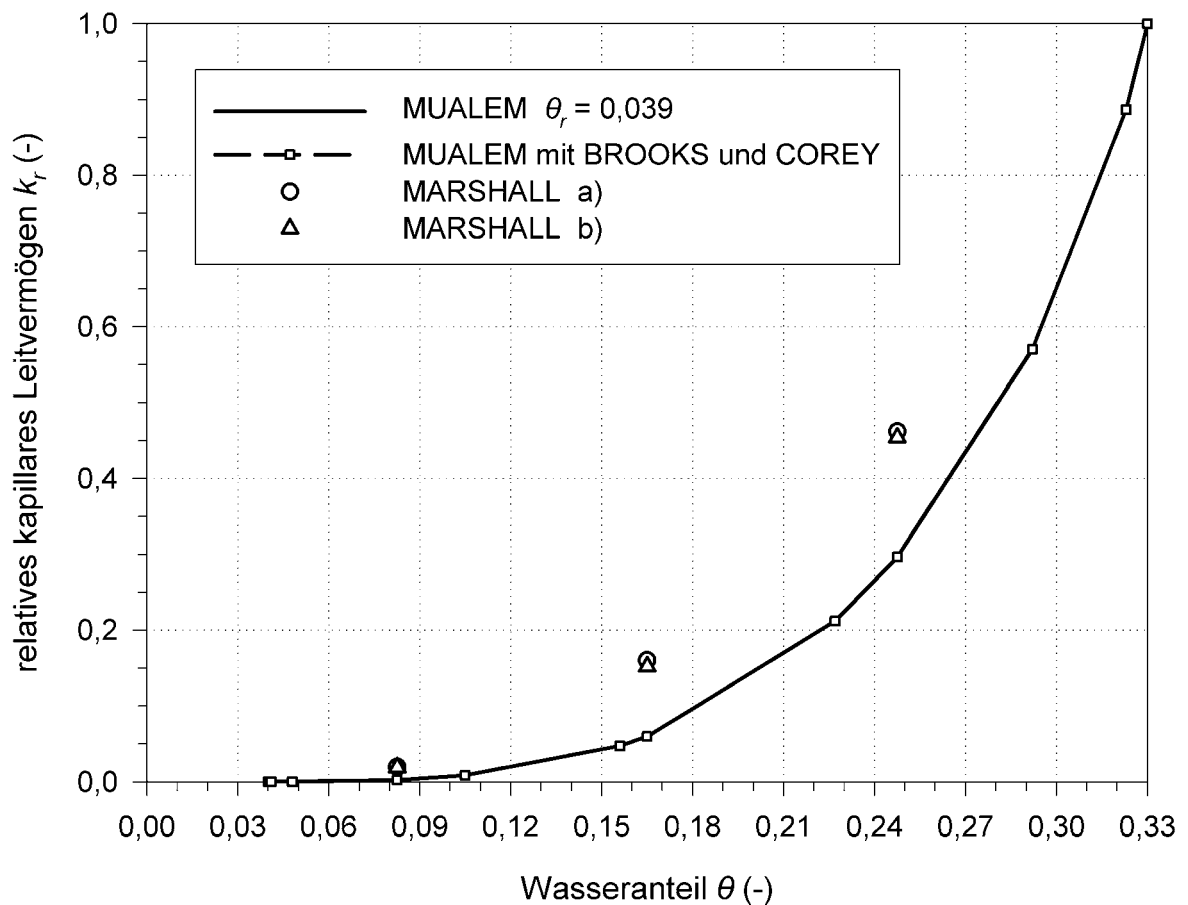


Abbildung 2-4: relatives kapillares Leitvermögen nach MUALEM und MARSHALL für die im Beispiel 2-5 gegebene Bodenwassercharakteristik

Die Unterschiede zur Berechnung nach a) sind im vorliegenden Fall marginal. Das ist insbesondere darauf zurückzuführen, dass die Tangente im letzten Messpunkt (θ_{min}, h_{max}) schon sehr steil steht und θ_{min} nur wenig von θ_r abweicht. Umgekehrt kann daraus geschlossen werden, dass die Regression mit dem Brooks-und-Corey-Modell nur dann den Aufwand lohnt, wenn die Messkurve im letzten Messpunkt noch nicht gegen den Restwasseranteil strebt.

Zum Vergleich: Die Berechnung nach MARSHALL unter a) in Beispiel 2-5 hat ergeben

	$k_r(0,75) = 0,454$	$k_r(0,50) = 0,152$	$k_r(0,25) = 0,019$
und unter b)	$k_r(0,75) = 0,462$	$k_r(0,50) = 0,160$	$k_r(0,25) = 0,019$

2.7 Geschlossene Funktionen für die Retentionskurve und das kapillare Leitvermögen

Für numerische Simulationen bzw. den Einsatz in Computerprogrammen werden häufig anstelle diskreter Messpunkte der Matrixpotenzial-Wasseranteil-Beziehung und des kapillaren Leitvermögens mathematische Funktionen verwendet, deren Parameter den gegebenen Werten angepasst werden. Anstelle des Zusammenhangs Wasserspannung – Wasseranteil bzw. $\theta(h)$ verwenden die meisten Modellfunktionen die verwandte Beziehung Wasserspannung h – effektive Sättigung $Se(h)$. Das kapillare Leitvermögen wird in der Literatur sowohl als Funktion der Wasserspannung $k(h)$ als auch der effektiven Sättigung $k(Se)$ beschrieben [LEIJ et al., 1997].

Die Darstellung der genannten Bodeneigenschaften in funktionaler Form erleichtert die numerische Modellierung der Wasserbewegung in der ungesättigten Bodenzone, erlaubt einen einfacheren Vergleich unterschiedlicher Böden, eröffnet die Möglichkeiten des Scalings für die Beschreibung der räumlichen Inhomogenität im Zusammenhang mit geographischen Informationssystemen (GIS) und ist überdies für die indirekte Bestimmung von Bodeneigenschaften von grundlegender Bedeutung. Demgemäß wurden im Laufe der Zeit eine Unzahl an empirischen und semi-empirischen Funktionen für die Bodenwassercharakteristik und das kapillare Leitvermögen vorgeschlagen.

LEIJ et al. [1997] haben in einem Fachartikel insgesamt 14 bekannte Funktionen für die Bodenwassercharakteristik und 11 mathematische Beziehungen für das kapillare Leitvermögen untersucht. Eine Auswahl ist in den beiden nachfolgenden Tabellen zu finden.

2.7.1 Modelle für die Bodenwassercharakteristik

Grundsätzlich verwenden die meisten Modelle nicht das (negative) Matrixpotenzial ψ_m selbst, sondern dessen negativ genommenen (und damit positiven) Wert, der unter der Bedingung $\psi_a = 0$ der Druckhöhe bzw. der Bodenwasserspannung h entspricht. Der Wasserspannung h wird von den Funktionen die dimensionslose effektive Sättigung $Se = \frac{\theta - \theta_r}{\theta_s - \theta_r}$ zugeordnet, woraus sich der Wasseranteil mit

$$\theta = \theta_r + Se \cdot (\theta_s - \theta_r) \quad \text{ergibt.}$$

Durch die Zuordnung über die effektive Sättigung $\theta = f(Se(h))$ treten neben den Formparametern α , β und γ der jeweiligen Funktionen mit θ_r und θ_s zwei weitere Parameter hinzu. Während dem Sättigungswassergehalt θ_s eine mehr oder weniger eindeutige physikalische Bedeutung zugeordnet werden kann, wird dem Restwassergehalt θ_r eine solche oft nicht zugebilligt, d. h. er ist als zusätzlicher mathematischer Parameter zu betrachten (dessen Ermittlung mitunter erhebliche Schwierigkeiten bereitet). Zu erwähnen ist weiters, dass keine der genannten Funktionen die Hysterese berücksichtigt. Für die Beschreibung des hysterese Verhalten wären sie daher entweder zu modifizieren, wie dies z. B. mit der van-Genuchten-Kurve im Programm HYSWASOR geschehen ist [DIRKSEN et al., 1993], oder es wären andere Modelle heranzuziehen (z. B. von KASTANEK [1995] oder BUSCH, LUCKNER und TIEMER [1993]).

Zum Teil andere Funktionen für die Bodenwassercharakteristik wurden von DOURADO-NETO et al. [1995] verwendet. Sie wurden im Programm SWRC implementiert, mit dem u. a. die Formparameter der Kurven bestimmt werden können.

Zur Funktion von BROOKS und COREY ist zu bemerken, dass sie für Böden mit einer engen Porengrößenverteilung – und entsprechend großen β -Werten – seit langem erfolgreich verwendet wird (typischer Wert für β etwa 2, niedriger für strukturierte Böden und höher für Sande). Fein texturierte oder ungestörte Böden haben häufig keinen klaren Lufteintrittspunkt; ihr Retentionsverhalten kann daher durch das Brooks-und-Corey-Modell weniger gut beschrieben werden [van GENUCHTEN et al., 1991]. Die Parameter der Kurve sind graphisch im doppelt logarithmischen Maßstab bequem zu bestimmen [COREY und BROOKS, 1999]. Ein Problem mag für manche Böden bzw. Modellierungen die Diskontinuität an der Grenze des geschlossenen Kapillarsaumes ($h = 1/\alpha$) darstellen.

Im Gegensatz dazu weisen die beiden Modelle von van GENUCHTEN [1980] (siehe Kapitel 2.2) einen glatten Verlauf auf, dafür ist i. A. kein geschlossener Kapillarsaum vorgesehen. Die Kurven können allerdings im untersten Wasserspannungsbereich eng an die Vollsättigung angeschmiegt

werden. Das lässt sich leicht belegen wenn man bedenkt, dass die Brooks-und-Corey-Funktion mathematisch als Grenzfall der van-Genuchten-Kurve mit $m = \infty$ (und $m \cdot n < \infty$) aufgefasst werden kann. Die dreiparametrische Kurve von van GENUCHTEN wird oft aus rein mathematischen Gründen durch den Ansatz $\gamma = 1 - 1/\beta$ auf einen zweiparametrischen reduziert. Nicht selten ergibt sich trotz dieser Einschränkung eine recht gute Anpassung.

Tabelle 2-1: Modellfunktionen für die Bodenwassercharakteristik [nach LEIJ et al., 1997]

Formel	Gültigkeitsbereich	Bezeichnung
$\begin{cases} 1 & \alpha \cdot h \leq 1 \\ (\alpha \cdot h)^{-\beta} & \alpha \cdot h > 1 \end{cases}$		BROOKS und COREY (1964)
$[1 + (\alpha \cdot h)^\beta]^{-\gamma}$		van GENUCHTEN (1980)
$[1 + (\alpha \cdot h)^\beta]^{(1-\beta)/\beta}$		van GENUCHTEN (1980)
$\begin{cases} 1 - (\alpha \cdot h)^2 \cdot S_i^{2/\beta} \cdot (1 - S_i) & h \leq h_i \\ (\alpha \cdot h)^{-\beta} & h > h_i \end{cases}$ <p>mit $h_i = 1/\alpha \cdot S_i^{1/\beta}$ und $S_i = 2/(2 + \beta)$</p>		HUTSON und CASS (1987)
$[(1 + \alpha \cdot h/2) \cdot e^{-\alpha \cdot h/2}]^{1/(1+\beta)}$		RUSSO (1988)
$\frac{1 + \gamma \cdot \alpha \cdot h}{1 + \alpha \cdot h + \beta (\alpha \cdot h)^2}$		ZHANG und van GENUCHTEN (1994)
$\begin{cases} 1 - b \cdot (\alpha \cdot h)^2 & 0 < h < \beta \\ (\alpha \cdot h)^{-\gamma} - (\alpha \cdot h_d)^{-\gamma} + a \cdot \ln(h_d/h) & h > \beta \end{cases}$ $a = \frac{2 - (2 + \gamma) \cdot (\alpha \cdot \beta)^\gamma + 2 \cdot (\alpha \cdot h_d)^{-\gamma}}{1 + 2 \cdot \ln(h_d/\beta)}$ $b = \frac{\gamma}{(\alpha \cdot \beta)^\gamma + a} + a$		ROSSI und NIMMO (1994)
$\begin{cases} 0,5 \cdot \operatorname{erfc}\left(\frac{\ln\left(\frac{1 - \alpha \cdot h}{1 - \alpha \cdot \beta}\right) - \gamma^2}{\gamma \cdot 2^{1/2}}\right) & \alpha \cdot h > 1 \\ 1 & \alpha \cdot h \leq 1 \end{cases}$		KOSUGI (1994)

Eine einfache mathematische Analyse zeigt, dass sämtliche Modelle keine Orthogonalfunktionen sind (die ersten Ableitungen nach den jeweiligen Parametern sind auch von den anderen Parametern abhängig), wobei die Abhängigkeiten der einzelnen Parameter sehr unterschiedlich ausgeprägt sind. Solche Abhängigkeiten erschweren nicht nur die Kurvenanpassung bzw. die Parameteroptimierung erheblich, sondern sie zeigen auch auf, dass die Modellparameter nicht die wahren Größen widerspiegeln, von denen die Retentionskurve abhängt und dass das auf diesen Parametern beruhende Modell keine ideale mathematische Abbildung der physikalischen Wirklichkeit darstellt. Eine Funktion, die in dieser Hinsicht ein wenig positiv hervorzuheben ist, ist laut mündlicher Auskunft von Prof. HOPMANS (University of California, Davis) der Ansatz von KOSUGI. Seine Funktionswerte sind allerdings ein wenig kompliziert zu berechnen. Darüber hinaus schnitt die Funktion in der Untersuchung von LEIJ et al. [1997] hinsichtlich der durchschnittlichen Abweichungen der

Funktion von gemessenen Datensätzen weniger gut ab. Wohl nicht zuletzt wegen dieser zwei Gründe ist das Modell von KOSHUGI und die Erfahrungen damit in der Fachwelt nicht sehr weit verbreitet.

Der Ansatz von ROSSI und NIMMO [1994] versucht vor allem den trockeneren Bereich besser zu modellieren. Dieselbe Absicht verfolgten auch FAYER und SIMMONS [1995], indem sie z. B. die van-Genuchten-Modellfunktion oder die Brooks-und-Corey-Modellfunktion im Bereich zwischen dem Restwassergehalt und dem Wassergehalt Null mit einer Adsorptionsfunktion ergänzten.

Die von LEIJ et al. [1997] angeführten Funktionen für die Bodenwassercharakteristik wurden mittels Regressionsrechnung an gemessene Datensätze von insgesamt über 550 Böden angepasst (UNSODA-Database [LEIJ et al., 1996]). Den Schwerpunkt der Bodensammlung bilden Sande und sandige Lehme. Als Kriterium für die Güte einer Funktion wurde der Korrelationskoeffizient, der mittlere Standardfehler und die Anzahl an korrekt nachgebildeten Datensätzen herangezogen. Dabei schnitten insbesondere die beiden Funktionen von van GENUCHTEN, von HUTSON und CASS und von RUSSO gut ab, gefolgt von BROOKS und COREY.

2.7.2 Modellfunktionen für das kapillare Leitvermögen

Ebenso wie bei den Modellen für die Bodenwassercharakteristik wird in den meisten Modellen für das kapillare Leitvermögen nicht das Leitvermögen k selbst, sondern der funktionale Zusammenhang zwischen dem Wasseranteil θ (oder der effektiven Sättigung Se) oder der Wasserspannung h und dem auf den Durchlässigkeitsbeiwert k_s bezogenen dimensionslosen relativen kapillaren Leitvermögen $k_r = k/k_s$; $k_r = f(Se)$ bzw. $k_r = f(h)$ dargestellt. Es existieren einige zumindest zum Teil auf theoretischen Ansätzen beruhende Funktionen, von denen jene nach BURDINE und MUALEM am bekanntesten sind, sowie rein empirische.

Unter den von LEIJ et al. untersuchten Leitfähigkeitskurven ist dem ersten Modell von GARDNER der Vorzug einzuräumen. Bemerkenswert ist vor allem, dass die von der effektiven Sättigung abhängigen Funktionen erheblich größere Fehler ergaben. Von diesen entsprachen die Modelle von BROOKS und COREY und von van GENUCHTEN und NIELSEN noch am ehesten. Schließlich wurden von LEIJ et al. noch Kombinationen aus den besten Bodenwassercharakteristik-Funktionen und Leitfähigkeitskurven bzw. geschlossene Modelle untersucht.

Wenn man für eigene Daten Näherungsfunktionen bestimmen möchte, empfiehlt sich das Programm RETC des U. S. Soil Salinity Laboratory. Man kann hierbei für die Bodenwassercharakteristik zwischen den Modellen von BROOKS und COREY und von van GENUCHTEN und für das relative kapillare Leitvermögen zwischen MUALEM und BURDINE wählen. Für die Ermittlung von Parametern mehrerer Modelle für die Rückhaltekurve kann auch das Programm SWRC von DOURADO-NETO et al. verwendet werden.

Tabelle 2-2: Funktionen für das relative kapillare Leitvermögen k/k_s

Formel	Gültigk.bereich	Bezeichnung
auf der Wasserspannung h basierend		
$[1 + (\alpha \cdot h)^\delta]^{-\gamma}$		GARDNER (1958)
$e^{- \delta \cdot h }$		GARDNER (1958)
$\begin{cases} 1 & \alpha \cdot h \leq 1 \\ (\alpha \cdot h)^{-2-3\delta} & \alpha \cdot h > 1 \end{cases}$		BROOKS und COREY (1964)
$Se^\delta \cdot \left(\frac{\int_0^{Se} \frac{1}{h(x)} dx}{\int_0^1 \frac{1}{h(x)} dx} \right)^2$		MUALEM (1976)
auf der effektiven Sättigung Se basierend		
$Se^{3+2/\delta}$		BROOKS und COREY (1964)
$Se^\delta \cdot [1 - (1 - Se^{1/\gamma})^\gamma]^2$		van GENUCHTEN (1980)
$Se^\delta \cdot [I_\xi(p, q)]^2$ $p = \gamma + 1/\beta; \quad q = \gamma - 1/\beta; \quad \xi = Se^{1/\gamma}$		van GENUCHTEN und NIELSEN (1985)
$\left[\frac{Se}{\delta} \right] \cdot \left[\frac{1 - (1 - Se^{1/\gamma})}{1 - (1 - \delta^{1/\gamma})} \right]^2$		van GENUCHTEN et al. (1991)
$\frac{(1 - \gamma) \cdot Se^\delta}{1 - Se}$		FUJITA (1952)
$e^{-\gamma \cdot Se^\delta}$		SETIAWAN und NAKANO (1993)
$e^{-\gamma \cdot (Se - \delta)}$		LIBARDI et al. (1980)

2.8 Bestimmung des kapillaren Leitvermögens im Labor

Die Labormethoden zur Bestimmung des kapillaren Leitvermögens lassen sich grundsätzlich in stationäre und in instationäre Verfahren einteilen. Bei den stationären Verfahren hält man entweder die Potenziale oder den Fluss konstant, indem man einerseits die Druckhöhen auf ein bestimmtes Niveau einstellt oder andererseits eine bestimmte, konstante Wassermenge zuführt. Die instationären Verfahren werten zumeist eine eindimensional-horizontale Wasserbewegung bzw. die Diffusionsgleichung aus, indem entweder die Wassergehaltsverteilung zu einem bestimmten Zeitpunkt oder der zeitliche Verlauf des Wassergehaltes an einem bestimmten Ort erfasst werden. Daneben gibt es noch die Sorptivitäts-Methode, die Multistep Outflow Method und diverse andere Verfahren [DANE und TOPP, 2002].

2.8.1 Versuchsanordnung mit horizontal durchströmter Bodenprobe

Durch die Höhenlage des Lufteintrittsrohres der Mariotteschen Flasche H_1 gegenüber der horizontalen Bodenprobe im Zylindermantel, der Lufteintrittsöffnungen aufweist, sowie der Wasserspiegel-lage H_2 wird sowohl ein Gradient ΔH und damit ein Fluss als auch eine bestimmte Wasserspannung mit entsprechender Sättigung im Boden durch Luftaufnahme oder -abgabe hervorgerufen. Der

Nachteil der Versuchsanordnung besteht darin, dass entlang des horizontalen Strömungsweges Δx ein Verlust an Gesamtenergiehöhe und wegen der horizontalen Anordnung ein ebensolcher Verlust an Druckhöhe einhergeht. Weiters sorgen die Lufteintrittsöffnungen dafür, dass das Gasdruckpotenzial dem atmosphärischen Luftdruck entspricht und damit Null ist. Das Matrixpotenzial muss also im Boden im selben Maße abnehmen wie das Gesamtpotenzial. Daraus folgt, dass weder die Wasserspannung bzw. der Wassergehalt noch das kapillare Leitvermögen in der horizontalen Achse konstant sein können und dass der Gradient mit dem Weg zunimmt, weil der Versuch unter stationären Bedingungen durchgeführt wird ($q(x, t) = \text{const.}$) und somit durch alle vertikalen Ebenen derselbe Fluss $Q = A \cdot k \cdot I$ hindurchtritt.

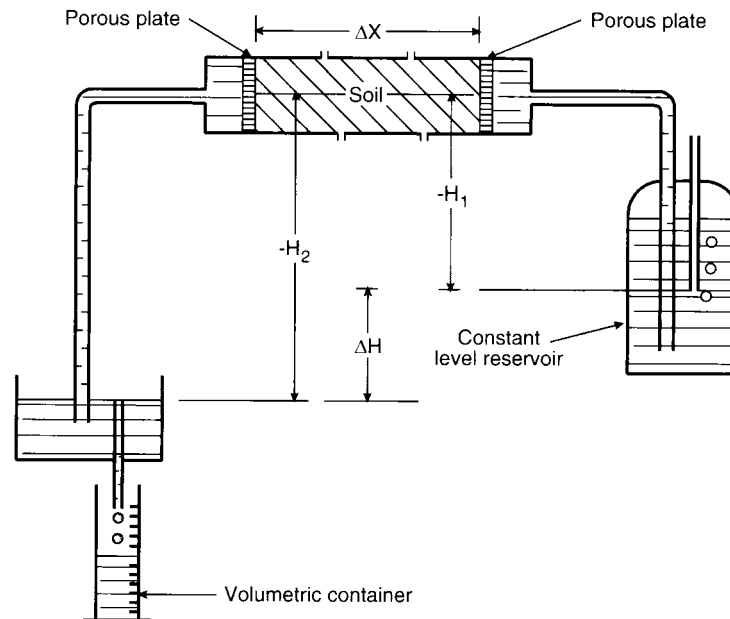


Abbildung 2-5: Versuchseinrichtung zur Bestimmung des kapillaren Leitvermögens mit horizontal durchströmter Bodenprobe [HILLEL, 1998]

Bei dem Versuch kann zwar der Fluss Q , der Zylinderquerschnitt A , die Potenzialdifferenz ΔH und der Strömungsweg Δx festgelegt bzw. gemessen werden, doch ist der sich ergebende Gradient $\bar{I} = \Delta H / \Delta x$ nur ein mittlerer Gradient und das aus $\bar{k} = Q / (A \cdot I)$ berechnete kapillare Leitvermögen ebenfalls nur ein mittlerer Wert \bar{k} für eine mittlere Wasserspannung $\bar{h} = (H_1 + H_2) / 2$.

Die Höhe der Probe bzw. die Länge Δx sollte demnach möglichst kurz sein, um eine annähernd punktuelle Zuordnung $k(h)$ zu erhalten. Mehrere Punkte bzw. Versuche mit zunehmenden Wasserspannungen h werden natürlich durch sukzessives Absenken beider Niveaus bewerkstelligt, während Q und k bei gleichbleibender Differenz ΔH von Versuch zu Versuch abnehmen.

Beispiel 2-8: Zur Bestimmung der kapillaren Leitfähigkeit wurden an eine ungestörte, horizontal angeordnete Bodenprobe über Keramikplatten zwei verschieden große Wasserspannungen angelegt (siehe Abbildung 2-5). Mit Hilfe zweier Tensiometer im Abstand Δx wurden in zwei Punkten der Probe die auftretenden Wasserspannungen nebst anderer Daten gemessen.

Probe:	$L = 20 \text{ cm}$	Gemessen:	$h_1 = -H_1 = 101 \text{ cm}$
	$\Delta x = 15 \text{ cm}$		$h_2 = -H_2 = 113 \text{ cm}$
	$d = 10 \text{ cm}$		$Q = 30,3 \text{ ml/4 h}$

Wie groß ist das kapillare Leitvermögen und welcher Wasserspannung ist es zuzuordnen?

$$Q = 30,3 \text{ ml/4 h} = 2,10 \times 10^{-3} \text{ cm}^3/\text{s}$$

Wenn die Vergleichsebene durch die Tensiometerspitzen gelegt wird, betragen die Gesamtpotenziale $H_1 = -h_1$ und $H_2 = -h_2$. Man erhält aus dem Gesetz von DARCY

$$\bar{k} = -\frac{Q \cdot \Delta x}{A \cdot \Delta H} = -\frac{2,10 \times 10^{-3} \times 15}{5^2 \times \pi \times (-113 - -101)} = 3,3 \times 10^{-5} \text{ cm/s}$$

$$\frac{h_1 + h_2}{2} = \bar{h} = 107 \text{ cm}$$

2.8.2 Versuchsanordnung mit vertikaler Durchströmung

Bei diesem stationären Versuch wird neben der Zulaufhöhe und der Ablaufhöhe noch zusätzlich der Gasdruck so eingestellt, dass sich die gewünschte mittlere Wasserspannung \bar{h} in der Probe ergibt. Der Größe des dabei auftretenden Gradienten $\Delta H/L$ wird nur insofern Bedeutung geschenkt, als er zu einem mit einer Bürette messbaren (stationären) Fluss führen soll. Der hierfür erforderliche Gradient des Gesamtpotenzials ist meist deutlich größer als 1.

Da auch bei diesem Versuch die Wasserspannung im Boden über die Tiefe nicht notwendigerweise konstant sein muss, erhält man ebenso wie bei der horizontalen Durchströmung nur mittlere Werte für \bar{h} und \bar{k} , doch wird bei der Abwärtsströmung die Abnahme des Gesamtpotenzials durch die Abnahme des Gravitationspotenzials teilweise kompensiert, sodass der Gradient des Druck- bzw. des Matrixpotenzials bei gleichem Fluss deutlich kleiner ist als beim Horizontalversuch.

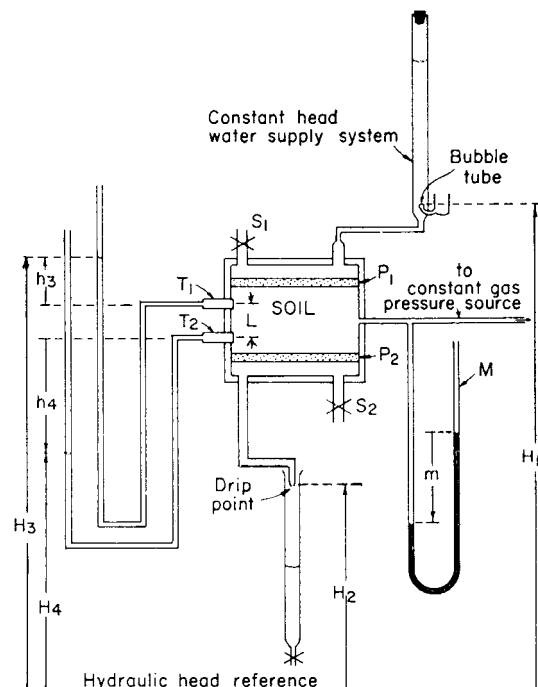


Abbildung 2-6: Versuchsschema für die Bestimmung des kapillaren Leitvermögens mit vertikal durchströmter Bodenprobe [KLUTE, 1965]

Beachtenswert erscheint der positive Druck im oberen Tensiometer der Abbildung 2-6. Nichtsdestotrotz ergibt sich aufgrund des positiven Gasdruckpotenzials m ein deutlich negatives mittleres Matrixpotenzial in der Probe.

Beispiel 2-9: Bei einem Stationärversuch mit vertikal durchströmter Probe wurden folgende Größen gemessen:

Probe: $d = 7 \text{ cm}$ abgelesene Werte: $Q = 21 \text{ ml/1,5 h}$ $h_3 = +4 \text{ cm}$
 $L = 5 \text{ cm}$ $m = h_a = 20 \text{ cm}$ $h_4 = -46 \text{ cm}$

Wie groß ist das kapillare Leitvermögen und welcher Wasserspannung ist es zuzuordnen?

Mit der Vergleichsebene auf dem Niveau des oberen Tensiometers erhält man für die Differenz der Gesamtpotenziale $\Delta H = h_3 - (h_4 - L)$

$$\Delta H = 4 - (-46 - 5) = 55 \text{ cm}$$

$$\bar{T} = \frac{\Delta H}{L} = \frac{55}{5} = 11$$

$$Q = 3,90 \times 10^{-3} \text{ cm}^3/\text{s}$$

$$\bar{k} = \frac{Q}{A \cdot \bar{T}} = \frac{3,90 \times 10^{-3} \times 4}{7^2 \times \pi \times 11} = 9,21 \times 10^{-6} \text{ cm/s}$$

Die mittlere Druckhöhe \bar{h} beträgt $(h_3 + h_4)/2 = (4 - 46)/2 = -21$; die Matrixpotenzialhöhe h_m beträgt nach Gleichung 1-2

$$h_m = \bar{h} - h_a = -21 - 20 = -41 \text{ cm.}$$

Bei einer Matrixpotenzialhöhe von -41 cm bzw. einer Wasserspannung von 41 cm beträgt das (mittlere) kapillare Leitvermögen $k = 9,21 \times 10^{-6} \text{ cm/s}$.

2.8.3 Einheitsgradientenverfahren

Bei korrekter Versuchsdurchführung ist bei diesem Stationärversuch die Wasserspannung h , der Wassergehalt θ , das kapillare Leitvermögen k und der Gradient I konstant über die Höhe z in der Bodenprobe.

Von KLUTE und DIRKSEN [1986] wird eine sehr aufwändige Apparatur für das Einheitsgradientenverfahren mit Druckluftversorgung beschrieben, bei der im Boden ähnlich hohe Wasserspannungen wie im Drucktopf hervorgerufen werden können. Allerdings müssen hierzu die Poren der Tensiometerspitzen (bzw. Tensiometerringe) und der beiden Kapillarplatten ausreichend fein sein, um ein Durchbrechen der Luft zu verhindern. Außerdem muss zumindest ein Tensiometer zur Messung positiver Drücke geeignet sein, für das zweite genügt ein genaues Differenzdruck-Manometer. Zu Beginn wird normalerweise k_s durch einen Versuch unter gesättigten Verhältnissen ermittelt. k_s dient in einer Überschlagsrechnung zur Ermittlung einer zweckmäßigen Voreinstellung zur Erreichung des Einheitsgradienten bei der gewünschten Matrixpotenzialhöhe im Boden. Diese Einstellungen umfassen die Höhe der Unterkante des Lufteintrittsrohres bzw. der Mariotteschen Flasche, die Höhe des Abtropfpunktes bzw. des Auslaufes und die Gasdruckhöhe h_a . Das gewünschte Matrixpotenzial h_m wird in erster Linie mit dem Druckregler der Druckluftanlage bzw. mit h_a eingestellt, der Einheitsgradient durch gegengleiches Absenken der Mariotteschen Flasche und Anheben des Abtropfpunktes oder umgekehrt. Während der Versuchsdurchführung sind zumeist Nachjustierungen erforderlich, damit genau die gewünschte Wasserspannung auftritt und genau ein Gradient von 1 vorhanden ist. Hierbei ist unbedingt eine Hysterese bzw. ein Wechseln von Ent- zu Bewässerung oder umgekehrt zu vermeiden. Für die Versuchsdurchführung ist generell einige Erfahrung notwendig.

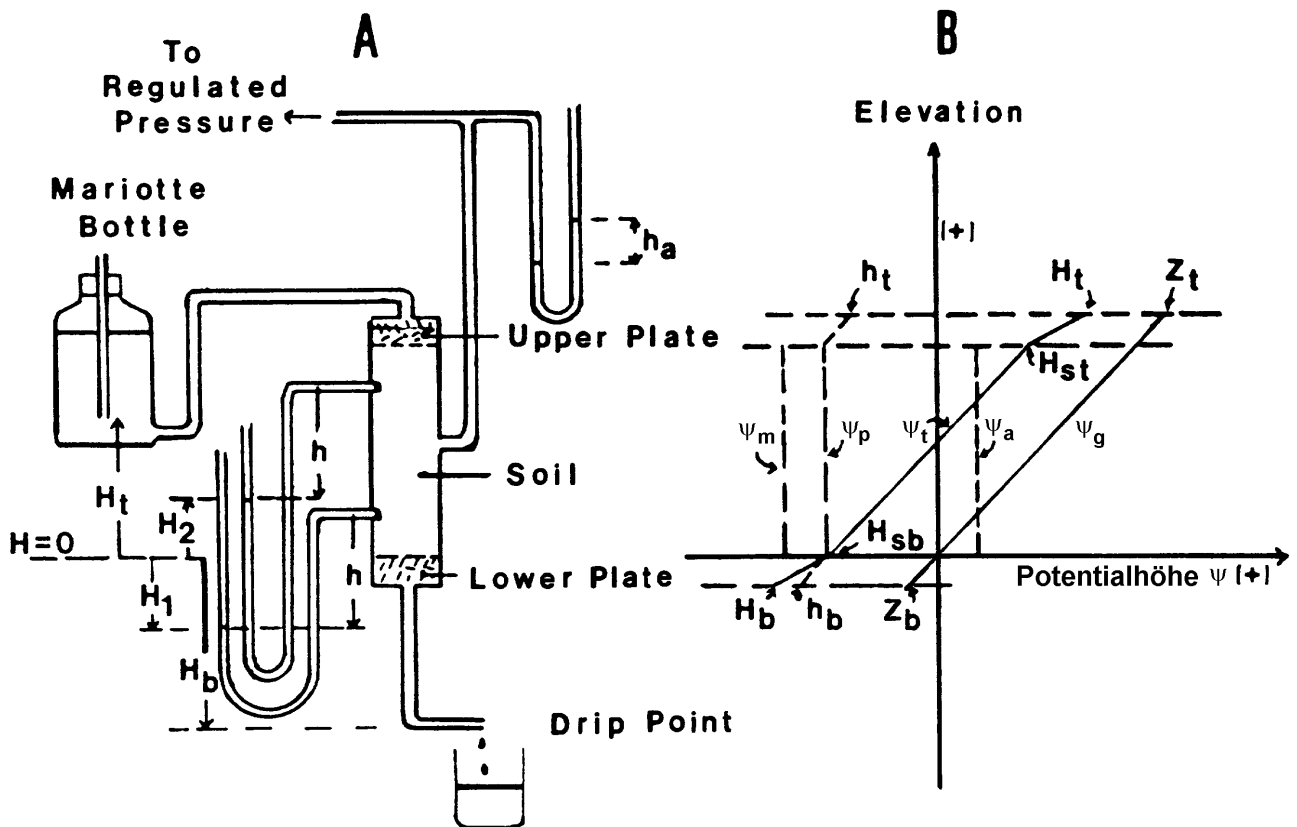


Abbildung 2-7: Prinzipskizze für die Bestimmung des kapillaren Leitvermögens nach dem Einheitsgradientenverfahren [KLUTE und DIRKSEN, 1986]

Da alle Einzelversuche mit unterschiedlichem, zumeist sukzessive höher gewähltem Matrixpotential (der Boden wird von Versuch zu Versuch entwässert), aber immer mit demselben Gradienten 1 betrieben werden, nimmt der Fluss sukzessive ab. Viele Böden weisen schon bei geringen Wasserspannungen bzw. geringer Untersättigung bei einem Gradienten von 1 nur eine sehr geringe Durchflussrate (bzw. Filtergeschwindigkeit) q auf, sodass es sehr lange dauern kann, bis stationäre Verhältnisse erzielt werden und anschließend mit einer Bürette gut messbare Volumina durch den Boden geströmt sind.

DIRKSEN [1999] beschreibt eine einfachere Versuchseinrichtung, bei der die Gasdrucksteuerung entfällt und in der Bodenluft atmosphärischer Luftdruck herrscht. Um dies zu gewährleisten, sind einerseits die Tensiometerschäfte nicht luftdicht mit dem Zylindermantel verbunden, sondern nur in diesen nur lose eingeschoben. Andererseits ist die obere und die untere Kapillarplatte nur auf dem Boden aufgesetzt, nicht unmittelbar mit dem Zylinder verbunden und geringfügig kleiner als dieser, sodass auch dort ein Luftspalt frei bleibt, über den sich der Porenluftdruck in der gesamten Probe an den Atmosphärenluftdruck anpassen kann.

Davon abgesehen werden die unterschiedlichen Druckstufen nicht durch Erhöhen des Porenluftdruckes bewerkstelligt, sondern durch eine Höhenverstellung der Probe selbst (ausreichende Raumhöhe vorausgesetzt), wobei die einstellbare Wasserspannung naturgemäß mit maximal 1 bar begrenzt ist. Je höher der Zylinder gegenüber den Zu- und Ablaufhöhen angeordnet wird, desto größer ist die Wasserspannung und desto kleiner ist der k -Wert und der Fluss. Da bei kleinerem Fluss Q die Verlusthöhen durch die beiden Filterplatten kleiner sind, muss die Potenzialdifferenz zwischen Zu- und Ablauf durch Höhersetzen des Ablaufes von Versuch zu Versuch verringert werden, um jeweils einen Gradienten von 1 in der Probe einzuhalten.

Beispiel 2-10: Die Messanordnung A laut Abbildung 2-7 dient zur Bestimmung der kapillaren Leitfähigkeit nach dem Einheitsgradientenverfahren. Die Verteilung der einzelnen Teilpotenzialhöhen wurde in Beispiel 1-12 auf Seite 30 konstruiert.

Bestimmen Sie, auf welche Höhe H_t das Rohr bzw. die Mariottesche Flasche zu positionieren sind und auf welcher Höhe H_b das freie Abtropfen des Wassers erfolgen muss, damit bei festgelegtem Druckpotenzial ψ_p , geschätztem k und bekannter Dicke d und Durchlässigkeit k_p der oberen und unteren Platte genau ein Gradient des Gesamtpotenzials von 1 auftritt! Welchem Matrixpotenzial ist das ermittelte kapillare Leitvermögen k zuzuordnen?

Vorweg seien die Bezeichnungen einiger grundlegender Größen angeführt:

$[h]$	= m	angelegtes Druckpotenzial, im Boden konstant über die Tiefe z .
$[L]$	= m	Höhe der Bodenprobe
$[k]$	= $\text{m} \cdot \text{s}^{-1}$	kapillares Leitvermögen der Bodenprobe (bei ψ_m !)
$[H_{st}]$	= m	Gesamtpotenzial an der Oberkante der Bodenprobe bzw. an der Unterseite der oberen Filterplatte

Wenn als Vergleichsebene die Unterkante der Bodenprobe bzw. die Oberseite der unteren Filterplatte festgelegt wird, beträgt das Gesamtpotenzial an der Unterkante der oberen Platte $H_{st} = L + h$. Der Fluss durch die obere Filterplatte ergibt sich nach dem Gesetz von DARCY aus

$$q = -k_p \cdot \Delta H / d$$

$[q]$	= $\text{m} \cdot \text{s}^{-1}$	Durchflussrate oder Filtergeschwindigkeit
$[k_p]$	= $\text{m} \cdot \text{s}^{-1}$	Durchlässigkeitsbeiwert der oberen und der unteren Filterplatte (beide Platten sind wassergesättigt)
$[\Delta H]$	= m	Energieverlusthöhe, Differenz des Gesamtpotenzials zwischen Ober- und Unterseite der Filterplatte
$[d]$	= m	Dicke der beiden Filterplatten

Außerdem gilt für die Bodenprobe $q = -k \cdot L / L = -k$. Für die Verlusthöhe in der Filterplatte ergibt sich dann

$$\Delta H = +k \cdot d / k_p$$

und für das Gesamtpotenzial an der Oberkante der oberen Filterplatte H_t :

$$H_t = H_{st} + d + \Delta H = L + h + d + k \cdot d / k_p$$

$[H_t]$	= m	Gesamtpotenzial an der Oberkante der oberen Filterplatte = Höhe der Unterkante des Lufteintrittsrohres über der Unterkante der Bodenprobe
---------	-----	---

Unter der Annahme, dass die Strömung von der Mariotteschen Flasche bis zur Oberseite der Filterplatte verlustfrei erfolgt, muss sich die Unterkante des Lufteintrittsrohres um H_t über der Unterkante der Bodenprobe befinden. Für die untere Filterplatte gilt

$$H_b = 0 - d - \Delta H = L + h + d - k \cdot d / k_p$$

$[H_b]$	= m	Gesamtpotenzial an der Unterkante der unteren Filterplatte = Höhe des Schlauchendes bzw. Abtropfpunktes
---------	-----	---

Die Austrittsöffnung muss sich also um H_b unter dem Vergleichsniveau (Unterkante der Bodenprobe) befinden.

Zur Ermittlung von ψ_m wird Gleichung 1-2 verwendet

$$\psi_m = \psi_p - \psi_a,$$

d. h. das der ermittelten Leitfähigkeit k zuzuordnende Matrixpotenzial ist im vorlie-

genden Fall (Bodenluft-Überdruck; die Gasdruckhöhe h_a ist auf denselben Bezugswert wie die von den Tensiometern angezeigte Druckhöhe h – nämlich Luftdruck –, zu beziehen und ist im vorliegenden Fall laut Skizze positiv) kleiner als das Druck- oder Tensiometerpotenzial h (Wasserspannung ist größer).

2.9 Profilmethode [FLÜHLER, 1991] [DIRKSEN, 1999]

Im Gegensatz zu Laboruntersuchungen, die praktisch als Punktmessungen des Durchlässigkeitsbeiwertes bzw. des kapillaren Leitvermögens zu bezeichnen sind, werden bei den Feldmethoden weitaus größere Volumina erfasst. Man erhält mittlere Werte, die bei inhomogenen oder anisotropen Böden deutlich von den Punktwerten abweichen können, aber für viele Anwendungen wesentlich stärkere Aussagekraft besitzen. In-situ-Messungen sind besonders dann angezeigt, wenn dünne, abgegrenzte Schichten mit einer nicht stabilen Struktur vorhanden sind oder wenn große Strukturelemente wie z. B. Risse oder Ähnliches ein großes REV bedingen. Labormessungen würden dafür große ungestörte Bodenproben (Zylinder) benötigen, die aufwändig und schwierig zu handhaben sind. Der größte Nachteil der Feldmethoden besteht darin, dass die Anfangs- und Randbedingungen weniger gut bekannt sind bzw. nur schlecht kontrolliert werden können.

Je nach den Gegebenheiten und gesuchten Größen können Doppelringinfiltrometer-Versuche, Tensionsinfiltrometer-Versuche, die umgekehrte Bohrlochmethode, Permeameter-Versuche, die Bohrlochmethode, Pumpversuche oder die Profilmethode zum Einsatz kommen. Grundsätzlich ist zu beachten, dass der vertikale Durchlässigkeitsbeiwert auch im ungeschichteten Boden eine starke Variabilität mit der Tiefe aufweisen kann. Überdies beträgt die vertikale Durchlässigkeit insbesondere durch alluviale Ablagerungen entstandener Böden oft nur ein Fünftel oder ein Zehntel der horizontalen [BOUWER, 1978].

Das Haupteinsatzgebiet der *Profilmethode* ist die eindimensionale, vertikale Entwässerung eines anfangs gesättigten Bodenprofils. Sie wird daher auch als „*unsteady drainage-flux method*“ bezeichnet (KLUTE, 1986). Der versuchstechnische und der zeitliche Aufwand ist selbst unter einfachen Gegebenheiten beträchtlich. Mit der Profilmethode kann das kapillare Leitvermögen eines Bodenprofils für jede Bodenschicht als Funktion von Wasseranteil und/oder Wasserspannung bestimmt werden. Dazu ist die Messung der zeitlichen Veränderung des Wasseranteils mit der Neutronen-sonde oder mit dem TDR-Verfahren und der Wasserspannung mit Tensiometern im Boden in Abhängigkeit von der Tiefe notwendig. Es werden also bei diesem Feldexperiment Tiefenprofile von $h(z)$ und von $\theta(z)$ in einer zeitlichen Abfolge gemessen. Das Experiment beginnt nach einer möglichst guten, entweder natürlichen oder künstlichen Sättigung des Profils. Zusätzlich muss der Fluss zu allen Zeitpunkten zumindest in einer Tiefe bekannt sein. Das wird zumeist dadurch erreicht, indem man die Bodenoberfläche mit Plastik abdeckt, das heißt, der Fluss durch die Oberfläche $q(0) = 0$. Die Profil-Methode kann in zahlreichen Varianten abgewandelt werden, z. B. indem man den Fluss durch den oberen Rand nicht Null setzt, sondern konstant hält oder indem man den Fluss über die Verdunstung ermittelt.

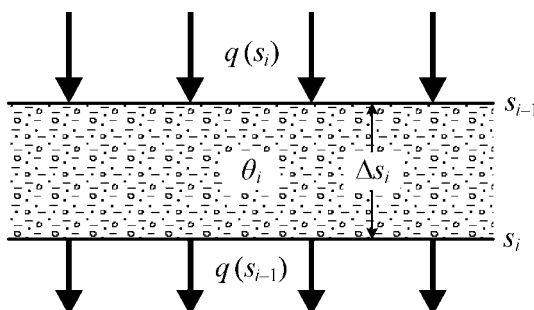
Das zu Beginn des Versuchs (nahezu) gesättigte Profil entwässert sich unter der Wirkung der Gravitation. Während dieses Dränvorganges wird die zeitliche Veränderung der vertikalen Verteilung des Wasseranteiles θ und der Wasserspannung h mit einer möglichst guten Auflösung verfolgt. Dieses Experiment liefert also Messwerte für $h(z, t)$ (Tensiometer-Ablesungen) und $\theta(z, t)$ (Neutronen-sonden- oder TDR-Ablesungen).

Grundgleichung: Gesetz von DARCY für ungesättigten Boden in eindimensionaler Form

$$q = -k(\theta) \cdot \frac{\partial H}{\partial s} = -k(\theta) \cdot \left(\frac{\partial h}{\partial s} + \frac{\partial z}{\partial s} \right) \quad (2-54)$$

$[q]$	$= \text{m} \cdot \text{s}^{-1}$	Durchflussrate, spezifischer Fluss
$[\theta]$	$= \text{dim.los}$	Wasseranteil
$[k(\theta)]$	$= \text{m} \cdot \text{s}^{-1}$	kapillares Leitvermögen
$[z]$	$= \text{m}$	Lagehöhe über Vergleichsniveau (\equiv Gravitationspotenzialhöhe)
$[h]$	$= \text{m}$	Druckhöhe (\equiv Druckpotenzialhöhe)
$[H]$	$= \text{m}$	Gesamtenergiehöhe; $H = h + z$
$[s]$	$= \text{m}$	Koordinate in Bewegungsrichtung

Das kapillare Leitvermögen ist berechenbar, wenn für einen bestimmten Zeitpunkt der Fluss und der Potenzialgradient bekannt sind. Der Gradient kann durch die Messung des Druckpotenzials (Tensiometer) ermittelt werden. Für die in-situ-Bestimmung des Flusses existieren keine zufriedenstellenden Messtechniken. Der Fluss wird daher mit Hilfe der Kontinuitätsbedingung ermittelt.



EIN – AUS = SPEICHERUNG

$$q(s_{i-1}) \cdot t - q(s_i) \Delta t = \Delta s_i \cdot \Delta \theta_i \quad (2-55)$$

oder in differenzieller Form

$$\frac{\partial \theta}{\partial t} = -\frac{\partial q}{\partial s} \quad (2-56)$$

Der Fluss am unteren Rand der ersten Schicht ist gleich dem Fluss am oberen Rand (z. B. Oberfläche für die oberste Schicht) weniger der zeitlichen Änderung der in der Schicht gespeicherten

Menge (Wasserverlust):
$$q(s_1) = q(0) - \Delta s_1 \cdot \frac{\partial \theta_1}{\partial t} \quad (2-57)$$

$[\Delta s_1]$	$= \text{m}$	Dicke der ersten Schicht
$[s_1]$	$= \text{m}$	Tiefe des unteren Randes der ersten Schicht
$[\theta_1]$	$= \text{dim.los}$	mittlerer Wasseranteil der ersten Schicht
$[t]$	$= \text{s}$	Zeit

Der Fluss am unteren Rand der zweiten Schicht wird analog beschrieben (Zufluss aus erster Schicht – Wasserverlust der zweiten Schicht)

$$q(s_2) = q(s_1) - \Delta s_2 \cdot \frac{\partial \theta_2}{\partial t} = q(0) - \Delta s_1 \cdot \frac{\partial \theta_1}{\partial t} - \Delta s_2 \cdot \frac{\partial \theta_2}{\partial t} \quad (2-58)$$

Allgemein folgt der Fluss $q(s_i, t_j)$ zu einem Zeitpunkt t_j am unteren Rand einer Schicht i

$$q(s_i, t_j) = q(s_{i-1}, t_j) - \Delta s_i \cdot \frac{\partial \theta_i}{\partial t}(t_j) = q(0, t_j) - \sum_{k=1}^i \Delta s_k \cdot \frac{\partial \theta_k}{\partial t}(t_j) \quad (2-59)$$

Aus diesem Fluss ergibt sich für das kapillare Leitvermögen zu diesem Zeitpunkt

$$k(\theta, s_i) = \frac{q(s_i, t_j)}{-\frac{\partial H}{\partial s}(s_i, t_j)} \quad (2-60)$$

In den beiden im Folgenden vorgestellten Auswerteverfahren nach FLÜHLER und nach DIRKSEN werden die Differenzialquotienten prinzipiell durch Differenzenquotienten ersetzt.

Eine neuere Entwicklung sind die so genannten *inversen Methoden*. Der physikalische Versuch wird dabei durch eine numerische Simulation nachgebildet, die auf mathematischen Transportmodellen beruht. Die Beziehungen $h(\theta)$ und $k(h)$ sind wesentliche Teilmodelle für den Transportprozess, die ihrerseits von Parametern abhängig sind. Die Werte dieser Parameter und damit die gesuchten Beziehungen $h(\theta)$ und $k(h)$ sind für die jeweilige Simulation dermaßen zu bestimmen, dass sich möglichst geringe Abweichungen zwischen dem Simulationsergebnis und den im physikalischen Versuch gemessenen Werten ergeben. Dabei handelt es sich um ein so genanntes *inverses Problem*, das numerisch durch eine inverse nichtlineare Optimierung zu lösen ist.

Der allgemeinen Anwendung inverser Methoden zur Versuchsauswertung stehen beträchtliche Erfahrung in Modellbildung und Simulation entgegen. Weiters sind Modelle für die Beziehungen $h(\theta)$ und $k(h)$ erforderlich, die bei den einfacheren Auswertungen weitestgehend vermieden werden können.

2.9.1 Auswertung nach FLÜHLER [1991]

Für die Bestimmung des k -Wertes bei h und θ einer gegebenen Tiefe z_i wenden wir das Darcy-Gesetz an. Wir ermitteln den Fluss Q durch die Horizontalebene in der Tiefe z_i während des Zeitintervalls von t bis $t + \Delta t$. Dieser Fluss Q entspricht der dränbedingten Abnahme des Wasservorrates ΔW zwischen $z = 0$ und z . Wir bestimmen den hydraulischen Gradienten in dieser Tiefe z anhand der Tensiometer-Ablesungen.

Bei der Art der Differenzen- und Mittelbildung nach FLÜHLER wird unterstellt, dass $h(z)$ und auch $h(t)$ linear sind, also arithmetisch gemittelt werden können. Je nach der Form dieser Funktionen $h(z)$ bzw. $h(t)$ sind andere gewichtete Mittel oder die Verwendung von Interpolations- bzw. Ausgleichskurven sinnvoller.

Gesucht: k -Wert für $h(z_i)$ und $\theta(z_i)$

1. Die Bestimmung des hydraulischen Gradienten in der Tiefe z_i erfolgt anhand der Tensiometer-Ablesungen
2. Ermittlung des Flusses in der Tiefe z_i während des Zeitintervalls Δt
 $q \equiv \Delta W$ (entwässerungsbedingte Abnahme des Wasservorrates zwischen $z = 0$ und z_i).

Beispiel 2-11: Im Zeitintervall Δt wurden bei der Anwendung der Profilmethode nach FLÜHLER die in der folgenden Tabelle enthaltenen Messwerte registriert:

Tensiometermessungen			Neutronensondenmessungen		
Messtiefe z_i (cm)	$h(z, t)$ (cm)	$h(z, t + \Delta t)$ (cm)	Messtiefe z_i (cm)	$\theta(z, t)$ ($\text{cm}^3 \cdot \text{cm}^{-3}$)	$\theta(z, t + \Delta t)$ ($\text{cm}^3 \cdot \text{cm}^{-3}$)
10	-5	-15	0-20	0,42	0,37
30	-10	-20	20-40	0,40	0,36
50	-10	-25	40-60	0,41	0,38
70	-15	-25	60-80	0,38	0,36
90	-30	-40	80-100	0,36	0,35
110	-60	-50	100-120	0,32	0,33
130	-100	-80	120-140	0,30	0,31
150	-130	-90	-	-	-

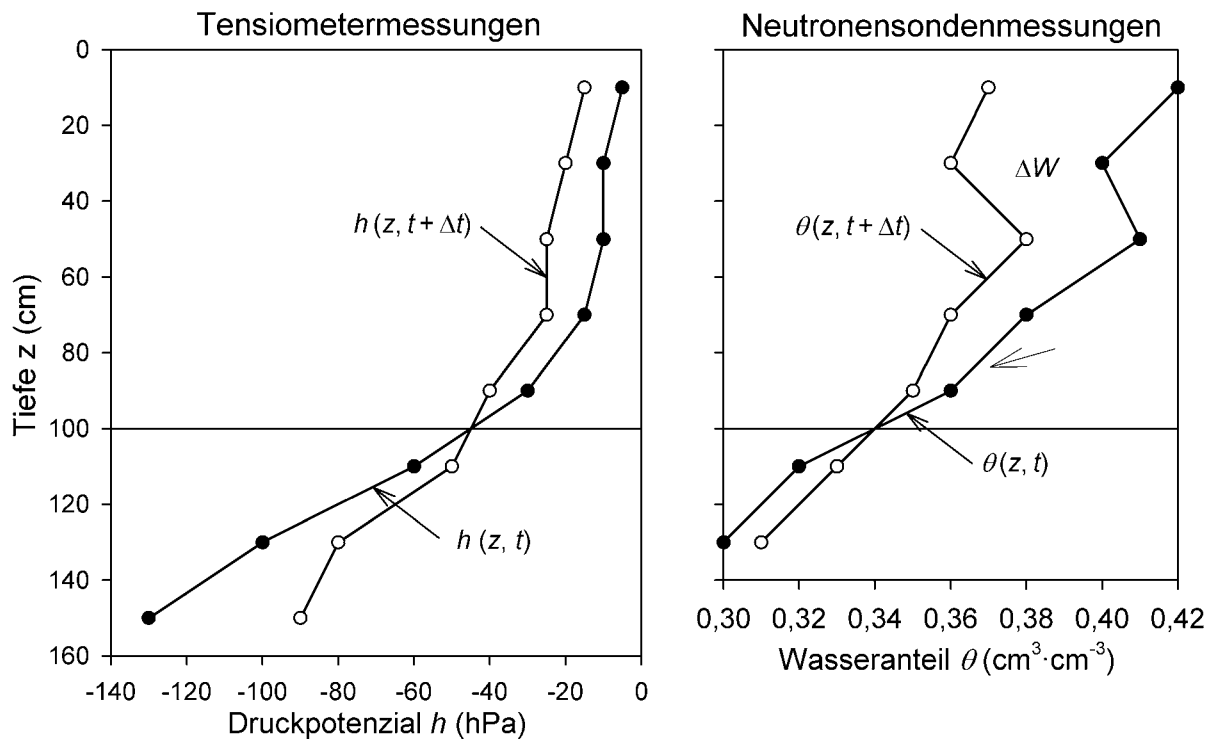


Abbildung 2-8: Druckpotenzial- und Wasseranteilsverlauf über die Tiefe

Gesucht ist der im Zeitintervall Δt durchschnittlich wirksame hydraulische Gradient $\Delta H/\Delta z = \dots\dots\dots$ in einer Tiefe $z = 100$ cm zur Zeit $t + \Delta t/2$.

Wie groß ist der Wasservorrat W zur Zeit t zwischen der Bodenoberfläche und $z = 100$ cm?

$W = \dots\dots\dots$

Wie groß ist die zeitliche Änderung des Wasservorrates ΔW im Zeitintervall Δt ?

Da der Fluss und der Gradient für $z = 100$ cm berechnet wurden, kann $k(\theta)$ bzw. $k(h)$ ebenfalls für diese Tiefe berechnet werden.

$k = \dots\dots\dots$

2.9.2 Auswertung nach DIRKSEN [1995]

Für die Profilmethode wird von DIRKSEN folgender genereller Berechnungsablauf empfohlen:

- Wähle die Zeitpunkte t_j für die die Flüsse und die Gradienten des Potentials berechnet werden sollen. Falls nicht alle grundlegenden (experimentellen) Daten zu den bestimmten Zeitpunkten verfügbar sind, müssen sie durch Interpolation für die Zeitpunkte gewonnen werden. Falls möglich, sollten die Zeitintervalle so gewählt werden, dass $\Delta\theta < 0,05$.
- Trage die Wasseranteile über die Tiefe als eine Funktion der Zeit auf: $\theta(s_i, t)$. Falls probat, zeichne Ausgleichskurven durch eine begrenzte Anzahl an Datenpunkten, wobei auf die theoretischen Verläufe Bedacht zu nehmen ist.
- Bestimme zu jedem gewählten Zeitpunkt t_j den Anstieg $\partial\theta_i/\partial t$ der (geglätteten) $\theta(s_i, t)$ -Kurven, entweder visuell anhand der ausreichend vergrößerten Zeichnungen oder mit einem geeigneten Berechnungsalgorithmus.

- Lege den Schichtenaufbau des Bodens und das Tiefen-Inkrement Δs_i fest. Für jede Bodenschicht sind durchschnittliche (repräsentative) $\partial\theta_i/\partial t$ -Werte zu ermitteln. Berechne die instationären Wasserverlust-Raten für die Zeitpunkte t_j und für jede Bodenschicht in der Form $\Delta s_i \cdot \partial\theta_i/\partial t$.
- Berechne für jeden gewählten Zeitpunkt t_j die instationären Flüsse an der Unterkante jeder Bodenschicht entsprechend der Formel. Beginne die Aufsummierung an der Bodenoberfläche ($s = 0$) und lasse keine Lücken zwischen den Schichten.
- Zeichne für jeden der Zeitpunkte t_j , falls nötig durch zeitliche Interpolation, den Verlauf der Potenzialhöhen $H(s_i, t_j)$ über die Tiefe. Zeichne geglättete Linien durch die Datenpunkte, wobei auf die theoretischen Verläufe Bedacht zu nehmen ist.
- Bestimme die Anstiege $\partial H/\partial s$ der (geglätteten) $H(s_i, t_j)$ -Profile an der Unterkante jeder Bodenschicht s_i , für die der instationäre Fluss berechnet wurde, entweder visuell anhand der ausreichend vergrößerten Zeichnungen oder mit einem geeigneten Berechnungsalgorithmus.
- Berechne die kapillaren Leitvermögen $k(s_i, t_j)$ entsprechend der Formel mit den Datenpunkten ($q, \partial H/\partial s$) für eine bestimmte Zeit und Tiefe.
- Ordne die kapillaren Leitvermögen $k(s_i, t_j)$ den zugehörigen Wasseranteilen $\theta(s_i, t_j)$ zu.
- Trage die Abhängigkeit der Kurven $k(s_i, t_j)$ oder $\log k(s_i, t_j)$ vom Wasseranteil $\theta(s_i, t_j)$ für die unterschiedlichen Tiefen auf.

Beispiel 2-12: Profilmethode nach DIRKSEN in einem groben Sandboden

Das Profil eines Bodens aus grobem Sand mit einem seichten, konstanten Grundwasserspiegel von 1,20 m wurde zu Beginn des Experiments aufgesättigt und anschließend abgedeckt um eine Verdunstung zu verhindern. Die Wasseranteile in 6 Tiefen wurden über einen Zeitraum von 24 Stunden aufgezeichnet (siehe Abbildung 2-9), die Verläufe des Gesamtpotentials über die Tiefe sind für 8 Zeitpunkte bekannt (Abbildung 2-10). Berechne das kapillare Leitvermögen des Bodens!

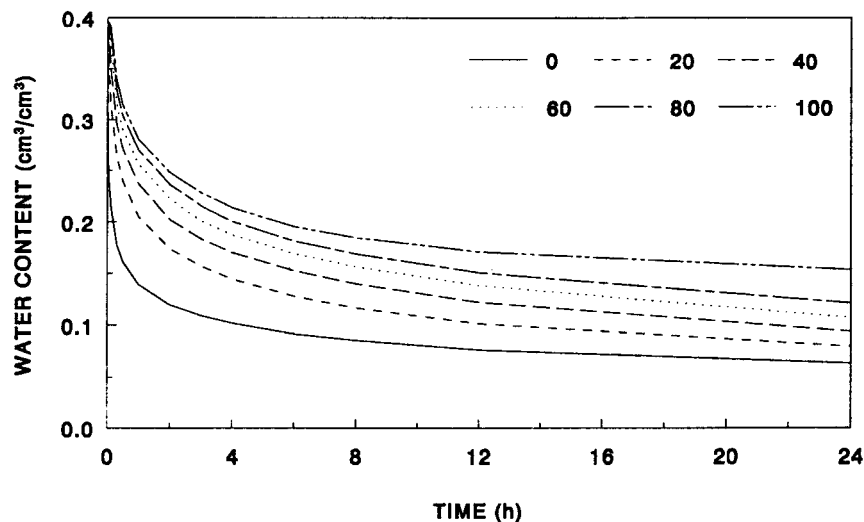


Abbildung 2-9: Gemessener zeitlicher Verlauf des Wasseranteiles in den einzelnen Bodentiefen [DIRKSEN, 1999]

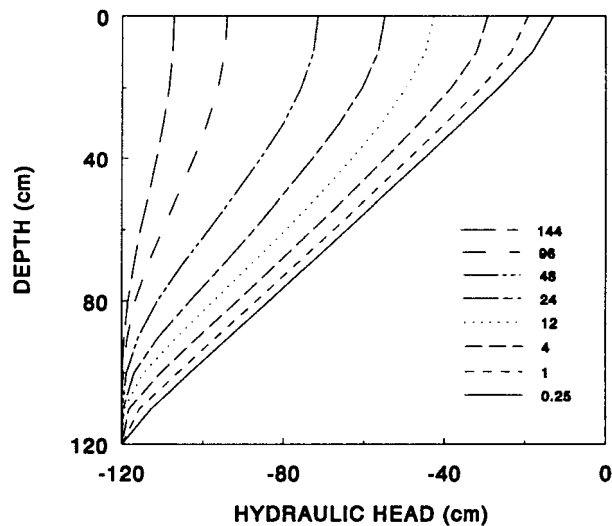


Abbildung 2-10: Verlauf des Gesamtpotenzials H über die Tiefe für einzelne Zeitpunkte [DIRKSEN, 1999]

Für die Auswertung dieses Beispiels ist das Anlegen zweier Tabellen zweckmäßig:

t (h)	s (cm)	$-\partial\theta/\partial t$ (h^{-1})	$\Delta s \cdot \partial\theta/\partial t$ ($cm \cdot h^{-1}$)	q ($cm \cdot h^{-1}$)
0,5	0–20	0,0835	1,670	1,670
	20–40	0,0988	1,976	3,646
	40–60	0,0912	1,824	5,470
	60–80	0,0926	1,852	7,322
	80–100	0,0973	1,946	9,268
1	0–20	0,0397	0,794	0,7945
	20–40	0,0494	0,988	1,782
	40–60	0,0488	0,976	2,758
	60–80	0,0493	0,986	3,744
	80–100	0,0512	1,024	4,768
2	0–20	0,0172	0,342	0,342
	20–40	0,0215	0,430	0,772
	40–60	0,0238	0,476	1,248
	60–80	0,0243	0,486	1,734
	80–100	0,0242	0,484	2,218
4	0–20	0,00837	0,167	0,167
	20–40	0,01060	0,212	0,379
	40–60	0,01076	0,215	0,595
	60–80	0,01172	0,234	0,829
	80–100	0,01243	0,249	1,078
8	0–20	0,00386	0,077	0,077
	20–40	0,00514	0,103	0,180
	40–60	0,00538	0,108	0,288
	60–80	0,00579	0,116	0,403
	80–100	0,00537	0,107	0,511

24	0–20	0,00152	0,0302	0,0302
	20–40	0,00210	0,0420	0,0722
	40–60	0,00208	0,0416	0,1138
	60–80	0,00161	0,0322	0,1460
	80–100	0,00153	0,0306	0,1766

s (cm)	T (h)	$\partial H/\partial s$ (cm·cm ⁻¹)	q (cm·h ⁻¹)	k (cm·h ⁻¹)	Θ (cm ³ ·cm ⁻³)
20	0,5	0,805	1,670	2,075	0,237
	1	0,839	0,794	0,946	0,206
	2	0,813	0,342	0,421	0,175
	4	0,741	0,167	0,225	0,145
	8	0,491	0,077	0,157	0,117
	24	0,375	0,030	0,080	0,080
40	0,5	0,926	3,646	3,937	0,268
	1	0,911	1,782	1,956	0,234
	2	0,871	0,772	0,886	0,202
	4	0,857	0,379	0,442	0,171
	8	0,821	0,180	0,219	0,140
	24	0,710	0,072	0,101	0,094
60	0,5	0,953	5,470	5,704	0,289
	1	0,946	2,758	2,915	0,255
	2	0,942	1,248	1,325	0,222
	4	0,911	0,595	0,653	0,187
	8	0,902	0,288	0,319	0,157
	24	0,759	0,114	0,150	0,108
80	0,5	0,968	7,322	7,564	0,299
	1	0,973	3,744	3,848	0,269
	2	0,964	1,734	1,799	0,236
	4	0,938	0,829	0,884	0,199
	8	0,924	0,403	0,434	0,169
	24	0,804	0,146	0,182	0,122
100	0,5	0,978	9,268	9,477	0,313
	1	0,967	4,768	4,931	0,279
	2	0,960	2,218	2,310	0,246
	4	0,888	1,078	1,214	0,215
	8	0,768	0,511	0,665	0,185
	24	0,375	0,177	0,471	0,154

Die ermittelten Ergebnispunkte $k(\theta)$ werden am besten in einem Graphen dargestellt:

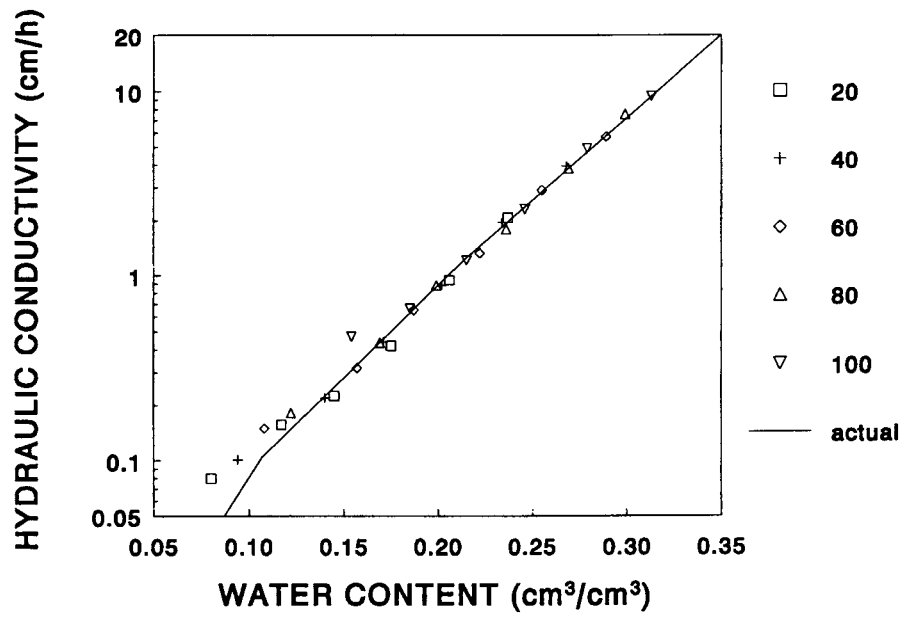


Abbildung 2-11: Abhängigkeit des kapillaren Leitvermögens vom Wasseranteil (für alle Tiefen) [DIRKSEN, 1999]

3. DATENERFASSUNG

Die Entwicklung elektronischer Meßsysteme ermöglicht die kontinuierliche (bzw. die mit einstellbarem Zeitinkrement Δt diskontinuierliche) Aufzeichnung von Messwerten.

Bodenphysikalisch relevante Parameter (Messwerte) und Messverfahren zu ihrer Erfassung:

- Wasseranteil: kapazitive Verfahren, Neutronensonde, TDR (Time Domain Reflectometry), FDR (Frequency Domain Resonance)
- Druck: Füllstandsmessung (Druckaufnehmer); Wasserspannung: Tensiometer (poröser Keramikkörper) mit Druckaufnehmer
- Temperatur: für die Temperaturmessung steht die größte Anzahl an Sensoren zur Verfügung z. B. Pt 100, NTC, Halbleiterbauelement etc.
- Leitfähigkeit: Widerstandsmessung
- Indirekte Meßmethoden zur Erfassung der Wasserspannung oder des Wassergehaltes: Gipsblock, Keramikblock, Nylonblättchen (dabei handelt es sich um Widerstandsmessungen); Psychrometer (Messung mit Thermoelement)

Das Meßsystem setzt sich aus der Datenerfassungsanlage [SOKOL, 1989] und den Messwertaufnehmern (Sensoren) zusammen. Die Datenerfassungsanlage ruft die Messwerte zu vorgegebenen Zeitpunkten von den Sensoren ab, wandelt das analoge Messsignal in ein digitales um und speichert den Messwert gemeinsam mit dem Messzeitpunkt. Nach einer bestimmten Zeitspanne sind die Daten auszulesen. Für den Feldbetrieb kann einfach die Speicherkarte (Chip Card) gewechselt werden, oder die Daten werden direkt vor Ort an einen Laptop übertragen. Im Laborbetrieb besteht die zusätzliche Möglichkeit, die Daten direkt an einen PC zu senden. Die elektrische Versorgung erfolgt durch Batterie, Netzanschluss oder über ein Solarpaneel. Um den Leistungsverbrauch im Feldbetrieb zu minimieren, ist es von Vorteil, das System nach jeder Messung „schlafen“ zu legen und erst wieder kurz vor der nächsten Messung mit Hilfe der Echtzeituhr zu aktivieren.

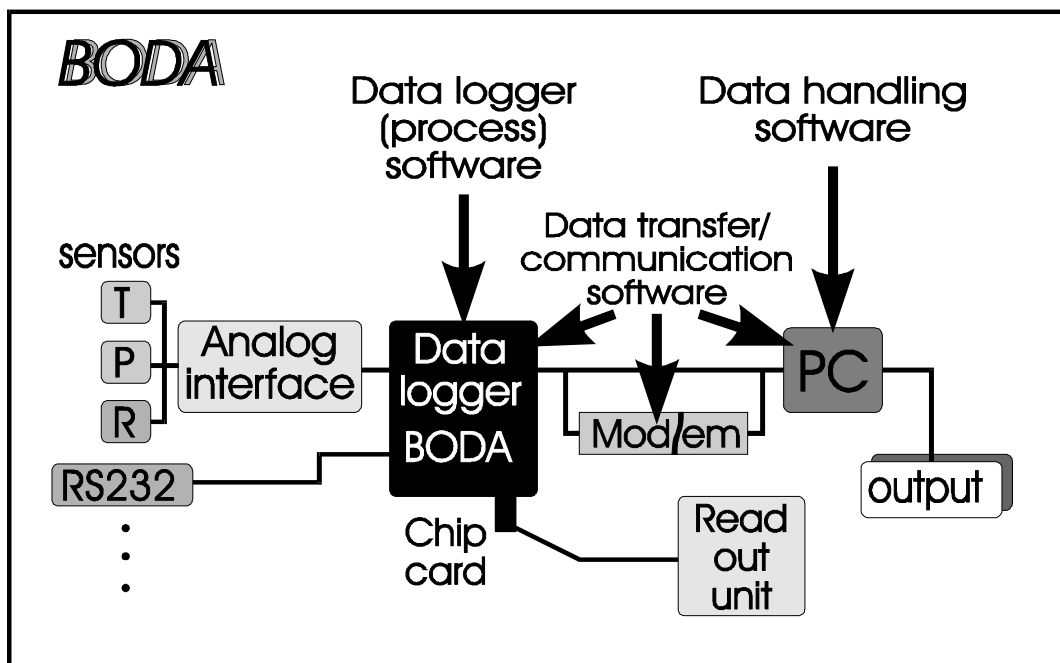


Abbildung 3-1: Messsystem

Die Nahtstelle der Datenerfassungsanlage zu den Sensoren bildet ein Sensorinterface mit folgenden Aufgaben:

- Spannungsversorgung der Sensoren (z. B. Wechselspannung bei Widerstandsmessungen)
- galvanische Trennung der Eingänge durch ein Relais
- Spannungs- oder Stromanpassungen, d. h. eine Anpassung an eine standardisierte Spannung im Bereich von 0 bis 10 V
- Vergrößerung der Anzahl der Messkanäle durch einen Multiplexer.

Der prinzipielle Aufbau einer Feldmessstelle ist aus der Abbildung 3-2 und der Abbildung 3-10 entnehmbar. Die Wasserspannung wird direkt (Tensiometer) und indirekt (Gipsblock) gemessen, die Temperatur mit einem Halbleiterbauelement und der Wasseranteil sowohl mit TDR-Sonden (Mittelwerte über Wellenleiterlänge) als auch mit kapazitiven Sensoren. Die TDR-Sonden-Messungen werden mit einem eigenen Gerät durchgeführt. Mit Hilfe der RS232-Schnittstelle können die TDR-Messungen auch mit der Datenerfassungsanlage aufgezeichnet werden.

Die gleichzeitige Erfassung der Wasserspannung und des Wasseranteiles ermöglicht die direkte Berechnung des kapillaren Leitvermögens (z. B. mit der Profil-Methode). Ein anderer eleganter Weg, für den Softwareprodukte komplette Lösungen anbieten, ist die Ermittlung der $k(\theta)$ -Funktion als inverses Problem.

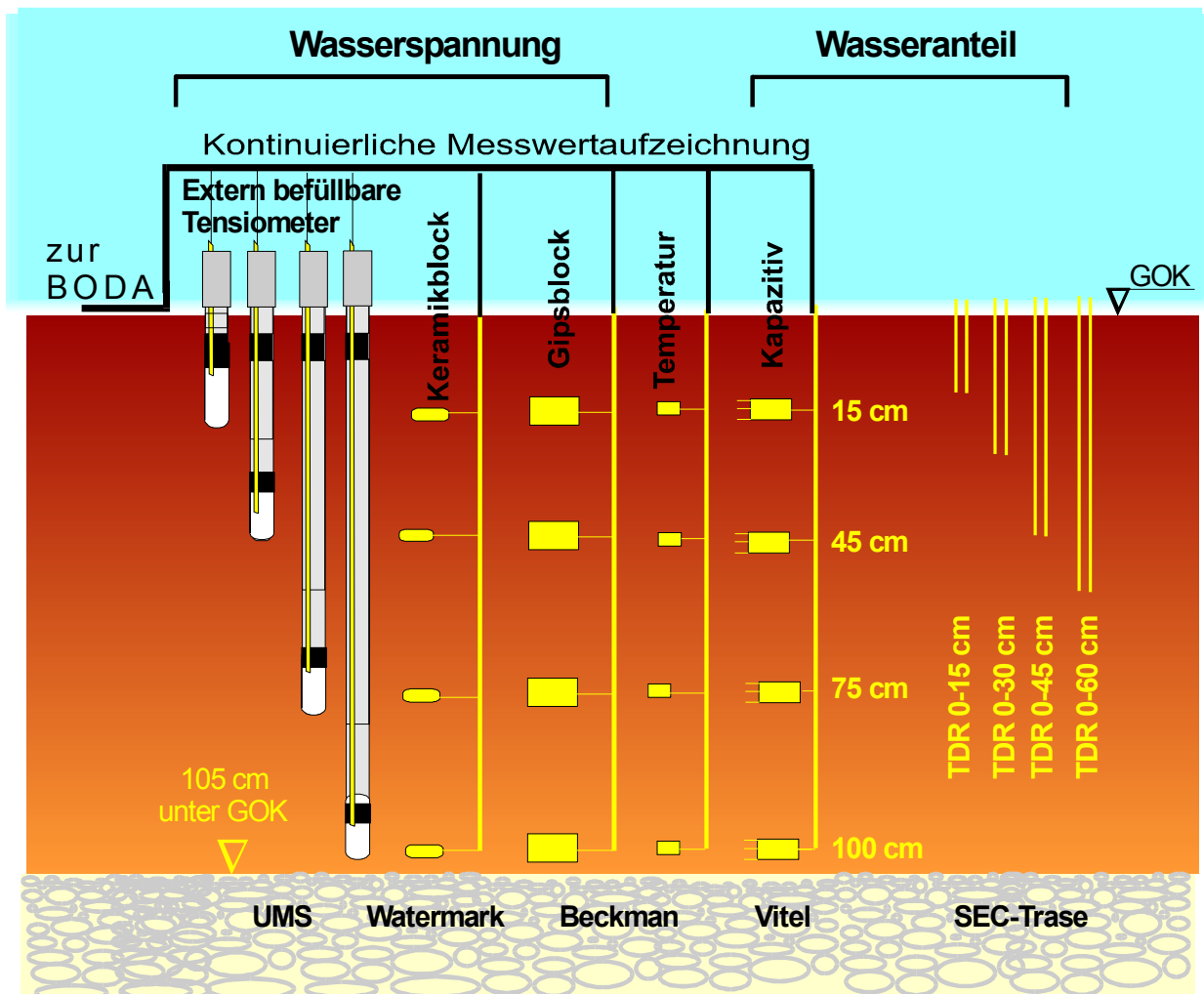


Abbildung 3-2: mit Messsensoren bestücktes Bodenprofil

Die folgende Abbildung eines Meßsystems zeigt die Datenerfassungsanlage und die Sensoren (von links nach rechts) Temperatur, zwei Nylonblättchen, Gipsblock, Keramikblock, Druckaufnehmer und TDR-Sonde mit Auswerteelektronik. Letztere kann durch Umwandlung des Messwertes in ein digitales Signal direkt an die Datenerfassung angeschlossen werden. Vorne quer im Bild ist ein kapazitiver Füllstandssensor abgebildet.

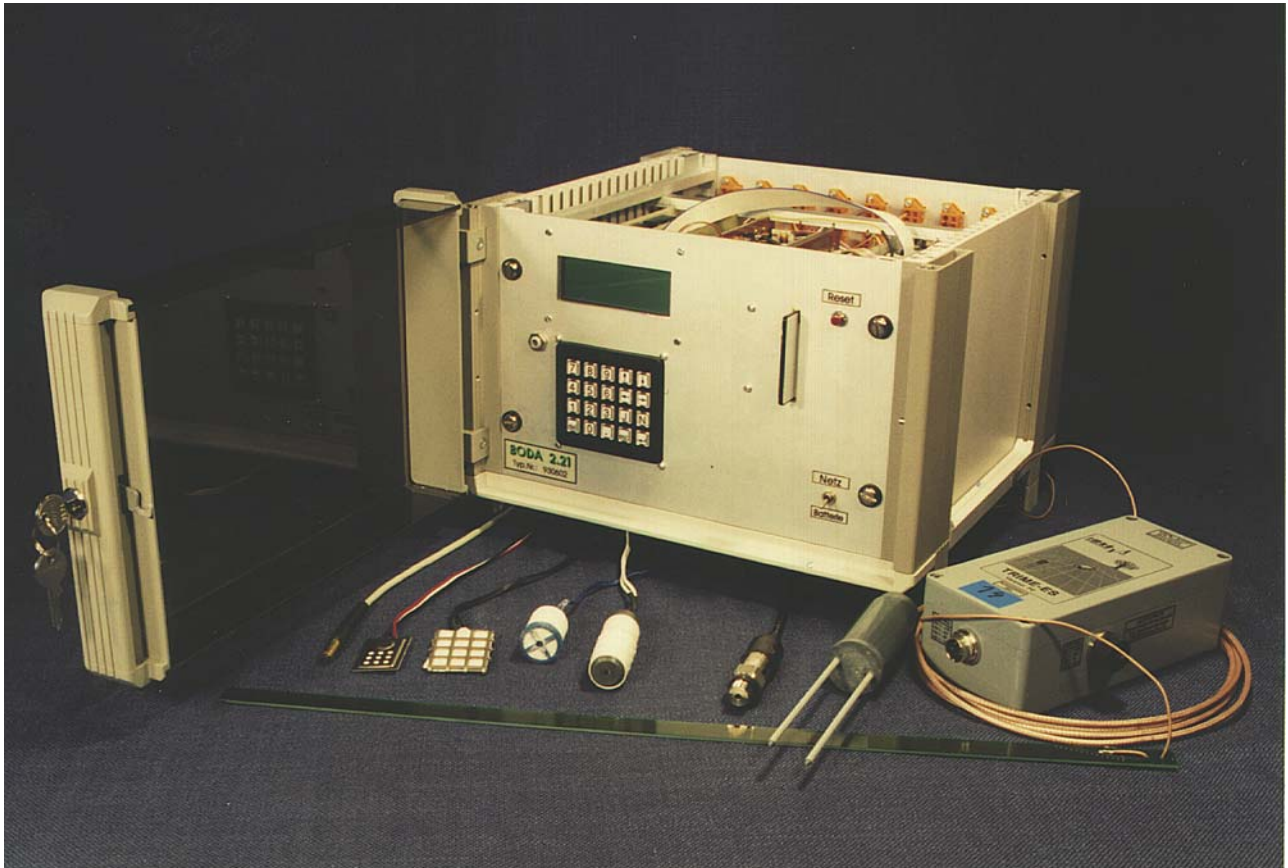


Abbildung 3-3: Datenerfassung und Messsensoren

In den folgenden Unterkapiteln werden Anwendungsbeispiele von Feldmessstationen in der Praxis gezeigt. Neben den sehr unterschiedliche Fragestellungen werden die Ergebnisse der jeweiligen Parameteraufzeichnung erläutert.

3.1 Untersuchung des Bodenklimas und des Langzeitverhaltens der Sensoren

Standort: Groß-Enzersdorf (Versuchswirtschaft)

In sechs Tiefen sind jeweils ein Keramikblock, ein Nylonblättchen und ein Temperaturfühler eingebaut. Unterhalb einer Tiefe von 1,85 m steht Schotter an. Der Aufbau des Messprofils erfolgte in Anlehnung an das US Global-Change-Program. Die Messungen begannen im Jahr 1992. Gemessen werden stündlich die Wasserspannung (indirekt) und die Temperatur [LOISKANDL und KLIK, 1994]. In der folgenden Abbildung sind der Temperaturverlauf und die Widerstandsaufzeichnung für das Jahr 1993 dargestellt. Zusätzlich sind die Niederschlagsereignisse im Jahresverlauf aufgetragen. Zur Datenreduzierung wurden die Messwerte in Tagesmittelwerte umgewandelt.

dpi

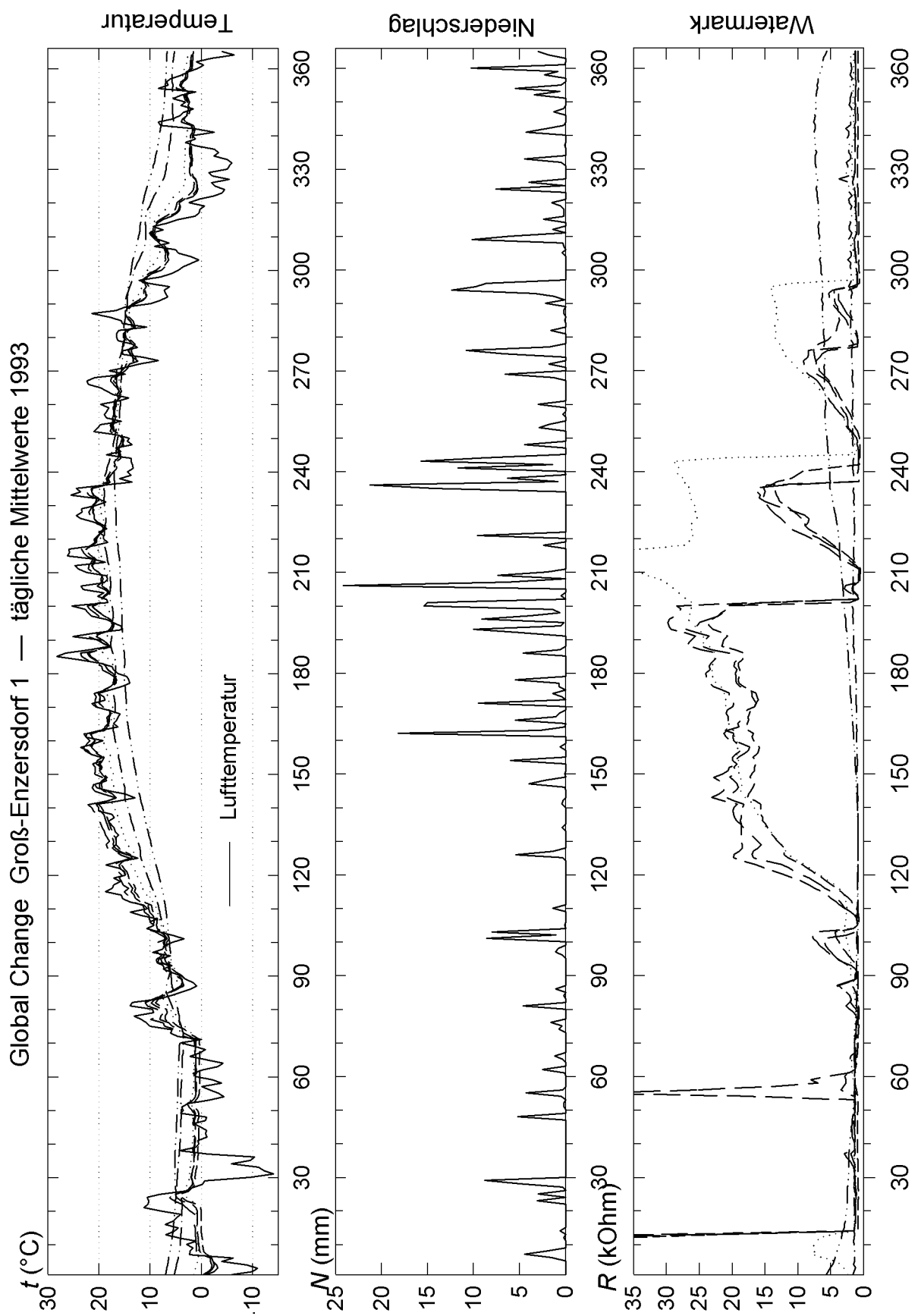
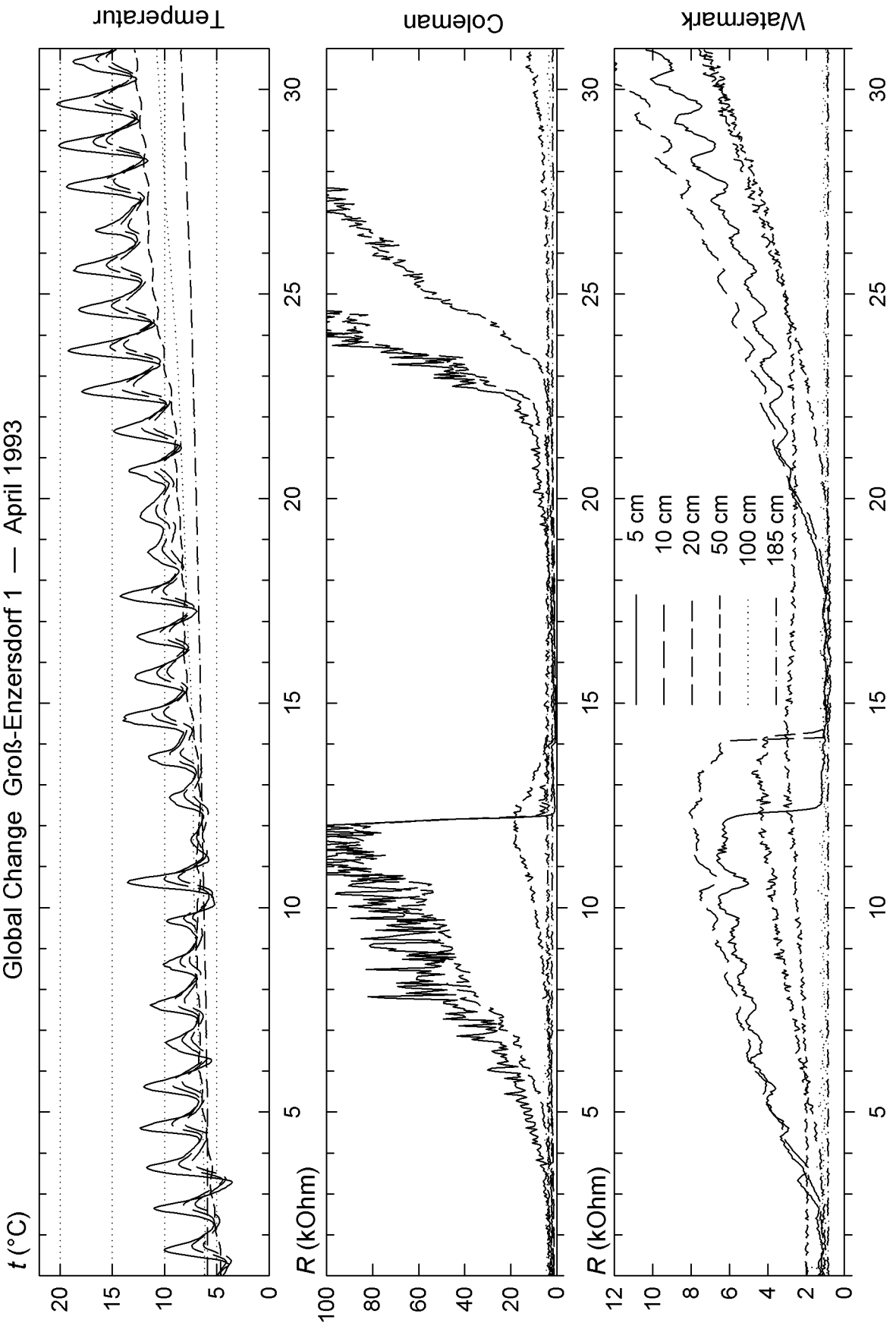


Abbildung 3-4: Tägliche Mittelwerte 1993

Global Change Groß-Enzersdorf 1 — April 1993



dpi

Abbildung 3-5: April 1993

Aus der Temperatureaufzeichnung ist sehr deutlich der Jahresgang und die Dämpfung der Amplitude bei zunehmender Tiefe, besonders der täglichen Schwankungen, ersichtlich. Zu Beginn des Jahres zeigen die oberen Temperatursensoren negative Werte an. Auch ohne Umrechnung der gemessenen Widerstände in Wasserspannungen ist bereits eine Aussage über Veränderungen im Bodenwasserregime möglich. Nach ca. drei Monaten beginnt eine längere Austrocknungsphase, die durch größere Niederschlagsereignisse kurz nach Jahresmitte beendet wird. Die Niederschläge zeigen eine deutliche Wirkung bis in eine Tiefe von 20 cm; in 50 cm tritt der Einfluss verzögert und weniger stark auf. Die unteren Sensoren reagieren nicht. Erst das zweite größere Niederschlagsereignis dringt bis in eine Tiefe von 50 cm vor. Im letzten Drittel folgt noch eine weniger stark ausgeprägte Austrocknung, bis schließlich wieder alle Sensoren einen geringen Widerstand, dies entspricht einem hohen Wasseranteil, zeigen. Die hohen Widerstandswerte zu Beginn sind das Resultat des Einfrierens der Sensoren in den oberen Schichten (Eis verhält sich wie ein Isolator). Die Sensoren begannen nach dem Auftauen wieder zu arbeiten und überstanden bereits ein mehrfaches Einfrieren.

Zur Veranschaulichung der täglichen Schwankungen sind in der zweiten Abbildung die stündlich aufgezeichneten Messwerte für den Monat April dargestellt. Die täglichen Temperaturschwankungen sind in den tiefen Bereichen nicht mehr erkennbar. Auch die Widerstandswerte zeigen den Temperatureinfluss in spiegelbildlicher Form. Höhere Temperaturen bewirken einen geringeren Widerstand.

Obwohl von vielen Herstellerfirmen Kalibrierkurven für die Sensoren mitgeliefert werden, ist es doch meist zweckmäßig, die Sensoren selbst zu kalibrieren. Die Kalibrierung der Blocksensoren erfolgt im Drucktopf. Dabei wird eine Beziehung zwischen dem Widerstand und der Wasserspannung – dem eigentlichen bodenrelevanten Parameter – hergestellt. In der Abbildung 3-6 wurden die gemessenen Wertepaare mit einer hyperbolischen Funktion ausgeglichen. Mit Hilfe der Felddaten konnte zusätzlich eine Temperaturkompensation eingeführt werden [LOISKANDL et al., 1996].

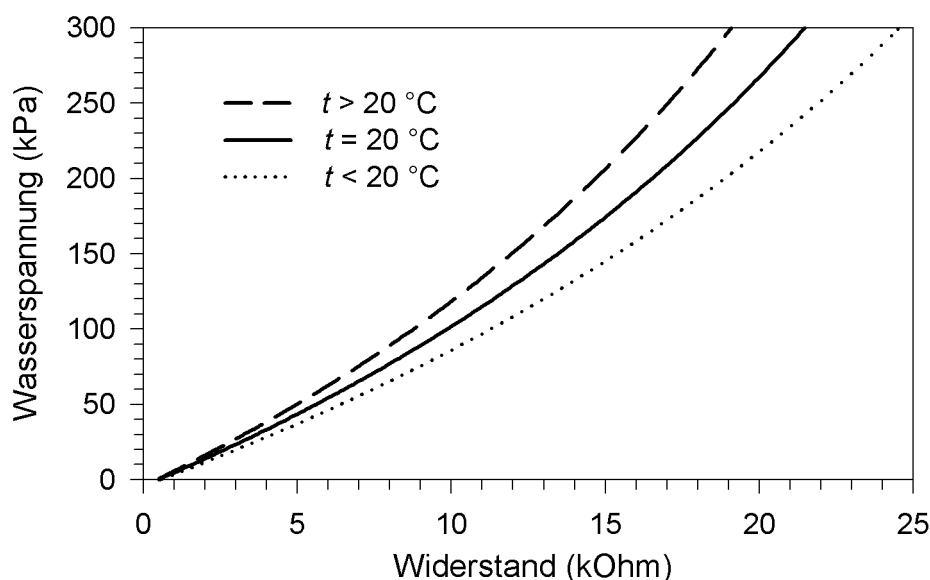


Abbildung 3-6: Kalibrierkurven für einen Blocksensor bei unterschiedlichen Temperaturen

Die Abhängigkeit der Wasserspannung vom Widerstand und von der Temperatur lässt sich durch folgenden funktionalen Zusammenhang beschreiben:

$$y = \frac{-4,13 + 8,76 \cdot R \cdot (1 + 0,025 \cdot \Delta t)}{1 - 0,018 \cdot R \cdot (1 + 0,025 \cdot \Delta t)} \quad (3-1)$$

[R] = kOhm Widerstand
 [Δf] = °C Differenz zwischen kalibrierter und gemessener Temperatur
 [ψ] = kPa Wasserspannung

Der Effekt der Temperaturkompensation auf die Messwerte wird durch den Vergleich der kompensierten mit den unkompensierten Wasserspannungswerten aufgezeigt.

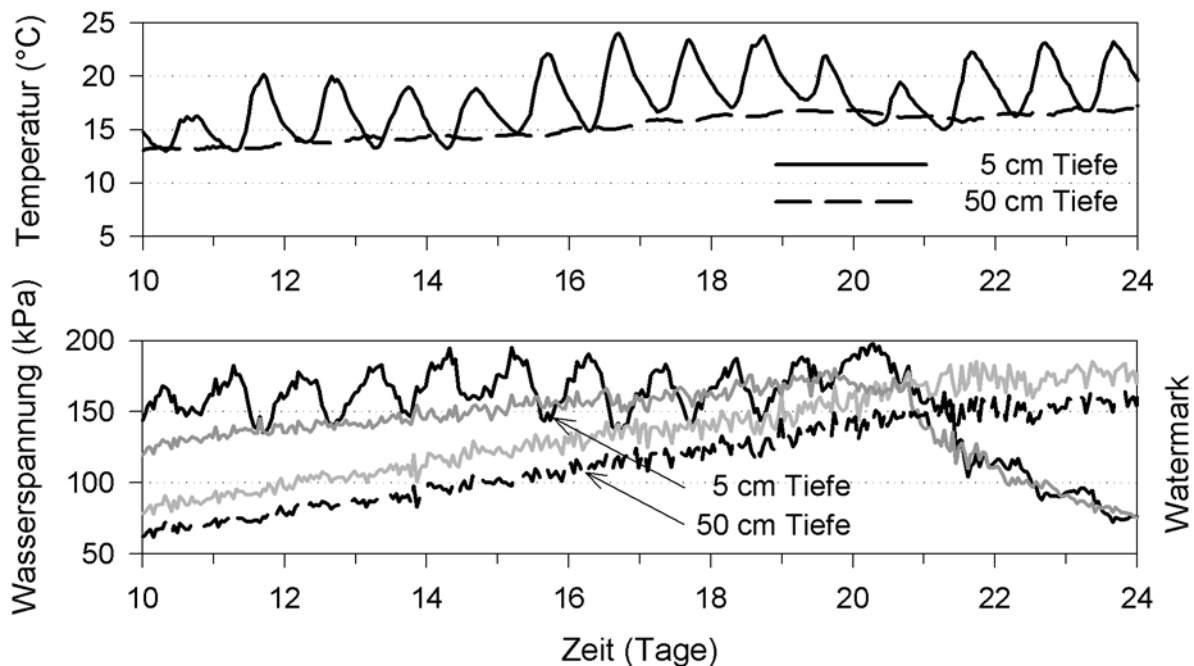


Abbildung 3-7: temperaturkompensierte Messwerte

3.2 Einfluss wasserkonservierender Maßnahmen

Standort: Klosterneuburg
 Sensoren: Gipsblöcke, Temperatursensoren
 Beobachtungszeitraum: 1991, 1992

Die Änderung des Widerstandes (Wasserspannung) ist, wie bereits ausgeführt, ein Indikator für die Änderung des Wasseranteiles. Damit ein Bezug zwischen dem Widerstand und dem Wassergehalt hergestellt werden kann, ist eine Wasserspannung-Wasseranteil-Beziehung notwendig. Eine Feldkalibrierung, d. h. die Erstellung einer direkten Beziehung Widerstand – Wasseranteil, ist in situ möglich, wenn der Wassergehalt mehrmals gemessen wird, z. B. durch Entnahme von Bodenproben (gravimetrische Bestimmung) oder durch TDR-Messungen etc..

Als Beispiel ist die Änderung des Bodenwassers in einem Weingarten während der Vegetationsphase 1991 für zwei verschiedene Oberflächengestaltungen, ohne Bodenbede-

ckung und mit Strohabdeckung, dargestellt. Die Abbildung zeigt die täglichen Werte des Bodenwassers in der Wurzelzone (0–70 cm). Für die Interpretation der Bodenschutzmaßnahme sind die relativen Werte ausreichend. Für die Beurteilung der absoluten Werte ist zusätzlich die Feldkapazität und der permanente Welkepunkt notwendig. Für den Monat Juli ist auch der Temperaturverlauf nahe der Bodenoberfläche (ca. 5 cm) im Vergleich zur Lufttemperatur unter den gleichen Bedingungen aufgezeichnet [LOISKANDL und KLIK, 1994].

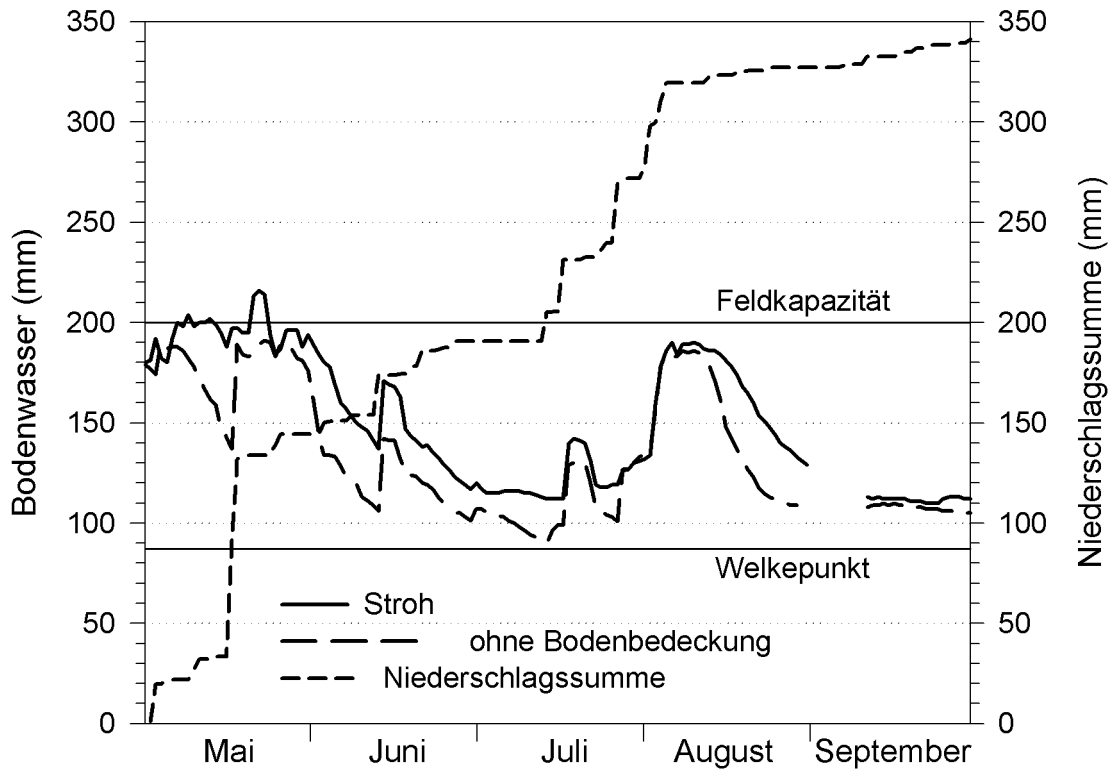


Abbildung 3-8: Bodenwasser in der Wurzelzone und akkumulierter Niederschlag für die Vegetationsperiode 1991

Der Bodenwassergehalt liegt für beide Plots zu Beginn der Wachstumsperiode nahe der Feldkapazität. Im Mai verringert sich das gespeicherte Bodenwasser, wenn keine Bodenbedeckung vorhanden ist; durch die Strohabdeckung wird die Evaporation nahezu unterbunden (keine Transpiration). Mit dem Einsetzen der Transpiration durch die Pflanzen sinkt der Wasseranteil für beide Plots. Die unterschiedlichen Steigungen sind das Ergebnis der reduzierten Evaporation durch die Strohabdeckung. Im Juli sind die Linien annähernd parallel, d. h. die Transpiration dominiert. Es konnte gezeigt werden, dass durch die Strohabdeckung mehr Wasser für die Pflanzen zur Verfügung steht.

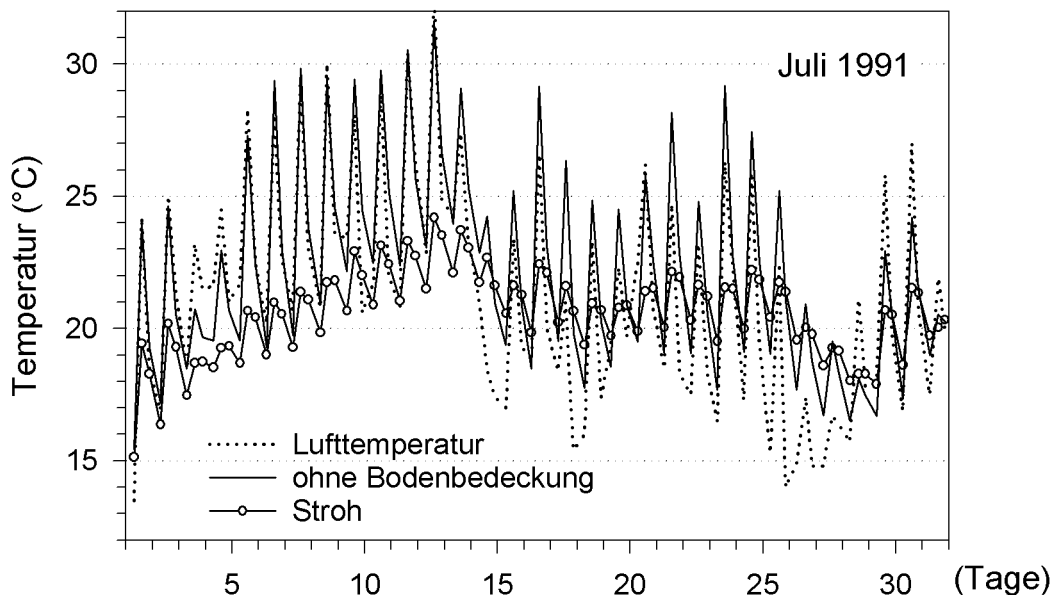


Abbildung 3-9: Bodentemperatur in 5 cm Tiefe im Vergleich zur Lufttemperatur

3.3 Wasserbilanzstudie einer Rindendeponie

Standort: Nähe Amstetten
 Sensoren: Block-, Temperatur- und kapazitive Sensoren
 Beobachtungszeit: 1994/1995

Die Wasserbilanzstudie verfolgte den Zweck, das Gefahrenpotenzial einer Rindendeponie für das Grundwasser abzuschätzen. Die Untersuchung stützte sich auf Feldmessungen und Simulationen [LOISKANDL et al., 1997]. Durch die Simulation konnte mit nur einer Feldmessstation das Auslangen gefunden werden. Die beobachteten Änderungen des Wasseranteiles fungieren als Inputdaten für die Simulation und dienen der Kalibrierung. Das kalibrierte Simulationsmodell erlaubt die Untersuchung unterschiedlicher Szenarien, wie Variationen des Bodenprofils, des k -Wertes und der Pflanzenfaktoren.

Das Bodenprofil ist aus einer Abdeckschicht und einer darunter liegenden Schicht, bestehend aus Rindenabfällen und groben Bodenanteilen, zusammengesetzt. Die untere Schicht weist einen dementsprechend hohen organischen Anteil auf.

Blocksensoren konnten bloß in der Abdeckschicht eingebaut werden, da nur dort ein guter Bodenkontakt möglich ist. Sie wurden sternförmig um die Datenerfassungsanlage angeordnet, jeweils nahe der Oberfläche und nahe der Grenze zur unteren Schicht. Sie sollten einen Aufschluss darüber gestatten, wie sich die Unterschiede in der Deckschicht auswirken. Fallweise wurden in dieser Schicht Vergleichsmessungen mit TDR-Sonden vorgenommen. Im groben Material konnten nur kapazitive Sensoren verwendet werden. Die folgende Systemskizze (Abbildung 3-10) zeigt den zweischichtigen Aufbau des Bodenprofils und die Lage der Sensoren.

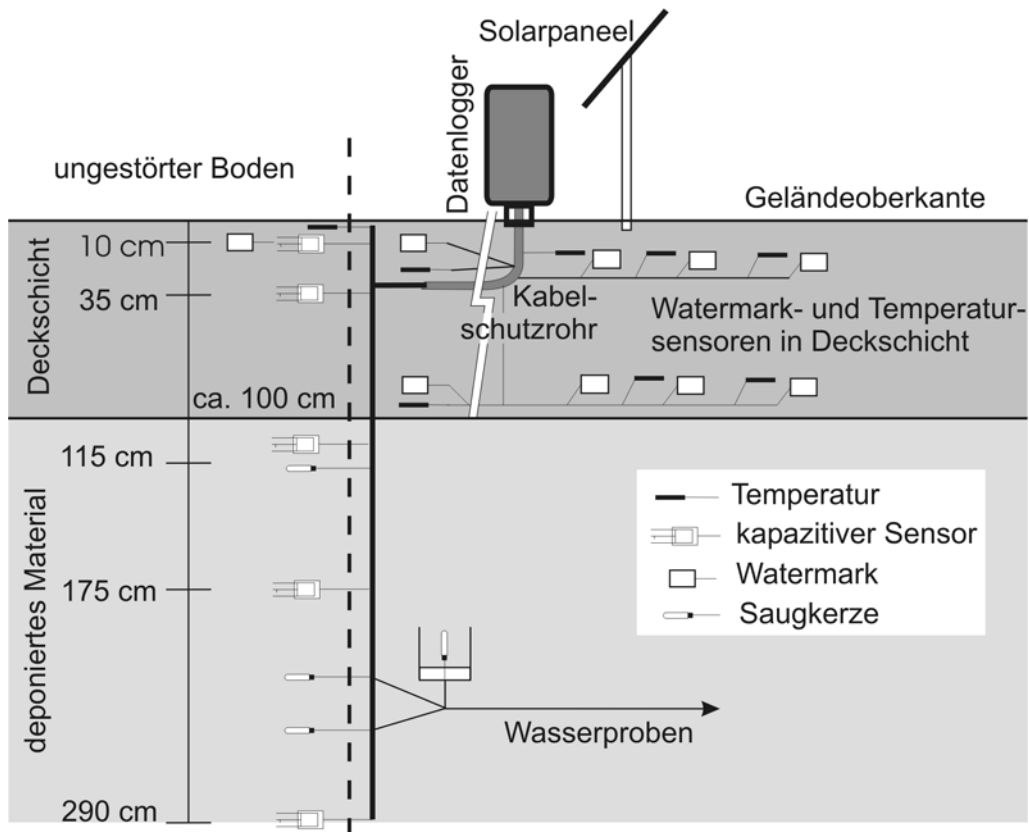


Abbildung 3-10: Aufbau der Feldmessstelle

Bei dieser Studie wurde der kapazitive Punktsensor Hydra Probe der seinerzeitigen Firma VITEL (mittlerweile von der Firma Stevens ® Water Monitoring Systems übernommen) zur Erfassung des Wassergehaltes verwendet. Die Besonderheit dieses Sensors besteht darin, dass nicht nur die Kapazität, sondern auch die elektrische Leitfähigkeit im Bereich des elektrischen Feldes gemessen wird und damit die gesamte relative komplexe Dielektrizitätskonstante ϵ_r erfasst wird; überdies wird die Temperatur im Sensorkopf gemessen. Die Bestimmung des Wasseranteils θ beruht dabei nur auf dem temperaturkompensierten Realteil von ϵ_r . Als Modell für die Beziehung zwischen diesem und θ verwendet die Erzeugerfirma ein kubisches Polynom und stellt eine eigene Umrechnungs-Software zur Verfügung, die je nach der Bodenart drei verschiedene Parametersätze anbietet. Im gegenständlichen Fall bedingte jedoch der hohe organische Anteil eine eigene Ermittlung der Polynomkoeffizienten in der Kalibrierfunktion

$$\hat{\theta} = a_0 + a_1 \cdot \epsilon_r + a_2 \cdot \epsilon_r^2 + a_3 \cdot \epsilon_r^3. \quad (3-2)$$

$[\hat{\theta}]$ = $\text{cm}^3 \cdot \text{cm}^{-3}$ Wasseranteil gemäß Modellbeziehung

$[\epsilon_r]$ = dim.los temperaturkompensierter Realteil der komplexen relativen Dielektrizitätskonstanten (siehe Anhang Kapitel 7.2.9)

a_{0-3} = dim.los Polynomkoeffizienten (4 Werte pro Parametersatz)

Für die Eichung des Sensors wurde ein Austrocknungsversuch im Labor durchgeführt und dabei der zeitliche Verlauf des Wasseranteils θ in der Probe durch Wiegen bestimmt und das Messsignal für ϵ_r des Hydra-Probe-Sensors aufgezeichnet. An die diskreten Wertepaare $\epsilon_r(t_i) / \theta(t_i)$ wurden die vier Koeffizienten des kubischen Polynoms mit der gewöhnlichen Fehlerquadratmethode angepasst und damit die Kalibrierfunktion für das gegenständliche Bodenmaterial gewonnen, die in der Abbildung 3-11 dargestellt ist. Zum Ver-

gleich wurden auch die drei von der Herstellerfirma verwendeten Standard-Funktionen eingetragen.

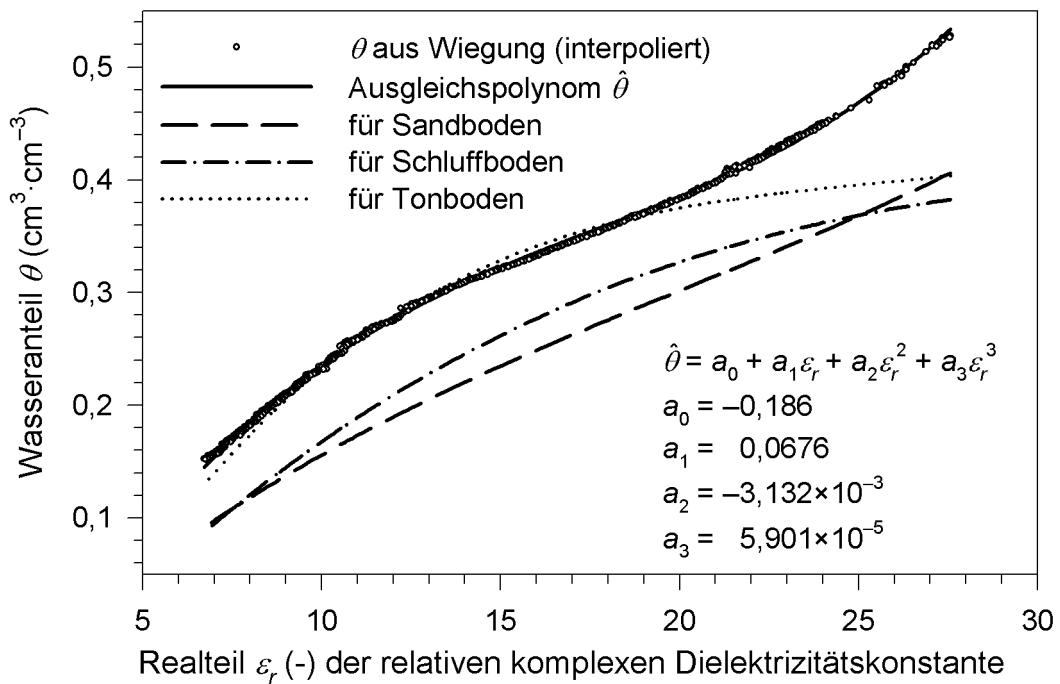


Abbildung 3-11: angepasste Kalibrierfunktion und Standard-Funktionen für den Hydra-Probe-Sensor

Der zeitliche Verlauf des Austrocknungsversuches ist in der Abbildung 3-12 ersichtlich. Das Messergebnis, das sich unter Verwendung der von der Firma bereitgestellten Software ergibt, ist bei hoher Sättigung unbrauchbar. Unter einem Wasseranteil von 0,4 würde die Standard-Umrechnungsfunktion für Tonboden einen akzeptablen Fehler ergeben.

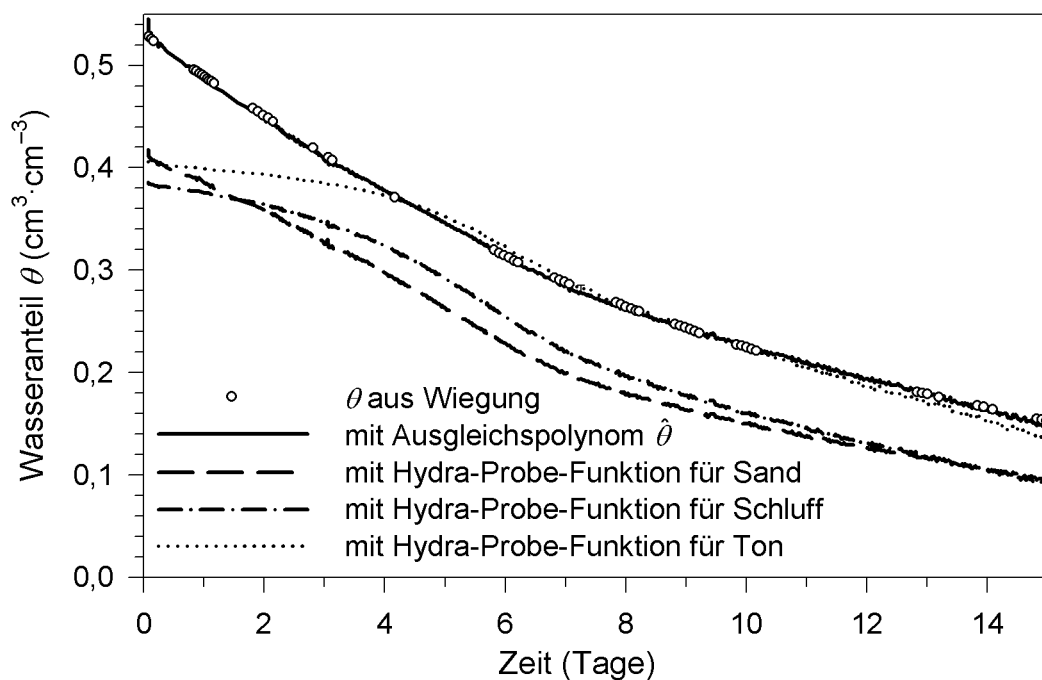


Abbildung 3-12: zeitlicher Wassergehaltsverlauf (Austrocknung) bei Verwendung vorgegebener und selbst ermittelter Eichfunktionen

Für den Beobachtungszeitraum im Feld ist die Messung des Wasseranteiles in den fünf Tiefen dargestellt. Auffällig sind die relativ konstanten Werte über den ganzen Zeitraum. Nur im Sommer ist in der Deckschicht eine Abnahme zu beobachten.

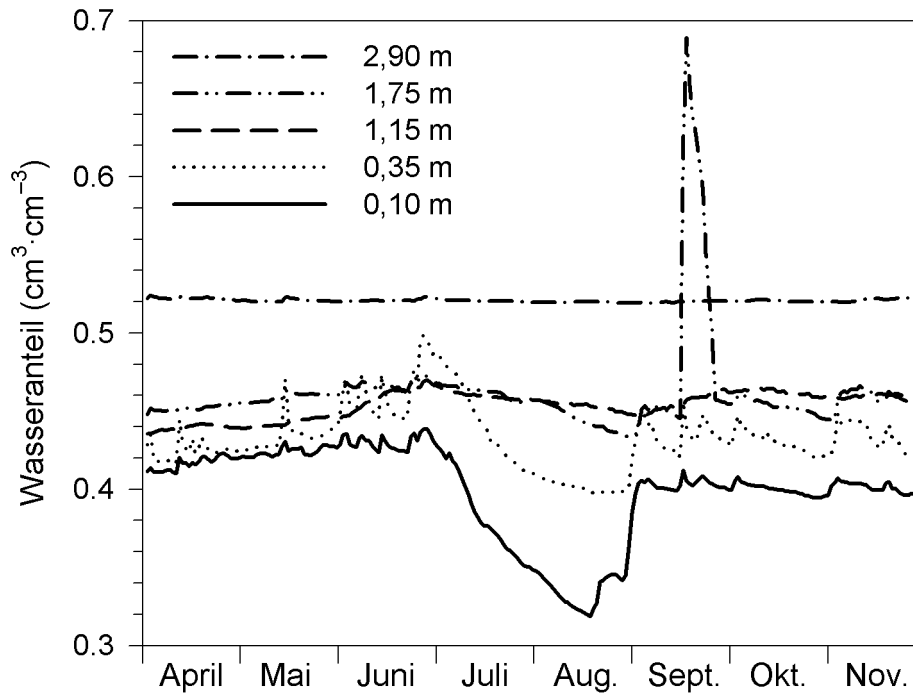


Abbildung 3-13: Gemessener und simulierter zeitlicher Verlauf (April bis November 1995) des Wassergehaltes in mehreren Tiefen

Die gemessene Wasserverteilung konnte mit der Simulation für fast alle Sensoren gut nachgebildet werden. Lediglich am unteren Rand der Deckschicht waren größere Abweichungen zu beobachten, die Tendenz wurde jedoch gewahrt. Begründungen liegen in der Diskretisierung, der k -Wert-Abschätzung und im Niederschlag, der nicht vor Ort gemessen, sondern von der nächstliegenden meteorologischen Station übernommen wurde.

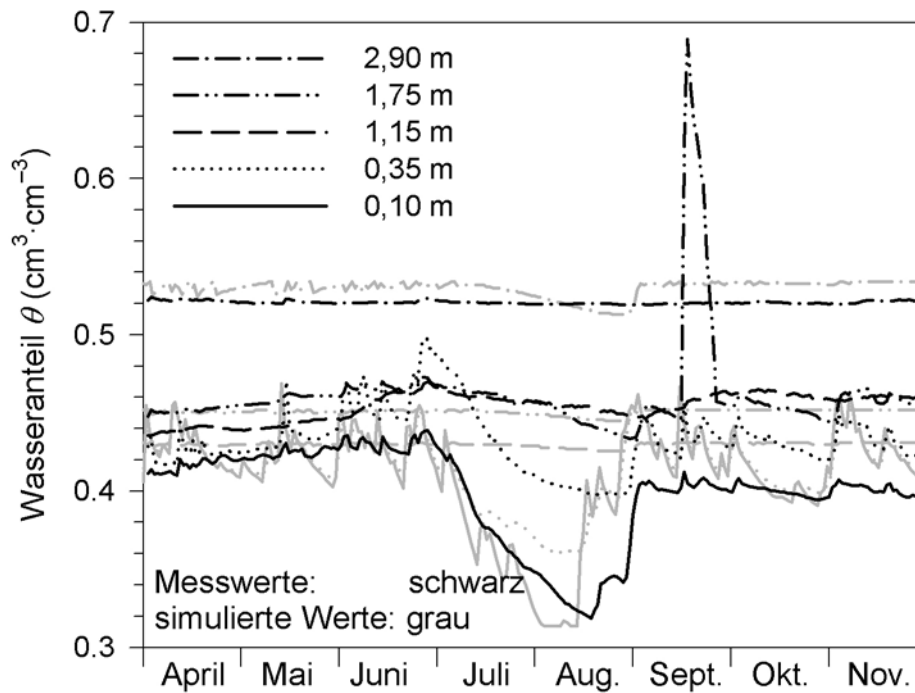


Abbildung 3-14: Vergleich gemessener mit den simulierten Werten

Mit Hilfe des kalibrierten Simulationsmodells wurde die Wasserbilanz erstellt. Der Summenwert des Niederschlages wurde der Ausflusssumme gegenübergestellt. Zusätzlich ist die Ausflussverteilung eingetragen.

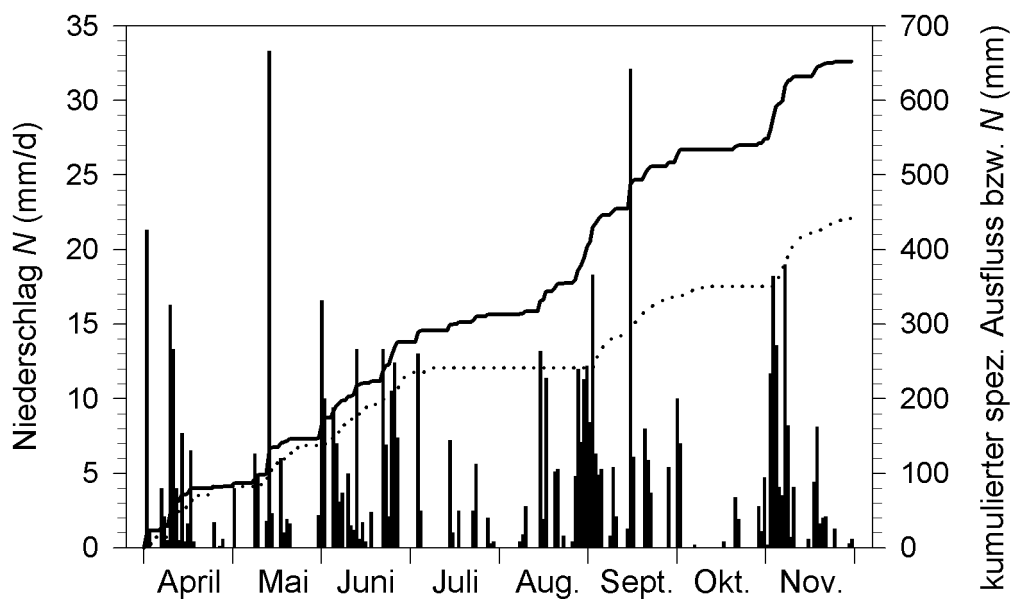


Abbildung 3-15: Ausflussmenge (unterer Rand – Bodenprofil) und Niederschlag

Ein weiteres Beispiel ist das Ergebnis am Ende der Simulation für zwei unterschiedliche Deckschichtmächtigkeiten. Ein Oberflächenabfluss (Runoff) tritt auf Grund der ebenen, rauen Geländebeziehungen nicht auf. Die Infiltration muss damit gleich sein der Summe aus Ausfluss (Leachate) + Evaporation + Transpiration + Wassergehaltsänderung. Der Term „Check“ stellt das Restglied und somit die Qualität der Massenbilanz dar.

Tabelle 3-1: Massenbilanz am Ende der Simulation

Mächtigkeit der Deckschicht	1,0 m	0,5 m
	kumulierter Fluss $\times 10^{-3}$ (m ³ /m ²)	
kumulierte Infiltration	652,6	
kumulierter Oberflächenabfluss	0,2	
kumul. Ausfluss in der Profilunterkante	441,9	420,4
kumulierte Evaporation	75,2	83,8
kumulierte Transpiration	136,3	146,1
Änderung des Profilwassergehaltes	3,3	0,8
Check	-4,1	1,4

Zur Erklärung der geringeren Ausflussrate bei einer dünneren Deckschicht wurden die Flüsse nahe der Deckschicht berechnet. In den Abbildungen ist klar ersichtlich, dass in den Sommermonaten bei der geringeren Deckschicht eine größere Aufwärtsbewegung vorhanden ist.

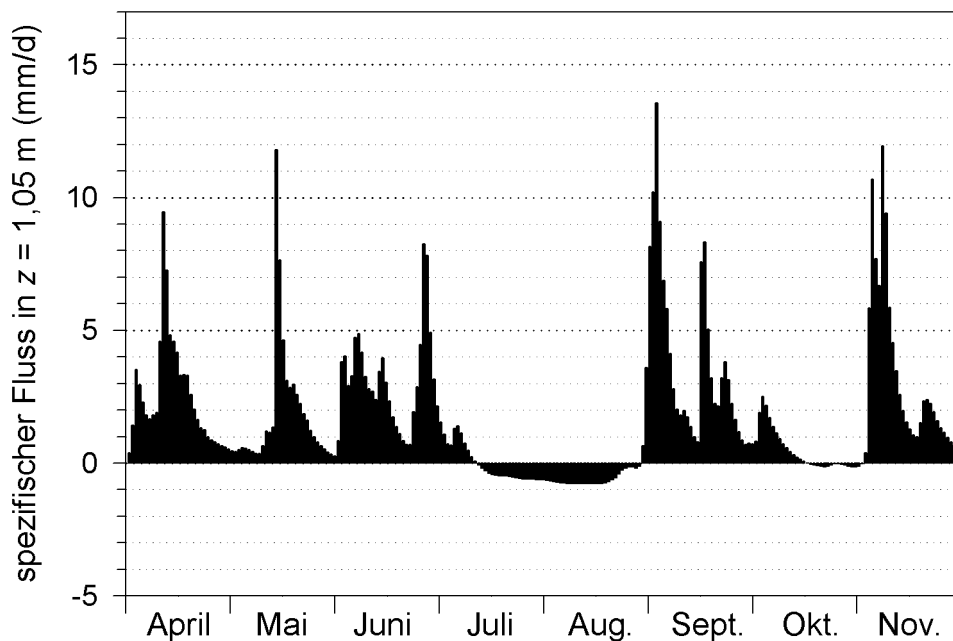


Abbildung 3-16: Fluss durch die Unterkante bei einer Mächtigkeit der oberen Schicht von 1,0 m

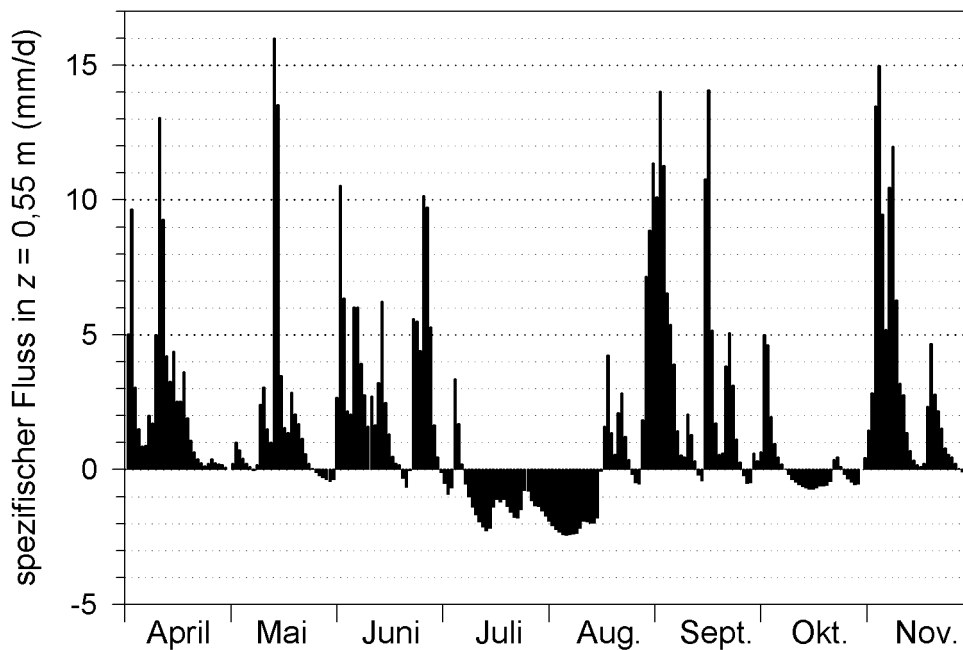


Abbildung 3-17: Fluss durch die Unterkante bei einer Mächtigkeit der oberen Schicht von 0,5 m

3.4 Kostenvergleich unterschiedlicher Sensoren

In den Feldanwendungen wurden verschiedenste Sensoren eingesetzt. Als grobe Richtlinie dafür, welche der sehr unterschiedlichen Sensoren man für einen bestimmten Einsatzzweck verwenden sollte, möge ein Vergleich der Kosten und der erzielbaren Genauigkeit dienen, wobei jeweils die gleiche Datenerfassungsanlage verwendet wird [LOISKANDL et al., 1996].

Anzumerken ist, dass Blocksensoren zwar kein Ersatz für technisch anspruchsvollere Sensoren sind, aber für bestimmte Anwendungen (z. B. Bewässerungsmanagement) ausreichende Information liefern können.

Tabelle 3-2: Kostenvergleich unterschiedlicher Sensoren

Sensortyp	relativer Preis	Genauigkeit
I. Blocksensor	1	±5–10 %
II. kapazitiver Sensor	10	±3 %
III. TDR	60	±2 %

4. SIMULATION DER WASSERBEWEGUNG UND DES STOFF-TRANSPORTES IM UNGESÄTTIGTEN BODEN

4.1 Simulationskonzept

Im Bewusstsein, dass eine Definition des Begriffes "Modell" sehr vielfältig ausfallen kann, wird zur Erreichung einer möglichst klaren Verständigungsebene den weiteren Ausführungen eine Standortbestimmung vorangestellt.

Meist unbewusst werden im täglichen Leben in Form unserer Vorstellungen ständig Modelle als Abbildungen der Wirklichkeit entwickelt. Der entscheidende Schritt ins Bewusstsein erfolgt dann, wenn die Notwendigkeit auftritt, diese Vorstellung zu Papier zu bringen, zum Beispiel im technisch-naturwissenschaftlichen Bereich eine mathematisch/physikalische Beschreibung zu finden. Die generellen Trends erscheinen oft klar, während Details schwerer vorherzusagen sind. Die Problemlösung kann in drei Komponenten gegliedert werden [KREYSZIG, 1988]:

- 1) *Modellierung*: Übersetzung der physikalischen, oder auch einer anderen, Information in eine mathematische Form. Dabei erfolgt eine Abstrahierung der Wirklichkeit und ein Versuch einer Reduktion auf das Wesentliche. Eine erfolgreiche Reduktion ist vielleicht die erfolgreichste Form aller wissenschaftlichen Erklärungen, die man sich vorstellen kann, da sie leistet, was MEYERSON (zitiert von POPPER [1994]) besonders hervorgehoben hat: die Identifikation des Unbekannten mit dem Bekannten. Im Gegensatz zu einer Reduktion macht die Erklärung mit Hilfe einer neuen Theorie das Bekannte – das bekannte Problem – durch etwas Unbekanntes klar: eine neue Vermutung [POPPER, 1994].
- 2) *Lösung*: Auswahl und Anwendung passender mathematischer Methoden zur Lösung des aufgestellten Modells, meist ist dies mit dem Einsatz eines Computers verbunden.
- 3) *Interpretation*: Erklärung des Zusammenhanges der mathematischen Lösung in Bezug zum ursprünglichen, meist physikalischen Problem.

Konkret werden nun festgelegt:

- a) Modelle im engeren Sinn: Modelle (Software), die ein Werkzeug für die Simulation bestimmter Aufgaben liefern, werden demzufolge als Simulationswerkzeug (Tool) bezeichnet. Sie stellen die Modellierung und die mathematische Lösung des Problems zur Verfügung.
- b) Modelle im weiteren Sinn: Anwendung eines Werkzeuges auf konkrete Fragestellungen mit realen Daten, kurz Simulationsmodelle. Die Resultate liefern die Voraussetzung für die Interpretation des betrachteten Modells.

Der Zusatz „Simulation“ weist jeweils auf die direkte Beziehung zur Anwendung hin. Im Fall a) ist zumindest teilweise Programmierarbeit erforderlich, für b) ist die Bereitstellung von Daten und diversen Anweisungen (z. B. grafische Ausgabe am Ende eines definierten Zeitpunktes etc.) ausreichend. Für eine konkrete Fragestellung können demzufolge diverse Entscheidungsebenen postuliert werden:

- a) es ist bereits eine Software vorhanden

- b) es steht eine Software (Computercode) zur Verfügung, die an die gegebenen Bedingungen anpassbar ist
- c) es bleibt als einzige Alternative die komplette Erstellung eines Programms (Software) von der Umsetzung der mathematisch/physikalischen Grundlagen bis hin zur eigentlichen Anwendung (Simulationsmodell)

Unabhängig davon, auf welcher Ebene mit der Modellerstellung begonnen wird, ist die Kenntnis der mathematischen/physikalischen Grundlagen zur Interpretation der Ergebnisse eine wesentliche Voraussetzung für die Modellanwendung. Nur dadurch können Fehler richtig eingeordnet werden.

Durch die Modellierung sind wir in der Lage, die Konsequenzen der menschlichen Interventionen aufzuzeigen, wobei prinzipiell kein Unterschied zwischen vergangenen und zukünftigen Handlungen besteht. Durch die Verwendung eines numerischen Modells fungieren die Zahlen als Ausdrucksmittel der physikalischen Gesetze [ABBOTT, 1990], die sich im konkreten Fall auf die Bewegung des Wassers im Boden und die damit verbundenen Prozesse (z. B. den Stofftransport) beziehen.

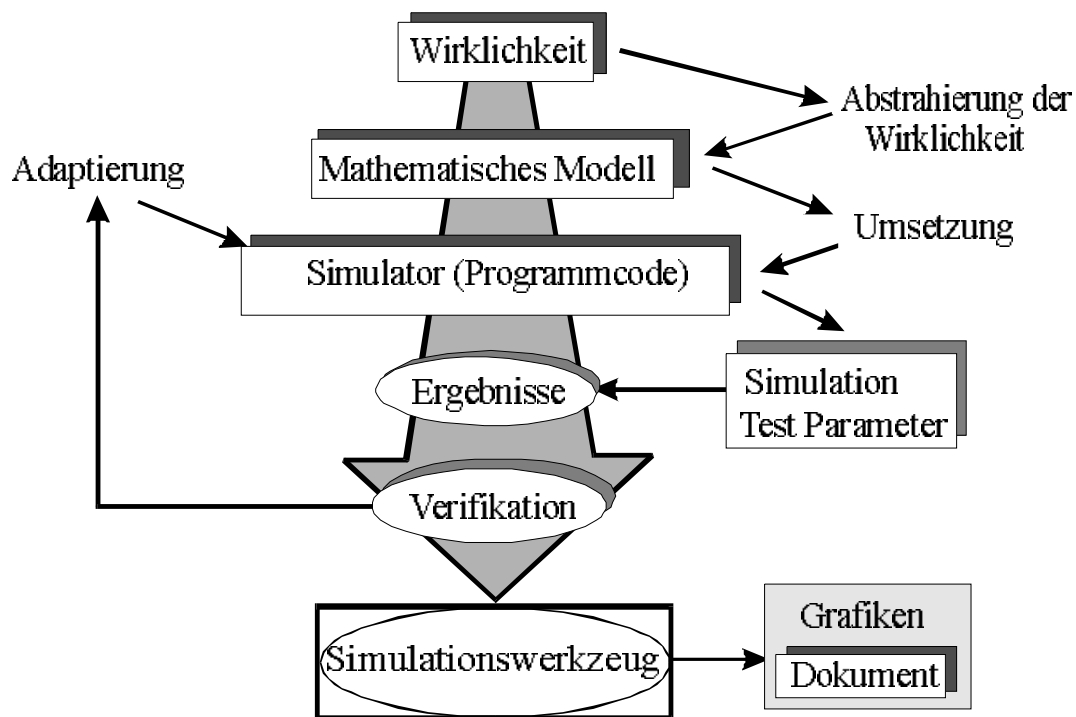


Abbildung 4-1: Modellentwicklung

4.1.1 Simulationswerkzeug

Die Erstellung eines naturwissenschaftlich-technischen Simulationswerkzeuges erfolgt, entsprechend der vorangestellten Komponenten der Problemlösung, mehr oder weniger nach dem gleichen Schema. Der erste Schritt ist die Entwicklung eines die Problemstellung beschreibenden mathematischen Modells (z. B. das Aufstellen einer Differentialgleichung, eines Gleichungssystems oder allgemein die Einführung mathematischer Ausdrücke). Die Umsetzung des mathematischen Modells in ein Simulationsprogramm kann mit Hilfe unterschiedlicher Methoden realisiert werden; dieser Schritt ist meist durch sehr umfangreiche Programmierarbeit gekennzeichnet. Für die praktische Anwendung unumgänglich ist die Verifikation durch Simulationsläufe mit geeigneten Testparametern.

tern. Am Ende steht hoffentlich ein Benutzerwerkzeug zur Verfügung. Die grafische Dokumentation ist nicht nur für das fertige Simulationswerkzeug von Bedeutung, sondern auch ein nicht mehr wegzudenkender Bestandteil der Programmerstellung.

Die Verwendung des Ausdruckes „Programmierarbeit“ weist auf die klassische Methode der Erstellung eines Computerprogramms in einer der gängigen Programmiersprachen (BASIC, PASCAL, FORTRAN, C etc.) hin. Ständig an Bedeutung gewinnen die sogenannten *höheren Programmiersprachen* (HPL = higher programming language), wie ACSL, MATHEMATICA, MATLAB, SIMULINK, SIMUL_R etc., die Werkzeuge zur Erstellung von Werkzeugen darstellen. Die HPLs können somit der anfangs postulierten Entscheidungsebene b) zugeordnet werden. Vielfach wird damit geworben, dass keine Programmierarbeit mehr notwendig ist. Die Programmierarbeit im eigentlichen Sinn tritt sicher zurück, doch muss darauf verwiesen werden, dass auch die Erstellung von Befehlsstrukturen, Kommandozeilen, Verknüpfungen usw. nicht ohne die Aneignung von spezifischen Fertigkeiten vor sich geht. Mit anderen Worten, es muss wie jedes Werkzeug auch eine höhere Programmiersprache erlernt werden.

Partielle Differentialgleichungen sind das „Stiefkind“ der höheren Simulationssprachen. Sie können in den meisten HPLs nur nach Umwandlung in ein System gewöhnlicher Differentialgleichungen gelöst werden. Allerdings erlauben nur bestimmte partielle Differentialgleichungen eine derartige Umwandlung, wofür die sogenannten *Linienmethoden* eingesetzt werden können [BREITENECKER et al., 1993]. Es muß darauf hingewiesen werden, dass bei Anwendungen von Routinen zur Lösung partieller Differentialgleichungen die Kontrolle der Ergebnisse schwieriger ist als bei gewöhnlichen Differentialgleichungen [RATTAY, 1994].

Zum Begriff der *kontinuierlichen Simulation* ist anzumerken, dass dieser zwar mit der Beobachtung unseres natürlichen Umfeldes übereinstimmt, da die meisten in der Natur vorkommenden Prozesse kontinuierlich sind, d. h. im Raum und zu jedem Zeitpunkt definiert und messbar. Die Arbeitsweise eines Computers ist jedoch diskret, so dass dementsprechend physikalische Vorgänge nur diskret nachgebildet werden können. Sind aber die Zeitschritte klein genug wählbar und ist die Wiedergabe (z. B. auf einem Monitor) so rasch, dass ein zeitlich kontinuierlicher Bildeindruck entsteht, so wird vielfach der Begriff des kontinuierlichen Systems beibehalten [BOSEL, 1992]. Spielt die räumliche Verteilung für die Dynamik eines Systems keine Rolle, z. B. wenn der Druck in einem geschlossenen Gasbehälter an jeder Stelle als gleich groß angenommen werden kann, so ist ein raumdiskretes System gegeben. Ist die Verteilung von Systemgrößen im Raum und deren räumliche Dynamik für die Simulation von essentieller Bedeutung, z. B. bei der Grundwasserströmung, ist eine kontinuierliche Betrachtung angebracht.

Diskrete Systeme führen zu gewöhnlichen Differentialgleichungen. Sind die maßgeblichen physikalischen Größen kontinuierlich verteilt, entstehen partielle Differentialgleichungen. Man kann solche Systeme auch als Systeme mit unendlich vielen Freiheitsgraden auffassen [GROSS et al., 1993]. Die partiellen Differentialgleichungen können wiederum mit diskreten Verfahren gelöst werden.

Gedanken zur Simulationsanwendung

Im Leitfaden für Simulationsbenutzer in der Fertigung [BREITENECKER, 1988] sind die folgenden Gedanken, die durchaus auch für Simulationen im weiteren Sinn Bedeutung haben, unter dem Titel „Was Sie sich merken sollten“ zusammengefasst:

- Rechnergestützte Simulationsuntersuchungen bieten die Möglichkeit einer richtigen Dimensionierung und Steuerung der Produktionsmittel
- Simulation ist kein Ersatz für Planung
- Das Modell ist ein vereinfachtes Abbild der Realität
- Die Zusammenarbeit zwischen Planer und Simulationsexperten bestimmt den Erfolg
- Die Validierung ist immer notwendig, um die Qualität der Simulationsergebnisse zu überprüfen
- Experimentieren bedeutet nicht probieren
- Graphik allein ist noch kein Ergebnis; Simulation ist kein Videospiele
- Funktionalität lässt sich nicht „hinsimulieren“
- Hinreichend simuliert ist oft ausreichend simuliert
- Der Appetit kommt beim Essen

4.1.2 Numerische Methoden

Mit Hilfe eines Systems von partiellen Differentialgleichungen und den zugehörigen Rahmenbedingungen ist ein mathematisches Modell für den Stofftransport definiert. Die Rahmenbedingungen legen die Geometrie, Systemparameter, die Randbedingungen und bei instationären Strömungsvorgängen auch die Anfangsbedingungen fest.

Bevor die das Problem beschreibende mathematische Formulierung gelöst werden kann, muss die Methodik festgelegt werden. Entsprechend dem Ablaufschema der Modellentwicklung besteht zwischen dem den Strömungsvorgang beschreibenden mathematischen Modell und der Umsetzung in einen Programmcode eine sehr enge Verbindung.

Für die Umsetzung sind folgende Schritte erforderlich:

- a) Aufstellung der mathematischen Gleichungen
- b) Falls keine analytische Lösung der Gleichungen möglich ist, Umwandlung in eine numerisch lösbare Form; z. B. Aufstellung eines Gleichungssystems
- c) Bestimmung des Lösungsalgorithmus
- d) Wahl von Routinen für die Darstellung der Ergebnisse

Da analytische Lösungen im allgemeinen auf spezielle Probleme beschränkt sind, müssen meist numerische Methoden verwendet werden. Für eindimensionale Problemstellungen werden räumliche Stützstellen und bei instationären Aufgaben eine Zeitinkrementierung festgelegt. Bei zwei- und dreidimensionalen Aufgaben geschieht die räumliche Diskretisierung in Form eines Gitternetzes, das über das betrachtete Gebiet gelegt wird. Das Resultat ist jeweils ein Gleichungssystem, d. h. jedem Stützpunkt, in Raum und Zeit, ist eine spezifische Gleichung zugeordnet, die diesen mit den Nachbarpunkten in Beziehung setzt. Das lineare Gleichungssystem kann in Matrixform dargestellt werden als [GREENKORN, 1983]

$$[A] [x] = [B].$$

A.....Koeffizientenmatrix
xLösungsvektor
B.....rechte Seite

Traditionell sind die zwei gebräuchlichsten numerischen Ansätze die *Methode der finiten Differenzen (FDM)* und die *Methode der finiten Elemente (FEM)*. Eine Einführung in diese Berechnungsverfahren geben unter anderem PRICKETT [1975] und WANG und ANDERSON [1982]. Die Lite-

ratur zu diesem Thema ist eng an den Fortschritt der elektronischen Datenverarbeitung gebunden. Die rasante Entwicklung der EDV in den letzten Jahrzehnten führte zu einem dementsprechend umfangreichen Bibliotheksbestand. Für die FDM seien exemplarisch zur Vertiefung die Bücher von KITCHING et al. [1975], RUSHTON und REDSHAW [1979], SHYY [1994] und für die FEM die Standardwerke von ZIENKIEWICZ [1977] sowie PINDER und GRAY [1977] empfohlen. Zahlreiche Vergleiche der beiden Methoden wurden von DAVIS im Jahre 1975 publiziert (zitiert von RUSHTON und REDSHAW [1979]). Etwas später wurde als dritte Methode die *Boundary integral equation method (BEM)* [LIGGETT, 1977] entwickelt.

Wird nun die FDM betrachtet, so ist deren Zweck der Ersatz eines Differentialoperators durch einen Differenzenoperator, d. h. kontinuierliche Verteilungen werden durch diskrete Stützstellenwerte beschrieben. Ebenso wird die Zeit in diskrete Schritte geteilt. Durch Sorgfalt können die daraus resultierenden Fehler vernachlässigbar klein gehalten werden [RUSHTON und REDSHAW, 1979]. Variable Parameter und zeitabhängige Einflüsse sind leicht integrierbar. Für die FDM existieren zahlreiche Lösungsansätze [VERWEY, 1988], die mehr oder weniger schwer aufzustellen sind.

Für die Feststellung der Tauglichkeit eines Schemas sind verschiedene Kriterien ausschlaggebend [SHYY, 1994]. Diese Kriterien betreffen:

- a) Den formalen Zusammenhang des Differenzenoperators mit dem Differentialoperator, ausgedrückt durch die Konsistenz und die Konvergenz.

Konsistenz: Der Differenzenoperator geht für $\Delta x \rightarrow 0$ in den Differentialoperator über.

$$\frac{\partial f}{\partial x} = \lim_{\Delta x \rightarrow 0} \frac{f(x + \Delta x) - f(x)}{\Delta x} \quad (4-1)$$

Konvergenz: Der Finite-Differenzen-Ansatz nähert sich der exakten Differentialgleichung im Grenzwert für $x \rightarrow 0$ an.

- b) Die **Stabilität**, d. h. die Frage, ob die Lösung für $t \rightarrow \infty$ einen Grenzwert hat; wobei t entweder die physikalische Zeit (Anfangswertproblem) oder die Anzahl der benötigten Iterationsschritte (Randwertaufgabe) repräsentiert.
- c) Die **Genauigkeit**, nicht zuletzt in Hinblick auf den erforderlichen Rechenaufwand. Die Genauigkeit wird oft in Abhängigkeit von den Diskretisierungselementen (z. B. Δx , Δy , Δt) als Größenordnung $O(\Delta x, \Delta t)$ definiert.

Die wesentliche Idee der Finite-Elemente-Methode beruht darauf, anstelle eines Näherungsverfahrens für das gesamte Gebiet Näherungsansätze zu wählen, von denen die Lösung nur in Teilbereichen abhängig ist. Üblicherweise berechnet man bei der FEM zunächst die zu einem Element gehörigen Matrizen. Diese baut man dann so zu einem globalen Gleichungssystem zusammen, dass die Kompatibilität (geometrische Verträglichkeit) über ein Element hinaus gewährleistet ist. Die Vorgehensweise ist im folgenden Ablauf zusammengestellt [GROSS et al., 1993]:

- Wahl von Ansatzfunktionen, die den Stetigkeitsanforderungen der Variationsaufgabe für ein Element genügen
- Berechnung der zum Problem gehörenden Matrizen mit den gewählten Ansätzen
- Zusammenbau der Matrizen unter Beachtung der Kompatibilität
- Lösung des Gleichungssystems

Die ersten beiden Punkte hängen direkt mit der Problemstellung zusammen. Die folgenden Punkte können vollständig von der speziellen Problemstellung getrennt werden und sind daher in von der Aufgabenstellung unabhängigen Programmteilen realisierbar.

Aus dem vorhin Gesagten folgt, dass wie bei der FD-Methode auch bei der FE-Methode das zu untersuchende Strömungsgebiet räumlich und bei Bedarf zeitlich diskretisiert wird. Die dabei entstehenden Teilgebiete, die Elemente, können im ebenen Fall Dreiecke oder Vierecke sein. Auch krummlinige Ränder können vorgesehen werden. Die Begrenzungslinien der Elemente bilden das Elementnetz. In den Schnittpunkten der Begrenzungslinien, bei bestimmten Elementtypen auch in zusätzlichen (Rand)punkten, befinden sich die Knoten, die einen oder mehrere Freiheitsgrade aufweisen (z. B. den Potenzialwert selbst, dessen Ableitung in x - oder y -Richtung usw.). Diesen sind die Stützwerte zuzuordnen, die letztlich die gesuchte Lösung bilden und z. B. im zweidimensionalen Fall eine Oberfläche aufspannen.

Die den Strömungsvorgang beschreibende Gleichung wird durch eine bekannte Funktion angenähert. Diese Näherungsfunktion stellt eine endliche Reihe dar, deren n knotenbezogene Einzelglieder Produkte aus einem Parameter und einer Ansatzfunktion sind. Die Parameter entsprechen dabei den Stützwerten. Sie sind so zu bestimmen, dass die beherrschende Gleichung und die Randbedingungen möglichst gut eingehalten werden bzw. dass die über das ganze Gebiet aufsummierten, gewichteten Fehler möglichst klein werden. Je nach Vereinbarung – ob Abweichungen von der beherrschenden Gleichung, von den Randbedingungen oder von beiden auftreten dürfen – spricht man von der Gebietsmethode (der die meisten FEM-Versionen zuzuordnen sind), der Randmethode (hierzu zählt in erster Linie die “Boundary integral equation method” BEM) oder der gemischten Methode. An mathematischen Prozessen, die die Näherungsfunktion im weiteren Sinne (oder ganz allgemein die numerische Lösung) den maßgebenden Gleichungen anpassen, seien das Raleigh-Ritz-Verfahren, die Methode der gewichteten Residuen und die Methode der kleinsten Quadrate genannt. Am meisten wird die Methode der gewichteten Residuen in Form des Verfahrens nach GALERKIN verwendet. Bei diesem dienen die Ansatzfunktionen auch als Gewichtungsfunktionen [KAMMERER, 1994]. Die Größenordnung ist durch die Summe der Residuen der einzelnen Teilgebiete festgelegt. Der allgemeinste Ansatz bei der Methode der gewichteten Residuen mit Abweichungen nur im Gebiet Ω lautet

$$\int_{\Omega} \mathbf{R} \cdot \mathbf{G} \, d\Omega = 0 \quad (4-2)$$

wobei \mathbf{R} für das Residuum und \mathbf{G} für die Gewichtungsfunktion gesetzt wird. Das Residuum ist die Differenz des Sollwertes vom Istwert (Näherungsfunktionswert eingesetzt) der Differentialgleichung in einem beliebigen Punkt. Die Gewichtungsfunktion \mathbf{G} ist – beim Galerkin-Verfahren ebenso wie die Ansatzfunktion \mathbf{R} – eine Linearkombination aus einzelnen Ansatzfunktionen, die jeweils nur im Umgebungsbereich – dem sogenannten Patch - eines Knotens von Null verschiedene Werte aufweisen. Es ergibt sich daher ein System von n Gleichungen in der Form

$$\int_{\Omega} R_i \cdot G_i \, d\Omega = 0 \quad \text{für } i = 1, 2, 3, \dots, n_G \quad (4-3)$$

R_i ist hierbei die Residuumsfunktion für den Knoten i und G_i die zugehörige Gewichtungsfunktion.

4.1.3 Festlegung der Diskretisierung (Netzgenerierung)

Die automatische Erstellung des Gitternetzes, d. h. der koordinativen Festlegung der Stützstellen, ist oft der zeitaufwendigste Teil der Programmierarbeit. Daher empfiehlt sich wo immer möglich, vor allem aber bei sehr unregelmäßigen Netzen, der Einbau von sogenannten Netzgeneratoren bzw. Netzgestaltungs-routinen. Jede Methode bevorzugt ihre eigene Netzgestaltung. Entsprechend der Methodenvielfalt beschäftigen sich mit diesem Thema sehr viele Autoren. Eine detaillierte mathematische Beschreibung der Netzgenerierung geben unter anderem KNUPP und STEINBERG [1993]. Eine Einführung der Netzgenerierung für die Methode der finiten Elemente wurde anschaulich für in der Praxis vorkommende Strömungsprobleme von NINOMIYA und ONISHI [1991] zusammengestellt. Für Berechnungen der Strömung durch ein poröses Medium kann vielfach mit einfachen quadratischen oder rechteckigen Netzen mit gleichen oder ungleichen Abständen das Auslangen gefunden werden. Bei der Methode der finiten Elemente werden wegen der einfachen Form bevorzugt Dreiecksnetze gewählt. Diese ermöglichen bereits eine bessere Anpassung an krummlinige Berandungen. Ähnliche Verbesserungen können durch eine quadrilineare Netzgenerierung erreicht werden. Die größte Flexibilität wird durch beliebige Vierecke mit quadratischen oder kubischen Seiten erreicht. Der Aufwand an Entwicklungsarbeit einerseits und die benötigte Rechenkapazität andererseits steigen dadurch beträchtlich. Zusätzlich können komplizierte Indizierungen ein erhöhtes Fehlerrisiko bedeuten. Für die Verbesserung der Rechenleistung ist die Möglichkeit der Netzverdichtung von besonderer Wichtigkeit; d. h. Bereiche mit großen Änderungen (z. B. in der Potenzialverteilung) erfordern einen kleineren Rasterabstand als jene mit geringen. Die Nachbearbeitung von Netzen ist bei vielen Netzgeneratoren eine wesentliche Funktion.

Bei der "Boundary integral equation method" wird von der Berandung ausgegangen. Die Werte im Inneren wirken nicht auf den eigentlichen Lösungsablauf ein. In vielen Anwendungsfällen genügt es jedoch nicht, nur die Randwerte zu kennen, und es ist dann auch bei dieser Methode eine Diskretisierung über das ganze Gebiet notwendig.

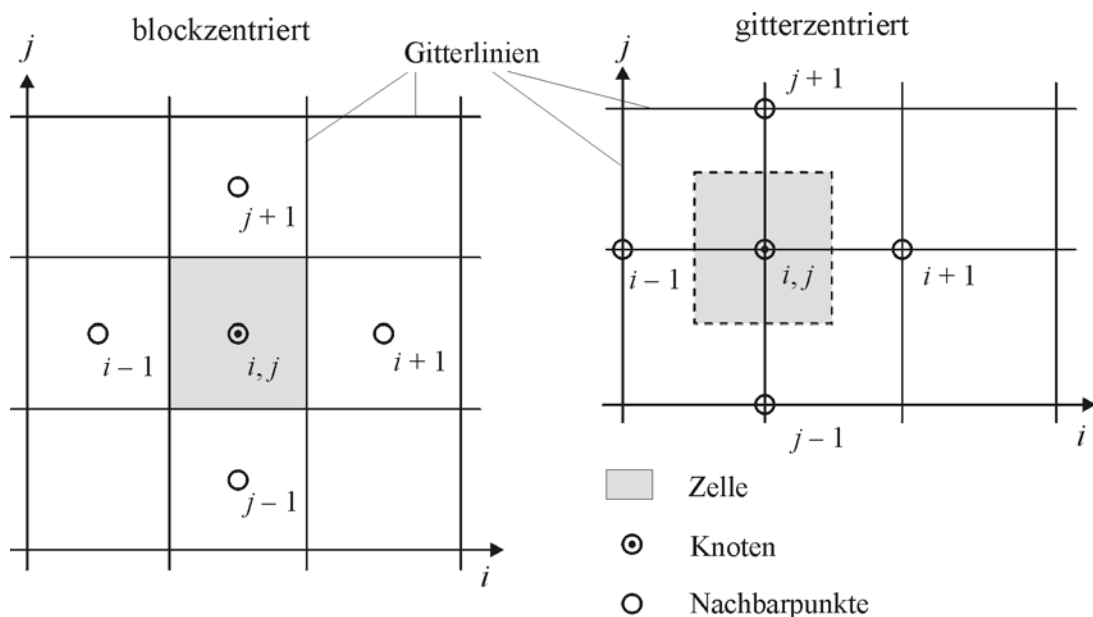


Abbildung 4-2: block- und gitterzentrierte Netze

Durch die räumliche Form des Gitternetzes ist die Koeffizientenmatrix des Gleichungssystems festgelegt, die rechte Seite durch vorgegebene bekannte Werte. Der Lösungsvektor kann je nach der gewählten Netzgenerierung entweder block- oder gitterzentriert zugeordnet sein.

Die Wahl der Art des Gitters hängt von den Randbedingungen ab. Gitterzentrierte Netze werden bevorzugt, wenn Potenzialpunkte an der Berandung gegeben sind, blockzentrierte hingegen wenn der Fluss an der Berandung bekannt ist. Praktisch betrachtet sind die Unterschiede bei der Netzgestaltung nicht von vorrangiger Bedeutung [WANG und ANDERSON, 1982].

4.2 Wasserbewegung

Während in der Geohydraulik dreidimensionale Strömungsprobleme häufig mit ausreichender Genauigkeit in zweidimensional-ebene, zweidimensional-vertikale oder zweidimensional-rotations-symmetrische Probleme übergeführt werden können, überwiegen in der Bodenphysik die eindimensional-vertikalen Strömungsprobleme. In der Geohydraulik wird die ungesättigte Bodenzone zumeist vernachlässigt und die Durchlässigkeit als konstant betrachtet. In der Bodenphysik ergeben sich hingegen wegen der Abhängigkeit des kapillaren Leitvermögens von der Wasserspannung bzw. dem Wassergehalt nichtlineare partielle Differentialgleichungen, bei denen eine eindimensionale Betrachtung mathematisch gesehen eine erhebliche Ersparnis bedeutet. Die allgemeine Formulierung der Wasserbewegung in der Bodenphysik schließt geohydraulische Strömungsprobleme grundsätzlich mit ein, doch ist die Modellierung bzw. der Grad der Vereinfachung der physikalischen Zusammenhänge selbst innerhalb der Bodenphysik von Anwendungsfall zu Anwendungsfall bzw. Gruppen von Anwendungsfällen sehr verschieden.

Je nachdem ob die wesentlichen Strömungsparameter als zeitlich konstant angesehen werden können oder nicht, ist zwischen den mathematisch unterschiedlich zu behandelnden Randwert- und Anfangswertproblemen zu unterscheiden:

Bei den **Randwertproblemen** sind die Randbedingungen entlang der Strömungsgebietsbegrenzung gegeben; gesucht ist eine Lösung für alle inneren Punkte. Die Randbedingungen und damit die Verhältnisse im Inneren ändern sich zeitlich nicht (*stationäres* Problem).

Bei den **Anfangswertproblemen** sind die Anfangswerte (für alle Knotenpunkte) zu einem bestimmten Zeitpunkt bekannt; gesucht ist der zeitliche Lösungsverlauf im Inneren unter Verwendung der zeitlich variierenden Randbedingungen des Strömungsgebietes (*instationäres* Problem). Oft sind auch die Anfangswerte nicht bekannt; sie müssen dann durch die Lösung eines zu definierenden Randwertproblems bestimmt werden.

Aus der Zusammenfügung der eindimensionalen Kontinuitätsgleichung und der Gleichung von DARCY für den ungesättigten Boden folgt die sogenannte **Richards-Gleichung**:

$$\frac{\partial \theta}{\partial t} = \frac{\partial}{\partial z} \left[k(\theta) \cdot \frac{\partial H}{\partial z} \right] - QS(z, t)$$

oder

$$\frac{\partial \theta}{\partial t} = \frac{\partial}{\partial z} \left[k(\theta) \cdot \left(\frac{\partial h}{\partial z} + 1 \right) \right] - QS(z, t) \quad (4-4)$$

$[\theta]$	$= \text{m}^3 \cdot \text{m}^{-3}$	Wasseranteil
$[H]$	$= \text{m}$	Gesamtpotenzial (ausgedrückt als Potenzialhöhe)
$[h]$	$= \text{m}$	Druckpotenzial

$[k(\theta)] = \text{m} \cdot \text{s}^{-1}$	kapillares Leitvermögen
$[t] = \text{s}$	Zeit
$[z] = \text{m}$	Tiefe
$[QS] = \text{s}^{-1}$	Quellen/Senkenterm

Durch die Einführung der **Bodenwasserkapazität** $C(\theta) = \frac{d\theta}{dh}$, (4-5)

die nichts anderes als die Neigung der Bodenwassercharakteristik $\theta(h)$ ist (bzw. $1/(dh/d\theta)$), folgt

weilers:

$$\frac{\partial h}{\partial t} C(\theta) = \frac{\partial}{\partial z} \left[k(\theta) \cdot \frac{\partial H}{\partial z} \right] - QS(z, t)$$

oder

$$\frac{\partial h}{\partial t} C(\theta) = \frac{\partial}{\partial z} \left[k(\theta) \cdot \left(\frac{\partial h}{\partial z} + 1 \right) \right] - QS(z, t) \quad (4-6)$$

Die beiden Variablen θ und h sind zeit- und ortsabhängig, es steht jedoch vorderhand nur eine Gleichung zur Verfügung. Für (horizontale) Infiltrationsprobleme in einem homogenen Boden und mit einem über die Tiefe konstanten Anfangswassergehalt ist es von Vorteil, das Druckpotenzial zu eliminieren. Das kann dadurch gelöst werden, indem die Wasserkapazität und das kapillare Leitvermögen zur Bodenwasserdiffusivität $D(\theta)$ zusammengefasst werden [OR und WRAITH, 1997a]. Dieser Vorgang soll nun an der einfachsten Form der Richards-Gleichung Form für die horizontale Wasserbewegung

$$\frac{\partial \theta}{\partial t} = \frac{\partial}{\partial x} \left[k(h) \cdot \frac{\partial h}{\partial x} \right] \quad (4-7)$$

gezeigt werden. Zu diesem Zweck wird die Änderung des Potenzials mit dem Weg $\partial h/\partial x$ durch die Anwendung der Kettenregel umgeformt zu

$$\frac{\partial h}{\partial x} = \frac{dh}{d\theta} \cdot \frac{\partial \theta}{\partial x}$$

Für den Fluss in der eckigen Klammer der Gleichung 4-7 ergibt sich

$$k(h) \cdot \frac{\partial h}{\partial x} = k(h) \cdot \frac{dh}{d\theta} \cdot \frac{\partial \theta}{\partial x}$$

oder wegen Gleichung 4-5

$$k(h) \cdot \frac{\partial h}{\partial x} = \frac{k(h)}{C(\theta)} \cdot \frac{\partial \theta}{\partial x}$$

$k(h(\theta))$ wird nun als $k(\theta)$ aufgefasst und die **Bodenwasserdiffusivität** als Quotient aus dem kapillaren Leitvermögen und der Wasserkapazität definiert

$$D(\theta) = \frac{k(\theta)}{C(\theta)} \quad (4-8)$$

oder

$$D(\theta) = k(\theta) \cdot \frac{dh}{d\theta} \quad (4-9)$$

Die Ausgangsgleichung 4-7 lautet somit in diffusiver Form:

$$\frac{\partial \theta}{\partial t} = \frac{\partial}{\partial x} \left[D(\theta) \cdot \frac{\partial \theta}{\partial x} \right] \quad (4-10)$$

Die strömungsbestimmende Größe ist in dieser Gleichung der Gradient des Wasseranteils, und nicht wie physikalisch definiert der Potenzialunterschied.

Beachte: Auf dem Wasseranteil aufbauende Gleichungen sollten nur bei horizontaler Wasserbewegung in homogenen Böden angewendet werden (unter Vernachlässigung der Hysterese). Das Druckpotenzial weist auch im geschichteten Boden einen stetigen Verlauf auf, aber das Wasseranteilsprofil zeigt an den Schichtgrenzen eine Unstetigkeit, sodass an diesen Stellen der Gradient der Wasseranteilsfunktion nicht gebildet werden kann.

Im Bereich eines geschlossenen Kapillarsaumes sowie in dem nach unten hin anschließenden Grundwasserbereich herrscht Vollsättigung vor und somit keine Änderung des Wassergehaltes mit der Tiefe. In diesem Bereich ist die Wasseranteil-Matrixpotenzial-Kurve keine umkehrbar eindeutige Beziehung und damit streng genommen gar keine Funktion; dem Wassergehalt θ_s kann kein eindeutiges Matrix- bzw. hydrostatisches Potenzial aus dem Bereich zwischen einem nahezu beliebig großen, positiven hydrostatisches Potenzial im Grundwasserbereich und dem Lufteintrittspunkt zugeordnet werden. Es kann daher durch die Wassergehaltsmessung allein weder ausgesagt werden, ob sich der Messpunkt im geschlossenen Kapillarsaum oder im Grundwasserbereich befindet, noch kann zwei Messpunkten mit θ_s ein eindeutiger Gradient zugeordnet werden. Modellgemäß kann also sowohl ein erheblicher Fluss abwärts als auch aufwärts oder auch Stillstand vorliegen; allerdings liefert eine genauere Betrachtung der räumlich-zeitlichen Wassergehaltsverteilung oft eindeutige Hinweise über den Fluss im gesättigten Bereich. Rein mathematisch versagt die Differenzialgleichung im geschlossenen Kapillarsaum und im anschließenden Grundwasserbereich. Abhilfe kann für den geschlossenen Kapillarsaum durch die Annahme erreicht werden, dass die Wasseranteil-Matrixpotenzial-Beziehung (van-Genuchten-Funktion anstelle Brooks und Corey) auch in diesem Bereich nicht vertikal verläuft bzw. dass bereits geringste Wasserspannungen zu einer Untersättigung führen.

Unter bestimmten Umständen, insbesondere wenn der Gravitationseinfluss verhältnismäßig klein in Bezug zum Matrixeinfluss ist, kann der vorhin beschriebene Ansatz trotz der genannten Nachteile verwendet werden (z. B. bei Infiltration im trockenen Boden, Evaporation von der Bodenoberfläche).

Eine analytische Lösung der *Diffusionsgleichung* ist für bestimmte Randbedingungen mit Hilfe der *Boltzmann-Substitution* möglich (siehe Anhang ab Seite 203).

4.2.1 Diskretisierung der Strömungsgleichung

Die numerische Lösung eines Strömungsproblems durch den Übergang von Differentialen zu Differenzen bzw. durch die FD-Methode soll konkret anhand der folgenden Gleichung erläutert werden.

Eine generelle Beschreibung der Strömung durch ein gesättigtes, anisotropes poröses Medium lautet [BUSCH et al., 1993]:

$$\frac{\partial}{\partial x} \left(k_{xx} \cdot \frac{\partial \phi}{\partial x} \right) + \frac{\partial}{\partial y} \left(k_{yy} \cdot \frac{\partial \phi}{\partial y} \right) + \frac{\partial}{\partial z} \left(k_{zz} \cdot \frac{\partial \phi}{\partial z} \right) + QS = \mu_s \cdot \frac{\partial \phi}{\partial t} \quad (4-11)$$

- k_{xx}, k_{yy}, k_{zz} Komponenten des Durchlässigkeitsbeiwert-Tensors in x-, y- und z-Richtung
- ϕ Standrohrspiegelhöhe
- QS Quelle oder Senke pro Volumseinheit; bei Einströmung ist QS positiv (+), bei Ausströmung negativ (-)
- μ_s spezifischer Speicherkoeffizient; Anmerkung: $\mu_s \approx \mu / D$

μ	Speicherkoeffizient
D	Schichtstärke
t	Zeit

Die Gleichung beschreibt den Strömungsvorgang für instationäre Bedingungen in einem heterogenen und anisotropen Medium unter der Voraussetzung, dass die Hauptachsen des Durchlässigkeitsbeiwert-Tensors mit den Koordinatenachsen übereinstimmen. Im allgemeinen sind μ , k_{xx} , k_{yy} , k_{zz} und QS ortsabhängige Größen. Der Quellen-/Senkenterm ist häufig zusätzlich zeitabhängig. Anzumerken ist weiters, dass auch die Stoffparameter μ und k_f , vor allem als Folge biologischer und bodenmechanischer Prozesse einer Zeitabhängigkeit unterliegen können.

Entsprechend der Methode der finiten Differenzen muss die obige Gleichung durch eine Differenzgleichung ersetzt werden. Ein formaler Weg ist die direkte Aufstellung von Differenzenoperatoren [BEAR und VERRUIJT, 1994]. Dazu stehen mehrere Möglichkeiten zur Auswahl:

$$\text{Vorwärtsdifferenz} \quad \frac{\partial F}{\partial x} \approx \frac{F(x + \Delta x, y) - F(x, y)}{\Delta x} \quad (4-12)$$

$$\text{Rückwärtsdifferenz} \quad \frac{\partial F}{\partial x} \approx \frac{F(x, y) - F(x - \Delta x, y)}{\Delta x} \quad (4-13)$$

$$\text{Zentraldifferenz} \quad \frac{\partial F}{\partial x} \approx \frac{F(x + \Delta x/2, y) - F(x - \Delta x/2, y)}{\Delta x} \quad (4-14)$$

Die zweite Ableitung der Zentraldifferenz wird z. B. folgendermaßen gebildet:

$$\frac{\partial^2 F}{\partial x^2} \approx \frac{F(x + \Delta x, y) - 2 \cdot F(x, y) + F(x - \Delta x, y)}{(\Delta x)^2}$$

oder in Indexschreibweise
$$\frac{\partial^2 F}{\partial x^2} \approx \frac{F_{i+1,j} - 2 \cdot F_{i,j} + F_{i-1,j}}{(\Delta x)^2}$$

Wird nun die Standrohrspiegelhöhe ϕ gleich der Funktion F gesetzt, so folgt unmittelbar für die

$$\text{Zentraldifferenz in } x\text{-Richtung} \quad \frac{\partial^2 \phi}{\partial x^2} \approx \frac{\phi_{i+1,j} - 2 \cdot \phi_{i,j} + \phi_{i-1,j}}{(\Delta x)^2} \quad (4-15)$$

Wird weiters die Ableitung der Funktion ϕ nach der Zeit als Rückwärtsdifferenz gebildet –

$$\frac{\partial \phi}{\partial t} \approx \frac{\phi_i^n - \phi_i^{n-1}}{\Delta t},$$

so stehen alle notwendigen Differenzenoperatoren zur Beschreibung der zeitlichen und der räumlichen Änderung (in x -Richtung) der Standrohrspiegelhöhe zur Verfügung.

$$\text{Die partielle Differentialgleichung} \quad \mu_s \cdot \frac{\partial \phi}{\partial t} = k \cdot \frac{\partial^2 \phi}{\partial x^2} + I \quad (4-16)$$

kann demnach näherungsweise durch eine Differenzgleichung der Form

$$\mu_s \cdot \frac{\phi_i^n - \phi_i^{n-1}}{\Delta t} = k \cdot \frac{\phi_{i+1}^n - 2 \cdot \phi_i^n + \phi_{i-1}^n}{(\Delta x)^2} + I \quad (4-17)$$

ersetzt werden. Die Rückwärtsdifferenz wird für die Zeitdiskretisierung wegen der immer vorhandenen numerischen Stabilität bevorzugt, obwohl dies die simultane Lösung des Gleichungssystems bedingt. Fehler (Oszillationen) werden im zeitlichen Verlauf gedämpft. Die anderen vorgestellten Möglichkeiten können zu numerischen Instabilitäten führen, d. h. im Verlauf der Simulation stellt sich ein anwachsender Fehler ein.

Beispiel 4-1: Diskretisierung der Richards-Gleichung (QS = 0)

- 1) Diskretisierung des Strömungsgebietes ($\Delta z = \text{konstant}$, $\Delta t = \text{konstant}$) und Festlegung des Differenzenoperators.
Gewählt: Vorwärtsdifferenz in der Zeit ($n \rightarrow n+1$), Zentraldifferenz nach dem Ort ($i-1 \rightarrow i+1$)
Indizierung in der z - t -Ebene, Differenzenoperator

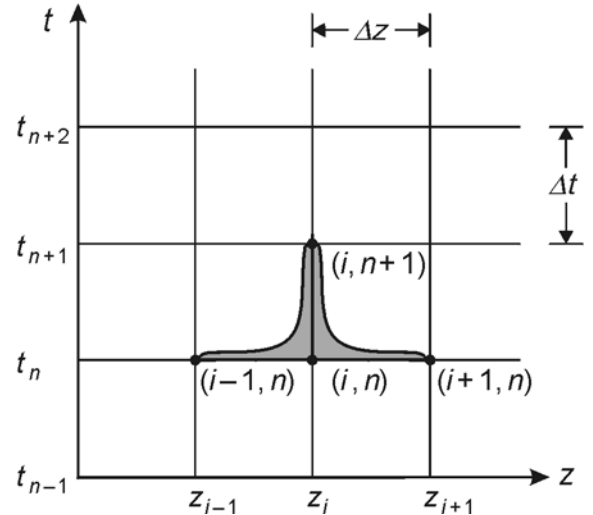


Abbildung 4-3: Vorwärts- und Zentraldifferenzen-Operator

2. Aufstellung der Differenzgleichung

$$\frac{\theta_i^{n+1} - \theta_i^n}{\Delta t} = \frac{1}{\Delta z} \left[k_{i+1/2}^n \left(\frac{h_{i+1}^n - h_i^n}{\Delta z} + 1 \right) - k_{i-1/2}^n \left(\frac{h_i^n - h_{i-1}^n}{\Delta z} + 1 \right) \right]$$

Die so gewonnene Gleichung ist eine Näherung der ursprünglichen Differentialgleichung. Für die Beschreibung des kapillaren Leitvermögens ($k(\theta)$ -Funktion) wurde eine explizite Linearisierung eingeführt. Die einzige verbleibende unbekannte Größe ist der Wasseranteil θ_i^{n+1} . Werden alle bekannten Größen auf eine Seite gebracht, kann der Wasseranteil am Ende eines Zeitschritts direkt aus den zeitlich vorhergegangenen Werten berechnet werden.

$$\theta_i^{n+1} = \frac{\Delta t}{\Delta z} \left[k_{i+1/2}^n \left(\frac{h_{i+1}^n - h_i^n}{\Delta z} + 1 \right) - k_{i-1/2}^n \left(\frac{h_i^n - h_{i-1}^n}{\Delta z} + 1 \right) \right] + \theta_i^n$$

Das Vorwärtsdifferenzschema ist einfach zu programmieren, es neigt jedoch vor allem bei großen Zeitschritten zu Instabilitäten.

Beispiel 4-2: Variable Rastereinteilung, vollständige Richards-Gleichung

Im Programm SWATRE (Soil Water Actual Transpiration Rate) [FEDDES und KOOPMANS, 1995] erfolgt die Näherung der zeitlichen Ableitung durch eine Rückwärtsdifferenz

$$C_i^n (h_i^{n+1} - h_i^n) = \frac{\Delta t^n}{\Delta z_i} \left[k_{i-1/2}^n \left(\frac{h_{i-1}^{n+1} - h_i^{n+1}}{\Delta z_u} \right) + k_{i-1/2}^n \right] - \frac{\Delta t^n}{\Delta z_i} \left[k_{i-1/2}^n \left(\frac{h_i^{n+1} - h_{i+1}^{n+1}}{\Delta z_i} \right) + k_{i+1/2}^n \right] - \Delta t^n s_i^n$$

Die Funktionen für k und C wurden wieder linearisiert.

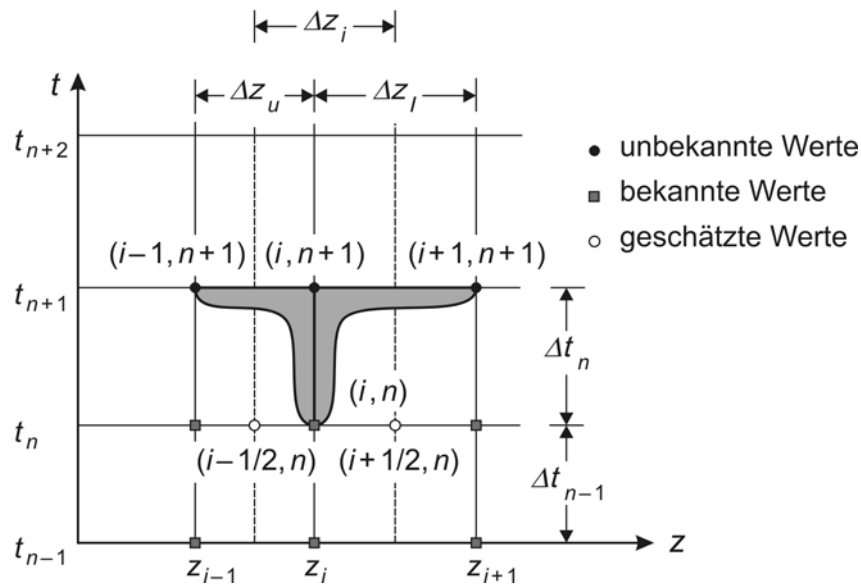


Abbildung 4-4: Rückwärtsdifferenzschema

Beispiel 4-3: Gewichtetes Schema (LEACHM, Leaching Estimation and Chemistry Model)

Das Profil wird über die Tiefe z in horizontale Segmente und die Zeit t in gleiche Schritte geteilt.

Die Aufstellung des Gleichungssystems unter Beachtung der Anfangs- und der Randbedingungen erfolgt nach dem impliziten Schema von CRANK-NICOLSON [1947]. Dieses Schema arbeitet mit einer Gewichtung von $1/2$ für die Näherung der zweiten Ableitung:

$$C(\theta)_i^{n-1/2} \cdot \frac{(h_i^n - h_i^{n-1})}{\Delta t} = \frac{1}{\Delta z_1 + \Delta z_2} \cdot \left[\begin{array}{l} k_{i-1/2}^{n-1/2} (h_{i-1}^{n-1} + h_{i-1}^n + 2\Delta z_1 - h_i^{n-1} - h_i^n) / \Delta z_1 \\ -k_{i+1/2}^{n-1/2} (h_i^{n-1} + h_i^n + 2\Delta z_2 - h_{i+1}^{n-1} - h_{i+1}^n) / \Delta z_2 \end{array} \right] - QS_i^{n-1/2}$$

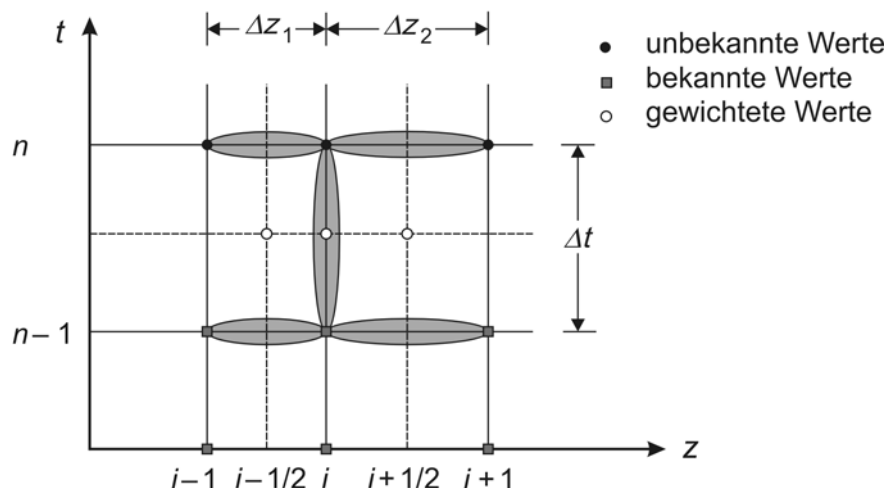


Abbildung 4-5: Crank-Nicolson-Schema

Die generelle Lösung der Zeitableitung, ohne von vornherein eine Methode zu spezifizieren, kann durch eine schrittweise Integration erfolgen. Die Werte am Ende eines Zeitschrittes werden aus den

Anfangswerten berechnet. Die neuen Werte sind dann die Anfangswerte für den nächsten Zeitschritt usw. [BEAR und VERRUIJT, 1994].

Die Integration der Ausgangsgleichung 4-6 von $t = 0$ nach $t = \Delta t$ ergibt

$$\frac{h' - h^o}{\Delta t} C(\theta) = \frac{\partial}{\partial z} \left[k(\theta) \left(\frac{\partial h}{\partial z} + 1 \right) \right] - QS(z, t) \quad (4-18)$$

h' Wert am Ende eines Zeitschritts
 h^o Anfangswert

Es wird angenommen, dass der Mittelwert h für ein bestimmtes Zeitintervall Δt durch eine Funktion aus dem Anfangswert und dem Endwert ausgedrückt werden kann – genauer gesagt durch eine Linearkombination von Anfangs- (h^o) und Endwert (h') –, verbunden mit einer Gewichtung ε :

$$h = \varepsilon \cdot h^o + (1 - \varepsilon) \cdot h' \quad (4-19)$$

h Mittelwert für das Zeitintervall Δt (theoretisch gleich dem Integral über Δt dividiert durch Δt)
 ε Interpolationsparameter, Gewichtungskoeffizient; $0 \leq \varepsilon \leq 1$
 $\varepsilon = 0$ Rückwärtsdifferenz: $h = h'$ (Wert am Ende des Zeitschrittes)
 $\varepsilon = 1$ vorwärts für die Zeit: $h = h^o$ (Wert am Anfang des Zeitschrittes)
 $\varepsilon = 1/2$ Zentralsdifferenz: führt zum Crank-Nicolson-Verfahren

Für viele praktische Fälle sind die instationären Vorgänge von langsam fallender Natur. Deshalb sollte der Mittelwert zum Endwert gewichtet sein, d. h. $\varepsilon < 1/2$ gewählt werden.

Durch Umformung der Gleichung 4-19 zu

$$h' - h^o = \frac{h - h^o}{1 - \varepsilon}$$

und anschließendem Einsetzen in die Gleichung 4-18 folgt als Ergebnis der Integration über den Zeitschritt

$$\frac{h - h^o}{\Delta t \cdot (1 - \varepsilon)} \cdot C(\theta) = \frac{\partial}{\partial z} \left[k(\theta) \cdot \left(\frac{\partial h}{\partial z} + 1 \right) \right] - QS(z, t).$$

Durch die Integration wurde die Zeitableitung eliminiert und eine Beziehung erstellt, die den Mittelwert als repräsentative Größe enthält. Die Ortsableitungen können wie vorhin in eine Differenzenform umgewandelt werden oder durch die Methode der finiten Elemente beschrieben werden.

4.2.2 Anfangs- und Randbedingungen

Anfangsbedingungen müssen für jeden Knotenpunkt für den Zeitpunkt $t = 0$ festgelegt werden. Entweder ist der Potenzialwert selbst bekannt – bei eindimensionaler Betrachtung gilt in diesem Fall die Zuordnung

$$h(z, t=0) = h_o \quad -,$$

oder der Wasseranteil

$$\theta(z, t=0) = \theta_o.$$

Der Potenzialwert wird dann durch die Bodenwassercharakteristik $h = f(\theta)$ fixiert. Wenn die Hysterisis vernachlässigt werden kann und kein geschlossener Kapillarsaum vorliegt, ist die Angabe des Wasseranteiles gleichwertig.

Zur Festlegung der Randbedingungen in der z - t -Ebene kann zwischen drei Arten unterschieden werden [FEDDES und KOOPMANS, 1995]:

a) **Dirichlet-Bedingung:** entweder Angabe des

Potenzialwertes: $h(z=0, t) = h_o$
 $h(z=L, t) = h_u$ oder des
Wasseranteiles: $\theta(z=0, t) = \theta_o$
 $\theta(z=L, t) = \theta_u$

für den oberen ($o; z=0$) und/oder unteren Rand ($u; z=L$).

- b) **Neumann-Bedingung:** Obwohl die Neumann-Bedingung streng genommen die Angabe eines bestimmten Gradienten durch die Berandung (Ableitung des Potenzialfeldes) bedeutet [McCORD, 1991], wird der Begriff häufig auch zur Spezifikation des Flusses, also des Produktes aus dem Gradienten und dem Leitvermögen verwendet [ŠIMUNEK et al., 1999]:

$$q(t) = -k(h) \cdot \left(\frac{\partial h}{\partial z} + 1 \right)$$

Ein undurchlässiger Rand wird z. B. durch einen Sonderfall der Neumann-Bedingung, nämlich durch eine **Randstromlinie** mit $q = 0$ festgelegt.

- c) **Cauchy- oder gemischte Bedingung:** Kombination von a) und b). Der Fluss durch die Berandung ist keine Konstante wie bei der Neumann-Bedingung, sondern eine Funktion des Randpotenzials oder auch anderer Größen; er kann z. B. proportional zum Randpotenzial sein:

$$q(t) = A \cdot h(t)$$

Die drei genannten Randbedingungen können auch in einer einzigen Gleichung

$$A \cdot h(t) + B \cdot q(t) = C,$$

zusammengefasst werden, wobei sich je nach der Wahl der Koeffizienten A , B und C eine der drei Bedingungen ergibt [BUSCH et al., 1993].

Obere Berandung

Der im allgemeinen zeitlich veränderliche Fluss q durch die obere Berandung kann positiv (Einströmung; z. B. *Infiltration* bei einem Niederschlagsereignis) oder negativ (Ausströmung; z. B. *Evapotranspiration*) sein.

Die *potentielle Evapotranspirationsrate* ET_p ist nur von den Pflanzen und den atmosphärischen Bedingungen abhängig. Der *aktuelle* Fluss durch die Oberfläche (*Evaporation*) und der Pflanzenwasserverbrauch (*Transpiration*) bzw. die *aktuelle* Evapotranspirationsrate ET_a sind durch das Wassertransportvermögen des Bodens begrenzt.

Wenn während eines Niederschlages oder einer Bewässerung die Aufnahmefähigkeit des Bodens überschritten wird, wird entweder ein Teil des Wasserdargebotes als *Oberflächenabfluss* abfließen und damit nicht infiltrieren, oder es kommt zu einem *Überstau*. Die *Infiltrationsrate* q hängt sehr wesentlich vom Anfangswassergehalt ab.

Es ist in Anbetracht dieser Umstände offensichtlich nicht möglich, die Randbedingung a priori zu definieren. Die folgenden Bedingungen müssen jedoch erfüllt sein (unter der vereinfachenden Annahme, dass der gesamte Wasserentzug durch die Pflanzenwurzeln an der Geländeoberfläche erfolgt):

$$\begin{aligned} & |q(z=0, t)| \leq |ET_p(z=0, t)| \\ \bullet & |q(z=0, t)| = \left| -k(h) \cdot \left(\frac{\partial h}{\partial z} + 1 \right) \right| \end{aligned}$$

- bei Niederschlag: $h(z=0, t) \leq 0$ (oder $\theta(z=0, t) \leq \theta_s$)
 θ_s Wasseranteil bei Sättigung
- bei Verdunstung: $h(z=0, t) \geq h_l$
 h_l minimales Potenzial bei Trockenheit
- Unter der Annahme, dass das Druckpotenzial an der Oberfläche im Gleichgewicht mit dem aktuellen Dampfdruck in der Atmosphäre steht, kann h_l durch Umformung der Beziehung 1-12

$$h_l = \frac{R \cdot T}{g \cdot M} \cdot \ln \frac{p}{p_s} \quad (4-20)$$

[R] = J·mol⁻¹·K⁻¹ universelle (molare) Gaskonstante; R = 8,314510 J·mol⁻¹·K⁻¹
 [T] = K Temperatur
 [g] = m·s⁻² Fallbeschleunigung
 [M] = kg·mol⁻¹ molare Masse; für Wasserdampf: M = 2×1,008 + 15,999 = 18,015
 [p/p_s] = dim.los relative Luftfeuchte

ermittelt werden. Das Druckpotenzial wird entsprechend den vorgegeben Bedingungen durch

$$h_l \leq h \leq 0 \quad \text{begrenzt.}$$

- Im Fall eines Überstaues ist es üblich, die Überstauhöhe als zeitabhängige Größe anzugeben:

$$h(z=0, t) = h_o(t)$$

Untere Berandung

Eine Dirichlet-Bedingung wird verwendet, wenn ein freier Grundwasserspiegel ($h = 0$) vorliegt. Befindet sich der Grundwasserspiegel in so großer Tiefe, dass sein Einfluss auf den Wasserhaushalt nahezu vernachlässigbar ist, wird die Wasserbewegung im Bodenprofil zumeist nur bis unterhalb der unteren Grenze der Wurzelzone oder bis zu jener Tiefe simuliert, in der die Bodenwasserbewegung kaum mehr vom Niederschlags- und Verdunstungsgeschehen beeinflusst wird. Häufig wird dann für den unteren Rand der Fluss q als gegeben bzw. konstant betrachtet. McCORD [1991] weist darauf hin, dass diese Spezifikation nicht als Neumann-Bedingung bezeichnet werden sollte; allein schon deshalb, weil nämlich eine echte Neumann-Bedingung, d. h. die Spezifikation des Gradienten, bei tief liegendem Grundwasserspiegel im allgemeinen bessere Ergebnisse liefert. Während zur Spezifikation des Flusses zumeist ein Schätzwert herangezogen werden muß, folgt aus der Neumann-Bedingung konsequenterweise nur, dass sich die Wasserspannung an der unteren Berandung mit der Tiefe nicht ändert und das Druckpotenzial h konstant ist $\rightarrow \partial h / \partial z(t) = 0$ und der Gradient des Gesamtpotenzials H beträgt dann auf Grund des Gradienten des Schwerkraftpotenzials gleich Eins: $\partial H / \partial z(t) = 1$. Im Gegensatz zum zeitlich konstant gesetzten Druckpotenzialgradient kann sich das aus der Simulation ergebende Druckpotenzial und damit auch das kapillare Leitvermögen durchaus zeitlich ändern (wenn auch zumeist nur geringfügig). Daraus folgt aber auch, dass der Fluss nicht konstant sein muß. Diese Modellierung der unteren Berandung ermöglicht daher unterschiedliche Flussraten auf Grund variabler Verhältnisse an der Oberfläche (Niederschlag und Verdunstung), hingegen erzwingt die Spezifikation eines konstanten Flusses eine Umverteilung des Bodenwassers, die in der Natur nicht stattfindet.

Eine Neumann-Bedingung wird auch bei einer undurchlässigen Schicht angewandt. Ein Sonderfall ist der freie Ausfluss, der z. B. bei vielen Lysimetern gegeben ist. Wenn ein Ausfluss (Sickerwasser)

gegen die freie Atmosphäre vorhanden ist bzw. aus der Simulation resultiert, ist die untere Randbedingung eine Dirichlet-Bedingung mit $h = 0$. Würde sich hingegen ein fallendes Potenzial nach oben bzw. eine Einströmung ergeben, die bei den Sickerwasser-Lysimetern konstruktionsbedingt nicht auftreten kann, wird dies durch eine Neumann-Bedingung mit $\partial H/\partial z = 0$ und daraus folgend $q = 0$ verhindert. Möchte man gemessene Sickerwasserraten als Randbedingung für die Simulation benützen, ist der Fluss bzw. eine unechte Neumann-Bedingung zu spezifizieren.

Gemischte Bedingungen werden verwendet, wenn Grundwassermodelle mit dem ungesättigten Bereich gekoppelt werden.

4.2.3 Beispiele für die Modellierung der Wasserbewegung und der Randbedingungen

Betrachtet man den zweidimensionalen isothermalen Darcy-Fluss von Wasser in einem variabel gesättigten festen Porenmedium und nimmt man an, dass die Luftphase für den Fließprozess der flüssigen Phase nur eine unbedeutende Rolle spielt, so ist die beschreibende Fließgleichung für diese Bedingungen durch die folgende modifizierte Form der Richards-Gleichung gegeben [ŠIMUNEK et al., 1994]

$$\frac{\partial \theta}{\partial t} = \frac{\partial}{\partial x_i} \left[K \left(K_{ij}^A \frac{\partial h}{\partial x_i} + K_{iz}^A \right) \right] - S, \quad (4-21)$$

$[\theta]$	= dim.los	Wasseranteil; besitzt die Dimension $L^3 \cdot L^{-3}$
$[h]$	= m	Druckhöhe; Dimension: L
$[S]$	= s^{-1}	Senkenterm; Dimension: T^{-1}
$[x_i]$	= m	räumliche Koordinaten, $i = 1, \dots, 2$; Dimension: L
$[t]$	= s	Zeit; Dimension: T
$[K_{ij}^A]$	= dim.los	Komponente des dimensionslosen Anisotropie-Tensors \mathbf{K}^A Für isotrope Medien reduziert sich der Anisotropie-Tensor \mathbf{K}^A auf die Diagonaleinträge, die gleich Eins sind, alle anderen Elemente betragen Null.
$[K]$	= $m \cdot s^{-1}$	Funktion des (ungesättigten) kapillaren Leitvermögens (Dimension $L \cdot T^{-1}$), gegeben durch $K(h, x, z) = K_s(x, z) \cdot K_r(h, x, z)$
$[K_r]$	= dim.los	relatives kapillares Leitvermögen
$[K_s]$	= $m \cdot s^{-1}$	Durchlässigkeitsbeiwert; Dimension: $L \cdot T^{-1}$

Falls die Gleichung 4-21 für den ebenen Fluss eines Vertikalschnittes verwendet wird, ist $x_1 = x$ die Horizontalkomponente und $x_2 = z$ die Vertikalkomponente, deren positive Richtung nach oben weist. Die Gleichung unterscheidet sich dann nicht von den bereits bekannten Formen der Richards-Gleichung.

Die Gegebenheiten an einem Vertikalprofil in der Natur können auf unterschiedlichste Weise modelliert werden. Für den oberen Rand kann man im einfachsten Fall annehmen, dass die Evaporation und der gesamte Pflanzenwasserentzug nicht über die gesamte Wurzeltiefe, sondern nur an der Bodenoberfläche vor sich geht. Folglich ist dann der Fluss zu spezifizieren, der entweder dem gemessenen Niederschlag N oder der aktuellen Verdunstung ET_a entspricht. Für die praktisch nicht messbare *aktuelle Evapotranspiration* wird zumeist die in Relation zur Bodenwasserspannung abgeminderte *potentielle Evapotranspiration* herangezogen. Der Senkenterm S in der Richards-Gleichung ist Null.

Für eine genauere Modellierung muß man berücksichtigen, dass das Bodenwasser von den Pflanzenwurzeln in unterschiedlichen Tiefen aufgenommen wird. Der Senkenterm repräsentiert dann das in einer Volumseinheit Boden pro Zeiteinheit infolge der Wasseraufnahme von Pflanzen entzogene

Wasservolumen. Geht man von der potenziellen Evapotranspiration ET_p aus, so muß man vorerst eine Annahme über den Wasserentzug über die Wurzeltiefe treffen. FEDDES et al. [1978] nahmen an, dass in jeder Tiefe etwa gleich viel Wasser aufgenommen wird und die maximale Wurzelwasseraufnahme, gleichbedeutend mit dem Senkenterm S_{pot} , daher

$$S_{pot} = \frac{ET_p}{\text{Wurzeltiefe}} \quad \text{beträgt.}$$

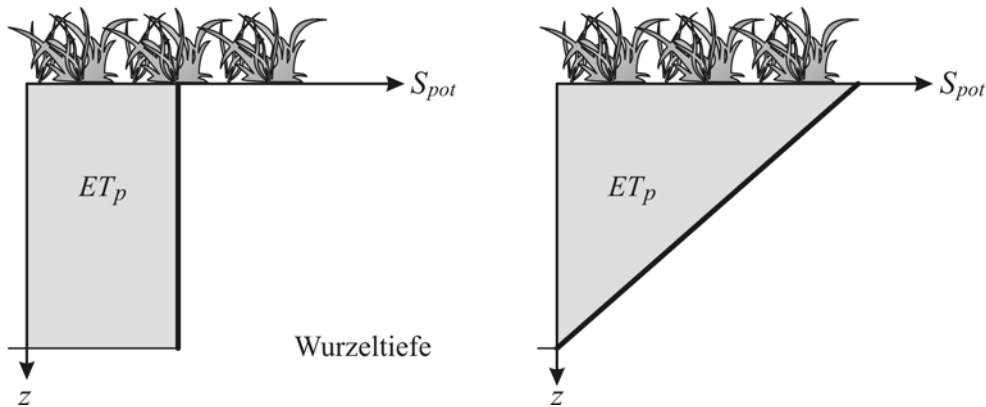


Abbildung 4-6: Mit der Tiefe konstante (links) und lineare (rechts) Wurzelwasseraufnahme bei potentieller Verdunstung [FEDDES und KOOPMANS, 1995]

Neuere Untersuchungen belegen, dass der Großteil des von der Pflanze für die potentielle Transpiration benötigten Bodenwassers im oberflächennahen Bereich aufgenommen wird und nur ein geringer an der Untergrenze der Wurzelzone. Diesem Umstand trägt ein linearer Ansatz für die Verteilung des Wasserentzuges über die Wurzeltiefe Rechnung, bei dem S_{pot} nicht mehr konstant, sondern eine Funktion der Tiefe ist (siehe Abbildung 4-6):

$$S_{pot}(z) = \frac{2 \cdot ET_{pot}}{\text{Wurzeltiefe}} \cdot \left(1 - \frac{z}{\text{Wurzeltiefe}} \right).$$

Bekanntlich entspricht die aktuelle Verdunstung ET_a nur bei optimaler Wasserversorgung der potentiellen. FEDDES et al. [1978] führen an, dass die Abminderung der Wasseraufnahme in einer bestimmten Tiefe als eine Funktion der Bodenwasserspannung gesehen werden kann

$$S(h) = \alpha(h) \cdot S_{pot}, \quad (4-22)$$

wobei der Abminderungsfaktor $\alpha(h)$ eine dimensionslose Funktion der Wasserspannung ist ($0 \leq \alpha \leq 1$), die das Verhältnis der Wasseraufnahme bei einer bestimmten Wasserspannung zur oben definierten maximalen Wasseraufnahme $S_{pot}(z)$ ausdrückt. Da die Wasserspannung zumeist nicht konstant mit der Tiefe ist, ergeben sich unterschiedliche α -Werte für die einzelnen Tiefen, die mit $S_{pot}(z)$ multipliziert und über die Wurzeltiefe integriert die aktuelle Evapotranspiration ET_a ergeben. FEDDES und KOOPMANS [1995] erwähnen für die Funktion $\alpha(h)$ zwei Modelle. Das Charakteristikum des ersten, das von FEDDES et al. [1978] stammt, ist die Annahme, dass die Wasseraufnahme bei annähernder Vollsättigung (unterhalb eines ideellen Grenzpunktes für ausreichenden Gasaustausch h_1) Null beträgt; erst darüber nimmt sie linear mit der Wasserspannung zu, um weiters mit dem Wert h_2 ein Maximum zu erreichen, das bis zum Wert h_3 beibehalten wird; darüber nimmt die Wasseraufnahme linear ab, bis sie schließlich mit h_4 (entspricht in etwa dem Welkepunkt) vollständig zum Erliegen kommt. Das Problem dieses Modells besteht darin, dass für die

Werte h_1 bis h_4 für die vorhandene Kulturpflanze bekannt sein müssen (siehe Tabelle 4-1) und dass die Funktion Knickstellen bzw. Unstetigkeitsstellen in der ersten Ableitung aufweist.

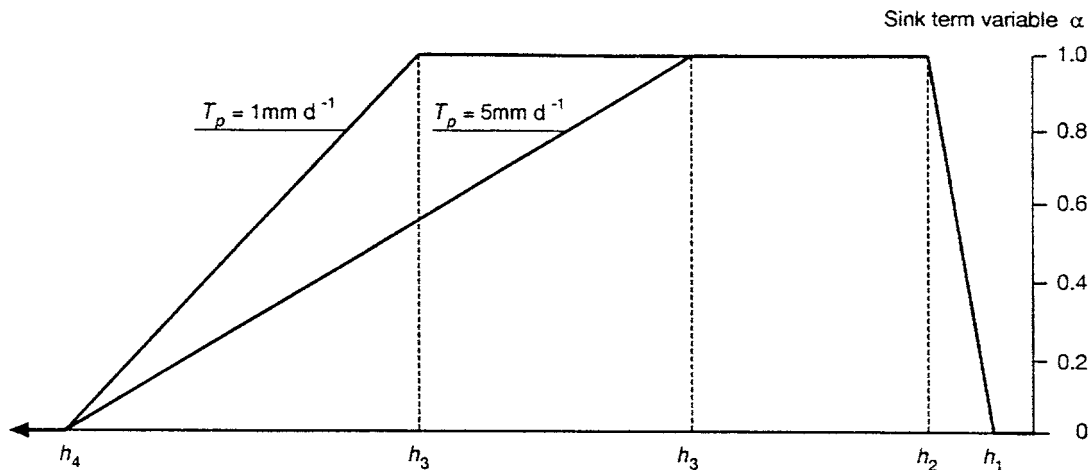


Abbildung 4-7: Modell für den Abminderungsfaktor $\alpha(h)$ [FEDDES et al., 1978]

Tabelle 4-1: Parameterwerte für die Funktion des Abminderungsfaktors α bei der Wasseraufnahme für einige Kulturpflanzen (h in cm WS) [FEDDES et al., 1978]

Pflanze	h_1 (cm WS)	h_2 (cm WS)	h_3 hoch (cm WS)	h_3 niedrig (cm WS)	h_4 (cm WS)
Tomaten	-10	-25	-320	-600	-16000
Zuckerrübe	-10	-25	-320	-600	-16000
Weizen	0	-1	-500	-900	-16000
Weidegras	-10	-30	-325	-800	-8000
Korn	-15	-30	-325	-600	-8000

Ein zweites Modell für den Abminderungsfaktor $\alpha(h)$ hat van GENUCHTEN [1987] publiziert:

$$\alpha(h) = \frac{1}{1 + \left(\frac{h}{h_{50}}\right)^p} \quad (4-23)$$

p empirische Konstante; für viele Pflanzen kann näherungsweise $p = 3$ gesetzt werden

h_{50} jener Wasserspannungswert, bei dem die Verdunstungsrate genau die Hälfte der maximalen oder potentiellen Evapotranspiration ausmacht

Dieses Modell impliziert, dass die maximale Wasseraufnahme bei Vollsättigung (genauer gesagt bei $h = 0$) erreicht wird und von diesem Wert kontinuierlich abnimmt, den Wert Null jedoch erst im Unendlichen erreicht. Lässt sich über die Eignung der Beziehung aus agrarhydrologischer Sicht streiten, so weist sie mathematisch zwei eindeutige Vorzüge auf: Sie benötigt nur zwei Parameter, wobei die Größe von einem der beiden (p) noch dazu für viele Kulturpflanzen gleich ist. Außerdem ist die Kurve für $0 \leq h \leq \infty$ glatt und muss daher nicht in Teilbereiche untergliedert werden.

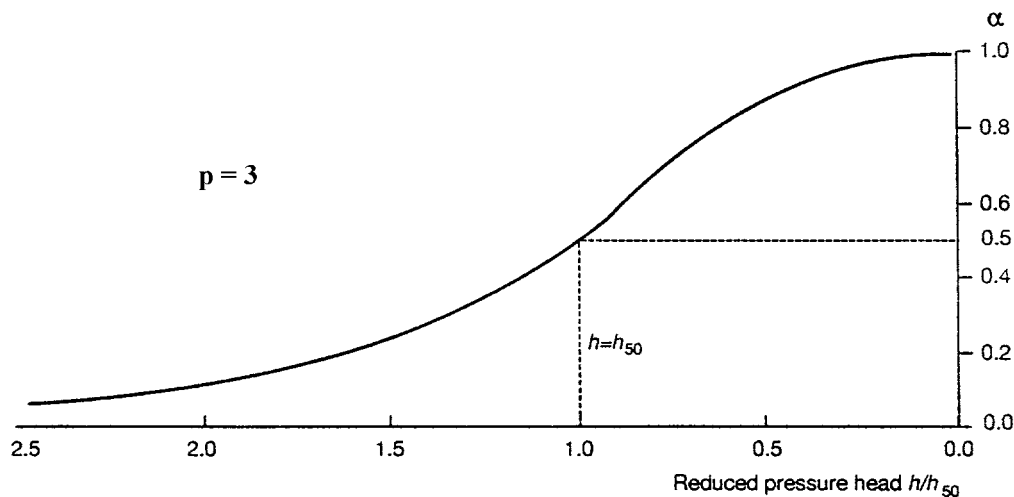


Abbildung 4-8: Modell für den Abminderungsfaktor $\alpha(h)$ von van GENUCHTEN [zit. in FEDDES und KOOPMANS, 1995]

Als Beispiel für die Implementierung des unteren Randes sei die Modellierung im Programm CHAIN_2D [ŠIMUNEK und van GENUCHTEN, 1994] erwähnt. Mit dem Programm kann an und für sich ein zweidimensionaler Stofftransport simuliert werden, doch eignet es sich insbesondere für Laborsäulenversuche bzw. Durchbruchskurven und verfügt dementsprechend über verschiedene Möglichkeiten der Spezifikation der unteren Randbedingung. Es kann (übrigens auf der gesamten Berandung) unter drei konstanten Randbedingungen – vorgegebene Druckhöhe h (Dirichlet-Bedingung), undurchlässiger Rand mit $q = 0$ (ein Anfangswert für h muß dann ebenfalls gesetzt werden) und vorgegebener Fluss (mit zusätzlicher Angabe von h_0) – und drei variablen Randbedingungen – freie Atmosphäre (mit zusätzlicher Angabe von h_0), zeitlich variable Höhe h und zeitlich variabler Fluss q (mit zusätzlicher Angabe von h_0) – gewählt werden. Darüber hinaus wird beim Anwendungsfall „Deep Drainage“ der variable Fluss in Abhängigkeit von der Tiefe des Grundwasserspiegels vorgegeben, bei „Free Drainage“ wird der Fluss ebenfalls variabel gehalten und der Einheitsgradient durch eine echte Neumann-Bedingung erzwungen und schließlich wird bei „Drains“ der Eintrittsverlust in das Dränrohr durch eine Anpassung der k -Werte der an den Eintrittsöffnungen situierten finiten Elemente implementiert.

Beispiel 4-4: Kapillare Wassernachlieferung von einem seichten Grundwasserspiegel an die Bodenoberfläche

Gesucht ist die kapillare Wassernachlieferung vom seichten Grundwasserspiegel an die unbewachsene Oberfläche eines Sandbodens

Bei größerer horizontaler Ausdehnung des Bodens mit annähernd konstantem Flurabstand kann das Strömungsproblem mit einem eindimensional-vertikalen Ansatz behandelt werden. Die Richards-Gleichung in entsprechender Form lautet (Gleichung 4-4)

$$\frac{\partial \theta}{\partial t} = \frac{\partial}{\partial z} \left[k(\theta) \cdot \left(\frac{\partial h}{\partial z} + 1 \right) \right] - QS(z, t).$$

Nachdem für den Gradienten der Schwerkraftpotenzialhöhe +1 gesetzt wurde, ist die z -Achse nach oben hin orientiert.

Damit der Ausdruck in der eckigen Klammer auch der Richtung nach dem Fluss entspricht, wird die Gleichung geringfügig umgeformt zu

$$\frac{\partial \theta}{\partial t} = -\frac{\partial}{\partial z} \left[-k(\theta) \cdot \left(\frac{\partial h}{\partial z} + 1 \right) \right] - QS(z,t)$$

Zur Erklärung der Vorzeichen sei angenommen, dass die Änderung des Gesamtpotenzials mit z negativ ist bzw. die Gesamtpotenzialhöhe mit der Höhe z fällt. Dann muss $\partial h / \partial z < -1$ sein; die Druckpotenzialhöhe h sinkt bzw. die Wasserspannung $|h|$ steigt mit z . Negativer Gesamtpotenzialhöhengradient mal negativ genommenen (positiven) k -Wert ergibt einen positiven Wert für den Fluss q , der definitionsgemäß vom höheren Potenzial zum niedrigeren stattfindet und damit gemäß der obigen Annahme in z -Richtung. Dem Fluss wird somit das richtige, positive Vorzeichen zugewiesen. Wenn nun der Fluss mit z zunimmt ($\partial q / \partial z > 0$), dann strömt in das von dz gebildete Kontrollvolumen weniger ein als aus, der Wassergehalt sinkt: $\partial \theta / \partial t < 0$. Die Ableitung des Flusses mit z $\partial q / \partial z$ ist daher negativ zu nehmen, um die Wassergehaltsänderung korrekt wiederzugeben.

Nachdem im unbewachsenen Boden Zu- oder Abströmungen einzig durch den oberen oder unteren Rand erfolgen bzw. Wasservolumen innerhalb des Profils weder verschwinden noch hinzutreten kann, ist der Quellen/Senkenterm Null. Nimmt man weiters an, dass sich die Randbedingungen zeitlich nicht ändern, stellt sich früher oder später der Stationärzustand im Boden ein; der Wassergehalt ändert sich mit der

Zeit nicht:

$$\frac{\partial}{\partial z} \left[-k(\theta) \cdot \left(\frac{\partial h}{\partial z} + 1 \right) \right] = 0.$$

Bei negativem Druck- oder Tensiometerpotenzial h kann das kapillare Leitvermögen auch als Funktion des Druckpotenzials betrachtet werden, das im geschlossenen Kapillarsaum konstant ist und dem Durchlässigkeitsbeiwert entspricht und darüber mit zunehmender Wasserspannung rasch abnimmt. Die einzige verbleibende Unbekannte ist dann das Druckpotenzial $h(z)$, die lediglich von der unabhängigen Ortsvariable z abhängt. Man erhält also als maßgebliche Differentialgleichung

$$\frac{d}{dz} \left[-k(h) \cdot \left(\frac{dh}{dz} + 1 \right) \right] = 0.$$

Das Integral über die Ortsvariable z liefert

$$\int \frac{d}{dz} \left[-k(h) \cdot \left(\frac{dh}{dz} + 1 \right) \right] dz = \int 0 dz$$

$$\left[-k(h) \cdot \left(\frac{dh}{dz} + 1 \right) \right] + C = 0$$

oder

$$-k(h) \cdot \left(\frac{dh}{dz} + 1 \right) = -C.$$

Nachdem die linke Seite der Gleichung dem Fluss entspricht, benennen wird die negativ genommene Integrationskonstante C mit q ($C = -q$):

$$-k(h) \cdot \left(\frac{dh}{dz} + 1 \right) = q \tag{4-24}$$

Bei stationären Verhältnissen, mathematisch ausgedrückt durch die Bedingung $\partial\theta(z, t)/\partial t = 0$, und dem Fehlen jeglicher Quellen und Senken ist der Fluss also konstant und daher in allen Höhen z und zu jedem Zeitpunkt t gleich: $q(z, t) = q$.

Nach diversen Umformungen
$$\frac{dh}{dz} + 1 = \frac{-q}{k(h)}$$

$$\frac{dh}{dz} = \frac{-q - k(h)}{k(h)}$$

und der Variablentrennung
$$\frac{-k(h)}{q + k(h)} \cdot dh = dz$$

kann integriert werden
$$\int \frac{-k(h)}{q + k(h)} \cdot dh = \int dz.$$

Wenn man nun wissen will, in welcher Höhe z über dem Grundwasserspiegel ein bestimmtes Druckpotenzial h auftritt, legt man die Vergleichsebene bzw. das Nullniveau für z am besten auf die Höhe des freien Grundwasserspiegels. Dann beträgt die untere Integrationsgrenze für h definitionsgemäß 0 für den freien Grundwasserspiegel und h für die obere Grenze, während die untere Grenze für z dann ebenfalls Null beträgt und die obere z zu ermitteln ist. Wir erhalten also

$$\int_0^z 1 \cdot dz = \int_0^h \frac{-k(h)}{q + k(h)} \cdot dh$$

$$\boxed{z = \int_0^h \frac{-k(h)}{q + k(h)} \cdot dh.} \quad (4-25)$$

Weil $\frac{-k(h)}{q + k(h)} = \frac{-k(h)}{q + k(h)} + \frac{q + k(h)}{q + k(h)} - 1 = \frac{q}{q + k(h)} - 1$ gilt, können wir auch schreiben

$$z = \int_0^h \frac{q}{q + k(h)} \cdot dh - h.$$

Ist generell die Druckpotenzialhöhe h_{unten} an der Unterkante einer Schicht mit der Schichtmächtigkeit Δz bekannt und möchte man die Druckhöhe an der Oberkante wissen, wenn stationärer Fluss mit der Größe q vorliegt, dann ist das Integral

$$\Delta z = \int_{h_{unten}}^{h_{oben}} \frac{-k(h)}{q + k(h)} \cdot dh$$

numerisch nach h_{oben} zu lösen.

Nachdem $q = -k(h) \cdot [dh/dz + 1]$ gesetzt wurde, findet positiver Fluss in z -Richtung bzw. nach oben, negativer hingegen nach unten statt. Soll also ein Fluss nach unten (Versickerung) untersucht werden, hat q ein negatives Vorzeichen zu besitzen, eine kapillare Aufstiegsrate q hingegen ein positives.

Um Gleichung 4-25 für einen Sandboden lösen zu können, muß die Beziehung $k(h)$ bekannt sein. Verfügt man über keinerlei Erhebungen der Eigenschaften des Bodens, bleibt nur die Wahl von Richtwerten für einen Sandboden, die man z. B. aus Bodendatenbanken wie der UNSODA-Database [LEIJ et al., 1996] oder der

HYPRES-Datenbank [WÖSTEN et al., 1999] erhalten kann. Nachdem Parameterwerte für bestimmte Böden für Modelle des kapillaren Leitvermögens seltener verfügbar sind als für die Rückhaltekurve, empfiehlt es sich, ein Modell für die Rückhaltekurve zu wählen und das kapillare Leitvermögen durch ein Modell zu beschreiben, das auf der Rückhaltekurve beruht. Aus den im Kapitel 2.7 angeführten Modellen werden zwei ausgewählt, die bereits detailliert vorgestellt worden sind, die leicht miteinander kombiniert werden können und für die mittlerweile auch umfangreiches Datenmaterial zu den Parameterwerten vorliegt: die van-Genuchten-Funktion und das Mualem-Modell. Unter der Einschränkung $m = 1 - 1/n$ gilt die in Kapitel 2.6.2 gefundene Beziehung 2-50 für das relative kapillare Leitvermögen

$$k_r(h) = \frac{\left[1 - (\alpha \cdot h)^{n-1} \cdot (1 + (\alpha \cdot h)^n)^{1/n-1}\right]^2}{\left[1 + (\alpha \cdot h)^n\right]^{(1-1/n) \cdot \lambda}},$$

aus der man bei bekanntem Durchlässigkeitsbeiwert k_s die Funktion $k(h) = k_s \cdot k_r(h)$ aufstellen kann:

$$k(h) = k_{sat} \cdot \frac{\left[1 - (\alpha \cdot h)^{n-1} \cdot (1 + (\alpha \cdot h)^n)^{1/n-1}\right]^2}{\left[1 + (\alpha \cdot h)^n\right]^{(1-1/n) \cdot \lambda}}.$$

Damit erhält man für Gleichung 4-25

$$z = -k_{sat} \int_0^h \frac{\left[1 - (\alpha \cdot h)^{n-1} \cdot (1 + (\alpha \cdot h)^n)^{1/n-1}\right]^2}{\left[1 + (\alpha \cdot h)^n\right]^{(1-1/n) \cdot \lambda}} \cdot dh \cdot \frac{1}{q + k_{sat} \cdot \frac{\left[1 - (\alpha \cdot h)^{n-1} \cdot (1 + (\alpha \cdot h)^n)^{1/n-1}\right]^2}{\left[1 + (\alpha \cdot h)^n\right]^{(1-1/n) \cdot \lambda}}}$$

Diese Gleichung kann analytisch nicht gelöst werden. Für die Integration ist daher ein numerisches Verfahren heranzuziehen. Die untenstehende Lösung wurde auf zwei Arten mit praktisch gleichen Ergebnissen erzielt: mit dem Programm MATHCAD und mit einer FORTRAN-Routine, für die ein adaptives Quadraturverfahren (Routine „dqags“ samt Hilfsroutinen) aus dem frei verfügbaren Programmpaket QUADPACK gewählt wurde (zu finden in der ebenfalls frei zugänglichen Programmbibliothek NETLIB unter <http://www.netlib.org/>).

Die oben zitierten Bodendatenbanken enthalten detaillierte Messergebnisse von einzelnen Bodenproben, z. B. von einzelnen Punkten der Bodenwassercharakteristik, geben aber keine durchschnittlichen Parameter für bestimmte Bodenarten an. Solche wurden hingegen von CARSEL und PARRISH [1988] für 12 verschiedene amerikanische Bodenarten veröffentlicht. Aus 246 verschiedenen Bodenproben der Bodenart Sand haben sie folgende Mittelwerte erhalten:

$\theta_r = 0,045$, $\theta_s = 0,43$, $\alpha = 0,145 \text{ cm}^{-1}$, $n = 2,68$ und $k_s = 712,8 \text{ cm/d}$. Die Untersuchung von CARSEL und PARRISH beschränkte sich auf die Retentionskurve und enthält demgemäß keine durchschnittlichen Werte für den Parameter λ bzw. n im Mualem-Modell für das relative kapillare Leitvermögen. Es wird daher wie üblich $\lambda = 0,5$ angenommen.

Im ersten Graphen werden vier Aufstiegsraten, und zwar $q = 0,1 \text{ cm/d}$, $q = 0,4 \text{ cm/d}$, $q = 0,7 \text{ cm/d}$ und $q = 1,0 \text{ cm/d}$ untersucht und die Profile $z(h)$ ermittelt. Dabei stellt sich die Frage, welcher Maximalwert für h gewählt werden soll. Der permanente Welkepunkt wird zumeist mit $h = -15 \text{ bar}$ bzw. -15000 cm angenommen, doch treten infolge der relativen Luftfeuchtigkeit in der Atmosphärenluft wesentlich höhere Wasserspannungen im Boden auf. Eine Größenordnung verschafft die Abbildung 1-17. Demnach entsprechen z. B. 93 % relative Luftfeuchtigkeit rund 100 bar Wasserspannung, 50 % gut 900 bar. Wir wählen vorerst $|h_{max}| = 15 \text{ bar}$ bzw. 15000 cm . Es liegt auf der Hand, dass z nicht proportional mit $-h$ zunehmen wird. Während im Bereich des geschlossenen Kapillarsaumes die Durchlässigkeit konstant ist, daher auch der Gradient konstant ist und h mit z proportional zunehmen muss, nimmt $k(h)$ im ungesättigten Bereich mit $|h|$ stark ab, weshalb der Gradient immer größer werden muss und Δz mit konstantem $\Delta(-h)$ immer kleiner werden muss. Wir teilen daher das Intervall $-10^6 \leq h \leq 0$ nicht mit gleichen Abständen auf, sondern mit logarithmischen.

Die Berechnung sowohl mit dem FORTRAN-Programm als auch mit MATHCAD ergibt für $q = 0,1 \text{ cm/d}$ und $h = -15000 \text{ cm}$ einen Wert für z von 25,6 cm. Trotz der logarithmischen Teilung liegt mehr als die Hälfte aller $z(h)$ -Werte über 25,0 cm; dieser Wert wird bereits bei einer Wasserspannung von $h = 37 \text{ cm}$ erreicht! Infolge des geringen kapillaren Leitvermögens bewirkt die Zunahme der Wasserspannung um fast $1,5 \times 10^4 \text{ cm}$ also nicht einmal eine Zunahme um einen Zentimeter. Dieses extreme Verhalten ist für einen Sandboden typisch. Der Abstand des Grundwasserspiegels von der Geländeoberfläche ist demnach relativ unabhängig vom minimalen Gesamtpotenzial (bzw. der relativen Luftfeuchtigkeit), das an der Oberfläche herrscht; bei einem gewünschten kapillaren Aufstieg von mindestens $q = 1,0 \text{ mm/d}$ darf der Grundwasserspiegel höchstens 25 cm unter GOK liegen.

Auf der Abszisse im untenstehenden Graphen (Abbildung 4-9) wurde ebenfalls eine logarithmische Teilung verwendet und deshalb die positive Wasserspannung anstelle des negativen Druckpotenzials aufgetragen. Man sieht, dass sich z ab etwa $h = 100 \text{ cm}$ nicht mehr ändert und es daher sinnlos ist, $z(h)$ auch für $h = 10^5 \text{ cm}$ oder gar $h = 10^6 \text{ cm}$ zu untersuchen.

Nachdem die Wasserspannung an der oberen Randbedingung kaum einen Einfluss auf das Ergebnis hat, wird für die nächste Zeichnung (Abbildung 4-10) h_{oben} konstant mit $-1,5 \times 10^4 \text{ cm}$ (die Kurve für $h_{oben} = 10^6 \text{ cm}$ wäre deckungsgleich) angenommen und der Fluss q zwischen 0 (muss $z = h_{oben}$ ergeben) und 50 mm/d auf zwei Etappen in gleichmäßigen Schritten variiert.

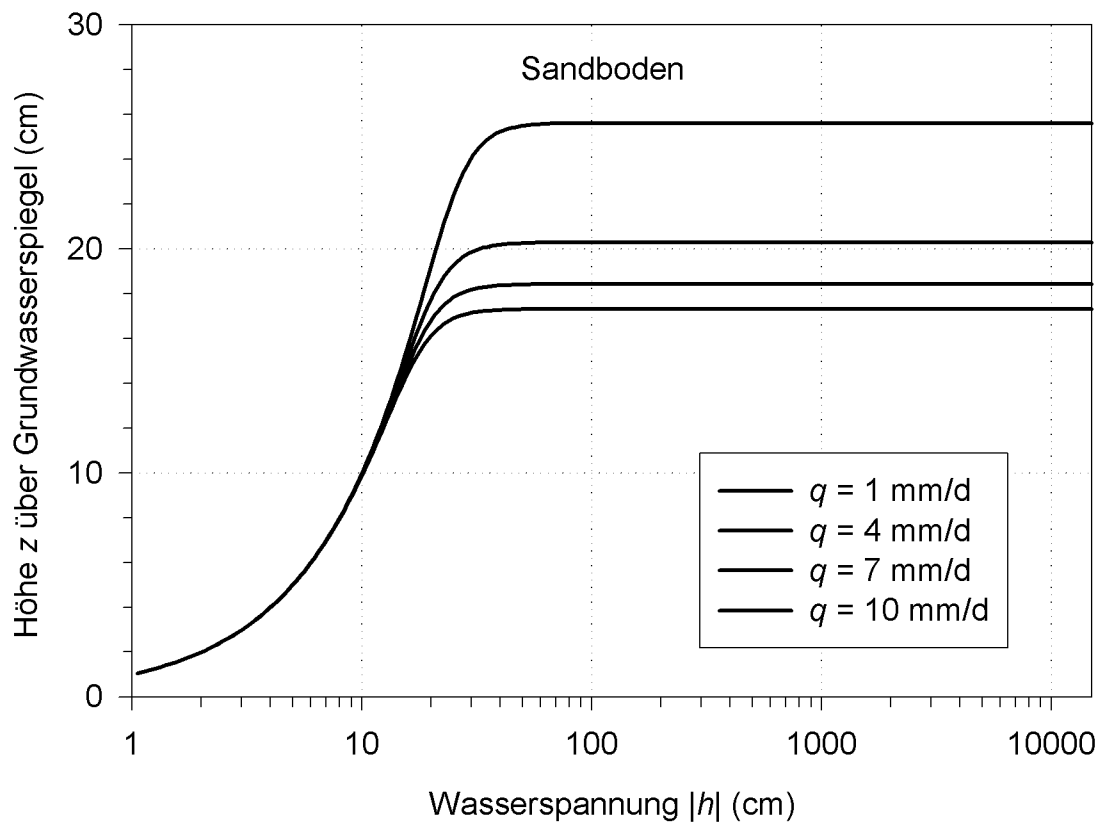


Abbildung 4-9: Beziehung $z(|h|)$ für einen Sandboden bei verschiedenen stationären Aufstiegsraten q

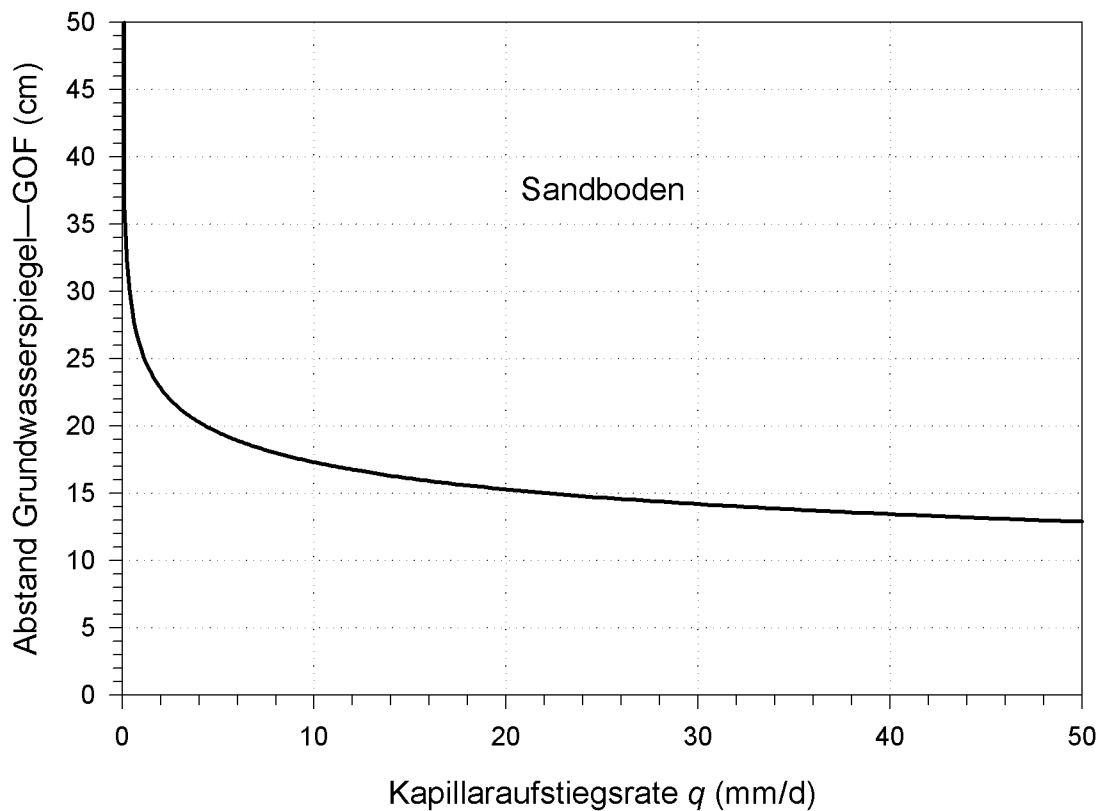


Abbildung 4-10: Kapillare Aufstiegsrate bei gegebenem Abstand des Grundwasserspiegels von der Geländeoberfläche für einen Sandboden ($h_{oben} = -15$ bar)

Zum Vergleich: für einen Tonboden geben CARSEL und PARRISH [1988] folgende Werte an: $\theta_r = 0,068$, $\theta_s = 0,38$, $\alpha = 0,008 \text{ cm}^{-1}$, $n = 1,09$ und $k_s = 4,8 \text{ cm/d}$; $\lambda = 1/2$.

Obwohl beim Tonboden in der Abbildung 4-11 noch eine geringe Neigung der Kurve $z(h)$ für $|h| = 15000 \text{ cm}$ erkennbar ist, sind die Zunahmen von z für $|h| = 10^6 \text{ cm}$ minimal (von 62,43 auf 62,53 cm für $q = 1 \text{ mm/d}$, von 22,17 auf 22,20 cm für $q = 4 \text{ mm/d}$, von 13,90 auf 13,91 cm für $q = 7 \text{ mm/d}$ und von 10,18 auf 10,19 cm für $q = 10 \text{ mm/d}$). Für die Achse in der Abbildung wurde deshalb ebenso wie beim Sandboden ein Bereich von $1 \leq |h| \leq 15000 \text{ cm}$ gewählt.

In der Abbildung 4-12 wurden die Werte für $h = -15 \text{ bar}$ eingetragen. Die Kurve für $h = -1000 \text{ bar}$ wäre deckungsgleich.

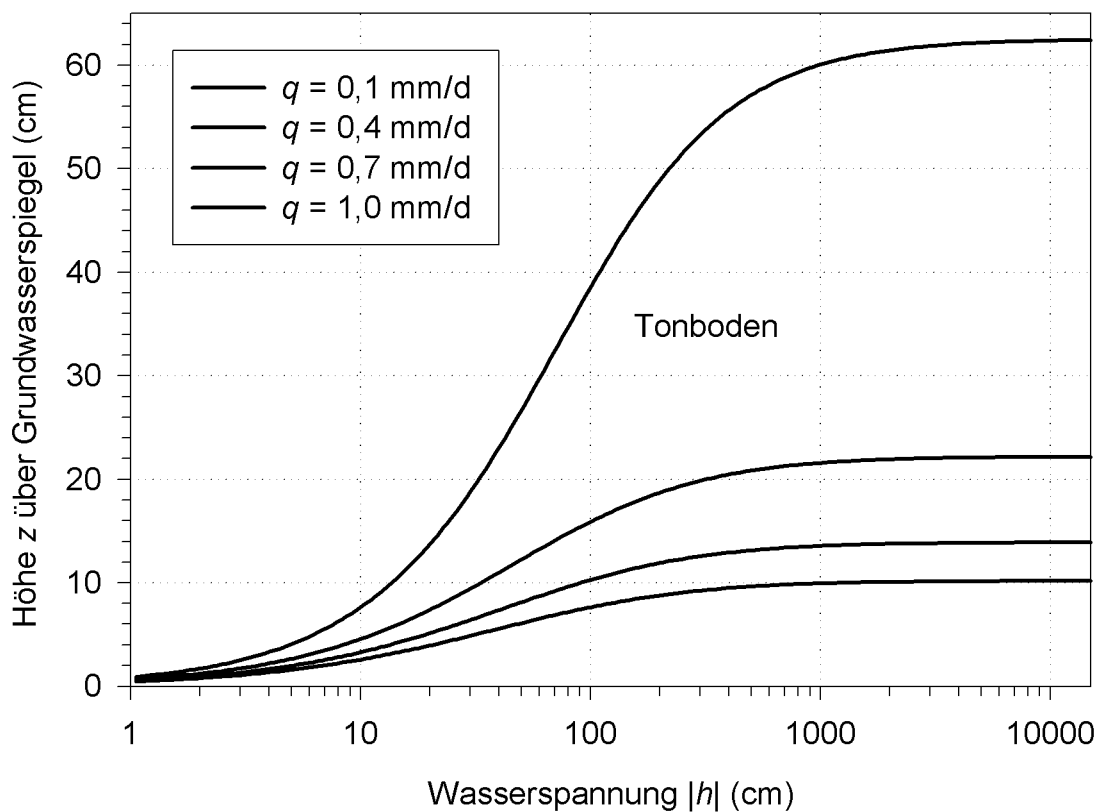


Abbildung 4-11: Beziehung $z(|h|)$ für einen Tonboden bei verschiedenen stationären Aufstiegsraten q

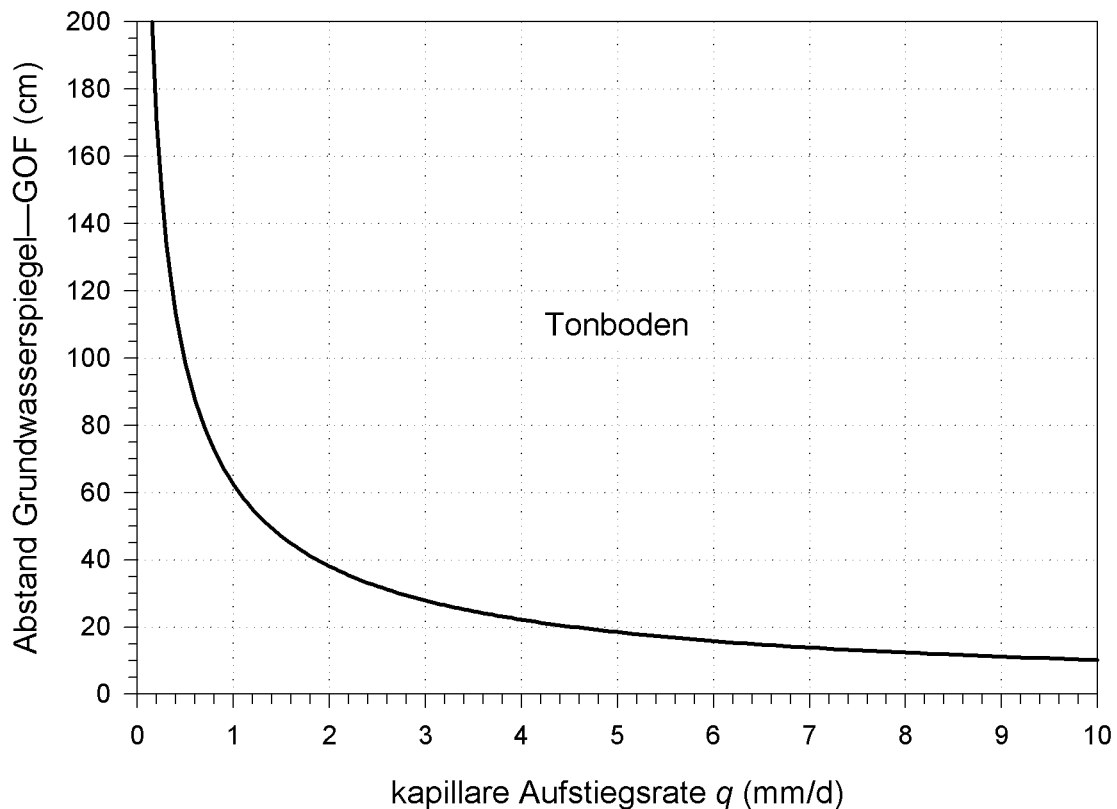


Abbildung 4-12: Kapillare Aufstiegsrate bei gegebenem Abstand des Grundwasserspiegels von der Geländeoberfläche für einen Tonboden ($h_{oben} \leq -15$ bar)

Zu beachten ist, dass die kapillare Aufstiegsrate sowohl durch die bodenphysikalischen Zustandsgrößen (Lage des Grundwasserspiegels und kapillares Leitvermögen des Bodens) als auch durch die atmosphärischen Bedingungen (potentielle Evapotranspiration) begrenzt ist. Da hinsichtlich der Modellierung praktisch kein Unterschied zwischen der kapillaren Wassernachlieferung in die Unterkante der Wurzelzone und dem Aufstieg bis an die Geländeoberfläche besteht, lässt sich aus der Abbildung 4-10 oder der Abbildung 4-12 auch die Wassernachlieferung von einem seichten Grundwasserspiegel in die Unterkante der Wurzelzone ablesen, wenn man anstelle des Abstandes bis zur Geländeoberfläche den Abstand vom Grundwasserspiegel bis zur Unterkante der Wurzelzone einsetzt. Als obere Randbedingung (in der Unterkante der Wurzelzone) wird dabei $h_{oben} = -15$ bar angenommen. Die Arbeitsgruppe Boden [1996] definiert übrigens jenen Abstand des freien Grundwasserspiegels von der Geländeoberfläche als *optimalen Flurabstand*, bei dem sich in der effektiven Durchwurzelungstiefe eine kapillare Wassernachlieferung von 5 mm/d ergibt (über die anzusetzende Wasserspannung werden keine Aussagen getroffen). Als *Grenzflurabstand* wird jener Abstand des freien Grundwasserspiegels von der Geländeoberfläche bezeichnet, bei dem sich in der effektiven Durchwurzelungstiefe eine kapillare Wassernachlieferung von 0,3 mm/d bei einer Wasserspannung von pF 4 bzw. 10 bar ergibt.

5. STOFFTRANSPORT

5.1 Allgemeines

Physikalisch, chemisch oder biologisch bedingte Transport-, Speicher-, Austausch- und Umwandlungsprozesse von im Boden und Grundwasserbereich befindlichen Stoffen sowie Wärmemengen werden als *Migrationsprozesse* bezeichnet [LUCKNER und SCHESTAKOW, 1991]. Die einer *Migration* unterliegenden Stoffe, die fest, flüssig oder gasförmig sein können, werden *Migranten* genannt.

Am *Stofftransport* im Boden können folgende Prozesse beteiligt sein:

Konvektion: Transport von Migranten infolge einer Strömung mit statistisch gemittelter Geschwindigkeit oder Durchflussrate. Es wird z. B. angenommen, dass sich alle im Bodenwasser befindlichen Wassermoleküle und gelösten Substanzen in einem REV mit derselben Geschwindigkeit (der Größe und der Richtung nach) bewegen. Außer bei nahezu stagnierendem Bodenwasser überwiegt der konvektive Transport anteilmäßig bei weitem. RAUSCH et al. [2002] bezeichnen nur die durch Dichte- oder Temperaturunterschiede hervorgerufene Grundwasserströmung als konvektiven Transport, während die Bewegung des gelösten Stoffes mit der Abstandsgeschwindigkeit als *Advektion* bezeichnet wird. Hierzu ist zu bemerken, dass die Konvektion in der Grundwasserströmung kaum auftritt und die Unterscheidung dort kaum von Bedeutung ist – umso mehr hingegen in der Aerodynamik. Die Begriffe Advektion und Konvektion werden häufig nicht scharf getrennt [RAUSCH et al., 2002].

hydrodynamische **Dispersion:** Bewegung der Migranten relativ zur konvektiven Bewegung der Mischphase. Sie ist stark an die Konvektion gekoppelt und extrem maßstabsabhängig. Bewegt sich die Mischphase nicht (keine Konvektion), tritt auch keine hydrodynamische Dispersion auf. Physikalisch gesehen kann die hydrodynamische Dispersion verschiedene Ursachen haben. Auf mikroskopischer Ebene wären insbesondere die Variabilität der Strömungsgeschwindigkeit quer zur Hauptströmungsrichtung (laminare Strömung!), unterschiedliche Poren- bzw. Fließquerschnittsflächen und damit veränderliche Strömungsgeschwindigkeit in Hauptströmungsrichtung, unterschiedliche Fließwege bzw. eine räumlich variable Porenstruktur, transversale Ausbreitung infolge Vereinigung und Verzweigung der Porenkanäle (Winkel $\alpha^* \approx 3^\circ$ in der Abbildung 5-1 rechts) usw. zu nennen [LUCKNER und SCHESTAKOW, 1991]. Auf makroskopischer Ebene ergibt sich eine Dispersion z. B. durch räumliche Inhomogenitäten wie geschichteter Boden, undurchlässige Inseln u. dergl., dreidimensionalen Fluss (Stromlinien mit unterschiedlichen Fließgeschwindigkeiten bei der Zuströmung zu einem Brunnen) usw..

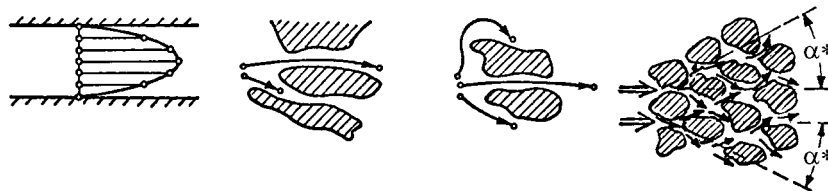


Abbildung 5-1: Ursachen für die mikroskopische hydrodynamische Dispersion [LUCKNER und SCHESTAKOW, 1991]

molekulare **Diffusion**: beruht hauptsächlich auf der Brownschen Bewegung in Feststoffen, Flüssigkeiten und Gasen, aber auch auf osmotischen Kräften, Wärmediffusion und Elektroosmose (Anziehungs- und Abstoßungskräften zwischen den Ionen und elektrisch geladenen Oberflächen). In einer in Ruhe befindlichen wässrigen Lösung gehorcht die Diffusion dem Fickschen Gesetz, wonach der Transport eines Stoffes proportional dem Konzentrationsgradienten ist [HILLEL, 1998]:

$$J_d = -D_0 \cdot dc/dx. \quad (5-1)$$

J_d diffusiver Transport in einer in Ruhe befindlichen wässrigen Lösung
 D_0 stoffspezifischer Diffusionskoeffizient, Proportionalitätsfaktor zwischen dem Konzentrationsgradienten und dem Fluss
 dc/dx effektiver Konzentrationsgradient des betreffenden Stoffes

Im Bodenwasser geht die Diffusion allerdings wesentlich langsamer vor sich, weil

- a) sie tatsächlich nur in dem dem Wasseranteil θ entsprechenden Teil der Querschnittsfläche erfolgt und daher bezogen auf die Gesamtquerschnittsfläche viel weniger Stoffmasse transportiert wird und
- b) der wahre Weg eines Teilchens wegen der Tortuosität τ der Poren deutlich länger ist als die direkte Verbindung zwischen Anfangs- und Endpunkt.

Nach HILLEL [1998] beträgt daher der *effektive Diffusionskoeffizient* D_S in der flüssigen Phase im Boden

$$D_S = D_0 \cdot \theta \cdot \tau.$$

$[D_S]$ = effektiver Diffusionskoeffizient; nimmt stark mit dem Wasseranteil ab
 $[\tau]$ = dim.los Tortuositätsfaktor; empirischer Parameter, der stets < 1 ist, entspricht dem Verhältnis aus der direkten Verbindung des Anfangs- und des Endpunktes eines diffundierenden Partikels und der tatsächlichen Weglänge (in den Poren). τ ist sowohl von der geometrischen Porenkonfiguration als auch vom Wasseranteil abhängig

Zum Teil im Gegensatz zu den obigen, phänomenologisch differenzierten Ausdrücken definieren BEAR und VERRUIJT [1994] Begriffe, die sich stärker an den beobachtbaren Auswirkungen und an den Hauptströmungsrichtungen (longitudinal und transversal) orientieren. Sie erwähnen insbesondere, dass die molekulare Diffusion (auf makroskopischer Ebene) im Gegensatz zur Dispersion auch dann stattfindet, wenn keine konvektive Bewegung der Mischphase vorhanden ist (*makroskopische Diffusion*).

Liegt Konvektion vor, verstärkt die molekulare Diffusion auf mikroskopischer Ebene insbesondere die transversale (siehe Abbildung 5-2c!), also normal zur Hauptströmungsrichtung erfolgende Ausbreitung eines Stoffes infolge unterschiedlicher örtlicher Geschwindigkeiten. Diese nach zwei unterschiedlichen Prinzipien (Dispersion und mikroskopische, durch die Dispersion bedingte Diffusion) erfolgende Ausbreitung wird als **mechanische Dispersion** bezeichnet.

Unter dem Begriff „*hydrodynamische Dispersion*“ subsumieren die beiden Autoren sowohl die makroskopische Diffusion als auch die mechanische Dispersion insbesondere deshalb, weil beide Prozesse – vorhandene Konvektion vorausgesetzt – untrennbar miteinander verbunden sind und in der Erscheinung kaum auseinandergehalten werden können.

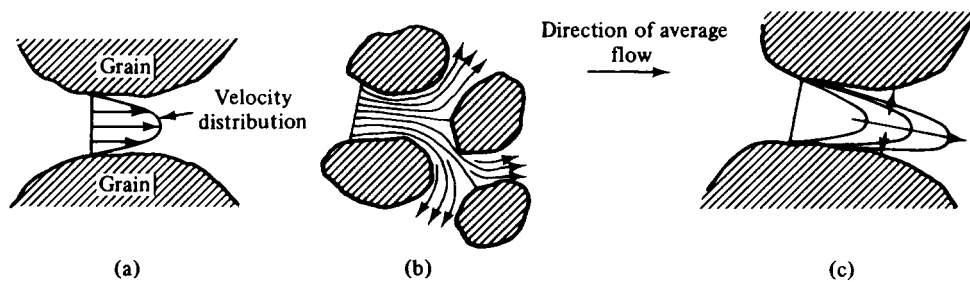


Abbildung 5-2: Ausbreitung infolge mechanischer Dispersion [BEAR und VERRUIJT, 1994]

5.2 Modellierung

Obwohl im weiteren das von WAGENET und HUTSON [1989] im Programm LEACHM implementierte Modellierungskonzept für den Stofftransport vorgestellt wird, ist der Großteil der Ansätze nicht programmspezifisch, sondern in vielen Lehrbüchern – z. B. bei JURY et al. [1991] oder HILLEL [1998] – zu finden und damit weit verbreitet.

WAGENET und HUTSON haben den Stofftransport im Boden J_S den einzelnen Prozessen und Phasen entsprechend in folgende Teilkomponenten gegliedert:

- Diffusion J_{DL} infolge eines Konzentrationsunterschiedes im Bodenwasser (L für liquid)
- Diffusion J_{DG} infolge eines Konzentrationsgradienten in der Bodenluft (G für gaseous)
- Konvektion J_{CL} (Massenfluss) als Ergebnis der Wasserbewegung
- Konvektion J_{CG} in der Dampfphase auf Grund von Druckunterschieden der Bodenluft

Die Summe aller Teilkomponenten ergibt den gesamten Transport:

$$\boxed{J_S = J_{DL} + J_{CL} + J_{DG} + J_{CG}} \quad (5-2)$$

Ein bestimmter Stoff kann sich in der flüssigen bzw. wässrigen Phase (Bodenwasser), in der Gasphase (Bodenluft) oder in der adsorbierten Phase (an den Feststoffen angelagert) befinden, aber auch zwischen den einzelnen Kompartimenten wechseln. Ob ein Phasenübertritt erfolgt oder ein Gleichgewicht herrscht, hängt von den Konzentrationen des betreffenden Stoffes in den einzelnen Phasen ab, die also gegenseitig voneinander abhängen. Infolgedessen können die einzelnen Transportprozesse J_{DL} , J_{CL} , J_{DG} und J_{CG} nicht getrennt voneinander berechnet werden. Bevor mit der Modellierung der einzelnen Teilkomponenten begonnen werden kann gilt es daher vorerst, einen Zusammenhang zwischen den Konzentrationen in den einzelnen Phasen zu finden.

Die gesamte, in der Bodenwasserlösung, in der adsorbierten Phase und in der Gasphase enthaltene Menge eines Stoffes c_T pro m^3 Bodenvolumen beträgt

$$c_T = \rho \cdot c_S + \theta \cdot c_L + n_a \cdot c_G \quad (5-3)$$

$[c_T]$	$= \text{g} \cdot \text{m}^{-3}$	($= \text{mg} \cdot \text{dm}^{-3}$) Gesamtmasse eines Stoffes pro Volumseinheit des Bodens
$[\rho]$	$= \text{kg} \cdot \text{m}^{-3}$	(Lagerungs-)Dichte des Feststoffes (mit Adsorptionsoberflächen)
$[c_S]$	$= \text{g} \cdot \text{kg}^{-1}$	Konzentration des Stoffes in der adsorbierten Phase
$[\theta]$	$= \text{dim.los}$	Wasseranteil ($= n_l$)
$[c_L]$	$= \text{g} \cdot \text{m}^{-3}$	($= \text{mg} \cdot \text{dm}^{-3}$) Konzentration des Stoffes in der Bodenwasserlösung

$[n_a]$ = dim.los gasgefüllter Porenanteil; $n_a = \theta_s - \theta$, wobei θ_s der Sättigungswasseranteil ist
 $[c_G]$ = $\text{g}\cdot\text{m}^{-3}$ (= $\text{mg}\cdot\text{dm}^{-3}$) Konzentration des Stoffes in der Gasphase

Bezüglich der Aufteilung eines Stoffes zwischen der adsorbierten Phase, der Bodenwasserlösung und der Gasphase wird für Pestizide und Stickstoffkomponenten angenommen, dass sie einer linearen Adsorptionsisotherme gehorchen, nach der die Konzentration des adsorbierten Stoffes (an der Feststoffoberfläche) proportional zur Konzentration des betreffenden Stoffes in der Bodenwasserlösung ist:

$$c_S = K_d \cdot c_L \quad (5-4)$$

$[c_S]$ = $\text{g}\cdot\text{kg}^{-1}$ Konzentration des Stoffes in der adsorbierten Phase
 $[c_L]$ = $\text{g}\cdot\text{m}^{-3}$ (= $\text{mg}\cdot\text{dm}^{-3}$) Konzentration des Stoffes in der Bodenwasserlösung
 $[K_d]$ = $\text{m}^3\cdot\text{kg}^{-1}$ Adsorptions- oder Verteilungskoeffizient, abhängig vom betrachteten Stoff, eventuell auch vom Ort bzw. von der Tiefe im Boden

Es wird darüber hinaus angenommen, dass die Ad- bzw. Desorption bei geänderter Konzentration in der Bodenwasserlösung augenblicklich bzw. ohne Reaktionskinetik vor sich geht.

Für flüchtige Substanzen ist es notwendig, eine Beziehung zwischen den Konzentrationen in der flüssigen Phase (c_L) und der Gasphase (c_G) herzustellen. In Anbetracht, dass das Verhältnis flüssig/gasförmig durch das modifizierte Henry-Gesetz beschrieben werden kann, haben JURY et al. [1983] folgenden funktionalen Zusammenhang vorgeschlagen

$$c_G = K_H^* \cdot c_L, \quad (5-5)$$

wobei $K_H^* = c_G^*/c_L^*$ ist.

$[K_H^*]$ = dim.los modifizierte Henry-Konstante; definiert als das Verhältnis zwischen der Dichte des gesättigten Dampfes des Stoffes (c_G^*) und seiner Löslichkeit in Wasser (c_L^*)
 $[c_G^*]$ = $\text{kg}\cdot\text{m}^{-3}$ Dichte des gesättigten Dampfes des betreffenden Stoffes
 $[c_L^*]$ = $\text{kg}\cdot\text{m}^{-3}$ Löslichkeit der Substanz in Wasser

Ersetzt man nun in der Gleichung 5-3 c_S durch die Beziehung 5-4, c_G mittels Gleichung 5-5 und n_a durch $\theta_s - \theta$, erhält man

$$c_T = \rho \cdot K_d \cdot c_L + \theta \cdot c_L + (\theta_s - \theta) \cdot K_H^* \cdot c_L$$

bzw. $c_T = c_L \cdot (\rho \cdot K_d + \theta + n_a \cdot K_H^*)$ (5-6)

Für nichtflüchtige Substanzen sind K_H^* und c_G Null.

Damit wurden alle Teilkonzentrationen auf die Konzentration in der Bodenwasserlösung bezogen und die Gesamtkonzentration ist nur mehr von c_L abhängig.

Mit der Modellierung der Teilkomponente J_{DL} des Gesamttransportes beginnend, bildet das Ficksche Gesetz bzw. Gleichung 5-1 den Ausgangspunkt für den diffusiven Fluss in der wässrigen Phase eines porösen Mediums [WAGENET und HUTSON, 1989]:

$$J_{DL} = -D_p(\theta) \cdot \frac{dc_L}{dz} \quad (5-7)$$

$[J_{DL}]$ = $\text{g}\cdot\text{m}^{-2}\cdot\text{d}^{-1}$ Diffusion infolge eines Konzentrationsunterschiedes im Bodenwasser
 $[c_L]$ = $\text{g}\cdot\text{m}^{-3}$ (= $\text{mg}\cdot\text{dm}^{-3}$) Konzentration des Stoffes in der Bodenwasserlösung
 $[z]$ = m Ortskoordinate in Fließrichtung
 $[D_p]$ = $\text{m}^2\cdot\text{d}^{-1}$ (gebräuchlichere Einheit: $\text{mm}^2\cdot\text{d}^{-1}$) effektiver Diffusionskoeffizient
 $[\theta]$ = dim.los Wasseranteil (genau genommen Anteil der Bodenwasserlösung am Gesamtvolumen)

Für $D_p(\theta)$ wurde von KEMPER und van SCHAIK [1966] eine Modellfunktion in Abhängigkeit vom Diffusionskoeffizienten in einer reinen Flüssigkeit aufgestellt:

$$D_p(\theta) = D_{OL} \cdot a \cdot e^{b\theta} \quad (5-8)$$

- $[D_{OL}] = \text{m}^2 \cdot \text{d}^{-1}$ stoffspezifischer *Diffusionskoeffizient in einer Flüssigkeit* (ohne Feststoffe)
 $[a] = \text{dim.los}$ empirischer Koeffizient; laut OLSEN und KEMPER [1968] (zitiert von WAGENET und HUTSON [1989]) ist $0,005 < a < 0,01$
 $[b] = \text{dim.los}$ empirischer Koeffizient; laut OLSEN und KEMPER [1968] ist $b = 10$

Der konvektive Transport eines gelösten Stoffes mit dem Bodenwasser wird üblicherweise beschrieben durch

$$J_{CL} = -\theta \cdot D_M(q) \cdot \frac{dc_L}{dz} + q \cdot c_L \quad (5-9)$$

- $[J_{CL}] = \text{g} \cdot \text{m}^{-2} \cdot \text{d}^{-1}$ konvektiver Transport eines gelösten Stoffes infolge der Wasserbewegung
 $[D_M] = \text{m}^2 \cdot \text{d}^{-1}$ mechanischer Dispersionskoeffizient; beschreibt die Durchmischung zwischen großen und kleinen Poren infolge lokaler Unterschiede in der mittleren Strömungsgeschwindigkeit (bezüglich mechanischer Dispersion siehe auch Seite 148)
 $[q] = \text{m} \cdot \text{d}^{-1}$ makroskopischer Wasserfluss
 $[\frac{dc_L}{dz}] = \text{g} \cdot \text{m}^{-4}$ Konzentrationsgradient in Strömungsrichtung

$D_M(q)$ kann abgeschätzt werden durch

$$D_M(v) = \lambda \cdot |v| \quad (5-10)$$

- $[\lambda] = \text{m}$ Dispersivität; bewegt sich im Bereich von $2 \text{ mm} < \lambda < 80 \text{ mm}$
 $[v] = \text{m} \cdot \text{d}^{-1}$ Porenfließgeschwindigkeit: $v = q/\theta$

Eine Diffusion in der Gasphase kann gegebenenfalls (bei flüchtigen Stoffen) formuliert werden als

$$J_{DG} = -D_{OG} \cdot \frac{dc_G}{dz} \quad (5-11)$$

- $[J_{DG}] = \text{g} \cdot \text{m}^{-2} \cdot \text{d}^{-1}$ diffusiver Transport eines gasförmigen Stoffes in der Bodenluft
 $[D_{OG}] = \text{m}^2 \cdot \text{d}^{-1}$ stoffspezifischer *Diffusionskoeffizient in der Bodenluft*

Für D_{OG} geben JURY et al. [1983] (zitiert von WAGENET und HUTSON [1989]) folgende Beziehung an:

$$D_{OG}(n_a) = D_0 \cdot T(n_a)$$

- $[D_0] = \text{m}^2 \cdot \text{d}^{-1}$ stoffspezifischer *Diffusionskoeffizient in der Luft* (außerhalb des Bodens)
 $[T] = \text{dim.los}$ Tortuositätsfaktor nach MILLINGTON und QUIRK:

$$T(n_a) = n_a^{10/3} / \theta_s^2$$

Mit dieser Modellfunktion für die Tortuosität erhält man für den Diffusionskoeffizienten in der Bodenluft

$$D_{OG}(n_a) = D_0 \cdot n_a^{10/3} / \theta_s^2 \quad (5-12)$$

Durch die Substitution von c_G im Fickschen Gesetzes für die Gasphase (5-11) mit Hilfe des modifizierten Henry-Gesetzes (5-5) kann man die Diffusion in der Gasphase in Abhängigkeit der Stoffkonzentration im Bodenwasser beschreiben:

$$J_{DG} = -D_{OG} \cdot K_H^* \cdot \frac{dc_L}{dz} \quad (5-13)$$

Die Konvektion in der Gasphase kann die Mobilität von flüchtigen Substanzen im Boden erhöhen. Änderungen im Bodenwassergehalt, im barometrischen Druck und in der Temperatur können eine Luftbewegung im Boden verursachen. Die zyklische Natur dieser Änderungen ermöglichen es, diese Effekte nicht durch Konvektionsterme, sondern durch eine Erhöhung des Gasdiffusionskoeffizienten zu simulieren. Zum Beispiel wurde festgestellt, dass barometrische Luftdruckschwankungen mit einer Amplitude von 2,5 kPa und einer Frequenz von 0,25 d den effektiven Gasdiffusions-

koeffizienten D_{OG} um etwa $0,13 \text{ m}^2 \cdot \text{d}^{-1}$ und Wasserspiegelschwankungen von 1 m im Jahresgang D_{OG} um etwa $0,01 \text{ m}^2 \cdot \text{d}^{-1}$ vergrößern. Diese Vergrößerung kann nach der Korrektur des molekularen Diffusionskoeffizienten in der Bodenluft mit der Tortuosität und dem Wassergehalt die dominante Komponente des effektiven Gasdiffusionskoeffizienten sein. Das allgemeine Ausmaß, mit dem Luftdruckschwankungen und der daraus resultierende konvektive Fluss zum Gasaustausch zwischen dem Boden und der Atmosphäre beitragen, war lange Gegenstand von Diskussionen unter den Bodenphysikern [HILLEL, 1998]. Die Mehrzahl soll zur Meinung tendieren, dass die Diffusion der wichtigere Mechanismus ist.

Die Kombination der Gleichungen 5-7, 5-9 und 5-13 ergibt die Summe aus diffusivem und konvektivem Fluss in der wässrigen Phase und in der Gasphase:

$$J_{DL} + J_{CL} + J_{DG} = -D_p(\theta) \cdot \frac{dc_L}{dz} - \theta \cdot D_M(q) \cdot \frac{dc_L}{dz} - D_{OG} \cdot K_H^* \cdot \frac{dc_L}{dz} + q \cdot c_L$$

Die ersten drei Glieder werden üblicherweise zu einem einzigen Term zusammengefasst:

$$J_{DL} + J_{CL} + J_{DG} = -\theta \cdot D(\theta, q) \cdot \frac{dc_L}{dz} + q \cdot c_L \quad (5-14)$$

$[J_{DL}] = \text{g} \cdot \text{m}^{-2} \cdot \text{d}^{-1}$ Diffusion infolge eines Konzentrationsunterschiedes im Bodenwasser
 $[J_{CL}] = \text{g} \cdot \text{m}^{-2} \cdot \text{d}^{-1}$ konvektiver Transport eines gelösten Stoffes infolge der Wasserbewegung
 $[J_{DG}] = \text{g} \cdot \text{m}^{-2} \cdot \text{d}^{-1}$ diffusiver Transport eines gasförmigen Stoffes in der Bodenluft
 $[\theta] = \text{dim.los}$ Wasseranteil
 $[D] = \text{m}^2 \cdot \text{d}^{-1}$ **effektiver Diffusions-Dispersionskoeffizient** (gebräuchlichere Einheit: mm^2/d); beschreibt den auf der mechanischen Dispersion und der chemischen Diffusion sowohl in der wässrigen Phase als auch in der Gasphase beruhenden Stofftransport und ist definiert durch

$$D(\theta, q) = D_p(\theta)/\theta + D_M(q) + D_{OG} \cdot K_H^*/\theta \quad (5-15)$$

$[c_L] = \text{g} \cdot \text{m}^{-3}$ (= $\text{mg} \cdot \text{dm}^{-3}$) Konzentration des Stoffes in der Bodenwasserlösung
 $[z] = \text{m}$ Ortskoordinate in Fließrichtung
 $[q \cdot c_L] = \text{g} \cdot \text{m}^{-2} \cdot \text{d}^{-1}$ konvektives Transportglied der Bodenwasserbewegung

Diese Gleichung beschreibt den Gesamttransport für bestimmte Werte der Größen θ , q , $D(\theta, q)$ und c_L , die bei stationären Verhältnissen konstant bleiben. Der Stofftransport im Felde geht aber unter natürlichen Bedingungen fast immer instationär vor sich, d. h. dass sich die unabhängigen Variablen θ und q zeitlich ändern. Darüber hinaus können Quellen oder Senken die Stoffkonzentration c_L verändern. Die Gleichung 5-14 gilt also unter instationären Verhältnissen nur für einen (beliebigen) Zeitpunkt (mit bestimmten Werten von θ und q) und beschreibt nicht das zeitliche Transportverhalten.

Die Transportgleichung 5-14 muss daher zur räumlich-zeitlichen Beschreibung des Stofftransportes mit einer Kontinuitätsbeziehung der Masse für Raum und Zeit kombiniert werden. Daraus entsteht die sogenannte **Konvektions-Dispersions-Gleichung (CDE)** für den Stofftransport

$$\frac{\partial c_T}{\partial t} = \frac{\partial J_S}{\partial z} + QC \quad (5-16)$$

$[c_T] = \text{g} \cdot \text{m}^{-3}$ (= $\text{mg} \cdot \text{dm}^{-3}$) Gesamtkonzentration (flüssig, gasförmig, adsorbiert) bzw. Gesamtmasse eines Stoffes pro Volumseinheit des Bodens
 $[t] = \text{d}^{-1}$ Zeit

- [J_S] = $\text{g} \cdot \text{m}^{-2} \cdot \text{d}^{-1}$ Gesamttransport; Konvektion und Diffusion in der wässrigen Phase und in der Gasphase
 [z] = m Ortskoordinate in Fließrichtung
 [QC] = $\text{g} \cdot \text{m}^{-3} \cdot \text{d}^{-1}$ Quell-/Senkenglied

Aus der Beziehung für die Gesamtkonzentration (5-6) $c_T = c_L \cdot (\rho \cdot K_d + \theta + n_a \cdot K_H^*)$ folgt für 5-16:

$$\frac{\partial}{\partial t} \left[c_L \cdot (\theta + \rho \cdot K_d + n_a \cdot K_H^*) \right] = \frac{\partial}{\partial z} \left[\theta \cdot D(\theta, q) \cdot \frac{\partial c_L}{\partial z} - q \cdot c_L \right] + QC \quad (5-17)$$

- [c_L] = $\text{g} \cdot \text{m}^{-3}$ ($\equiv \text{mg} \cdot \text{dm}^{-3}$) Konzentration des Stoffes in der Bodenwasserlösung
 [θ] = dim.los Wasseranteil n_l (genau genommen Anteil der Bodenwasserlösung am Gesamtvolumen)
 [ρ] = $\text{kg} \cdot \text{m}^{-3}$ (Lagerungs-)Dichte des Feststoffes (mit Adsorptionsoberflächen)
 [K_d] = $\text{m}^3 \cdot \text{kg}^{-1}$ Adsorptions- oder Verteilungskoeffizient, abhängig vom betrachteten Stoff
 [n_a] = dim.los gasgefüllter Porenanteil; $n_a = \theta_s - \theta$, wobei θ_s der Sättigungswasseranteil ist
 [K_H^*] = dim.los modifizierte Henry-Konstante; definiert als das Verhältnis zwischen der Dichte des gesättigten Dampfes des Stoffes (c_G^*) und seiner Löslichkeit in Wasser (c_L^*)
 [D] = $\text{m}^2 \cdot \text{d}^{-1}$ effektiver Diffusions-Dispersionskoeffizient
 [q] = $\text{m} \cdot \text{d}^{-1}$ konvektiver Fluss der Bodenwasserlösung (bezogen auf den Fließquerschnitt)
 [z] = m Ortskoordinate in Fließrichtung
 [QC] = $\text{g} \cdot \text{m}^{-3} \cdot \text{d}^{-1}$ Quell-/Senkenglied

In dieser Form tritt in der CDE lediglich c_L als unbekannte Konzentration des betrachteten Stoffes in der Bodenwasserlösung auf.

5.3 Numerische Umsetzung im Programm LEACHM

Gleichung 5-17 ist eine partielle Differentialgleichung, die vorteilhafterweise durch ein numerisches Verfahren gelöst wird. Ein Wesenszug dieser Verfahren ist die räumliche und zeitliche Diskretisierung des Transportgebietes. WAGENET und HUTSON [1989] beschreiben den eindimensional-vertikalen Stofftransport durch ein finite-Differenzen-(FD-)Verfahren mit uneinheitlichen Tiefeninkrementen (unterschiedliche Abstände der Diskretisierungspunkte) und Vernachlässigung aller zweiten Ableitungen. Beim FD-Verfahren wird für jeden Knotenpunkt eine Differenzengleichung aufgestellt (vgl. Wasserbewegung), bei die Differentialquotienten für die betreffende Stelle durch Differenzenquotienten ersetzt sind. Die Gleichung 5-17 wird stellvertretend für den Knoten i (als räumlicher Index wird i im untenstehenden Text tiefgestellt) und den Zeitpunkt $t^{j+1/2}$ ausgewertet (der Ausdruck $t^{j+1/2}$ ist kein Exponent, sondern ein hochgestellter Index). Der Differenzenausdruck für den ersten, ausmultiplizierten Term auf der linken Seite der Gleichung lautet (für c_L wird ab nun kurz c geschrieben)

$$\frac{\partial(\theta \cdot c_L)_i}{\partial t} = \frac{\theta_i^{j+1} \cdot c_i^{j+1} - \theta_i^j \cdot c_i^j}{\Delta t} \quad (5-18)$$

Der zweite Differentialquotient auf der linken Seite der Gl. 5-17 wird ersetzt durch (ρ und K_d sind wohl vom Ort bzw. der Tiefenlage, jedoch nicht von der Zeit abhängig und können daher herausgehoben werden)

$$\frac{\rho \cdot K_d \cdot \partial(c_L)_i}{\partial t} = \rho_i \cdot K_{d_i} \cdot \frac{c_i^{j+1} - c_i^j}{\Delta t} \quad (5-19)$$

Die durch den dritten Ausdruck dargestellte Ableitung wird gebildet durch (für n_a steht ab nun ε)

$$\frac{K_H^* \cdot \partial(n_a \cdot c_L)_i}{\partial t} = K_H^* \cdot \frac{\varepsilon_i^{j+1} \cdot c_i^{j+1} - \varepsilon_i^j \cdot c_i^j}{\Delta t} \quad (5-20)$$

$D(\theta, q)$ in der räumlichen Ableitung auf der rechten Seite der Gleichung 5-17 ist keine Konstante, sondern eine Funktion des räumlich (und zeitlich) variierenden Wassergehaltes und des Flusses. Um die Abhängigkeit des Koeffizienten $D(\theta, q)$ von der Ortsvariablen z zu untersuchen, muss er gemäß Gleichung 5-15 in abhängige Variable und unabhängige Konstante aufgesplittet werden:

$$D(\theta, q) = D_M(q) + D_p(\theta)/\theta + D_{OG} \cdot K_H^*/\theta$$

Die Koeffizienten für die einzelnen Teilprozesse D_p , D_M und D_{OG} werden nun ebenfalls auf ihre Abhängigkeit von ortsabhängigen Variablen untersucht bzw. durch die Modellfunktionen 5-10 ($D_M(v) = \lambda \cdot |v|$), 5-8 ($D_p(\theta) = D_{OL} \cdot a \cdot e^{b \cdot \theta}$) und 5-12 ($D_{OG}(n_a) = D_0 \cdot n_a^{10/3} / \theta_s^2$) ersetzt

$$D(\theta, q) = \lambda \cdot |v| + D_{OL} \cdot a \cdot e^{b \cdot \theta} / \theta + D_0 \cdot \varepsilon^{10/3} / \theta_s^2 \cdot K_H^* / \theta.$$

$D(\theta, q)$ wird an der Stelle zwischen den zwei Knoten $i-1$ und i und auch zeitlich zwischen den Zeitpunkten j und $j+1$ formuliert, wobei λ , D_{OL} , a , b , D_0 und K_H^* als Konstante betrachtet werden (der später für die Ableitung nach z ebenfalls benötigte Wert $D_{i+1/2}$ ergibt sich analog dazu):

$$D_{i-1/2}^{j+1/2} = \lambda \cdot \frac{q_{i-1/2}^{j+1/2}}{\theta_{i-1/2}^{j+1/2}} + D_{OL} \cdot a \cdot \frac{\exp(-b \cdot \theta_{i-1/2}^{j+1/2})}{\theta_{i-1/2}^{j+1/2}} + D_0 \cdot (\varepsilon_{i-1/2}^{j+1/2})^{10/3} \cdot \frac{K_H^*}{\theta_s^2 \cdot \theta_{i-1/2}^{j+1/2}}.$$

Der Wassergehalt für dieselbe Stelle $i-1/2$ und denselben Zeitpunkt $j+1/2$ ergibt sich aus dem Mittel der zwei benachbarten Knoten zu den zwei aufeinander folgenden Zeiten

$$\theta_{i-1/2}^{j+1/2} = (\theta_{i-1}^{j+1} + \theta_{i-1}^j + \theta_i^{j+1} + \theta_i^j) / 4.$$

Jetzt kann der Differenzenquotient für den ersten Term auf der rechten Seite der Gleichung 5-17 aufgestellt werden, wobei die Bildung der zweiten Ableitung vereinbarungsgemäß umgangen wird:

$$\frac{\partial}{\partial z} \left[\theta \cdot D(\theta, q) \cdot \frac{\partial c}{\partial z} \right] \approx \frac{\left(D_{i-1/2}^{j+1/2} \cdot \theta_{i-1/2}^{j+1/2} \cdot \frac{c_{i-1}^j - c_i^j + c_{i-1}^{j+1} - c_i^{j+1}}{\Delta z_1} \right) - \left(D_{i+1/2}^{j+1/2} \cdot \theta_{i+1/2}^{j+1/2} \cdot \frac{c_i^j - c_{i+1}^j + c_i^{j+1} - c_{i+1}^{j+1}}{\Delta z_2} \right)}{\Delta z_3} \quad (5-21)$$

mit $\Delta z_1 = z_{i-1} - z_i$, $\Delta z_2 = z_i - z_{i+1}$ und $\Delta z_3 = \Delta z_1 + \Delta z_2 = z_{i-1} - z_{i+1}$ (der Faktor $1/2$ aus der zeitlichen Mittelung des Konzentrationsgradienten kürzt sich mit dem Faktor $1/2$ aus der räumlichen Mittelung der beiden Knotenabstände heraus).

Unter Berücksichtigung der zweiten Ableitung hätte die Ableitung gelautet

$$\begin{aligned} \frac{\partial}{\partial z} \left[\theta \cdot D(\theta, q) \cdot \frac{\partial c}{\partial z} \right] &= \frac{\partial(\theta \cdot D(\theta, q))}{\partial z} \cdot \frac{\partial c}{\partial z} + \theta \cdot D(\theta, q) \cdot \frac{\partial^2 c}{\partial z^2} \approx \\ &\frac{D_{i-1/2}^{j+1/2} \cdot \theta_{i-1/2}^{j+1/2} - D_{i+1/2}^{j+1/2} \cdot \theta_{i+1/2}^{j+1/2}}{\Delta z_3} \cdot \left(\frac{c_{i-1}^j - c_i^j + c_{i-1}^{j+1} - c_i^{j+1}}{\Delta z_1} + \frac{c_i^j - c_{i+1}^j + c_i^{j+1} - c_{i+1}^{j+1}}{\Delta z_2} \right) \cdot \frac{1}{2} + \\ &+ D_{i-1/2}^{j+1/2} \cdot \theta_{i-1/2}^{j+1/2} \cdot \left(\frac{c_{i-1}^j - c_i^j + c_{i-1}^{j+1} - c_i^{j+1}}{\Delta z_1} - \frac{c_i^j - c_{i+1}^j + c_i^{j+1} - c_{i+1}^{j+1}}{\Delta z_2} \right) \cdot \frac{1}{\Delta z_3} \end{aligned}$$

Die im zweiten, konvektiven Term enthaltenen Knotenkonzentrationen hängen von der Richtung des Wasser- bzw. Lösungsflusses ab. Hierbei sind 4 Fälle zu unterscheiden, die in der Abbildung 5-3 ersichtlich sind.

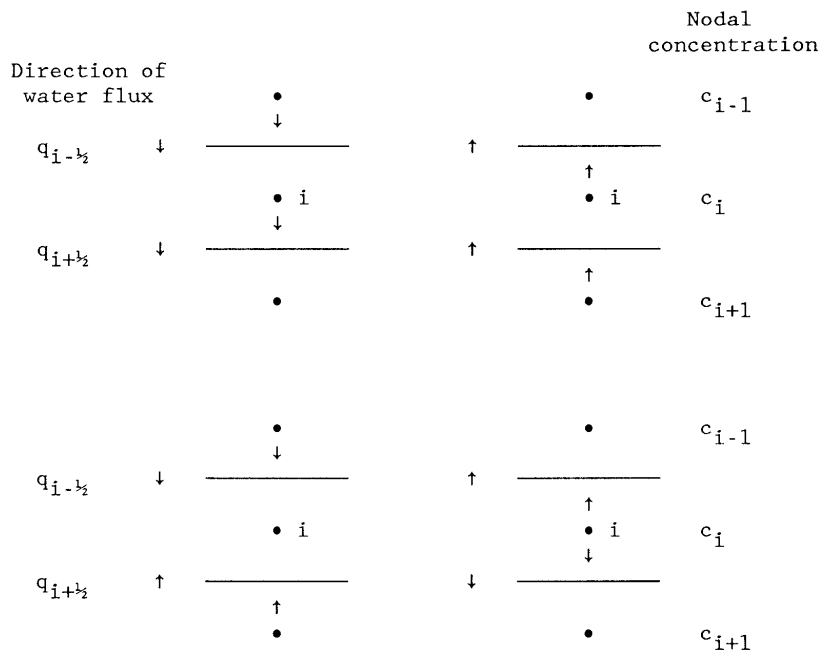


Abbildung 5-3: Einfluss der Wasserströmungsrichtung auf die Knotenkonzentrationen, mit deren Hilfe die örtliche Änderung der Konzentration im Knoten i ausgedrückt wird [WAGENET und HUTSON, 1989]

Die Ableitung des zweiten Terms wird durch einen einzigen Differenzenquotienten ersetzt, in dem die 4 unterschiedlichen Fälle für die Fließrichtung durch die Steuerparameter β_1 bis β_4 berücksichtigt werden:

$$\begin{aligned}
 \beta_1 = 1 & \quad \text{und} \quad \beta_4 = 0 & \quad \text{wenn} \quad q_{i-1/2} > 0 \\
 \beta_1 = 0 & \quad \text{und} \quad \beta_4 = 1 & \quad \text{wenn} \quad q_{i-1/2} < 0 \\
 \beta_2 = 1 & \quad \text{und} \quad \beta_3 = 0 & \quad \text{wenn} \quad q_{i+1/2} > 0 \\
 \beta_2 = 0 & \quad \text{und} \quad \beta_3 = 1 & \quad \text{wenn} \quad q_{i+1/2} < 0
 \end{aligned}$$

$$\begin{aligned}
 \frac{\partial}{\partial z} (q_i^{j+1/2} \cdot c_i^{j+1/2}) = & \frac{\beta_1 \cdot q_{i-1/2}^{j+1/2} \cdot (c_{i-1}^j + c_{i-1}^{j+1})}{\Delta z_3} - \frac{\beta_2 \cdot q_{i+1/2}^{j+1/2} \cdot (c_i^j + c_i^{j+1})}{\Delta z_3} \\
 & + \frac{\beta_3 \cdot q_{i+1/2}^{j+1/2} \cdot (c_{i+1}^j + c_{i+1}^{j+1})}{\Delta z_3} + \frac{\beta_4 \cdot q_{i-1/2}^{j+1/2} \cdot (c_i^j + c_i^{j+1})}{\Delta z_3}
 \end{aligned} \tag{5-22}$$

Damit liegen für sämtliche Ableitungen in der CDE 5-17 Näherungsausdrücke in Form von Differenzenquotienten vor (Gleichungen 5-18, 5-20, 5-19, 5-21 und 5-22), die noch zur Finite-Differenzen-Gleichung für einen einzelnen Knoten zusammengesetzt sind:

$$\begin{aligned}
& \frac{\theta_i^{j+1} \cdot c_i^{j+1} - \theta_i^j \cdot c_i^j}{\Delta t} + \frac{K_H^* \cdot (\varepsilon_i^{j+1} \cdot c_i^{j+1} - \varepsilon_i^j \cdot c_i^j)}{\Delta t} + \rho_i \cdot K_{di} \cdot \frac{(c_i^{j+1/2} - c_i^j)}{\Delta t} = \\
& \frac{D_{i-1/2}^{j+1/2} \cdot \theta_{i-1/2}^{j+1/2}}{\Delta z_1 \cdot \Delta z_3} \cdot (c_{i-1}^j - c_i^j + c_{i-1}^{j+1} - c_i^{j+1}) - \frac{D_{i+1/2}^{j+1/2} \cdot \theta_{i+1/2}^{j+1/2}}{\Delta z_2 \cdot \Delta z_3} \cdot (c_i^j - c_{i+1}^j + c_i^{j+1} - c_{i+1}^{j+1}) \\
& + \frac{\beta_1 \cdot q_{i-1/2}^{j+1/2} \cdot (c_{i-1}^j + c_{i-1}^{j+1})}{\Delta z_3} - \frac{\beta_2 \cdot q_{i+1/2}^{j+1/2} \cdot (c_i^j + c_i^{j+1})}{\Delta z_3} \\
& - \frac{\beta_3 \cdot q_{i+1/2}^{j+1/2} \cdot (c_{i+1}^j + c_{i+1}^{j+1})}{\Delta z_3} + \frac{\beta_4 \cdot q_{i-1/2}^{j+1/2} \cdot (c_i^j + c_i^{j+1})}{\Delta z_3} + QC_i^j
\end{aligned}$$

Das sich für alle Knoten ergebende Gleichungssystem wird, wie für den Wassertransport beschrieben, gelöst. Die Randbedingungen sind einerseits durch die Wasserbewegung vorgegeben und andererseits durch den Stoffein- bzw. -austrag festgelegt. Als Anfangsbedingung müssen in allen Knoten Konzentrationswerte angegeben werden.

Beispiel 5-1: LEACHM – ein prozessorientiertes Modell für den Wasser- und Stofftransport, Phasenübergänge, Pflanzenaufnahme und chemische Reaktionen in der ungesättigten Bodenzone.

Als obere Randbedingung kann eine Infiltration, eine Evaporation oder ein Nulltransport angesetzt werden. Als untere Randbedingung stehen ein Grundwasserspiegel, freier Ausfluss (mit Einheitsgradient) oder ein Nulltransport zur Verfügung. Die Diffusion zwischen den zwei letzten Knotenpunkten wird unterdrückt. Bei einem ansteigenden Grundwasserspiegel wird die Konzentration im letzten Knotenpunkt gleich der Konzentration im Grundwasser gesetzt. Generell ist in der Lösung der CDE der konvektive und der diffusive Transport in der Gasphase inkludiert. Im allgemeinen wird angenommen, dass kein Stofftransport vom Boden in die Atmosphäre erfolgt. Bei flüchtigen Stoffen kann ein zusätzlicher Transport berücksichtigt werden.

In diesem Beispiel wird aufgezeigt:

- Parameteranpassung für die Wasserbewegung
- Simulation einer gemessenen Durchbruchkurve aus der Literatur
- Einfluss der numerischen Dispersion auf das Simulationsergebnis

Ad a). Als Modell für die Wasserbewegung wird im Programm LEACHM die Richards-Gleichung herangezogen, in der die maßgeblichen Bodeneigenschaften durch die Retentionsfunktion (Wasseranteil θ – Wasserspannung h bzw. $h = f(\theta)$ oder $\theta = f(h)$) und das kapillare Leitvermögen ($k = f(\theta)$ oder $k = f(h)$) beschrieben werden. Die beiden in LEACHM verwendeten Beziehungen stützen sich auf Ansätze von CAMPBELL [1974] (zitiert von HUTSON und WAGENET [1992]) in Form der beiden Funktionen 5-23 und 5-26. Das von ihm vorgeschlagene Modell für die Retentionsfunktion lautet

$$h = a \cdot (\theta/\theta_s)^{-b} \quad (5-23)$$

- [h] = m Wasserspannung. h wird Funktion des Wasseranteils betrachtet:
 $h = f(\theta)$
- [a] = m Funktionsparameter; wird oft als Lufttrittspunkt bezeichnet, wird aber aus einer Kurvenanpassung gewonnen

- [b] = dim.los Funktionsparameter, ebenfalls aus einer Kurvenanpassung an Messwerte der Rückhaltefunktion gewonnen
 [θ_s] = dim.los Wasseranteil n_l bei Sättigung \approx Porenanteil

Für den voll gesättigten Zustand mit $\theta = \theta_s$ liefert diese Exponentialfunktion $h = a$. Da θ nicht größer als θ_s werden kann, existieren keine Funktionswerte $h < a$. In der Natur kann sich die Wasserspannung jedoch sehr wohl im Bereich $0 < h < a$ bewegen, und zwar unter Vollsättigung ($\theta = \theta_s$) bei den Böden mit physisch vorhandenem Lufteintrittspunkt bzw. mit geschlossenem Kapillarsaum und unter Teilsättigung ($\theta < \theta_s$) bei denjenigen Böden, die Grobporen enthalten. Die Modellierung der Retentionsfunktion mit Lufteintrittspunkt durch zwei Teilfunktionen gemäß BROOKS und COREY, und zwar mit Funktion 5-23 für den Bereich $\theta < \theta_s$ und mit $\theta = \theta_s$ für den Bereich $a \geq h \geq 0$, ergibt eine C^1 -Unstetigkeit bzw. keine eindeutige Wasserkapazität im Punkt (θ_s, a) . HUTSON und CASS [1987] (zitiert von HUTSON und WAGENET [1992]) sind diesen Schwierigkeiten aus dem Weg gegangen und haben bei der Modellierung auf den Lufteintrittspunkt verzichtet. Stattdessen haben sie die Funktion 5-23 im Teilsättigungsbereich $\theta_s \geq \theta \geq \theta_{cr}$ durch eine zweite, parabolische Funktion (5-24 bzw. 5-27) ersetzt, die für diesen Bereich eine Wasserspannung $0 \leq h \leq h_{cr}$ und damit eine Retentionskurve ergibt, die bei Vollsättigung nicht mit a , sondern mit 0 endet. Die beiden Teilfunktionen sind am Übergangspunkt (θ_{cr}, h_{cr}) zusammengefügt:

$$h = \frac{a \cdot (1 - \theta / \theta_s)^{1/2} \cdot (\theta_{cr} / \theta_s)^{-b}}{(1 - \theta_{cr} / \theta_s)^{1/2}} \quad 0 \leq h < h_{cr} \quad (5-24)$$

und

$$h = a \cdot (\theta / \theta_s)^{-b} \quad h \geq h_{cr}$$

- [a] = m Funktionsparameter (wie bei CAMPBELL, jedoch aufgrund der geänderten Gesamtfunktion mit verschiedenem Wert)
 [b] = dim.los Funktionsparameter, z. B. aus einer Kurvenanpassung an Messwerte der Rückhaltefunktion gewonnen
 [θ_{cr}] = dim.los Wasseranteil im Kurvenübergangspunkt
 [h_{cr}] = m Wasserspannung im Kurvenübergangspunkt
 [θ_s] = dim.los Wasseranteil n_l bei Sättigung \approx Porenanteil

Das Programm LEACHM sieht nun vor, die Parameter a und b entweder direkt anzugeben – dieser Weg muss auch beschritten werden, wenn die Retentionsfunktion durch diskrete Wertepaare bekannt ist – oder indirekt mittels einem von vier verschiedenen Pedotransferfunktionssätzen zu berechnen. Jeder der 4 Sätze besteht je nach Satz aus 5 bis 9 Einzelfunktionen, die jede den Wasseranteil zu einer bestimmten Wasserspannung als Funktion des Sandanteils, Tonanteils, des Anteils an organischem Kohlenstoff und der Trockendichte liefern. An die solcherart bestimmten 5-9 Wertepaare passt nun LEACHM das Retentionsfunktionsmodell von HUTSON und CASS durch Optimierung der Kurvenparameter a und b an. Nach der Festlegung von a und b oder deren Ermittlung aus einer Regressionsanalyse ergibt sich der Übergangspunkt (θ_{cr}, h_{cr}) zu

$$\theta_{cr} = \frac{2b \cdot \theta_s}{1 + 2b} \quad h_{cr} = a \cdot \left(\frac{2b}{1 + 2b} \right)^{-b}$$

Nachdem die diskrete Retentionsfunktion des verwendeten Feinsand-Bodens durch Versuche von FINK [1991] bekannt war, wurden die Werte der beiden Parameter a und b extern berechnet. Das hierbei verwendete Verfahren wurde später als Erweiterung [TAXENBACHER, 1993] in das Programm LEACHM implementiert, um sich die externe Ermittlung der Parameter aus gemessenen Wertepaaren (h, θ) in Hinkunft zu ersparen. Der sich mit diesen Parameterwerten ergebende Kurvenverlauf ist in der Abbildung 5-4 als externe Anpassung eingetragen. Für die als graphische Anpassung bezeichnete Kurve wurden die Wertepaare von FINK auf halblogarithmischem Papier aufgetragen und graphisch eine Gerade angepasst; die Teilfunktion 5-24 wird dabei nicht berücksichtigt. Aus der Zeichnung wurden dann die Parameter a und b abgelesen und damit der Kurvenverlauf in beiden Teilbereichen bestimmt. Die graphische Anpassung liefert offensichtlich eine weniger gute Anpassung bei den größeren Wasserspannungen als die externe. Als unbrauchbar sind jedenfalls jene Retentionskurven zu bezeichnen, die aus den vier Pedotransfersätzen gewonnen wurden. Das sollte als nachdrückliche Empfehlung verstanden werden PTFs nur dann zu verwenden, wenn keine direkte Bestimmung möglich ist und genau zu überlegen, ob die gewünschte Aussage damit getroffen werden kann.

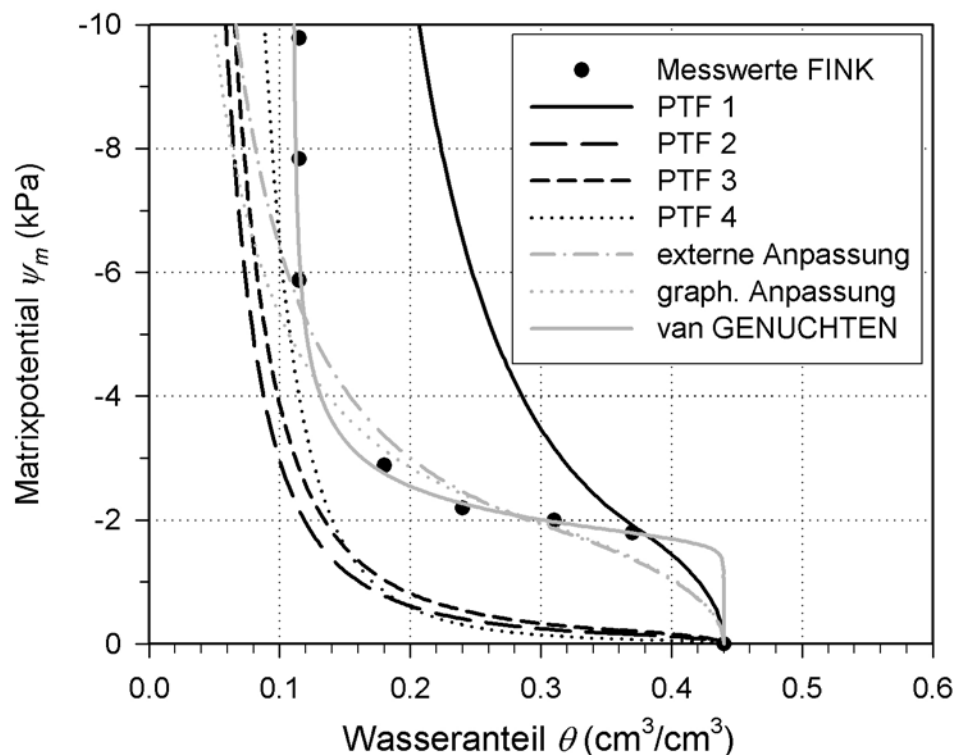


Abbildung 5-4: Gegenüberstellung der berechneten Wasseranteil-Wasserspannung-Beziehungen zu den Messdaten [LOISKANDL und KARNER, 1994]

Eine ausgezeichnete Anpassung ist beim gegebenen Boden mit dem Parametermodell nach van GENUCHTEN [1980] zu erreichen; dieses ist jedoch in LEACHM nicht implementiert. Es beschreibt die Wasseranteil-Matrixpotenzial-Beziehung bekanntlich durch die Funktion (siehe Tabelle 2-1)

$$\theta = \theta_r + \frac{\theta_s - \theta_r}{\left[1 + (\alpha \cdot |h|)^n\right]^m} \quad (5-25)$$

$[h]$	= m	Wasserspannung
$[\theta_s]$	= dim.los	Wasseranteil n_f bei Sättigung \approx Porenanteil
$[\theta_r]$	= dim.los	Restsättigung
$[\alpha]$	= m	Parameter aus Kurvenregression
$[n, m]$	= dim.los	Parameter aus Kurvenregression

Die Modellbeziehung für das kapillare Leitvermögen wurde von CAMPBELL [1974] direkt aus der Rückhaltefunktion unter Annahme eines bestimmten Kapillarenmodells abgeleitet

$$k(\theta) = (\theta / \theta_s)^{2b+2+p}, \quad h \geq h_{cr} \quad (5-26)$$

$[k]$	= m·d ⁻¹	kapillares Leitvermögen
$[p]$	=	Porenparameter (standardmäßig im Programm = 1 gesetzt)

wobei für Wasserspannungswerte $h < h_{cr}$ die Funktion

$$k = k_s (a/h)^{2+2(2+p)/b} \quad 0 < h \leq h_{cr} \quad (5-27)$$

heranzuziehen ist.

Nach der Ermittlung der Parameter für die Wasserbewegung kann die Stoffverlagerung kalkuliert werden. Das Programm ist für stationäre und instationäre Transportvorgänge bei gesättigtem oder ungesättigtem Boden geeignet.

Ad b) Verdrängung von Reinwasser durch eine Tracerlösung unter stationärer, ungesättigter Wasserbewegung.

Als Daten wurden gemessene Werte aus der Literatur (MERMOUND et al., 1991) verwendet. Für diese Randbedingungen und für eine kontinuierliche Tracerzugabe (Sprungfunktion) wurde von OGATA und BANKS [1961] (zitiert von KOBUS [1992]) eine analytische Lösung (Gleichung 5-28) hergeleitet.

$$\frac{C(z,t)}{c_0} = \frac{1}{2} \left[\operatorname{erfc} \left(\frac{z-vt}{2\sqrt{D_L t}} \right) \right] + \exp \left(\frac{v \cdot z}{D_L} \right) \operatorname{erfc} \left(\frac{z+vt}{2\sqrt{D_L t}} \right) \quad (5-28)$$

$[C(z,t)]$		Konzentration als Funktion der Zeit t und des Ortes z
$[c_0]$		Tracerkonzentration
$[D_L]$		longitudinaler Dispersionskoeffizient
$[v]$	= m·s ⁻¹	Transportgeschwindigkeit

Nach Erreichung eines stationären Fließzustandes erfolgt die Tracerzugabe. Der Zeitpunkt $t = 0,0$ min entspricht in den nachfolgenden Abbildungen dem Beginn der Tracerzugabe. Der Tracer ist in 1 m Tiefe nach ca. 65 min. nachweisbar; nach 160 min. ist die Ausgangskonzentration erreicht (Abbildung 5-5).

Der FD-Lösungsansatz bewirkt einen numerischen Dispersionseffekt. Der effektive Diffusions-Dispersions-Koeffizient D kann vereinfacht, ohne Berücksichtigung der Diffusion in der Bodenluft, in der Form

$$D = \frac{D_D}{\theta} + D_M \quad (5-29)$$

- [D] = tatsächlicher Dispersionskoeffizient
- [D_p] = Diffusion in der Bodenwasserlösung
- [D_M] = mechanische Dispersion
- [θ] = dim.los Wasseranteil

dargestellt werden.

Häufig ist der Anteil der mechanischen Dispersion dominant. Von HUTSON und WAGENET wurde deshalb nur D_M herangezogen, wobei zur Korrektur der numerischen Dispersion D_M durch den empirisch ermittelten Wert D_M' (16 % von Δz) ersetzt wird:

$$D_M' = (\lambda - 0,16 \cdot \Delta z) \cdot v_p \quad (5-30)$$

- [D_M'] = korrigierte mechanische Dispersion
- [Δz] = Höheninkrement
- [v_p] = Poregeschwindigkeit
- [λ] = Dispersionskoeffizient

Negative Werte für D_M' werden gleich Null gesetzt.

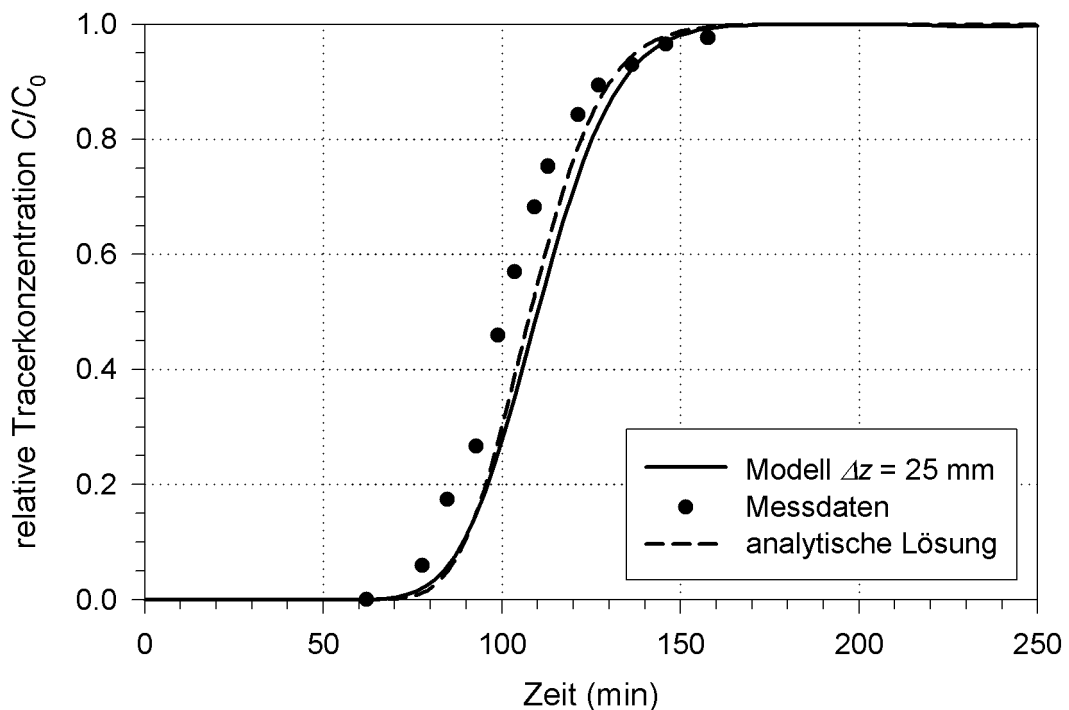


Abbildung 5-5: Vergleich Messwerte – analytische Lösung – Modell

Ad c) Zur Demonstration des Einflusses der numerischen Dispersion werden der Diffusions- und der mechanische Dispersionskoeffizient gleich Null gesetzt. Mit Verkleinerung der Segmentstärke wird der Einfluss der numerischen Dispersion geringer. Bei der Festlegung der mechanischen Dispersion ist es günstig, die Auswirkung des numerisch bedingten Anteils abzuschätzen.

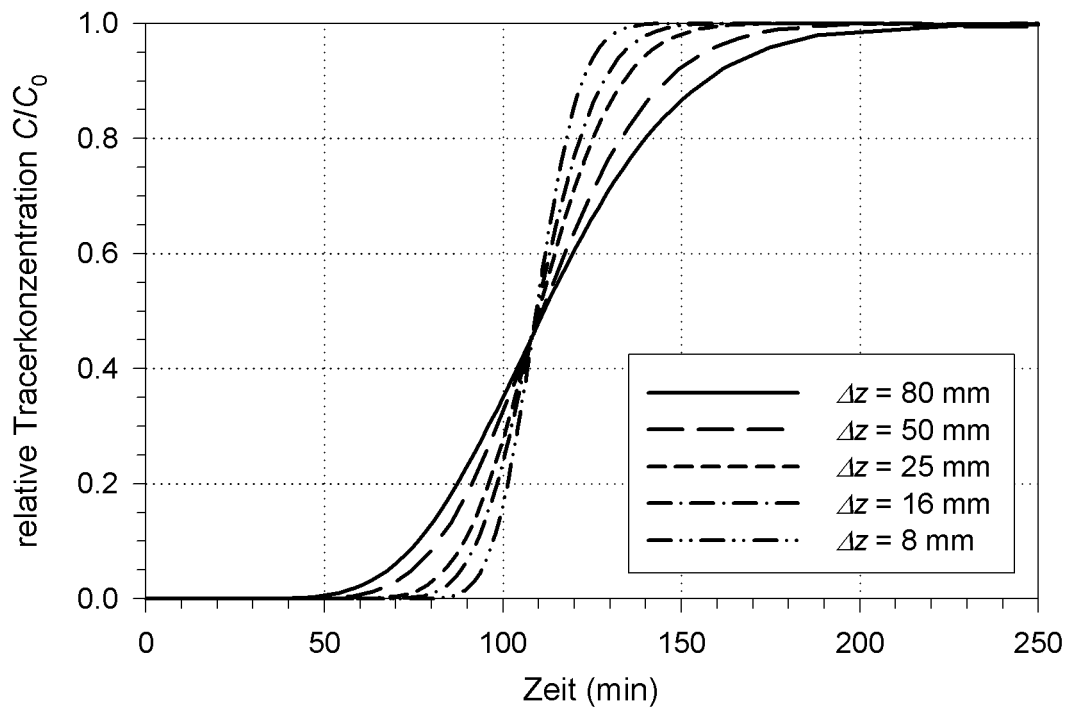


Abbildung 5-6: Numerische Dispersion

6. WÄRMETRANSPORT

Die Bodentemperatur ist für den Pflanzenwuchs – insbesondere für die Keimung und den Auflauf – und für die Bodenorganismen von größter Wichtigkeit. Um über den Energieinhalt eines Stoffes, der selbst keine Wärmequelle oder Senke darstellt, bzw. über dessen Temperatur Aussagen treffen zu können, müssen die Vorgänge des Wärmetransportes bekannt sein. Zu dessen Mechanismen zählt nicht nur die Wärmeleitung, sondern auch die Konvektion oder Wärmeströmung und die Strahlung [VOGEL, 1999].

- **Wärmeleitung** erfolgt nur in Materie, ist aber nicht mit deren makroskopischer Bewegung verbunden, sondern nur mit der Energieübertragung durch Molekülstöße. Sie setzt örtliche Unterschiede in der Molekülenergie, also ein Temperaturgefälle voraus. Wärmeleitung, *Stoffdiffusion* und *Viskosität* sind physikalisch vollkommen analoge Transportphänomene, die sich aus molekularen Vorstellungen ableiten lassen [VOGEL, 1999].
- **Wärmekonvektion** oder **-strömung** setzt makroskopische Bewegungen in der Flüssigkeit oder dem Gas voraus, deren Wärmeinhalt so an andere Stelle transportiert wird (z. B. in den Boden eindringender, warmer Niederschlag oder die latente Energie des Wasserdampfes, der mit der Bodenluft infolge Temperaturunterschiede transportiert wird). Strömungsvorgänge werden bei dichteänderlichen Fluiden insbesondere durch lokale Temperatur- und damit Dichteunterschiede, d. h. durch den Auftrieb der wärmeren Bereiche ausgelöst.
- **Wärmestrahlung** ist elektromagnetischer Natur wie das Licht, sie ermöglicht die Abgabe von Wärme auch im Vakuum und ist nur von der Temperatur des strahlenden Körpers abhängig (Stefan-Boltzmann-Gesetz; siehe auch JURY et al. [1991]).

Weiters zählen zur essentiellen Nomenklatur der Wärmelehre folgende Begriffe:

- *Wärme* ist ungeordnete Molekülbewegung
- *Wärmeenergie* W ist die kinetische Energie dieser Bewegung
- *Temperatur* T ist ein lineares Maß für den Mittelwert dieser Energie [VOGEL, 1999]
- *Wärmekapazität* $C_{\text{Körper}}$ eines Körpers ist das Verhältnis aus Wärmeenergiezunahme und

Temperaturzunahme $C_{\text{Körper}} = \frac{\Delta W}{\Delta T}$.

[W] = J Wärmeenergie. Die Dimension von W entspricht natürlich der der Arbeit:
 $M \cdot L^2 \cdot T^{-2}$

[T] = K Temperatur. In der Wärmelehre ist die Einheit Kelvin wesentlich praktischer als die Einheit Grad Celsius.

[$C_{\text{Körper}}$] = $J \cdot K^{-1}$ Wärmekapazität

In der Bodenphysik wird die Wärmekapazität $C_{\text{Körper}}$ i. a. auf das Volumen des Körpers bezogen bzw. pro Volumeneinheit des Stoffes angegeben und diese volumenbezogene Wärmekapazität kurz als Wärmekapazität C bezeichnet (siehe Kapitel 7.2.5 im Anhang). Wenn eine bestimmte Menge eines homogenen Stoffes die Masse M und die Dichte $\rho = M/V$ besitzt, so nimmt er ein Volumen $V = M/\rho$ ein. Seine volumenbezogene Wärmekapazität C beträgt daher

$$C = \frac{C_{\text{Körper}}}{V_{\text{Körper}}} = \frac{\Delta W}{\Delta T} \cdot \frac{\rho}{M} \quad (6-1)$$

[C] = $J \cdot m^{-3} \cdot K^{-1}$ Wärmekapazität eines Stoffes (auf eine Volumeneinheit bezogen)

$[\rho] = \text{kg}\cdot\text{m}^{-3}$ Dichte des Stoffes

Die volumenbezogene Wärmekapazität des Bodens setzt sich aus der volumenbezogenen Wärmekapazität der einzelnen Phasen mal deren Volumsanteilen zusammen:

$$C_{\text{Boden}} = C_s \cdot n_s + C_l \cdot n_l + C_a \cdot n_a$$

Nachdem die Wärmekapazitäten der einzelnen Phasen und n_s praktisch konstant sind und außerdem $n_s = 1 - n$ und $n_a = n - \theta$ gilt – sofern die flüssige Phase nur aus Bodenwasser besteht –, kann C_{Boden} als Funktion der Variablen θ betrachtet werden:

$$C_{\text{Boden}}(\theta) = C_s - n \cdot (C_s - C_a) + \theta \cdot (C_{\text{H}_2\text{O}} - C_a)$$

Die Wärmekapazität des Bodens steigt also linear mit dem Wasseranteil – unabhängig davon, ob man die Wärmekapazität der Bodenluft vernachlässigt oder nicht.

Besteht zwischen zwei Punkten in einem masseerfüllten Kontinuum ein Temperatur- und damit ein Energieunterschied, tritt unweigerlich ein *Wärmestrom* J_{Hc} auf. Wenn durch eine gerichtete Fläche A in der Zeit dt die Wärmeenergie dW hindurchtritt, dann beträgt J_{Hc}

$$J_{Hc} = \frac{dW}{dt} = \int \mathbf{j}_{Hc} dA$$

$[J_{Hc}] = W$ Wärmestrom (das Formelzeichen J steht in Anlehnung an JURY et al. [1991] für den Transport im Allgemeinen und der Index Hc für die Wärmeleitung bzw. engl. heat conduction)

$[\mathbf{j}_{Hc}] = W \cdot m^{-2}$ Wärmestromdichte; auf die Flächeneinheit bezogener Wärmestrom (vektorielle Feldgröße)

Das Gesetz der Wärmeleitung besagt, dass die *Wärmestromdichte* \mathbf{j}_{Hc} proportional zum Temperaturgefälle ist und seiner Richtung folgt [VOGEL, 1999]:

$$\boxed{\mathbf{j}_{Hc} = \lambda \cdot \text{grad } T} \quad (6-2)$$

$[\lambda] = W \cdot K^{-1} \cdot m^{-1}$ Wärmeleitfähigkeit; Stoffkonstante

$[T] = K$ Temperatur in Kelvin (skalare Feldgröße)

Wenn aus einem Kontrollvolumen für einen infinitesimalen Zeitabschnitt dt mehr Wärme heraustritt als hineinströmt, ändert sich sein Wärmeinhalt W . Für ein kleines Volumen dV drückt die Operation div diesen Verlust aus (Prinzip der Energieerhaltung): $\text{div } \mathbf{j}_{Hc} dV \cdot dt = -dW$

$$\text{div } \mathbf{j}_{Hc} dV = -\frac{dW}{dt} \quad (6-3)$$

Die volumenbezogene Wärmekapazität C eines Stoffes (6-1) drückt aus, wie stark sich die Temperatur eines Stoffes mit dem Wärmeinhalt pro Volumseinheit ändert:

$$C = \frac{dW}{dT \cdot dV}$$

bzw. $dW = C \cdot dT \cdot dV$.

Dieser Ausdruck wird nun benutzt, um die infinitesimale Wärmeinhaltszunahme in Gl. 6-3 durch die infinitesimale Temperaturzunahme zu ersetzen $\text{div } \mathbf{j}_{Hc} dV = -\frac{C \cdot dT \cdot dV}{dt}$,

woraus man nach Kürzen $\frac{dT}{dt} = -\frac{1}{C} \cdot \text{div } \mathbf{j}_{Hc}$

erhält. Durch Ersetzen der Wärmestromdichte \mathbf{j}_{Hc} nach dem Gesetz der Wärmeleitung (6-2) wird daraus die **allgemeine Wärmeleitungsgleichung**

Die Lösung der Differentialgleichung 6-6 erfolgt vorteilhafterweise durch die Trennung der Variablen

$$T(s, t) = f(s) \cdot g(t) \quad (6-7)$$

$$\frac{\partial T}{\partial t} = f(s) \cdot g'(t), \quad \frac{\partial T}{\partial s} = f'(s) \cdot g(t), \quad \frac{\partial^2 T}{\partial s^2} = f''(s) \cdot g(t)$$

Die partiellen Ableitungen werden in Gl. 6-6 eingesetzt

$$f(s) \cdot g'(t) = D \cdot f''(s) \cdot g(t) \quad /: D \cdot g(t) \cdot f(s)$$

$$\frac{1}{D} \frac{g'(t)}{g(t)} = \frac{f''(s)}{f(s)} \quad (6-8)$$

Da die linke Seite nur von der Variablen t und die rechte Seite nur von s abhängt (und beide Variablen voneinander unabhängig sind), sind die beiden Ausdrücke für eine beliebige Wahl von s und t nur dann gleich, wenn sie immer dieselbe Konstante ergeben:

$$\frac{1}{D} \frac{g'(t)}{g(t)} = r = \frac{f''(s)}{f(s)} \quad (6-9)$$

Gleichung 6-9 lässt sich in 2 gewöhnliche lineare Differentialgleichungen aufteilen, die beide zu erfüllen sind:

$$\text{I) } g'(t) - r \cdot D \cdot g(t) = 0$$

$$\text{II) } f''(s) - r \cdot f(s) = 0$$

$$\text{ad I) } \frac{dg}{dt} - r \cdot D \cdot g(t) = 0 \rightarrow \frac{dg}{g(t)} = r \cdot D \, dt$$

$$\ln[g(t)] = r \cdot D \cdot t + C_1$$

$$g(t) = e^{(r \cdot D \cdot t + C_1)} = e^{r \cdot D \cdot t} \cdot e^{C_1}$$

$$g(t) = C_1' \cdot e^{r \cdot D \cdot t} \quad (6-10)$$

$$\text{ad II) } f''(s) - r \cdot f(s) = 0$$

$$\frac{\partial^2 f}{\partial s^2} - r \cdot f(s) = 0 \quad (6-11)$$

Damit der Quotient aus der zweiten Ableitung einer Funktion und der Funktion selbst eine Konstante ergibt (siehe Gl. 6-9), ist für f folgender Ansatz zu wählen:

$$f(s) = C_2 \cdot e^{(\mu \cdot s)}$$

$$f'(s) = C_2 \cdot \mu \cdot e^{(\mu \cdot s)}; \quad f''(s) = C_2 \cdot \mu^2 \cdot e^{(\mu \cdot s)}$$

In Gl. 6-11 eingesetzt: $C_2 \cdot \mu^2 \cdot e^{(\mu \cdot s)} - r \cdot C_2 \cdot \mu \cdot e^{(\mu \cdot s)} = 0$

$$\text{Wenn } C_2 \cdot e^{(\mu \cdot s)} \neq 0 \text{ sein soll, muss } \mu^2 - r = 0 \quad \text{gelten.}$$

$$|\mu_2 = \pm r^{1/2}$$

$$\text{Die Funktion } f(s) \text{ lautet dann } f(s) = C_2 \cdot \exp[\pm(r^{1/2} \cdot s)]. \quad (6-12)$$

Die aus (I) und (II) gewonnenen Funktionen $g(t)$ (6-10) und $f(s)$ (6-12) werden nun laut Gl. 6-7 verknüpft, wobei die Konstanten der beiden Funktionen g und f zusammengefasst werden:

$$T(s, t) = A \cdot \exp[\pm(r^{1/2} \cdot s)] \cdot \exp[r \cdot D \cdot t] \quad A = C_2 \cdot C_1' \quad (6-13)$$

Für die Bestimmung der Konstanten A und vor allem r ist zu bedenken, dass in die Funktion $T(s, t)$ in irgendeiner Form die Sinusschwingung Eingang finden muss. Nach EULER gilt

$$e^{i \cdot \omega \cdot t} = \cos(\omega \cdot t) + i \cdot \sin(\omega \cdot t). \quad (6-14)$$

Wir legen daher r mit $r = i \cdot \omega / D$ fest und erhalten für Gl. 6-13

$$T(s, t) = A \cdot \exp[\pm(i \cdot \omega / D)^{1/2} \cdot s] \cdot \exp[i \cdot \omega \cdot t] \quad (6-15)$$

Weil die zweite Randbedingung ($T(s, t) = 0$ für $\lim_{s \rightarrow \infty}$) nur eingehalten werden kann, wenn der Exponent negativ ist (mit positivem Exponenten würde der Ausdruck gegen Unendlich streben), entfällt die Lösung mit positivem Vorzeichen.

Aus den Beziehungen (siehe 6-14) $i = e^{i\pi/2} = \cos(\pi/2) + i \cdot \sin(\pi/2)$
 und $i^{1/2} = e^{i\pi/4} = \cos(\pi/4) + i \cdot \sin(\pi/4) = (1+i)/2^{1/2}$
 ergibt sich die Formel $i^{1/2} = (i+1)/2^{1/2}$.

Damit wird Funktion 6-15 zu

$$\begin{aligned} T(s, t) &= A \cdot \exp[-(i+1)/2^{1/2} \cdot (\omega/D)^{1/2} \cdot s] \exp[i \cdot \omega t] \\ &= A \cdot \exp[-i \cdot (\omega/(2D))^{1/2} \cdot s] \cdot \exp[-(\omega/(2D))^{1/2} \cdot s] \cdot \exp[i \cdot \omega t] \\ &= A \cdot \exp\{i \cdot [\omega t - (\omega/(2D))^{1/2} \cdot s]\} \cdot \exp[-(\omega/(2D))^{1/2} \cdot s]. \end{aligned}$$

Jetzt kann $e^i \dots$ nach EULER (6-14) in Winkelfunktionen umgeformt werden:

$$T(s, t) = A \cdot \{\cos[\omega t - (\omega/(2D))^{1/2} \cdot s] + i \cdot \sin[\omega t - (\omega/(2D))^{1/2} \cdot s]\} \cdot \exp[-(\omega/(2D))^{1/2} \cdot s]. \quad (6-16)$$

Sowohl der Realteil als auch der imaginäre Teil der Funktion 6-16 sind Lösungen der Differentialgleichung 6-6. Da als Randbedingung eine Sinusfunktion angenommen wurde, wird der imaginäre Teil als Lösung gewählt:

$$\boxed{T(s, t) = A \cdot \exp[-(\omega/(2D))^{1/2} \cdot s] \sin[\omega t - (\omega/(2D))^{1/2} \cdot s]}$$

Die Amplitude der Sinusschwingung und damit der Temperatur, gleichbedeutend mit $T_{max} = -T_{min}$, beträgt somit für einen bestimmten Abstand s von der Wärmequelle

$$T_{max} = -T_{min} = A \cdot \exp[-(\omega/(2D))^{1/2} \cdot s].$$

Für $s = 0$ muss die Amplitude gemäß der oberen Randbedingung 6-5 gleich a betragen, die Konstante A ist daher gleich der gegebenen Amplitude a : $A = a$

Ersetzt man die Wärmediffusivität D durch den Quotienten aus der Leitfähigkeit und der Kapazität ($D = \lambda/C$; siehe Gl. 6-6) und führt den Begriff des Dämpfungswertes (Eindringtiefe) d in der Form

$$D = \frac{\lambda}{C} \rightarrow \sqrt{\frac{\omega \cdot C}{2 \cdot \lambda}} = \frac{1}{d}; \quad d = \sqrt{\frac{2 \cdot \lambda}{\omega \cdot C}}$$

ein, so lässt sich T als Funktion der Zeit und des Abstandes s mit den gegebenen Konstanten a (Amplitude), d (Eindringtiefe) und ω (Periode) einfacher darstellen als

$$T(s, t) = a \cdot e^{-s/d} \cdot \sin(\omega t - s/d).$$

Der *Dämpfungswert* bzw. die *Eindringtiefe* d ist jener Abstand von der Bodenoberfläche, in der das Verhältnis der (abgeschwächten) Amplitude zur Amplitude an der Oberfläche nur mehr den Wert $1/e$ aufweist.

Der Vergleich mit dem vordefinierten Temperaturverlauf an der Bodenoberfläche (6-5) $T = a \cdot \sin(\omega t)$ zeigt, dass der Temperaturverlauf in einer beliebigen Tiefe eine um den Faktor $e^{-s/d}$ abgeminderte und um den Wert $-s/d$ verschobene Sinusfunktion ist.

6.2 Temperaturmittel $T_a \neq 0$, Maximum verschoben

Die Differentialgleichung 6-4 gilt klarerweise auch für diesen Fall

$$\frac{\partial T}{\partial t} = D \cdot \frac{\partial^2 T}{\partial s^2}.$$

Im Gegensatz zum vorherigen Fall schwingt die Temperatur nicht um den Wert 0 Grad, sondern eben um die mittlere Temperatur T_a . Zusätzlich soll berücksichtigt werden, dass die Maximaltemperatur T_{max} an der Bodenoberfläche nicht wie im vorigen Fall nach einem Viertel der Periode, sondern zu einem gewählten Zeitpunkt t_{max} auftritt (z. B. für den Tagesgang um 13 Uhr). Die Anfangs- und Randbedingungen sind daher zu modifizieren:

$$\begin{aligned} T(s, t) &= T_a + a \cdot \sin(\omega t) && \text{für } s = 0, && t \geq 0 \\ T(s, t) &= T_a && \text{für } \lim_{s \rightarrow \infty}, && t \geq 0 \end{aligned}$$

und
$$T(s, t) = T_a + a \quad \text{für } s = 0, \quad t = t_{max}. \quad (6-17)$$

Bei Betrachtung der Differentialgleichung 6-6 ist ersichtlich, dass die konstante Funktion $T(s, t) = A'$ ebenfalls eine (unabhängige) Lösung der Differentialgleichung ist (die erste Ableitung einer Konstanten nach der Zeit beträgt Null, ebenso die zweite Ableitung nach dem Weg, die Differentialgleichung wird also erfüllt; diese Lösung ergibt sich natürlich unter anderen Randbedingungen als den zuvor definierten).

Eine lineare Kombination unabhängiger Lösungen der Differentialgleichung ist bekanntlich eine weitere Lösung derselben. Daher ist

$$T(s, t) = A' + B \cdot a \cdot e^{-s/d} \cdot \sin(\omega t - s/d)$$

auch eine Lösung von 6-6.

Aus den Randbedingungen folgt $A' = T_a$ und $B = 1$:

$$T(s, t) = T_a + a \cdot e^{-s/d} \cdot \sin(\omega t - s/d)$$

Um das Auftreten des Maximalwertes T_{max} an der Bodenoberfläche ($s = 0$) zum Zeitpunkt t_{max} zu erzwingen, ist eine Phasenverschiebung mit dem Wert C vorzunehmen:

$$T(s, t) = T_a + a \cdot e^{-s/d} \cdot \sin(\omega t - s/d + C)$$

Da wegen der dritten Randbedingung 6-17

$$T(0, t_{max}) = T_a + a \cdot \sin(\omega t_{max} + C) = T_a + a$$

sein muss, folgt

$$\sin(\omega t_{max} + C) = 1$$

$$\omega t_{max} + C = \pi/2$$

$$C = \pi/2 - \omega t_{max}$$

und schließlich

$$T(s, t) = T_a + a \cdot e^{-s/d} \cdot \sin[\omega t - s/d + (\pi/2 - \omega t_{max})]$$

Für eine gewählte Periodendauer $p = 24$ Stunden (man könnte z. B. auch einen Jahresgang simulieren) und $t_{max} = 13$ Uhr ergibt sich z. B. für C mit $\omega = 2\pi/p$

$$C = \frac{\pi}{2} - 13 \times \frac{2\pi}{24} = -\frac{7\pi}{12}$$

6.3 Sprunghafte Temperaturänderung

Im Gegensatz zu den ersten beiden Beispielen fluktuiert die Temperatur an der Bodenoberfläche nicht in Form einer Sinusfunktion, sondern ändert sich unmittelbar vor dem Zeitpunkt $t = 0$ abrupt von der Temperatur T_i auf die Temperatur T_0 und bleibt sodann konstant. Zum Zeitpunkt $t = 0$ wird angenommen, dass die Temperatur im gesamten Tiefenprofil außer an der Oberfläche $z = 0$ selbst gleich T_i beträgt. In unendlichem Abstand von der Oberfläche bleibt die Temperatur T_i auch mit der Zeit konstant; in endlichem Abstand wird sie sich der Temperatur an der Oberfläche T_0 nähern. Gesucht ist daher die Funktion der abhängigen Variablen T von den unabhängigen Variablen s und t .

Die Lösung der Diffusionsgleichung unter diesen Anfangs- und Randbedingungen ist nicht nur für die Wärmebewegung von Interesse, sondern auch für die Wasserbewegung (z. B. Eindringen einer Infiltrationsfront in den Boden). Sie wurde daher im Anhang (7.6) unter Anwendung der Boltzmann-Substitution für beide Fälle gelöst.

Die sich ergebende Funktion der Temperatur in Abhängigkeit von der Ortsvariablen s und der Zeit t lautet

$$T(s, t) = T_i + (T_0 - T_i) \cdot \operatorname{erfc} \left(\frac{s}{2 \cdot \sqrt{\lambda / C_n \cdot t}} \right),$$

wobei erfc die Komplementärfunktion zum Wahrscheinlichkeitsintegral ist ($\operatorname{erfc}(u) = 1 - \operatorname{erf}(u)$). Werte der Funktion können mit Hilfe des Strukturcodes im Anhang (7.6.1) ermittelt werden.

7. ANHANG

7.1 Formelzeichen, Einheiten und Definitionen div. physikalischer Größen

7.1.1 SI – Internationales Einheitensystem

SI = „Système Internationale d’Unités“. Größen, Namen und Formelzeichen nach ON V 118 [1996]
"Größen und Einheiten in Physik und Technik"

Tabelle 7-1: Liste der verwendeten Formelzeichen

Formelzeichen	SI-Einheit		Größe
	Zeichen	Name	
a	$\text{m}\cdot\text{s}^{-2}$		Beschleunigung
g	$\text{m}\cdot\text{s}^{-2}$		Fallbeschleunigung Normwert [*] : $g_n = 9,80665 \text{ m/s}^2$
l	m	Meter	Länge
m	kg	Kilogramm	Masse
P	Pa	Pascal	Druck ($\text{Pa} = \text{N}\cdot\text{m}^{-2} = \text{kg}\cdot\text{m}^{-1}\cdot\text{s}^{-2}$)
q	$\text{m}^3\cdot\text{m}^{-2}\cdot\text{s}^{-1}$		Durchflussrate
t	s	Sekunde	Zeit
t	°C	Grad Celsius	Celsiustemperatur
v, u, w	$\text{m}\cdot\text{s}^{-1}$		Geschwindigkeit
A	m^2	Quadratmeter	Flächeninhalt
E		$= \text{kg}\cdot\text{m}^2\cdot\text{s}^{-2}$)	Energie
F	N	Newton ($\text{kg}\cdot\text{m}\cdot\text{s}^{-2}$)	Kraft
G			Gewicht
P	W	Watt ($= \text{J}\cdot\text{s}^{-1} = \text{kg}\cdot\text{m}^2\cdot\text{s}^{-3}$)	Leistung
Q	$\text{m}^3\cdot\text{s}^{-1}$		Fluss, Durchfluss, Volumenstrom
T	K	Kelvin	Temperatur
V	m^3	Kubikmeter	Rauminhalt (Volumen)
W	J	Joule ($= \text{N}\cdot\text{m} =$	Arbeit
$\alpha, \beta, \gamma \dots$	rad	Radian	Ebener Winkel
E	$\text{F}\cdot\text{m}^{-1}$	Farad je Meter	Permittivität
η (Eta)		$(\text{Pa}\cdot\text{s} = \text{kg}\cdot\text{m}^{-1}\cdot\text{s}^{-1})$	dynamische Viskosität
θ (Theta)	$\text{m}^3\cdot\text{m}^{-3}$		Wasseranteil
λ (Lambda)	$\text{W}\cdot\text{K}^{-1}\cdot\text{m}^{-1}$		Wärmeleitfähigkeit
ν (Ny)		$(\text{m}^2\cdot\text{s}^{-1})$	kinematische Viskosität
ρ (Rho)	$\text{kg}\cdot\text{m}^{-3}$		Dichte
σ (Sigma)	$\text{N}\cdot\text{m}^{-1}$	$\text{N}\cdot\text{m}^{-1} = \text{kg}\cdot\text{s}^{-2}$	Oberflächenspannung
τ (Tau)	Pa	Pascal	Schubspannung ($1 \text{ Pa} \equiv 1 \text{ N}\cdot\text{m}^{-2}$)
ω (Omega)	$\text{rad}\cdot\text{s}^{-1}$		Winkelgeschwindigkeit

*: In Österreich liegt die Fallbeschleunigung zwischen $9,7960 \text{ m/s}^2$ (Gipfel des Großglockners) und $9,8095 \text{ m/s}^2$ (nördliches Niederösterreich).

Druckangaben: $1 \text{ hPa} = 1 \text{ mbar} = \frac{10000}{9810} = 1,019368 \text{ cm WS}$

7.1.2 Definitionen und Formelzeichen diverser bodenphysikalischer Größen

$[m_s]$	= kg	Feststoffmasse	
$[V]$	= m^3	Gesamtvolumen; Volumen, das Feststoffe und Poren einnehmen:	$V = V_s + V_p$
$[V_s]$	= m^3	Feststoffvolumen; V_s und Gesamtvolumen V können mittels des Porenanteils n in Beziehung zueinander gesetzt werden:	$n = V_p/V = (V - V_s)/V$, $n \cdot V = V - V_s$, $V_s = V \cdot (1 - n)$ und $V = V_s/(1 - n)$. Es gilt aber auch $V_s = m_s/\rho_s$
$[n]$	= dim.los	Porenanteil; besitzt eigentlich die Dimension $\text{L}^3 \cdot \text{L}^{-3}$; Der Porenanteil ist das Porenvolumen geteilt durch Gesamtvolumen:	$n = V_p/V$
		Es gilt auch $n = n_a + n_l$. Mit $V_p = V - V_s = V - m_s/\rho_s$ erhält man n über die Feststoffdichte aus $n = \frac{V - m_s/\rho_s}{V} = 1 - \frac{m_s}{V \cdot \rho_s}$ bzw. mit $m_s/V = \rho_d$	$n = 1 - \frac{\rho_d}{\rho_s}$
		Wird eine ungestörte Bodenprobe vollständig mit Wasser gesättigt und die Masse der Probe im gesättigten als auch im ofentrockenen Zustand bestimmt, errechnet sich der Porenanteil aus $n_p = n_w = \frac{V_w}{V} = \frac{m_w}{\rho_w \cdot V} = \frac{(m_s + m_w) - m_s}{\rho_d \cdot V}$	
		Weil eine vollständige Wassersättigung bei vielen Böden sehr schwer zu erzielen ist, erfolgt die Bestimmung des Porenanteils im Labor entweder aus ρ_s und ρ_d oder mit dem Gaspyknometer [DANIELSON und SUTHERLAND, 1986]	
$[V_p]$	= m^3	Porenvolumen; ist mitunter vollständig, teilweise oder gar nicht mit Bodenwasser oder Bodenluft gefüllt:	$V_p = V_a + V_l$
$[n_l]$	= dim.los	Porenanteil, der mit Bodenwasser (mit dem Volumen V_l) gefüllt ist:	$n_l = V_l/V$
$[S]$	= dim.los	Sättigung; Bodenwasservolumen geteilt durch das Porenvolumen:	$S = V_l/V_p$
$[n_a]$	= dim.los	Porenanteil, der mit Bodenluft (mit dem Volumen V_a) gefüllt ist:	$n_a = V_a/V$
$[n_s]$	= dim.los	Anteil des Feststoffvolumens am Gesamtvolumen	$n_s = V_s/V$
			$n_s + n_l + n_a = 1$
$[e]$	= dim.los	Porenzahl; $e = V_p/V_s = n \cdot V/(V \cdot (1 - n)) = n/(1 - n) = 1/n - 1$	
$[\rho_s]$	= $\text{kg} \cdot \text{m}^{-3}$	Feststoffdichte, Feststoffmasse geteilt durch Feststoffvolumen:	$\rho_s = m_s/V_s$
		Die englische Bezeichnung für ρ_s lautet "mineral density"	
$[\rho_d]$	= $\text{kg} \cdot \text{m}^{-3}$	Trockendichte, Feststoffmasse geteilt durch Gesamtvolumen:	$\rho_d = m_s/V$
		Die englische Bezeichnung für ρ_d lautet "bulk density"	

Der Begriff der *Lagerungsdichte* [ÖNORM B 4490, 1981], mit dem in der Bodenmechanik mitunter die relative Dichte (eine dimensionslose Verhältniszahl) $D_n = (n_{max} - n)/(n_{max} - n_{min})$ (mit n_{max} als Porenanteil bei der dichtesten und n_{min} bei der lockersten Lagerung) bezeichnet wird und der zur Beurteilung des Zustandes grobkörniger Böden (sehr locker, locker, mitteldicht, dicht, sehr dicht) [PREGL, 1980] dient, ist in der Bodenphysik nicht definiert und sollte in diesem Fachgebiet vermieden werden.

Ähnliches gilt für die *effektive Lagerungsdichte* L_d , die gemäß ARBEITSGRUPPE BODEN [1996] und DVWK-Heft 115 [1980] bei Mineralböden aus der Trockendichte und dem Tongehalt in Masse-% (T) wie folgt berechnet werden kann: $L_d = \rho_d + 0,009 \cdot T$.

Dieser Parameter wird insbesondere im DVWK-Heft 116 [1982] zur Abschätzung der Durchlässigkeit aus der Bodenart verwendet.

7.1.3 Zusammenstellung von Einheiten und Größen in der Stöchiometrie

$[m_u]$	= kg	<p>atomare Massenkonzstante; $m_u = (1,6605402 \pm 0,0000010) \times 10^{-27}$ kg. [ON V 118, 1996]. m_u entspricht 1/12 der Masse eines neutralen Atoms des Nuklids ^{12}C im Grundzustand. (Wenn man sich auf ein spezielles Atom mit der Ordnungszahl (Protonenzahl) Z und der Massenzahl (Nukleonenzahl) A bezieht, spricht man auch von einem Nuklid [MORTIMER, 1996]).</p> <p>Die atomare Massenkonzstante m_u wird vielfach als <i>atomare Masseneinheit</i> (u) auf Atome, Moleküle und deren Bestandteile angewendet.</p>
$[n]$	= mol	<p>Stoffmenge. Natürlich könnte man als Einheit der Stoffmenge einfach ein Teilchen (Molekül) des betreffenden Stoffes festlegen. Diese Einheit würde jedoch in der Stöchiometrie immer riesige Größen für n ergeben. Als Einheit der Stoffmenge wurde daher das Mol festgelegt, das genau der Anzahl an Teilchen entspricht, mit der das Nuklid ^{12}C (im Grundzustand) eine Masse von 0,012 kg ergibt. Nachdem ein Teilchen ^{12}C die zwölfwache Masse von m_u bzw. 12 u besitzt, sind $1/(12 \cdot m_u)$ Teilchen pro Kilogramm und damit $1/(12 \cdot m_u) \times 0,012$ kg = 0,001 kg/m_u Teilchen für eine Masse von 0,012 kg erforderlich. Die Stoffmenge 1 mol umfasst demnach genau $0,001 \text{ kg} / (1,6605402 \times 10^{-27} \text{ kg}) = 6,0221367 \times 10^{23}$ Teilchen. Diese Anzahl wurde als Loschmidtsche Zahl L definiert [SCHAUM, 1976]:</p> $L = \frac{0,001 \text{ kg} \cdot \text{mol}^{-1}}{m_u}$
$[L]$	= mol ⁻¹	<p>Avogadro-Konstante oder <i>Loschmidtsche Zahl</i>; $L = 6,0221367 \times 10^{23} \text{ mol}^{-1}$. L gibt die Anzahl an Teilchen an, die in einem Mol bzw. pro Mol enthalten sind und ist daher jene Anzahl an Atomen des Nuklids ^{12}C im Grundzustand, die eine Masse von 0,012 kg ergeben. $L \cdot m_u \equiv L \cdot 1 \text{ u} = 0,001 \text{ kg} \cdot \text{mol}^{-1} = 1 \text{ g} \cdot \text{mol}^{-1}$</p>
$[m_a]$	= kg	<p><i>Atommasse</i>; durchschnittliche, von der relativen Häufigkeit der vom Element existierenden Isotope abhängige Masse eines Atoms (mitsamt den Elektronen). Da die Atommassen der einzelnen Elemente in der Einheit kg unhandliche Zahlen sind, ist in Tabellenwerken zumeist nicht die Atommasse selbst, sondern die relative Atommasse angeführt.</p>
$[A_r]$	= dim.los	<p>relative Atommasse; die auf die atomare Massenkonzstante bezogene Masse eines bestimmten Atoms (Nuklids). A_r ist z. B. im Periodensystem der Elemente eingetragen. $A_r = m_a / m_u$</p> <p>Die Atommasse m_a ergibt sich demnach aus $m_a = A_r \cdot m_u$</p> <p>Natürlich ließe sich die Atommasse auch in der Einheit u angeben. Da $m_u \equiv 1 \text{ u}$ ist und daher $m_a = A_r \text{ u}$ ist, ist der Zahlenwert der dimensionslosen Größe A_r ident mit dem Zahlenwert der Atommasse m_a in der Einheit u (es ist also egal, ob man den Zahlenwert von A_r als dimensionslose Verhältniszahl auffasst, die mit m_u zu multiplizieren ist um m_a zu erhalten, oder eben als Zahlenwert der Größe m_a mit der Einheit u).</p>
$[m]$	= kg	<p>Teilchenmasse; z. B. ist die Masse eines Moleküls die Summe der Masse seiner Atome. Es gilt auch $m = M/L$ und $m = m_u \cdot \Sigma A_r$.</p>
$[M]$	= kg·mol ⁻¹	<p>Molare Masse; Masse in kg, die 1 mol eines Stoffes besitzt. Wenn ein Teilchen des Stoffes die Masse m besitzt und in einem Mol die Anzahl L an Teilchen enthalten ist, dann muss gelten: $M = m \cdot L$</p> <p>Weiters ist $\{M\} \cdot \text{kg} \cdot \text{mol}^{-1} = (\Sigma A_r) \cdot m_u \cdot L = (\Sigma A_r) \cdot 1 \text{ g} \cdot \text{mol}^{-1} \equiv (\Sigma A_r) \times 10^{-3} \text{ kg} \cdot \text{mol}^{-1}$,</p> $\{M\} \cdot \text{kg} \cdot \text{mol}^{-1} = (\Sigma A_r) \times 10^{-3} \text{ kg} \cdot \text{mol}^{-1}$
<p>d. h. der Zahlenwert der dimensionslosen relativen Masse eines Moleküls als Summe der relativen Massen seiner Atome ist gleich dem Zahlenwert der molaren Masse in der Einheit g·mol⁻¹; die molare Masse in der Einheit kg·mol⁻¹ entspricht einem Tausendstel der relativen Molekülmasse.</p>		

Größen für die relativen Atommassen der Elemente, die atomare Massenkostante oder für andere atomphysikalische Größen werden von der CAWIA – Commission on Atomic Weights and Isotopic Abundances – aufgestellt. CAWIA ist ein Komitee der Division of Inorganic Chemistry in der International Union of Pure and Applied Chemistry (IUPAC). Die Empfehlungen aus dem Jahre 1984 wurden z. B von MOORE [1990] im Periodensystem der Elemente zitiert, jene von 1986 von JAKUBKE und KARCHER [1998]. Neueste Werte stammen aus dem Jahr 1999 (siehe Homepage der CAWIA [<http://www.physics.curtin.edu.au/iupac/>]).

Für das Kohlenstoffnuklid ^{12}C gilt nach den obigen Definitionen: Die Nuklid- bzw. Teilchenmasse $m = 12 \text{ u}$, die Anzahl der Teilchen pro Mol beträgt L und die molare Masse M daher

$$M = m \cdot L = 12 \cdot \text{u} \cdot L = 12 \times 1,6605402 \times 10^{-27} \text{ kg} \times 6,0221367 \times 10^{23} \text{ mol}^{-1} = 0,012 \text{ kg} \cdot \text{mol}^{-1};$$

d. h. die relative Atommasse von $A_r = 12$ entspricht unmittelbar der molaren Masse von $12 \text{ g} \cdot \text{mol}^{-1}$.

Die durchschnittliche relative Masse eines Wasserstoffatoms beträgt laut DE LAETER [2003] $A_r(\text{H}) = 1,00794$, jene des Sauerstoffatoms $A_r(\text{O}) = 15,9994$. Die relative Masse eines Wassermoleküls ist daher anzugeben mit $m_{r \text{H}_2\text{O}} = 2 \times 1,00794 + 15,9994 = 18,01528$,

die absolute Masse mit $m_{\text{H}_2\text{O}} = m_{r \text{H}_2\text{O}} \cdot m_u = 18,01528 \times 1,6605402 \times 10^{-27} \text{ kg}$

und die molare Masse $M_{\text{H}_2\text{O}} = 18,01528 \times 10^{-3} \text{ kg} \cdot \text{mol}^{-1}$. (7-1)

Tabelle 7-2: Zusammenstellung der Konzentrationseinheiten [nach SCHAUM, 1976]

Bezeichnung	Symbol	SI-Einheit	Definition	
Massenkonzentration oder Partialdichte	ρ_S	$\text{kg} \cdot \text{m}^{-3}$ bzw. g/l	$\frac{\text{Masse des gelösten Stoffes}}{\text{Volumen der Lösung}}$	$\frac{m_S}{V_{SL}}$
Molarität	C_S	$\text{mol} \cdot \text{m}^{-3}$	$\frac{\text{Menge an gelöstem Stoff}}{\text{Volumen der Lösung}}$	$\frac{n_S}{V_{SL}}$
Normalität		Obsolet! $\text{val} \cdot \text{l}^{-1}$	$\frac{\text{Äquivalentmenge an gelöstem Stoff}}{\text{Volumen der Lösung}}$	
Massenprozent		dim.los	$\frac{\text{Masse an gelöstem Stoff}}{100 \text{ Masseneinheiten der Lösung}}$	
Molalität	C_S^*	$\text{mol} \cdot \text{kg}^{-1}$	$\frac{\text{Menge an gelöstem Stoff}}{\text{Masse des Lösungsmittels}}$	$\frac{n_S}{m_L}$
Molenbruch einer Komponente	X	dim.los	$\frac{\text{Stoffmenge dieser Komponente}}{\text{Stoffmengen aller Komponenten}}$	$\frac{n_S}{n_{SL}}$

$$X = \frac{\text{Menge einer Komponente in mol}}{\text{Menge einer Komponente in mol} + \text{Menge Lösungsmittel in mol}} = \frac{m_S/M_S}{m_S/M_S + m_L/M_L}$$

m Masse

S Index für Stoff bzw. Lösungskomponente

M Teilchenmasse

L Index für Lösungsmittel (z. B. Wasser)

$m/M = n$

SL Index für Lösung

[KASTANEK, 1998]

Außerdem gilt: Molarität = Molalität \times Partialdichte des Lösungsmittels ($C_S = C_S^* \cdot \rho_L$)

Beispiel 7-1: Wie viel Gramm Schwefelsäure befinden sich in einer 0,5-molaren Lösung?

Eine 0,5-molare (0,5 m) Schwefelsäurelösung enthält 0,5 mol H_2SO_4 in einem Liter Lösung. Da Schwefelsäure eine relative Molekularmasse von

$2 \times 1,008 + 32,06 + 4 \times 15,999 = 98,07$ bzw. eine molare Masse von $98,07 \text{ g} \cdot \text{mol}^{-1}$ besitzt, besagt dieser Konzentrationsausdruck gleichzeitig, dass $0,5 \times 98,07 = 49,04 \text{ g}$ H_2SO_4 in einem Liter Lösung vorliegen [SCHAUM, 1976].

Beispiel 7-2: 25 ml einer 0,1-molaren Tetranatriumdiphosphat-Dekahydrat-Lösung werden in einem Schlammzylinder mit Wasser auf 1 l aufgefüllt. Wie viel Gramm des Stoffes befinden sich im Eindampfrest von 20 ml, die mit einer Pipette aus dem Zylinder entnommen wurden?

Tetranatriumdiphosphat-Dekahydrat – $\text{Na}_4\text{P}_2\text{O}_7 \times 10 \text{ H}_2\text{O}$ – dient als Dispergierungsmittel. Es wird z. B. bei der Korngrößenbestimmung mit der Feinsiebung oder mit dem Pipetteverfahren nach KUBIENA der Suspension von Bodenteilchen im Schlammzylinder zugesetzt. Normalerweise werden in den 25 ml der 0,1-molaren Dispergierungsmittellösung noch eine gewisse Menge an Bodenteilchen dispergiert, sodass sich in der Lösung von 1 l im Schlammzylinder bzw. in der Pipette auch Bodenteilchen befinden. Doch sollte bei einer Versuchsserie auch ein Schlammzylinder ohne Boden angesetzt werden, um eben herauszufinden, wie viel Dispergierungsmittel sich in einer Pipette befindet.

Natrium besitzt eine relative Atommasse $A_r(\text{Na}) = 22,990$, P eine solche von $A_r(\text{P}) = 30,974$, O von $15,998$ und $A_r(\text{H}) = 1,008$.

Ein Molekülverband $\text{Na}_4\text{P}_2\text{O}_7 \times 10 \text{ H}_2\text{O}$ besitzt daher die relative Masse von $4 \times 22,990 + 2 \times 30,974 + 7 \times 15,998 + 10 \times (2 \times 1,008 + 15,998) = 446,034$.

Die relative Molekülmasse entspricht unmittelbar der molaren Masse in $\text{g} \cdot \text{mol}^{-1}$, die molare Masse beträgt also $446,034 \text{ g} \cdot \text{mol}^{-1}$. Nachdem ein 0,1-molare Lösung des Dispergierungsmittels hergestellt werden soll, sind hierfür pro Liter Lösung $0,1 \times 446,034 = 44,6034 \text{ g/l}$ erforderlich (Die ÖNORM L 1064 schreibt allerdings $44,608 \text{ g/l}$ vor, und die Herstellerfirma MERCK gibt auf der Verpackung eine molare Masse $M(\text{Na}_4\text{P}_2\text{O}_7 \times 10 \text{ H}_2\text{O}) = 446,06 \text{ g/mol}$ an, was durch unterschiedliche Isotopenzusammensetzung aufgrund des Herstellungsprozesses gedeutet werden kann). Allerdings sind von den $44,6034 \text{ g/l}$ Tetranatriumdiphosphat-Dekahydrat

$$0,1 \times 10 \times (2 \times 1,008 + 15,998) = 18,0140 \text{ g/l Wasser}$$

und nur $44,6034 - 18,0140 = 26,5894 \text{ g/l Na}_4\text{P}_2\text{O}_7$

enthalten, in 25 ml, die dem Schlammzylinder zugesetzt wurden, also nur $0,025 \times 26,5894 = 0,664735 \text{ g}$ bzw. $0,664735 \text{ g/l}$ Lösung. Mit einer 20-ml-Pipette werden davon $0,020 \times 0,664735 = 0,0132947 \text{ g}$ entnommen.

Im Labor wurden Werte um $0,012 \text{ g}$ festgestellt, jedoch auch einige über $0,0133 \text{ g}$.

7.1.4 Umrechnung verschiedener Potenzialangaben

Die Umrechnung von einer Potenzialangabe des Bodenwassers in eine andere mit unterschiedlicher Dimension bedarf genau genommen der kompletten Kenntnis des thermodynamischen Zustandes. Für bodenphysikalische Zwecke reichen hierfür allerdings grobe Annahmen vollkommen aus.

Mit Hilfe dieser Annahmen soll nun der auf die Masse des Kontrollvolumens bezogene relative Energieinhalt ψ in der Einheit $\text{J} \cdot \text{kg}^{-1}$ bzw. $\text{kg} \cdot \text{m}^2 \cdot \text{s}^{-2} \cdot \text{kg}^{-1} = \text{m}^2 \cdot \text{s}^{-2}$ als Ausgangsgröße in verschie-

dene andere Potenzialangaben umgerechnet werden. Kennt man das Volumen V des Kontrollvolumens, so besitzt dieses eine Masse $M = V \cdot \rho$. Kennt man weiters die Energiedifferenz ΔE zum Referenzpotential, ist $\psi = \Delta E / M = \Delta E / (\rho \cdot V)$ bzw. $\Delta E = \psi \cdot \rho \cdot V$.

Für den Druck in der SI-Einheit MPa bzw. für das auf das Volumen bezogene Potenzial ψ^* als Zielgröße gilt allgemein bei bekannter Dichte

$$\{\psi^*\} \cdot \text{MPa} \equiv \{\psi^*\} \times 10^6 \cdot \text{Pa} \equiv \{\psi^*\} \times 10^6 \cdot \text{J} \cdot \text{m}^{-3} = \{\psi\} \cdot \text{J} \cdot \text{kg}^{-1} \cdot \{\rho\} \cdot \text{kg} \cdot \text{m}^{-3}$$

$$\{\psi^*\} \cdot \text{MPa} = 10^{-6} \cdot \{\psi\} \cdot \{\rho\} \cdot \text{J} \cdot \text{m}^{-3}$$

bzw. als reine Zahlenwertgleichung $\{\psi^*\} = 10^{-6} \cdot \{\psi\} \cdot \{\rho\}$.

$[\psi^*] = \text{MPa}$ auf das Volumen des Kontrollvolumens bezogenes Potential; besitzt die Einheit des Drucks

$[\psi] = \text{J} \cdot \text{kg}^{-1}$ auf die Masseneinheit bezogenes Potential

$[\rho] = \text{kg} \cdot \text{m}^{-3}$ Dichte der Bodenwasserlösung

Die Dichte von flüssigem Wasser ist kaum von der Temperatur und noch viel weniger vom Druck abhängig bzw. praktisch konstant mit 1000 kg/m^3 anzunehmen. Genauer beträgt sie unter atmosphärischen Bedingungen für eine gewählte Referenztemperatur von 20°C laut Tabelle 7-9 $\rho_{\text{H}_2\text{O}} = 998,20 \text{ kg/m}^3$. Man erhält also für flüssiges Wasser

$$\{\psi^*\} \cdot \text{MPa} = 10^{-6} \cdot \{\psi\} \cdot 998,20 \cdot \text{J} \cdot \text{m}^{-3}$$

bzw. $\{\psi^*\} = 998,20 \times 10^{-6} \cdot \{\psi\}$ ($t = 20^\circ\text{C}$)

und näherungsweise $\{\psi^*\} = 10^{-3} \cdot \{\psi\}$.

Der Zahlenwert des Druckes ψ^{**} in der wie eh und je gebräuchlichen Einheit bar ergibt sich mit der Einheitengleichung $1 \text{ bar} \equiv 10^5 \text{ Pa} \equiv 10^{-1} \text{ MPa}$, ihrer Inversen $1 \text{ MPa} \equiv 10 \text{ bar}$ und deren Vielfachem $\{\psi^*\} \cdot \text{MPa} \equiv \{\psi^*\} \cdot 10 \cdot \text{bar} = \{\psi^{**}\} \cdot \text{bar}$ zu $\{\psi^{**}\} = \{\psi^*\} \cdot 10$ bzw. umgekehrt

$$\{\psi^*\} = 10^{-1} \cdot \{\psi^{**}\},$$

weshalb unter atmosphärischen Bedingungen bei 20°C $10^{-1} \cdot \{\psi^{**}\} = 998,20 \times 10^{-6} \cdot \{\psi\}$

bzw. $\{\psi^{**}\} = 998,20 \times 10^{-5} \cdot \{\psi\}$ gilt.

$[\psi^{**}] = \text{bar}$ auf das Volumen des Kontrollvolumens bezogenes Potential; in der nicht SI-konformen Druckeinheit bar

Näherungsweise kann man setzen $\{\psi^{**}\} = 10^{-2} \cdot \{\psi\}$.

Für die Druckhöhe H in der Einheit cm erhält man $H = \Delta E / (\rho \cdot g \cdot V) = \psi \cdot \rho \cdot V / (\rho \cdot g \cdot V) = \psi / g$.

$$\{H\} \cdot \text{cm} \equiv \{H\} \cdot 10^{-2} \cdot \text{m} = \{\psi\} \cdot \text{m}^2 \cdot \text{s}^{-2} / (9,80665 \cdot \text{m} \cdot \text{s}^{-2})$$

$\{H\} = \{\psi\} \times 100 / 9,80665$ bzw. $\{H\} = 10,197 \cdot \{\psi\}$.

$[H] = \text{cm}$ auf das Gewicht der Masse des Kontrollvolumens bezogenes Potential; Druckhöhe

Der pF-Wert ist als dekadischer Logarithmus der positiv genommenen Druckhöhe in cm definiert:

$$pF = \log \{-H\} = \log (100 \times 9,80665^{-1} \cdot \{-\psi\})$$

$$pF = 2 - \log (9,80665) + \log \{-\psi\}.$$

Den prozentualen Verhältniswert der relativen Luftfeuchte RH (%) kann man ebenfalls als Potenzialmaß auffassen. RH lässt sich allerdings erst dann in Abhängigkeit vom Tensiometerdruck angeben, wenn das thermodynamische System näher bestimmt wird. Legt man fest, dass keine Netto-

verdunstung herrscht, muss RH gemäß Kapitel 1.4.4 gleich dem Verhältnis zwischen dem reduzierten Sättigungsdampfdruck p_S^* und dem Sättigungsdampfdruck p_S sein:

$$RH = \frac{p_S^*}{p_S} \times 100.$$

Die maßgebliche Beziehung ist Gleichung 1-13: $\frac{p_S^*}{p_S} = \exp\left(\frac{p_T - \Pi}{\rho_w} \cdot \frac{M}{R \cdot T}\right)$

Π sei Null; $p_T/\rho_w = \psi$: $\frac{p_S^*}{p_S} = \exp\left(\psi \cdot \frac{M}{R \cdot T}\right)$

Gleichgewicht zwischen dem Potenzial des Wasserdampfes in der Bodenluft und dem Tensiometerdruck in der Bodenwasserlösung liegt dann vor, wenn der aktuelle Dampfdruck genau dem reduzierten Sättigungsdampfdruck entspricht und damit die relative Luftfeuchtigkeit dem Verhältnis p_S^*/p_S :

$$RH = 100 \times \frac{p_S^*}{p_S} = 100 \times \exp\left(\psi \cdot \frac{M}{R \cdot T}\right)$$

Mit den Werten von Seite 42 $R = 8,314510 \text{ J} \cdot \text{mol}^{-1} \cdot \text{K}^{-1}$ und $M_{\text{H}_2\text{O}} = 18,015 \times 10^{-3} \text{ kg} \cdot \text{mol}^{-1}$ erhält man für eine angenommene Temperatur von $T = 293,15 \text{ K}$ bzw. $t = 20^\circ \text{C}$

$$RH = 100 \times \exp\left(\{\psi\} \cdot \text{Pa} \cdot \frac{18,015 \times 10^{-3}}{8,314510 \times 293,15} \cdot \text{Pa}^{-1}\right)$$

$$RH = 100 \times \exp(\{\psi\} \cdot 7,39108 \times 10^{-6}).$$

Der Sättigungsdampfdruck über einer freien Oberfläche beträgt übrigens für diese Temperatur laut

der Funktion 1-16 $p_S = 610,8 \cdot e^{\left(\frac{17,27 \times 20}{20 + 237,3}\right)} = 2338,3 \text{ Pa}.$

Spezielle Werte von ψ sind insbesondere jene Potenziale, die der Feldkapazität und dem Welkepunkt zuzuordnen sind. Diese Werte sind zwar beileibe keine Konstanten und variieren u. a. von Standort zu Standort, doch findet sich in der Literatur oft der Hinweis, dass bei Feldkapazität eine Wasserspannung von 1 m bis 3 m herrscht (also in etwa $\psi = -33 \text{ J/kg}$). Viel öfter noch als die Feldkapazität ist der permanente Welkepunkt an einem Pflanzenstandort unbekannt und demzufolge auch ψ . Die Annahme, dass der permanente Welkepunkt jener Wassergehalt ist, bei dem der Boden ein Potenzial von $\psi = -1500 \text{ J/kg}$ aufweist, wird daher sehr häufig getroffen. Diese Annahme ist weit weniger kritisch als jene für die Feldkapazität, weil sich bei den meisten Kulturböden der Wassergehalt mit der Wasserspannung bei $H \approx 15000 \text{ cm}$ kaum mehr ändert, während bei $H \approx 330 \text{ cm}$ der Lufttrittspunkt schon überschritten ist und die Retentionskurve eine flache Tangente aufweist. Während also die Abschätzung des Welkepunktes aus der Retentionskurve zumeist einen guten Wert ergibt – er entspricht etwa dem Restwassergehalt –, ist die aus der Retentionskurve abgeleitete Feldkapazität oft unbrauchbar (im Intervall 1 m bis 3 m liegt nicht selten ein Drittel der effektiven Sättigung!).

Tabelle 7-3: Einige Potenzialwerte des Bodenwassers in verschiedenen Einheiten

<p>ΔE: relatives Potenzial von Wasser mit einer Masse von 1 kg (und einer Temperatur von 20 °C) ψ: auf die Masseneinheit bezogenes Potenzial ψ^*: auf die Volumseinheit bezogenes Potenzial (Druck) ψ^{**}: auf die Volumseinheit bezogenes Potenzial (Druck) H: auf das Gewicht der Masse bezogenes Potenzial (Potenzialhöhe) pF: dekadischer Logarithmus der absolut genommenen Potenzialhöhe in cm RH: relative Luftfeuchtigkeit, bei der die Bodenluft mit dem Bodenwasser (flüssige Phase) im energetischen Gleichgewicht steht, wenn die flüssige Phase ein Potenzial von ψ aufweist</p>							
entspricht	ΔE	ψ	ψ^*	ψ^{**}	H	pF	RH
ungefähr	J	J/kg	MPa	bar	cm	-	%
	-1	-1	-0,001	-0,010	-10,2	1,008	99,9993
	-10	-10	-0,010	-0,100	-102,0	2,008	99,9926
Feldkapazität	-33	-33	-0,033	-0,329	-336,5	2,527	99,9756
	-100	-100	-0,010	-0,998	-1019,7	3,008	99,926
	-1000	-1000	-0,998	-9,982	-10197	4,008	99,264
p. Welkepunkt	-1500	-1500	-1,497	-14,973	-15296	4,185	98,897
	-10000	-10000	-9,982	-99,82	-101972	5,008	92,88
lufttrocken	-100000	-100000	-99,82	-998,2	-1019720	6,008	47,75
ofentrocken	-1000000	-1000000	-998,2	-9982	-10197000	7,008	0,06

7.2 Beschreibung einiger physikalischer Eigenschaften und Zustandsgrößen

7.2.1 Temperatur T

Umrechnung der Temperatur von Kelvin in Grad Celsius (in Anlehnung an ON V 118 [1996]):

$$\frac{t}{^{\circ}\text{C}} = \frac{T}{\text{K}} - 273,15 \quad 1^{\circ}\text{C} = 1\text{K (exakt)} \quad (7-2)$$

[t] = $^{\circ}\text{C}$ Temperatur in Grad Celsius
[T] = K Temperatur in Kelvin

(beachte, dass die Spezifikation der Einheiten durch eine separate Legende nicht notwendig wäre, weil sie definitionsgemäß bereits durch die Bruchschreibweise gegeben ist).

Ein Kelvin ist definiert als 1/273,16 der thermodynamischen Temperatur des Tripelpunktes des Wassers. Der Nullpunkt der Celsiusstemperatur liegt daher exakt um 0,01 K tiefer als der Tripelpunkt des Wassers.

7.2.2 Dynamische Viskosität η

Die dynamische Viskosität ist eine stark stoffabhängige Größe und für einen bestimmten Stoff in erster Linie eine Funktion der Temperatur. Die Abhängigkeit vom Druck ist nur gering.

Die dynamische Viskosität η von Wasser wird weltweit für die Eichung von Viskosimetern herangezogen und wurde daher in einem Technical Report der ISO [ISO/TR 3666, 1998] genormt.

η von frischem, doppelt destilliertem Wasser bei 20 $^{\circ}\text{C}$ und einem Druck der Normatmosphäre von 0,101325 MPa beträgt

$$\eta = 1,0016 \text{ mPa}\cdot\text{s}$$

Der zugehörige relative Fehler dieses Wertes beträgt dem Report zufolge 0,17 %.

Weiters sind in einer Tabelle relative Viskositätswerte für verschiedene Temperaturen zusammengestellt, die sich auf den Normwert der Viskosität bei 20 $^{\circ}\text{C}$ beziehen. Die absoluten Werte wurden daraus selbst errechnet ($1 \text{ mPa}\cdot\text{s} \equiv 1 \times 10^{-2} \text{ g}\cdot\text{cm}^{-1}\cdot\text{s}^{-1}$).

Tabelle 7-4: Relative dynamische Viskositäten $\eta_r = \eta(t)/\eta(20^{\circ}\text{C})$ von reinem Wasser bei verschiedenen Temperaturen [ISO/TR 3666, 1998] sowie absolute Werte

Temperatur t ($^{\circ}\text{C}$)	Relative dynamische Viskosität $\eta_r = \eta(t)/\eta(20^{\circ}\text{C})$ (dimensionslos)	dynamische Viskosität $\eta(t)$ (mPa·s)
15	$1,1360 \pm 0,0006$	1,1378
20	1,000000	1,0016
23	$0,9306 \pm 0,0004$	0,9321
25	$0,8885 \pm 0,0003$	0,8899
30	$0,7958 \pm 0,0003$	0,7971
40	$0,6514 \pm 0,0002$	0,6524

Für Temperaturen t , die nicht explizit im Technical Report der ISO angeführt sind, ist zur Bestimmung von $\eta(t)$ eine Interpolation der Tabellenwerte erforderlich. Möchte man die Viskosität in der

Einheit mPa·s auf drei Nachkommastellen genau angeben – was gemäß ISO/TR durchaus gerechtfertigt ist –, genügt eine einfache Linearinterpolation nicht. Statt dessen ist in Betracht zu ziehen, dass die Temperatur und die dynamische Viskosität nach den Gesetzmäßigkeiten der Natur in funktionalem Zusammenhang stehen, der für die Interpolation benutzt werden kann.

Für Flüssigkeiten im Bereich $0 < t < 100$ (t in °C) bzw. $273,15 < T < 373,15$ (T in K) kann man laut TRUCKENBRODT [1980] ansetzen:

$$\frac{\eta}{\eta_b} = \frac{e^{\left(\frac{T_A}{T+T_B}\right)}}{e^{\left(\frac{T_A}{T_b+T_B}\right)}} \quad \text{bzw.} \quad \eta = \eta_b \cdot e^{\left(\frac{T_A}{T+T_B} - \frac{T_A}{T_b+T_B}\right)}$$

- [η] = Pa·s Dynamische Viskosität bei gegebener Temperatur
- [η_b] = Pa·s Bezugsgröße, dynamische Viskosität bei gewählter Bezugstemperatur T_b
- [T_A] = K Konstante, aus Messungen ermittelt für Wasser: $T_A = 506$ K
- [T_B] = K Konstante, aus Messungen ermittelt für Wasser: $T_B = -150$ K
- [T] = K vorgegebene Temperatur
- [T_b] = K Bezugstemperatur

Für die (gewählte) Bezugstemperatur $T_b = 0$ °C bzw. 273,15 K gibt TRUCKENBRODT einen Wert von $\eta_b = 179,3 \times 10^{-5}$ Pa·s an. Für die dynamische Viskosität des Wassers bei einer beliebigen Temperatur folgt hierfür:

$$\eta = 179,3 \times 10^{-5} \cdot e^{\left(\frac{506}{T-150} - \frac{506}{273,15-150}\right)} \quad (7-3)$$

- [η] = Pa·s Dynamische Viskosität bei gegebener Temperatur
- [T] = K vorgegebene Temperatur

Um die Temperatur in der obigen Formel in °C einsetzen zu können, ist eine Umrechnung mit der Formel 7-2 ($T = t + 273,15$ K) vorzunehmen. Benutzt man außerdem für η die Einheit $\text{g}\cdot\text{cm}^{-1}\cdot\text{s}^{-1}$ anstelle Pa·s ($1 \text{ Pa}\cdot\text{s} \equiv 1 \text{ kg}\cdot\text{m}^{-1}\cdot\text{s}^{-1} \equiv 10 \text{ g}\cdot\text{cm}^{-1}\cdot\text{s}^{-1}$), ergibt sich für Formel 7-3

$$\eta = 179,3 \times 10^{-4} \cdot e^{\left(\frac{506}{t+123,15} - \frac{506}{123,15}\right)}$$

- [η] = $\text{g}\cdot\text{cm}^{-1}\cdot\text{s}^{-1}$ Dynamische Viskosität bei gegebener Temperatur
- [t] = °C vorgegebene Temperatur

bzw. nach Umformung
$$\eta = 2,9454 \times 10^{-4} \cdot e^{\left(\frac{506}{t+123,15}\right)} \quad (7-4)$$

- [η] = $\text{g}\cdot\text{cm}^{-1}\cdot\text{s}^{-1}$ Dynamische Viskosität bei gegebener Temperatur
- [t] = °C vorgegebene Temperatur

In der Tabelle 7-5 werden die auf zwei Nachkommastellen gerundeten Ergebnisse der Formel 7-4 mit Werten von BOLLRICH und PREIBLER [1992] verglichen, in Tabelle 7-6 die auf vier Nachkommastellen gerundeten Resultate mit den Angaben des ISO/TR 3666 [1998]. Während sich in Tabelle 7-5 eine recht gute Übereinstimmung zeigt, muss man an Hand der Tabelle 7-6 feststellen, dass die Genauigkeit zumindest der Modellparameter für eine Angabe von η auf drei signifikante Stellen unzureichend ist.

Tabelle 7-5: Dynamische Viskosität von Wasser als Funktionswert nach TRUCKENBRODT [1980] und Tabellenwert von BOLLRICH und PREIBLER [1992]*

t in °C	0	2	4	6	8	10	12	14	16	18	20	30	50	100
η in $\text{g}\cdot\text{cm}^{-1}\cdot\text{s}^{-1}\times 10^2$	1,79	1,68	1,58	1,48	1,40	1,32	1,24	1,18	1,12	1,06	1,01	0,80	,547	,284
η in $\text{g}\cdot\text{cm}^{-1}\cdot\text{s}^{-1}\times 10^2$ *	1,79	1,67	1,57	1,47	1,39	1,31	1,24	1,17	1,12	1,06	1,00	0,80	0,55	0,28

*: Werte von BOLLRICH und PREIBLER [1992] für reines, luftfreies Wasser bei 1013 hPa.

Tabelle 7-6: Dynamische Viskosität von Wasser als Funktionswert nach TRUCKENBRODT [1980]* und Tabellenwert im ISO/TR 3666 [1998]**

t in °C	15	20	23	25	30	40
η in $\text{mPa}\cdot\text{s}$ *	1,1477	1,0099	0,9392	0,8963	0,8017	0,6548
η in $\text{mPa}\cdot\text{s}$ **	1,1378	1,0016	0,9321	0,8899	0,7971	0,6524

Um eine bessere Übereinstimmung zu erzielen, wird nun zwar die Modellbeziehung von TRUCKENBRODT verwendet, jedoch als Bezugstemperatur $t = 20^\circ\text{C}$ und als Bezugswert für die dynamische Viskosität $\eta_b = 1,0016 \times 10^{-3} \text{ Pa}\cdot\text{s}$ aus dem ISO/TR 3666 gewählt. Die Werte für die beiden Konstanten T_A und T_B werden nicht von TRUCKENBRODT übernommen, sondern als variable Parameter betrachtet und aus einer Optimierung an die gegebenen Werte des ISO/TR 3666 bestimmt, wobei die unterschiedlichen Fehlergrenzen für die Tabellenwerte unberücksichtigt bleiben (es wird angenommen, dass alle sechs Werte dieselbe absolute Genauigkeit besitzen). Die entsprechende Optimierung ergab folgende Parameterwerte (zwei Nachkommastellen sind ausreichend):

$$T_A = 463,19$$

$$T_B = -155,76$$

Mit diesen Werten für T_A und T_B erhält man folgende Beziehung in Anlehnung an TRUCKENBRODT [1980]:

$$\eta(T) = 100,16 \times 10^{-5} \cdot e^{\left(\frac{463,19}{T-155,76} - \frac{463,19}{273,15+20-155,76} \right)} \quad 291,15 \text{ K} \leq t \leq 303,15 \text{ K}$$

bzw.

$$\eta(t) = 1,0016 \cdot e^{\left(\frac{463,19}{t+117,39} - \frac{463,19}{137,39} \right)}$$

oder

$$\eta(t) = 0,034398 \cdot e^{\left(\frac{463,19}{t+117,39} \right)} \quad 15^\circ\text{C} \leq t \leq 40^\circ\text{C} \quad (7-5)$$

$[\eta]$ = $\text{mPa}\cdot\text{s} \equiv \text{g}\cdot\text{m}^{-1}\cdot\text{s}^{-1}$ Dynamische Viskosität bei gegebener Temperatur
 $[t]$ = °C Temperatur in Grad Celsius

Tabelle 7-7: η aus der optimierten Modellbeziehung in Anlehnung an TRUCKENBRODT [1980] und die hierfür herangezogenen Werte aus ISO/TR 3666

t in °C	15	20	23	25	30	40
η in $\text{mPa}\cdot\text{s}$ aus Modell	1,1376	1,0016	0,9320	0,8898	0,7968	0,6526
η in $\text{mPa}\cdot\text{s}$ aus ISO/TR 3666	1,1378	1,0016	0,9321	0,8899	0,7971	0,6524

Die Funktionswerte dieser optimierten Modellbeziehung weichen von den im ISO/TR 3666 gegebenen Werten um weniger als 4/10000 ab. Sie liefert daher für drei Nachkommastellen ausreichend

genaue Interpolationswerte für die dynamische Viskosität von reinem Wasser bei einer Temperatur im Bereich $15\text{ °C} \leq t \leq 40\text{ °C}$.

Für die Güte der Anpassung über den angegebenen Wertebereich hinaus wird nicht garantiert. Insbesondere sei darauf hingewiesen, dass die Funktion 7-5 für 0 °C einen Wert von $\eta_b = 177,9 \times 10^{-5}\text{ Pa}\cdot\text{s}$ liefert, während TRUCKENBRODT (siehe oben) $\eta(0\text{ °C}) = 179,3 \times 10^{-5}\text{ Pa}\cdot\text{s}$ angibt – derselbe Wert wird übrigens auch von BOLLRICH und PREIBLER zitiert.

7.2.3 Dichte des Wassers $\rho_{\text{H}_2\text{O}}$

Das Wasser tritt im Boden überwiegend als benetzende flüssige Phase auf. Im Bodenwasser bzw. in dieser benetzenden flüssigen Phase sind Inhaltsstoffe im allgemeinen in größeren Konzentrationen als im Grundwasser gelöst. Die Dichte des Wassers in der Flüssigphase kann für die meisten bodenphysikalischen Vorgänge als konstant betrachtet werden. Wasser tritt darüber hinaus in der Bodenluft als Wasserdampf auf, und das bei durchschnittlich viel höheren relativen Luftfeuchtigkeiten als in der freien Atmosphäre. Thermodynamisch ist die Bodenluft als Gas-Dampf-Gemisch zu betrachten, deren Dichte stark vom Druck und von der Temperatur bzw. vom herrschenden thermodynamischen Zustand abhängig ist.

Physikalische Modellierung der Abhängigkeit der Dichte vom Druck und von der Temperatur

Für die totale Dichteänderung eines Fluids kann man schreiben [TRUCKENBRODT, 1980a]:

$$d\rho = \frac{\partial \rho}{\partial p} \cdot dp + \frac{\partial \rho}{\partial T} \cdot dT$$

Um später die Funktion der Dichte auf der Basis eines Referenzwertes darstellen zu können (und nur die Änderungen – jedoch nicht die Absolutwerte – mit p und T funktional beschreiben zu müssen), aber auch aus anderen Gründen, wird die infinitesimale Zunahme $d\rho$ auf die Dichte selbst bezogen

$$\frac{d\rho}{\rho} = \frac{1}{\rho} \cdot \frac{\partial \rho}{\partial p} \cdot dp + \frac{1}{\rho} \cdot \frac{\partial \rho}{\partial T} \cdot dT$$

und β_T als (isothermer) Kompressibilitätskoeffizient und β_p als (isobarer) Wärmeausdehnungskoeffizient eingeführt

$$\beta_T = \frac{1}{\rho} \cdot \left(\frac{\partial \rho}{\partial p} \right)_T \quad \beta_p = -\frac{1}{\rho} \cdot \left(\frac{\partial \rho}{\partial T} \right)_p,$$

sodass man zur Gleichung $\frac{d\rho}{\rho} = \beta_T \cdot dp - \beta_p \cdot dT$

gelangt. β_T (in Pa^{-1}) und β_p (in K^{-1}) stellen jeweils die bezogenen Änderungen infolge der Kompressibilität (bei konstanter Temperatur) bzw. infolge der Wärmeausdehnung (bei konstantem Druck) dar. Zwischen dem (kubischen) Elastizitätsmodul E_F eines Fluids und dem Kompressibilitätskoeffizienten β_T besteht der Zusammenhang $E_F = 1/\beta_T$. Verlaufen die Strömungsvorgänge bei mäßigen Druck- und Temperaturänderungen, dann ist wegen $dp \approx 0$ und $dT \approx 0$ die Dichteänderung $d\rho \approx 0$. Bei einem dichtebeständigen Fluid ($\rho = \text{const.}$) ist $\beta_T = 0 = \beta_p$. Für das Dichteverhältnis eines dichteveränderlichen Fluids erhält man durch Integration

$$\frac{\rho}{\rho_b} = e^{\left(\int_{p_b}^p \beta_T dp - \int_{T_b}^T \beta_p dT \right)} \quad \text{bzw.} \quad \rho = \rho_b \cdot e^{\left(\int_{p_b}^p \beta_T dp - \int_{T_b}^T \beta_p dT \right)}$$

$[\rho]$ = $\text{kg}\cdot\text{m}^{-3}$ Dichte bei vorgegebenem Druck und vorgegebener Temperatur
 $[\rho_b]$ = $\text{kg}\cdot\text{m}^{-3}$ Bezugsdichte (bei einem bestimmten Druck und einer bestimmten Temperatur)

$[p]$	= Pa	Vorgegebener Druck
$[p_b]$	= Pa	Druck für die Bezugsdichte
$[\beta_T]$	= Pa ⁻¹	isothermer Kompressibilitätskoeffizient
$[T]$	= °C	Vorgegebene Temperatur
$[T_b]$	= °C	Temperatur für die Bezugsdichte
$[\beta_p]$	= K ⁻¹	isobarer Wärmeausdehnungskoeffizient

Neben der Kenntnis einer Bezugsdichte ρ_b ist auch der Verlauf von β_T und β_p notwendig (wobei die Funktion für β_T von der Temperatur abhängig sein kann und β_p vom Druck).

Für Wasser ändert sich der Kompressibilitätskoeffizient β_T mit dem Druck, aber auch mit der Temperatur nur wenig und kann daher konstant mit $\beta_T = 5 \times 10^{-10} \text{ Pa}^{-1}$ angenommen werden. Das Integral für β_T beträgt dann $5 \times 10^{-10} \cdot (p - p_b) \approx 0$, und $e^0 = 1$. Die Funktion der Dichte vereinfacht sich damit

für Wasser zu

$$\rho = \frac{\rho_b}{e^{\int \beta_p dT}} \quad (7-6)$$

Im Gegensatz zum Kompressibilitätskoeffizienten β_T variiert der Wärmeausdehnungskoeffizient β_p mit der Temperatur. Für $p = 1 \text{ bar}$ gelten folgende Werte [TRUCKENBRODT, 1980a]:

Tabelle 7-8: Verlauf des (isobaren) Wärmeausdehnungskoeffizienten mit der Temperatur

$t \text{ (}^\circ\text{C)}$	0	4	50	99,6
$\beta_p \text{ (K}^{-1}\text{)}$	$-0,085 \times 10^{-3}$	0	$0,46 \times 10^{-3}$	$0,75 \times 10^{-3}$

Weil die Dichte bei rund 4 °C ein Maximum (Anomalie des Wassers) aufweist, ist $\beta_p(4 \text{ }^\circ\text{C}) = 0$. Genau dieses Dichtemaximum wird zumeist als Bezugsdichte gewählt. Sie beträgt für entlüftetes Wasser in der Isotopenzusammensetzung von SMOW (= Standard Mean Ocean Water) unter einem Druck von $p_0 = 101325 \text{ Pa}$ genau $\rho_b = \rho_{max} = 999,97495 \pm 0,00084 \text{ kg/m}^3$.

Ursprünglich war beabsichtigt, das Ur- bzw. Archivkilogramm mit genau der Masse herzustellen, die 1 dm³ Wasser bei 4 °C und 1 bar besitzt. Demnach hätte sich die Wasserdichte ρ_{max} genau zu 1 kg/dm³ ergeben. Da jedoch die Masse des Archivkilogramms geringfügig größer ausgefallen ist, sind ρ_{max} bzw. ρ_b ein wenig kleiner als 1000 kg/m³.

Anstelle eine große Anzahl an Werten für β_p bei verschiedenen Temperaturen experimentell zu bestimmen, an diese eine Funktion $\beta_p(t)$ anzupassen und daraus die Dichte von Wasser zu berechnen, wird in der Praxis die Dichtefunktion $\rho_w(t)$ selbst numerisch modelliert. Hingegen ist die Bestimmung von $\rho(t)$ aus der Formel 7-6 für Fluide, die von beiden Parametern (T und p) ausgeprägt abhängig sind, durchaus auch in der Praxis sinnvoll.

Dichtewerte von reinem Wasser, Meerwasser und Bodenwasser

International genormt und deshalb für die Anwendung unbedingt empfohlen sind die Werte aus ISO/TR 3666 [1998]. Leider umfasst der Bericht nur Werte in der Nähe der Zimmertemperatur bzw. im Bereich [15 °C, 40 °C].

Tabelle 7-9: Dichte ρ_w von reinem Wasser laut ISO/TR 3666 [1998]

$T \text{ in } ^\circ\text{C}$	15	20	23	25	30	40
$\rho_w \text{ in kg/m}^3$	999,10	998,20	997,54	997,04	995,65	992,21

Die untenstehende Tabelle umfasst Tabellenwerte von BOLLRICH und PREIBLER [1992] und von TRUCKENBRODT [1980a]. Obwohl die Abweichungen zu den Werten der ISO/TR im überlappenden Bereich gering sind, sollte jenen der Tabelle 7-9 der Vorzug gegeben werden.

Tabelle 7-10: Relative Raumaufdehnung und Dichte von reinem Wasser

Temperatur t (°C)	Relative Raumaufdehnung β (%)	Dichte ρ_w nach [B/P] (kg/m ³)	Dichte ρ_w nach [TR] (kg/m ³)
Eis	9,08	916,70	
0	0,0132	999,84	999,84
2	0,0033	999,94	
4	0	999,97	999,99
6	0,0032	999,94	
8	0,0124	999,85	
10	0,0272	999,70	
12	0,0475	999,50	
14	0,0729	999,24	
16	0,1030	998,94	
18	0,1378	998,60	
20	0,1768	998,21	
30	0,434	995,65	
50	1,211	988,03	987,79
100	4,34	958,4	958,18

Durch Salzgehalt oder mitgeführte Schweb- und Schmutzstoffe vergrößert sich die Dichte des Wassers bzw. der Lösung etwas. Das Meerwasser der Ostsee mit 0,94 % Salzgehalt hat eine Dichte von 1007 kg/m³, typisches Meerwasser weist 35 g Salz pro 1000 g Meerwasser und eine Dichte von 1028 kg/m³ auf (In 1000 ml sind daher 35×1,028 = 36 g Salz pro Liter Meerwasser enthalten) [DENNY, 1993]. Das Meerwasser der baltischen See enthält nur rund 0,7 % Salzgehalt bzw. 7 g Salz/1000 g Meerwasser, das rote Meer hingegen 4,1 %. In grober Näherung, insbesondere unter Vernachlässigung der Temperaturabhängigkeit, kann die Dichte von Meerwasser in Abhängigkeit vom Salzgehalt S (ausgedrückt durch das Verhältnis g Salz pro 1000 g Meerwasser) formuliert werden durch [MASSIE, 1986]

$$\rho_{\text{Meerwasser}} = 1000 + 0,75 \cdot S$$

$[\rho_{\text{Meerwasser}}] = \text{kg} \cdot \text{m}^{-3}$ Dichte von Meerwasser
 $[S] = \text{g} \cdot 10^{-3} \cdot \text{g}^{-1}$ Salzgehalt; g Salz pro 1000 g Meerwasser

Schwebstoffhaltiges Flusswasser kann $\rho = 1050$ bis 1100 kg/m³ erreichen.

Im Bodenwasser sind Salze kaum in ähnlich hohen Konzentrationen enthalten wie im Meerwasser. Die Dichte des Bodenwassers kann daher für bodenphysikalische Probleme zumeist konstant gesetzt werden:

$$\rho_w = 1000 \text{ kg/m}^3$$

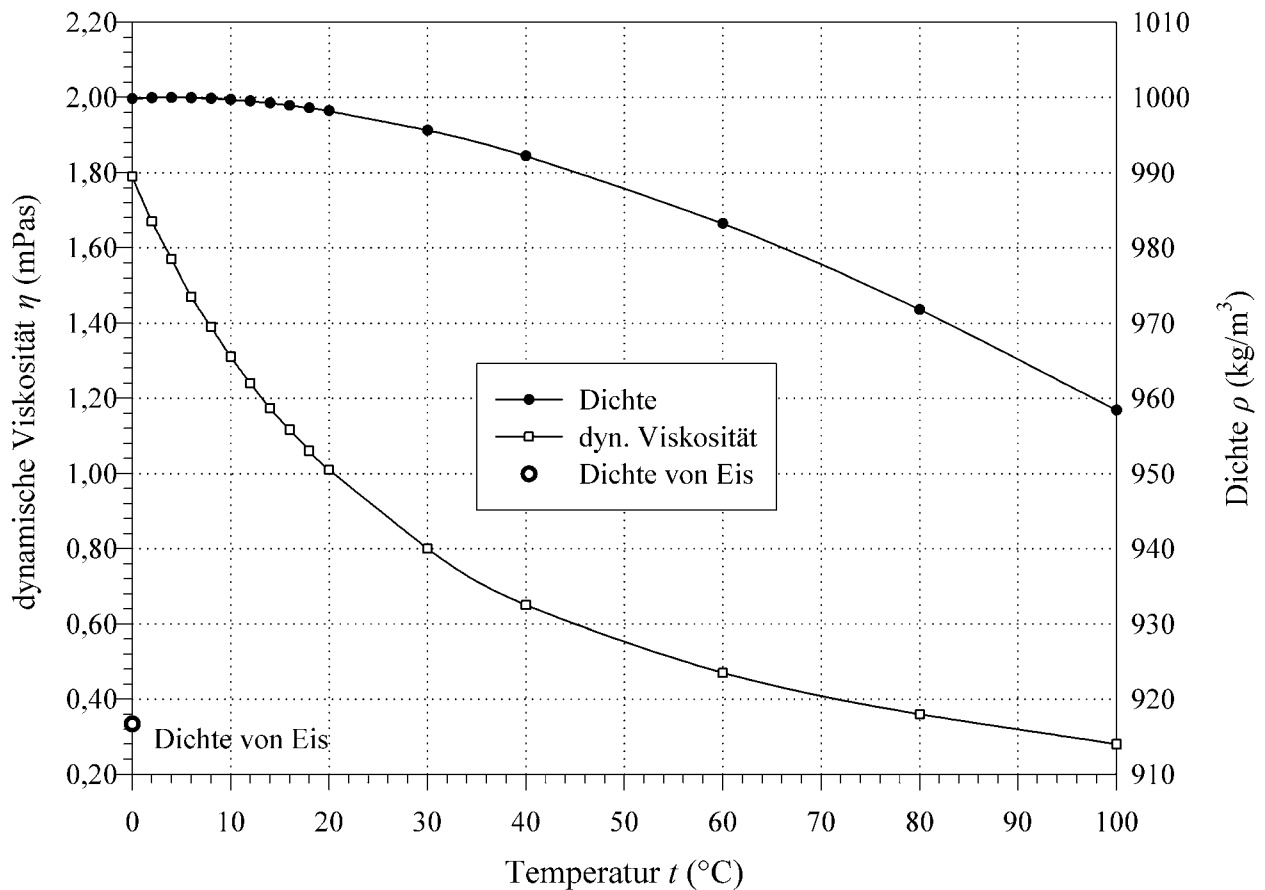


Abbildung 7-1: Abhängigkeit der Dichte und der dynamischen Viskosität reinen Wassers von der Temperatur

Modellfunktion für die Dichte von reinem Wasser

TANAKA et al. [2001] haben Ergebnisse von neueren Experimenten zur Bestimmung der Dichte von Wasser analysiert und an diese eine Beziehung $\rho_w(t)$ angepasst, die von THIESEN schon im Jahre 1900 verwendet wurde. Demzufolge lässt sich die Dichte von reinem, entlüftetem Wasser in der Isotopenzusammensetzung von SMOW (= Standard Mean Ocean Water) unter einem Druck von $p_0 = 101325$ Pa durch folgende Funktion hochgenau angeben:

$$\rho_w(t) = a_5 \cdot \left[1 - \frac{(t+a_1)^2 \cdot (t+a_2)}{a_3 \cdot (t+a_4)} \right] \quad 0^\circ\text{C} \leq t \leq 40^\circ\text{C} \quad (7-7)$$

$[\rho_w(t)] = \text{kg} \cdot \text{m}^{-3}$ Dichte von reinem, luftfreiem Wasser in der Isotopenzusammensetzung von SMOW bei $p_0 = 101325$ Pa

$[t] = ^\circ\text{C}$ Temperatur

Die aus der Anpassung ermittelten Parameterwerte betragen

$[a_1] = ^\circ\text{C}$	Koeffizient;	$a_1/^\circ\text{C} = -3,983035$
$[a_2] = ^\circ\text{C}$	Anpassungskoeffizient;	$a_2/^\circ\text{C} = 301,797$
$[a_3] = ^\circ\text{C}^2$	Anpassungskoeffizient;	$a_3/^\circ\text{C}^2 = 522528,9$
$[a_4] = ^\circ\text{C}$	Anpassungskoeffizient;	$a_4/^\circ\text{C} = 69,34881$
$[a_5] = \text{kg} \cdot \text{m}^{-3}$	Koeffizient;	$a_5/(\text{kg} \cdot \text{m}^{-3}) = 999,974950$.

TANAKA et al. geben zwar keinen Gültigkeitsbereich für die Formel selbst an, doch ist ein solcher sogar im Titel ihres Artikels angeführt. Dieser wird daher auch der Formel 7-7 unterstellt. Die

einzelnen Koeffizienten haben mitunter auch einen speziellen Wert, z. B. ist $-a_1$ die Temperatur, bei der das Dichtemaximum auftritt und a_5 die Dichte unter einem Druck von 10^5 Pa bei dieser Temperatur. Die Werte, die man mit der Formel 7-7 erhält, weichen um maximal $0,01 \text{ kg}\cdot\text{m}^{-3}$ von den Normwerten des ISO/TR 3666 [1998] (Tabelle 7-9) ab.

Darüber hinaus haben TANAKA et al. [2001] auch den Unterschied in der Dichte zwischen SMOW und Leitungswasser aufgrund eventuell abweichender Isotopenzusammensetzung (Verhältnisse $^{18}\text{O}/^{16}\text{O}$ und $[\text{D}]/[\text{H}]$) beschrieben. Weiters geben sie auch den Dichteunterschied zu luftgesättigtem Wasser durch folgende Formel an:

$$\Delta\rho_w(t) = s_0 + s_1 \cdot t \quad 0^\circ\text{C} < t < 25^\circ\text{C}$$

$[\Delta\rho_w(t)] = \text{kg}\cdot\text{m}^{-3}$ Differenz zwischen der Dichte von luftgesättigtem Wasser und entlüftetem Wasser

$[s_0] = \text{kg}\cdot\text{m}^{-3}$ Koeffizient; empirisch ermittelt: $s_0/(\text{kg}\cdot\text{m}^{-3}) = -4,612 \times 10^{-3}$
 $[s_1] = \text{kg}\cdot\text{m}^{-3}\cdot^\circ\text{C}^{-1}$ Koeffizient; empirisch ermittelt: $s_1/(\text{kg}\cdot\text{m}^{-3}\cdot^\circ\text{C}^{-1}) = 0,106 \times 10^{-3}$
 $[t] = ^\circ\text{C}$ Temperatur

Ebenso interessant ist die Auswirkung der Kompressibilität auf die Dichte von Wasser. Die Dichte bei einer Atmosphäre (101325 Pa) ist gemäß der Autoren mit dem Faktor

$$[1 + (k_0 + k_1 \cdot t + k_2 \cdot t^2) \cdot \Delta p] \quad 0^\circ\text{C} \leq t \leq 40^\circ\text{C}$$

$[\Delta p] = \text{Pa}$ Differenz zwischen dem herrschenden Druck und dem Standardwert
 $p_0 = 101325 \text{ Pa}$

zu multiplizieren, wobei für die einzelnen Faktoren folgende Werte ermittelt wurden:

$[k_0] = \text{Pa}^{-1}$ Koeffizient; empirisch ermittelt: $k_0/(\text{Pa}^{-1}) = 50,74 \times 10^{-11}$
 $[k_1] = \text{Pa}^{-1}\cdot^\circ\text{C}^{-1}$ Koeffizient; empirisch ermittelt: $k_1/(\text{Pa}^{-1}\cdot^\circ\text{C}^{-1}) = -0,326 \times 10^{-11}$
 $[k_2] = \text{Pa}^{-1}\cdot^\circ\text{C}^{-2}$ Koeffizient; empirisch ermittelt: $k_2/(\text{Pa}^{-1}\cdot^\circ\text{C}^{-2}) = 0,00416 \times 10^{-11}$.

7.2.4 Kinematische Viskosität ν

$$\nu = \frac{\eta}{\rho}$$

$[\nu] = \text{m}^2\cdot\text{s}^{-1}$ kinematische Viskosität
 $[\eta] = \text{kg}\cdot\text{m}^{-1}\cdot\text{s}^{-1}$ dynamische Viskosität
 $[\rho] = \text{kg}\cdot\text{m}^{-3}$ Dichte

Nach POISEUILLE [BOLLRICH und PREIBLER, 1992] gilt für die kinematische Viskosität von Wasser in Abhängigkeit von der Temperatur

$$\nu_{\text{H}_2\text{O}} = \frac{1,78 \times 10^{-6}}{1 + 0,0337 \cdot t + 0,000221 \cdot t^2}$$

$[\nu] = \text{m}^2\cdot\text{s}^{-1}$ kinematische Viskosität
 $[t] = ^\circ\text{C}$ vorgegebene Temperatur

Für eine Temperatur von 10°C ergibt die Formel einen Wert von $\nu = 1,31 \times 10^{-6} \text{ m}^2/\text{s}$ (dieser Wert stimmt mit dem Tabellenwert von BOLLRICH und PREIBLER [1992] überein).

Im ISO/TR 3666 [1998] ist für die kinematische Viskosität von doppelt destilliertem, frischem Wasser bei 20°C und normal atmosphärischem Druck von $0,101325 \text{ MPa}$ ein Standardwert von

$$\nu(20^\circ\text{C}) = 1,0034 \times 10^{-6} \text{ m}^2/\text{s}$$

angegeben. Die relative Unsicherheit dieses Wertes beträgt $0,17\%$.

Die Abhängigkeit der Viskosität des Wassers vom Druck ist vernachlässigbar gering. Beimengungen, wie Salze und Verunreinigungen, können die Viskosität dagegen stark verändern. Glycerin hat gegenüber Wasser eine etwa 1000mal größere kinematische Viskosität.

Da die Dichte von Wasser im Verhältnis zur dyn. Viskosität mit $\rho_{\text{H}_2\text{O}} = 1000 \text{ kg/m}^3 \equiv 1 \text{ g}\cdot\text{cm}^{-3}$ annähernd konstant ist, gilt:

$$\nu = \eta / \rho$$

[η] = $\text{g}\cdot\text{cm}^{-1}\cdot\text{s}^{-1}$ dynamische Viskosität
 [ν] = $\text{cm}^2\cdot\text{s}^{-1}$ kinematische Viskosität

7.2.5 Wärmekapazität C

Die theoretische Herleitung der Wärmekapazität fußt auf einem fundamentalen Gesetz (Gl. 7-43 auf Seite 210) der Wärmelehre, wonach die mittlere Translationsenergie eines Moleküls in einem Stoff

$$\overline{W_{\text{trans}}} = \frac{1}{2} \cdot m \cdot \overline{v^2} = \frac{3}{2} \cdot k \cdot T$$

beträgt. Weil ein Kilogramm eines aus massearmen Molekülen bestehenden Stoffes mehr Moleküle enthält als 1 kg eines Stoffes aus schweren Molekülen – die Moleküle beider Stoffe jedoch bei gleicher Temperatur gleiche kinetische Energie besitzen –, ist zu schließen, dass sich die spezifische, auf die Masseneinheit bezogene Wärmekapazität verkehrt proportional zur relativen Molekülmasse verhält. Allerdings können Moleküle neben der Translationsbewegung weitere Freiheitsgrade der Bewegung aufweisen und demzufolge thermische Energie nicht nur durch Translationsbewegung, sondern auch durch Drehbewegung speichern. Darüber hinaus gestatten manche Moleküle (insbesondere Wasser) ihren Atomen eine gewisse Eigenbewegung und gewinnen so zusätzliche Freiheitsgrade. Die spezifische Wärmekapazität ist also neben der Molekülmasse m und der Anzahl der Freiheitsgrade f noch von der Temperatur abhängig [VOGEL, 1999].

Ein homogener Körper mit der Masse M , dessen Moleküle die Masse m besitzen und f Freiheitsgrade der Bewegung aufweisen, enthält M/m Moleküle und die mittlere Gesamtenergie

$$W = \frac{M}{m} \cdot \frac{f}{2} \cdot k \cdot T$$

[W] = J Energie
 [M] = kg Masse des homogenen Körpers
 [m] = kg Masse eines einzelnen Moleküls
 [f] = dim.los Anzahl der Freiheitsgrade (der unabhängigen Bewegungsmöglichkeiten); im allgemeinen = 6 (3 Translations- und 3 Rotationsfreiheitsgrade)
 [k] = $\text{J}\cdot\text{K}^{-1}$ Boltzmann-Konstante; $k = (1,380658 \pm 0,000012) \times 10^{-23} \text{ J}\cdot\text{K}^{-1}$ (siehe S. 211)
 [T] = K Temperatur in Kelvin

Um den Körper um ΔT zu erwärmen, muss man ΔW Energie zuführen:

$$\Delta W = \frac{M}{m} \cdot \frac{f}{2} \cdot k \cdot \Delta T.$$

[ΔT] = K Temperaturerhöhung

Das Verhältnis $C_{\text{Körper}} = \frac{\Delta W}{\Delta T} = \frac{M}{m} \cdot \frac{f}{2} \cdot k$

wird als Wärmekapazität $C_{\text{Körper}}$ des Körpers bezeichnet. [$C_{\text{Körper}}$] in $\text{J}\cdot\text{K}^{-1}$. In der Bodenphysik wird die Wärmekapazität im allgemeinen auf das Volumen bezogen. Wenn der homogene Körper die Masse M und die Dichte $\rho = M/V$ besitzt, so beträgt sein Volumen $V = M/\rho$. Die volumenbezogene

Wärmekapazität, in der Bodenphysik kurz **Wärmekapazität** C genannt [KASTANEK, 1980], beträgt daher

$$C = \frac{C_{\text{Körper}}}{V_{\text{Körper}}} = \frac{\Delta W}{\Delta T} \cdot \frac{\rho}{M} = \frac{\rho}{m} \cdot \frac{f}{2} \cdot k$$

[C] = $\text{J} \cdot \text{m}^{-3} \cdot \text{K}^{-1}$ Wärmekapazität eines Stoffes (auf das Volumen des Kontrollvolumens bezogen)
 [ρ] = $\text{kg} \cdot \text{m}^{-3}$ Dichte des Stoffes

Wird die Wärmekapazität eines Stoffes hingegen auf seine Masse bezogen, so spricht man von der **spezifischen Wärmekapazität** c :

$$c = \frac{C_{\text{Körper}}}{M_{\text{Körper}}} = \frac{\Delta W}{\Delta T \cdot M} = \frac{f \cdot k}{2 \cdot m}$$

[c] = $\text{J} \cdot \text{kg}^{-1} \cdot \text{K}^{-1}$ spezifische Wärmekapazität eines Stoffes (auf eine Masseneinheit bezogen)

Für einfache Stoffe wie Gase oder feste Metalle, bei denen der Bewegungsfreiheitsgrad ihrer Moleküle bekannt ist, lässt sich die spezifische Wärmekapazität gut aus der obigen Formel berechnen. Für alle anderen Stoffe muss sie im Labor bestimmt werden, z. B. mit dem Mischungskalorimeter.

Flüssiges Wasser verhält sich etwas komplizierter. Das gewinkelte H_2O -Molekül hat so viele Freiheitsgrade der Translation, Rotation und Schwingung, dass man die drei Atome fast als völlig unabhängige Einheiten auffassen kann, von denen jedes 6 Freiheitsgrade hat. Da das Wassermolekül noch dazu sehr leicht ist (seine relative Molekularmasse beträgt etwa 18,0), hat Wasser eine größere Wärmekapazität als fast alle anderen Stoffe. Man erhält rein rechnerisch

$$c_{\text{H}_2\text{O}} = \frac{f \cdot k}{2 \cdot m_{\text{H}_2\text{O}}} = \frac{(3 \times 6) \times 1,380658 \times 10^{-23}}{2 \times (2 \times 1,008 + 15,999) \times 1,6605402 \times 10^{-27}} = 4153,8 \text{ J} \cdot \text{kg}^{-1} \cdot \text{K}^{-1}.$$

Tatsächlich schwankt die spezifische Wärmekapazität von Wasser ein wenig mit der Temperatur, wie die nachfolgende (wohl auf Messwerten beruhende) Tabelle belegt.

Tabelle 7-11: spezifische Wärmekapazität c von Wasser [CERBE und HOFFMANN, 1994]

Temperatur ($^{\circ}\text{C}$)	0	20	60	100
Wärmekapazität ($\text{J} \cdot \text{kg}^{-1} \cdot \text{K}^{-1}$)	4217	4182	4184	4216

Die Energie, die man braucht um 1 g Wasser um 1 K zu erwärmen, heißt auch 1 cal (Kalorie):

$$c_{\text{H}_2\text{O}} = 4185 \text{ J} \cdot \text{kg}^{-1} \cdot \text{K}^{-1} = 1 \text{ cal}$$

Mit der Dichte von $999,8 \text{ kg} \cdot \text{m}^{-3}$ bei 9°C wird daraus

$$C_{\text{H}_2\text{O}} = 4,184 \text{ J} \cdot \text{cm}^{-3} \cdot \text{K}^{-1}.$$

7.2.6 Spezifische Oberfläche

Die spezifische Oberfläche ist die wichtigste Größe, von der die Reibungskraft abhängt, die ein poröser Stoff einem Strömungsmedium entgegensetzt. Der Kehrwert von O/V_s (bzw. d_w) kann als hydraulischer Radius aufgefasst werden. Bei oberflächenreaktiven Partikeln ist die spezifische Oberfläche auch die maßgebliche Größe für die Sorption. Neben dem Durchströmungsverfahren (entspricht dem Versuch zur k -Wert-Bestimmung im Labor) kann daher auch das Sorptionsverfahren und auch das photometrische Verfahren zur Ermittlung der spezifischen Oberfläche eingesetzt werden [DIN 66126 Teil 1, 1989].

Unter der spezifischen Oberfläche einer dispersen Phase hat man laut DIN 66160 [1992] [DIN-Taschenbuch 133, 1997] ihre massen- oder volumenbezogene Oberfläche mit der Dimension $\text{L}^2 \cdot \text{M}^{-1}$

oder $L^2 \cdot L^{-3}$ zu verstehen (die disperse Phase eines dispersen Systems ist diejenige Phase, die aus mehreren abgrenzbaren Elementen besteht). KOZENY [1953] benutzte die auf das Feststoffvolumen bezogene Oberfläche O/V_s , doch kann O auch auf das Gesamtvolumen V bezogen werden: Nachdem für den Porenanteil $n = V_p/V = (V - V_s)/V$ gilt, ist $n \cdot V = V - V_s$, $V_s = V \cdot (1 - n)$ und

$$V = V_s / (1 - n), \quad (7-8)$$

womit $O/V = O/V_s \cdot (1 - n)$ ist. Bei der auf das Gesamtvolumen bezogenen spezifischen Oberfläche geht also auch der Porenanteil ein, nicht hingegen bei O/V_s .

Die spezifische massenbezogene Oberfläche O/M_s ist bei Sanden $< 0,1 \text{ m}^2/\text{kg}$, während sie bei Montmorilloniten bis $800 \text{ m}^2/\text{kg}$ und bei organischen Bestandteilen des Bodens noch mehr betragen kann [KASTANEK, 1998].

Die spezifische Oberfläche eines Stoffes kann u. a. aus der Korngrößenverteilung oder seinen fluidmechanischen Eigenschaften bestimmt werden. Für einige spezielle Oberflächenformen lassen sich auch theoretische Werte angeben, so z. B. für einen aus lauter gleich großen Kugeln bestehenden Feststoff. Die Oberfläche einer einzelnen Kugel beträgt $O = 4 \cdot \pi \cdot r^2 = \pi \cdot d^2$, ihr Volumen bzw. Feststoffvolumen $V_s = 4/3 \cdot \pi \cdot r^3 = \pi \cdot d^3/6$. Die auf das Feststoffvolumen bezogene spezifische Oberfläche ergibt sich daher für eine Kugel zu

$$O/V_{\text{Kugel}} = \frac{\pi \cdot d^2}{\pi \cdot d^3/6} = \frac{6}{d}. \quad (7-9)$$

Möchte man die Oberfläche auf das Gesamtvolumen beziehen, liefern die Gleichung 7-8 $V = V_s / (1 - n)$ und $V_s = \pi \cdot d^3/6$ die Beziehung $V = \pi \cdot d^3 / (6 \cdot (1 - n))$, womit die auf das Gesamtvolumen bezogene spezifische Oberfläche einer Kugel mit dem Porenanteil n

$$O/V_{\text{Kugel}} = \frac{\pi \cdot d^2}{\pi \cdot d^3} = \frac{6 \cdot (1 - n)}{d \cdot 6 \cdot (1 - n)}$$

beträgt. Weil eine einzelne Kugel die Masse $M_s = \rho_s \cdot V_s = \rho_s \cdot \pi \cdot d^3/6$ besitzt, beträgt die auf die Bodenmasse bezogene Oberfläche $O/M_s = (\pi \cdot d^2) / (\rho_s \cdot \pi \cdot d^3/6) = 6 / (\rho_s \cdot d)$.

Für Würfel gilt $V_s = d^3$ und $O = 6 \cdot d^2$ und ebenfalls $O/V_{\text{Würfel}} = 6/d$ bzw. $O/M_s = 6 / (\rho_s \cdot d)$.

Die spezifische Oberfläche eines natürlichen Bodens mit einer Vielzahl an Partikeln unterschiedlichster Durchmesser und Massenanteile lässt sich mit dem in Kapitel 7.2.7 definierten wirksamen Korndurchmesser d_w berechnen, wenn die Form der Partikel festgelegt wird (z. B. Kugel, Drehellipsoid, Würfel, Prisma, Plättchen usw.). Unterstellt man nun den Primärteilchen des fiktiven Bodens mit dem einheitlichen Durchmesser d_w , dass sie Kugeln (oder Würfel) sind, beträgt die volumenbezogene spezifische Oberfläche

$$\boxed{O/V_s = \frac{6}{d_w}}, \quad (7-10)$$

die auf das Gesamtvolumen bezogene Oberfläche

$$O/V = \frac{6 \cdot (1 - n)}{d_w}$$

und die massenbezogene Oberfläche

$$O/M_s = \frac{6}{\rho_s \cdot d_w}.$$

Die Bestimmung von O/V_s wird mit dem Konzept von d_w natürlich nicht erleichtert, denn die Schwierigkeiten werden bloß auf die Bestimmung von d_w verlagert.

7.2.7 Wirksamer Korndurchmesser d_w

Im Gegensatz zum effektiven Korndurchmesser d_e (siehe S. 52) ist der **wirksame Korndurchmesser** d_w in Österreich durch eine Publikation – und zwar von KASTANEK et al. [1980] – definiert. d_w ist jener Durchmesser, der für einen fiktiven Boden aus lauter gleich großen Primärteilchen mit dem Durchmesser d_w die gleiche spezifische Oberfläche ergibt wie der reale Boden.

Diese Definition sagt weder aus, ob die Oberfläche der Primärteilchen mit d_w als Kugel anzunehmen ist, noch ob die Teilchen des realen Bodens als Kugeln aufzufassen sind (aus dieser Sicht wäre der Begriff „wirksame Korngröße“ passender). Für die Ermittlung von d_w ist jedoch eine allgemeine Funktion zwischen der Größe eines Partikels und seiner spezifischen Oberfläche unumgänglich. Zu ergänzen wäre daher, dass bei der Definition – zumindest bei der Berechnung von d_w gemäß KOZENY [1953] und in der heute üblichen Form – stillschweigend vorausgesetzt wird, dass sich die Korngrößen d (d entspricht bei den größeren Körnern der Maschenweite des Siebes und bei den kleineren dem Durchmesser einer Kugel von gleicher Fallgeschwindigkeit) der Primärteilchen zu ihren spezifischen Oberflächen genau gemäß Formel 7-10 verhalten. Daraus folgt genau genommen nicht unbedingt, dass die Primärteilchen mit d_w Kugeln sind, denn z. B. auch O/V_s von Würfeln entspricht der Formel 7-10. Wie auch immer, nur durch die Annahme der Formel 7-10 lassen sich die Teilchen unterschiedlichster Größe innerhalb einer Fraktion auf eine mittlere Fraktionsgröße und die mittleren Fraktionsgrößen auf den wirksamen Korndurchmesser überführen. Ein *Primärteilchen* ist übrigens laut DIN 66160 [1992] [DIN-Taschenbuch 133, 1997] ein Partikel, das nicht durch Zusammenlagerung aus anderen Partikeln entstanden ist.

Unter diesen Voraussetzungen gilt grundsätzlich für ein Korngemisch [KOZENY, 1927]

$$\frac{1}{d_w} = \int_0^1 \frac{1}{d(KV)} dKV, \quad (7-11)$$

wobei $d(KV)$ die Inverse der Kornverteilungssummen-Kurve $KV(d)$ in dimensionslosen Massenanteilen ($0 \leq KV \leq 1$) ist.

Weil die Verteilungssummen-Kurve nicht kontinuierlich, sondern diskret erfasst wird, ist der Korngrößenbereich immer in mehrere Kornfraktionen aufgeteilt. Vorweg sind daher die mittleren Durchmesser der einzelnen Fraktionen d_i zu ermitteln und anschließend aus allen mittleren Fraktionsdurchmessern der wirksame Korndurchmesser d_w zu errechnen. Der diesbezügliche heute übliche Berechnungsvorgang für den wirksamen Durchmesser d_w wurde im Kapitel 2.3.4 vorgestellt, im Anhang 7.4 werden die Vorgangsweise von KOZENY und weitere mögliche Verfahren diskutiert.

7.2.8 Oberflächenverhältniszahl OVZ

Die *Oberflächenverhältniszahl* OVZ ist der Quotient der spezifischen, auf das Feststoffvolumen oder die Feststoffmasse bezogenen Oberfläche des Bodens und der spezifischen Oberfläche des Bodens mit dem Durchmesser 1 mm. Man erhält sie erneut unter Annahme der Beziehungen 7-10 bzw.

$$7-10 \quad OVZ = \frac{6/d_w}{6/1 \text{ mm}} = \frac{6/(\rho_s \cdot d_w)}{6/(\rho_s \cdot 1 \text{ mm})} = \frac{1 \text{ mm}}{d_w}$$

[OVZ] = dim.los Oberflächenverhältniszahl; gibt das Verhältnis zwischen der pro Feststoffvolu-

men vorhandenen Oberfläche des Bodens mit dem wirksamen Korndurchmesser d_w und der spezifischen Oberfläche eines Bodens mit lauter gleich großen Teilchen mit dem Durchmesser 1 mm an

$[d_w] = \text{mm}$ wirksamer Korndurchmesser; d_w ist jener Durchmesser, der für einen fiktiven Boden aus lauter gleich großen Teilchen mit dem Durchmesser d_w die gleiche spezifische Oberfläche O/V_s ergibt wie der reale Boden

7.2.9 Permittivität ϵ

Der gebräuchlichere Terminus für diese physikalische Größe ist *Dielektrizitätskonstante* [VOGEL, 1999], doch wird sie im Normen-Handbuch ON V 118 [1996] ausschließlich als *Permittivität* bezeichnet. Sie verknüpft die elektrische Flussdichte \mathbf{D} mit der elektrischen Feldstärke \mathbf{E} :

$$\mathbf{D} = \epsilon \cdot \mathbf{E}$$

$[\mathbf{D}] = \text{C} \cdot \text{m}^{-2}$ elektrische Flussdichte; vektorielle Feldgröße. Das Coulomb als Einheit der elektrischen Ladung Q und des elektrischen Flusses Ψ ergibt sich aus der Einheitengleichung $1 \text{ C} = 1 \text{ A} \cdot \text{s}$.

$[\mathbf{E}] = \text{V} \cdot \text{m}^{-1}$ elektrische Feldstärke; vektorielle Größe. \mathbf{E} ist der Differentialquotient aus der Kraft \mathbf{F} eines elektrischen Feldes auf einen ruhenden punktförmigen Körper und der elektrischen Ladung Q dieses Körpers: $\mathbf{E} = d\mathbf{F}/dQ = -\text{grad } V = \nabla V$
Für die Einheit Volt des elektrischen Potentials V gilt
 $1 \text{ V} = 1 \text{ W} \cdot \text{A}^{-1} = 1 \text{ J} \cdot \text{C}^{-1} = 1 \text{ kg} \cdot \text{m}^2 \cdot \text{s}^{-3} \cdot \text{A}^{-1}$

$[\epsilon] = \text{F} \cdot \text{m}^{-1}$ Die Einheit für \mathbf{E} lässt sich daher auch angeben durch $[\mathbf{E}] = \text{kg} \cdot \text{m} \cdot \text{s}^{-3} \cdot \text{A}^{-1}$
Permittivität (Dielektrizitätskonstante) eines bestimmten Stoffes (Kondensators). Aus den obigen Einheitengleichungen folgt für das Farad als Einheit der elektrischen Kapazität C unmittelbar $1 \text{ F} = 1 \text{ C} \cdot \text{V}^{-1} = 1 \text{ A}^2 \cdot \text{s}^4 \cdot \text{kg}^{-1} \cdot \text{m}^{-2}$ und für die Einheit von ϵ : $1 \text{ F} \cdot \text{m}^{-1} = 1 \text{ A}^2 \cdot \text{s}^4 \cdot \text{kg}^{-1} \cdot \text{m}^{-3}$

Die *relative Permittivität* oder Permittivitätszahl ϵ_r ist die auf die elektrische Feldkonstante bezogene absolute Permittivität:

$$\epsilon_r = \frac{\epsilon}{\epsilon_0}$$

$[\epsilon_r] = \text{dim.los}$ relative Permittivität (oder relative Dielektrizitätskonstante); dimensionslose Verhältniszahl. Verhältnis der Kapazität eines Kondensators mit dem betreffenden Stoff als Isolator bzw. mit Vakuum im Plattenzwischenraum [VOGEL, 1999] $\epsilon_r = C/C_{\text{Vakuum}}$ bzw. auf die elektrische Feldkonstante bezogene absolute Permittivität des betreffenden Stoffes

$[\epsilon_0] = \text{F} \cdot \text{m}^{-1}$ elektrische Feldkonstante; Permittivität des leeren Raumes. ϵ_0 wird auch als *Influenzkonstante* bezeichnet und ergibt sich aus der Formel

$$\epsilon_0 = \frac{1}{\mu_0 \cdot c_0^2} = \frac{10^7}{4 \cdot \pi \cdot 299792458^2} = 8,854 \dots \times 10^{-12} \text{ F/m}$$

Die Influenzkonstante tritt im SI-System auch im Coulomb-Gesetz als Proportionalitätskonstante auf:

$$\mathbf{F} = \frac{Q \cdot Q'}{4 \cdot \pi \cdot \epsilon_0 \cdot r^2} \cdot \mathbf{r}_0$$

$[Q, Q'] = \text{C}$ elektrische Ladungen; Q' mit entgegengesetztem (Anziehung) oder gleichem (Abstoßung) Vorzeichen von Q

$[\mathbf{r}_0] = \text{m}$ Einheitsvektor in Verbindungsrichtung

$[r] = \text{m}$ Abstand der beiden Ladungen

$[\mathbf{F}] = \text{N}$ anziehende oder abstoßende Kraft zwischen zwei elektrischen Ladungen. Die Kraft zwischen zwei geladenen Elementarteilchen ist etwa 10^{40} mal größer als die Gravitation zwischen ihnen (die Elementarladung eines Protons, die gleich der eines Elektrons ist, beträgt $e = 1,602 \times 10^{-19} \text{ C}$).

- $[\mu_0] = \text{H} \cdot \text{m}^{-1}$ magnetische Feldkonstante; Permeabilität des leeren Raumes.
 $\mu_0 = 4 \times \pi \times 10^{-7} \text{ H/m} = 12,566 \dots \times 10^{-7} \text{ H/m}$
 Das Henry (H) als Einheit der gegenseitigen Induktivität L_{mn} ergibt sich aus der Einheitengleichung [ON V 118, 1996] $1 \text{ H} = 1 \text{ V} \cdot \text{s/A} = 1 \text{ kg} \cdot \text{m}^2 \cdot \text{s}^{-2} \cdot \text{A}^{-2}$.
- $[c_0] = \text{m} \cdot \text{s}^{-1}$ Geschwindigkeit elektromagnetischer Wellen im leeren Raum; Lichtgeschwindigkeit im Vakuum. $c_0 = 299792458 \text{ m/s}$ (exakt)

Die relative Dielektrizitätskonstante wird meist nur kurz als Dielektrizitätskonstante oder Dielektrizitätszahl bezeichnet, auch der Index r wird mitunter weggelassen. Bezüglich der Permittivität ϵ_r verschiedener Stoffe siehe z. B. LIDE [2002].

ϵ_r von Wasser hängt vom Druck und von der Temperatur ab und beträgt unter Atmosphärendruck (0,1 MPa) und Zimmertemperatur (295 K) 79,55; wesentlich kleiner ist ϵ_r von Quarz mit rund 4,4 je nach Hauptrichtung und noch kleiner von trockener, CO_2 -freier Luft mit 1,0005 (die von CO_2 beträgt 1,000922 und die von Wasserdampf bei 20°C 1,0002). Für die Bestandteile des Bodens kann für Bodenwasser etwa 81, für die Bodenmineralien 3–4 und für Bodenluft 1 gesetzt werden [<http://psb.usu.edu/wintdr98/manual/chapter2.pdf>]. $\epsilon_{r \text{ Eis}} = 4$.

Die Permittivität von flüssigem Wasser, das einem hochfrequenten elektrischen Feld (Radiofrequenzen und Mikrowellen) ausgesetzt ist, hängt insbesondere von der Frequenz ab. Um ihren Einfluss darzustellen, benutzt man am besten die so genannte *komplexe relative Permittivität*

$$\epsilon_r = \epsilon_r' + i \cdot \epsilon_r''.$$

- $[\epsilon_r'] = \text{dim.los}$ Realteil der komplexen relativen Permittivität. ϵ_r' steht in enger Beziehung zur Kapazität eines Stoffes
- $[\epsilon_r''] = \text{dim.los}$ Imaginärteil der komplexen relativen Permittivität. ϵ_r'' steht mit der Leitfähigkeit des Mediums in enger Beziehung

Die beiden Teile lassen sich gemäß der Debye-Gleichung ermitteln aus [LIDE, 2002]

$$\epsilon_r' = \epsilon_{r\infty} + \frac{\epsilon_{rs} - \epsilon_{r\infty}}{1 + \omega^2 \cdot \tau^2}$$

und

$$\epsilon_r'' = \epsilon_{r\infty} + \frac{(\epsilon_{rs} - \epsilon_{r\infty}) \cdot \omega \cdot \tau}{1 + \omega^2 \cdot \tau^2}$$

- $[\epsilon_{rs}] = \text{dim.los}$ statische relative Permittivität (klassische Permittivität)
- $[\epsilon_{r\infty}] = \text{dim.los}$ Parameter, unter dem die relative Permittivität unter Höchsthäufigkeit verstanden werden kann. Für Wasser bei 0°C : $\epsilon_{r\infty} = 5,7$, bei 25°C 5,2 und bei 50°C 4,0 [LIDE, 2002]
- $[\omega] = \text{s}^{-1}$ Winkelgeschwindigkeit. $\omega = 2 \cdot \pi \cdot f$
 Einheit: der Radiant je Sekunde ($1 \text{ rad/s} = 1 \text{ s}^{-1}$)
- $[f] = \text{rad} \cdot \text{s}^{-1}$ Frequenz; Kehrwert der Periodendauer T bzw. Anzahl der Perioden pro Zeiteinheit. SI-Einheit: das Hertz (Hz). Es gilt $1 \text{ Hz} = 1 \text{ s}^{-1}$
- $[\tau] = \text{ps}$ dielektrische Relaxation (Ansprechzeit) für die Molekülorientierung. Für Wasser bei 0°C : $\tau = 17,67 \text{ ps}$, bei 25°C 8,27 ps und bei $4,75 \text{ ps}$ 4,0 [LIDE, 2002] ($1 \text{ ps} \equiv 10^{-12} \text{ s}$).

Während ϵ_r' erst bei Frequenzen im GHz-Bereich langsam abnimmt, erreicht ϵ_r'' erst bei solchen eine nennenswerte Größe. Bei 25°C und 100 MHz beträgt jedenfalls $\epsilon_r' = 78,36$ und $\epsilon_r'' = 0,38$ [LIDE, 2002].

7.3 Zusammenfassung: Oberflächenspannung und Kapillarität

(vgl. Vorlesung Hydraulik und Hydromechanik)

An Phasengrenzen treten Grenzflächenspannungen auf. Stoßen z. B. eine Gasphase (Gasgemische, Dämpfe; z. B. Luft (1)), ein tropfbares Fluid (Flüssigkeit; z. B. Wasser (2)) und ein fester Stoff (3) zusammen, so treten drei Randspannungen auf, wobei die Grenzflächenspannung zwischen dem tropfbaren Fluid (Flüssigkeit) und der Gasphase als *Oberflächenspannung* (σ_{12}) und der Spannungsunterschied zwischen den zwei Fluiden und dem festen Stoff als *Haftspannung* bezeichnet wird ($\sigma_{13} - \sigma_{23}$) [BOHL, 1989]. Grenzflächenspannungen können auch negativ sein, z. B. wenn ein Festkörper die Moleküle einer Flüssigkeit stärker anzieht als diese einander [VOGEL, 1999]. Dann tritt mindestens teilweise Benetzung ein. Negative Grenzflächenenergie zwischen zwei Flüssigkeiten führt zur Durchmischung.

Je nach der Größe der drei Randspannungen bildet sich an der Schnittlinie der drei Begrenzungsflächen ein Benetzungswinkel α zwischen dem festen Stoff und der Grenzfläche 12 aus. Wenn die Oberfläche 12 in Ruhe verhartet, müssen die Grenzflächenspannungen im Berührungspunkt B der untenstehenden Abbildung 7-2 im Gleichgewicht sein und es muss in Wandrichtung (nach unten gerichtete x -Achse) für die Summe der x -Komponenten der Spannungsvektoren gelten

$$\sigma_{13,x} + \sigma_{23,x} + \sigma_{12,x} = 0.$$

Diese Gleichung lässt sich in vektorieller Schreibweise als Summe der Skalarprodukte der Spannungsvektoren mit dem Einheitsvektor in x -Richtung $\mathbf{i} = \begin{pmatrix} 1 \\ 0 \end{pmatrix}$ darstellen:

$$\sigma_{13} \cdot \mathbf{i} + \sigma_{23} \cdot \mathbf{i} + \sigma_{12} \cdot \mathbf{i} = 0 \quad (7-12)$$

Die Skalarprodukte sind definitionsgemäß anzusetzen mit $\mathbf{a} \cdot \mathbf{b} = |\mathbf{a}| \cdot |\mathbf{b}| \cdot \cos \varphi$:

$$\begin{aligned} |\sigma_{13}| \cdot |\mathbf{i}| \cdot \cos \pi + |\sigma_{23}| \cdot |\mathbf{i}| \cdot \cos 0 + |\sigma_{12}| \cdot |\mathbf{i}| \cdot \cos \alpha &= 0 \\ \sigma_{13} \cdot 1 \cdot (-1) + \sigma_{23} \cdot 1 \cdot 1 + \sigma_{12} \cdot 1 \cdot \cos \alpha &= 0 \\ -\sigma_{13} + \sigma_{23} + \sigma_{12} \cdot \cos \alpha &= 0. \end{aligned}$$

Alternativ lässt sich das Skalarprodukt für den zweidimensionalen Fall bilden durch

$$\mathbf{a} \cdot \mathbf{b} = a_1 \cdot b_1 + a_2 \cdot b_2.$$

Man erhält für Gl. 7-12 $\begin{pmatrix} -\sigma_{13} \\ 0 \end{pmatrix} \cdot \begin{pmatrix} 1 \\ 0 \end{pmatrix} + \begin{pmatrix} \sigma_{23} \\ 0 \end{pmatrix} \cdot \begin{pmatrix} 1 \\ 0 \end{pmatrix} + \begin{pmatrix} \sigma_{12} \cdot \cos \alpha \\ \sigma_{12} \cdot \sin \alpha \end{pmatrix} \cdot \begin{pmatrix} 1 \\ 0 \end{pmatrix} = 0$:

$$-\sigma_{13} \cdot 1 + 0 \cdot 0 + \sigma_{23} \cdot 1 + 0 \cdot 0 + \sigma_{12} \cdot \cos \alpha \cdot 1 + \sigma_{12} \cdot \sin \alpha \cdot 0 = 0$$

und damit wieder

$$-\sigma_{13} + \sigma_{23} + \sigma_{12} \cdot \cos \alpha = 0.$$

Für den Benetzungswinkel gilt also

$$\cos \alpha = \frac{\sigma_{13} - \sigma_{23}}{\sigma_{12}}.$$

$[\alpha] = ^\circ$ Benetzungswinkel. Winkel zwischen der vertikal nach unten verlaufenden festen Wand (1) und der Flüssigkeitsoberfläche 12. Bei benetzenden Flüssigkeiten ist $\alpha < 90^\circ$, für nichtbenetzende gilt $\alpha > 90^\circ$.

$[\sigma_{13}] = \text{N} \cdot \text{m}^{-1}$ Grenzflächenspannung zwischen dem Fluid (1) und der festen Wand (3)

$[\sigma_{23}] = \text{N} \cdot \text{m}^{-1}$ Grenzflächenspannung zwischen der Flüssigkeit (2) und der festen Wand (3). σ_{23} ist negativ, wenn der feste Stoff (1) die Moleküle der Flüssigkeit (2) stärker anzieht als diese einander (z. B. Glas (1) und Wasser (2)).

$[\sigma_{12}] = \text{N} \cdot \text{m}^{-1}$ Oberflächenspannung zwischen zwei Fluiden (wovon eines klarerweise eine Flüssigkeit sein muss). Eine Oberfläche bildet sich zwischen zwei Fluiden nur dann aus, wenn ihre Grenzflächenenergie positiv ist (daher ist σ_{12} von Oberflächen stets positiv; andernfalls würden sich die zwei Fluide durchmischen).

Ist die Haftspannung $\sigma_{13} - \sigma_{23}$ negativ bzw. $\sigma_{13} < \sigma_{23}$ wie in der Abbildung 7-2 links, ist σ_{12} nach oben (in Richtung 13) gerichtet und $\alpha > 90^\circ$, es bildet sich eine konvexe Oberfläche aus, die Flüssigkeit (2) benetzt die feste Wand nicht (z. B. Luft und Quecksilber gegen Glas). In eine Kapillare würde die Flüssigkeit erst dann eintreten, wenn jene ausreichend tief eingetaucht wird (Kapillardepression).

Ist hingegen wie in der Abbildung 7-2 Mitte $\sigma_{13} > \sigma_{23}$ (σ_{23} negativ!), muss σ_{12} für ein Kräftegleichgewicht nach unten (in Richtung 23) gerichtet sein und $\alpha < 90^\circ$, es bildet sich eine konkave Oberfläche aus, die Flüssigkeit benetzt den festen Stoff zumindest teilweise (z. B. Luft und Wasser gegen Glas). In einer Kapillarröhre würde die Flüssigkeit ansteigen (Kapillaraszension).

Ist die Haftspannung größer als die Oberflächenspannung ($\sigma_{13} - \sigma_{23} > \sigma_{12}$; Abbildung 7-2 rechts), kriecht die Flüssigkeit ganz an der Wand hoch bzw. benetzt sie diese vollkommen ($\alpha = 0^\circ$) (z. B. Petroleum).

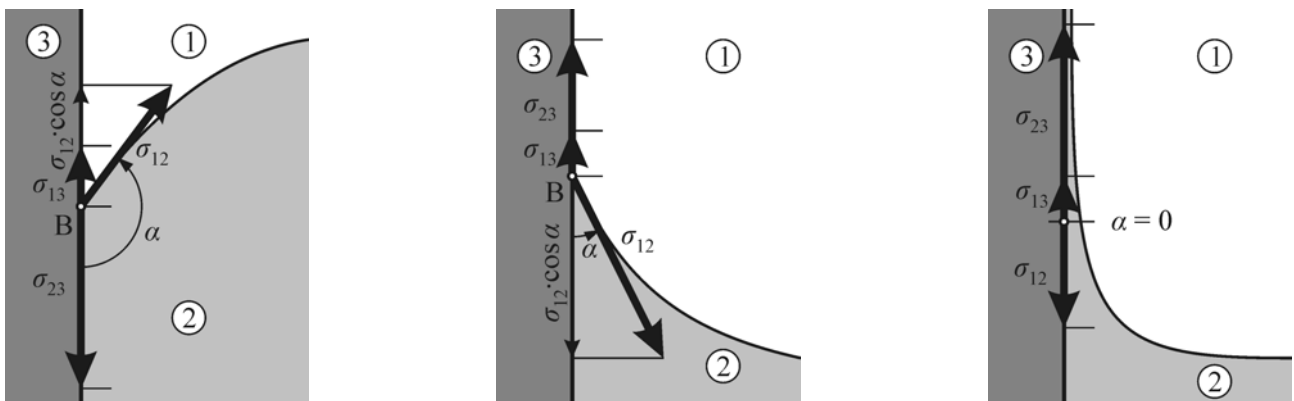


Abbildung 7-2: Zusammenhang zwischen der Haftspannung und dem Randwinkel
 links: Flüssigkeit benetzt die Wand nicht
 Mitte: Wand wird von der Flüssigkeit teilweise benetzt
 rechts: vollkommene Benetzung

Bei gekrümmten Flächen ergibt sich eine resultierende Kraft senkrecht zur Oberfläche. Wird diese Kraft auf die Flächeneinheit bezogen, so folgt der *Kapillardruck* p_K :

Kapillar- oder Krümmungsdruck
$$p_K = \frac{dF}{dA} \quad (7-13)$$

1. Hauptsatz der Kapillarität:
$$p_K = \sigma \cdot \left(\frac{1}{r_1} + \frac{1}{r_2} \right) \quad (7-14)$$

Für eine kreisförmige Kapillare (Haarröhrchen) ist mit $r_1 = r_2 = r_K = \frac{r_K}{\cos \alpha} = \frac{d_K}{2 \cdot \cos \alpha}$ (halbkugelförmige Gestalt der Flüssigkeitsoberfläche)
$$p_K = \frac{4 \cdot \sigma}{d_K} \cdot \cos \alpha \quad (7-15)$$

und die kapillare Steighöhe
$$h_K = \frac{4 \cdot \sigma}{\rho \cdot g \cdot d_K} \cdot \cos \alpha \quad (7-16)$$

$[h_K]$ = m kapillare Steighöhe
 $[\sigma]$ = N·m⁻¹ Oberflächenspannung; z. B. Luft – Wasser: $\sigma = 0,073$ N/m bei 20 °C. σ steht nach VOGEL [1999] in engem Zusammenhang mit der latenten Energie (um ein

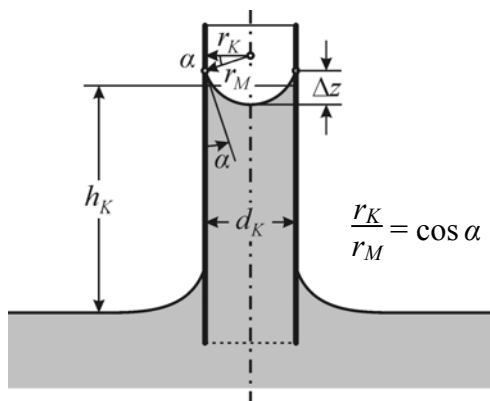
Flüssigkeitsmolekül an die Oberfläche zu bringen, ist etwa ein Viertel der Energie nötig, um es ganz aus der flüssigen Phase zu befreien)

- $[\rho] = \text{kg} \cdot \text{m}^{-3}$ Dichte der Flüssigkeit
 $[d_K] = \text{m}$ Durchmesser der Kapillare
 $[\alpha] = \text{rad}$ Benetzungswinkel

Mit den Werten $\rho_{\text{H}_2\text{O}} = 1000 \text{ kg/m}^3$, $\sigma = 0,073 \text{ N/m}$ und $g = 9,81 \text{ m/s}^2$ erhält man als Faustformel

$$h_K = \frac{30}{d_K} \quad (7-17)$$

- $[h_K] = \text{mm}$ kapillare Steighöhe
 $[d_K] = \text{mm}$ Durchmesser der Kapillare



Umgekehrt ist einer bekannten Steighöhe h_K bzw. Wasser-
spannung h bei einem Benetzungswinkel α , einer Oberflä-
chenspannung σ und einer Flüssigkeitsdichte ρ folgender
Kapillar- bzw. Porenradius r_K zuzuordnen:

$$r_K = \frac{2 \cdot \sigma \cdot \cos \alpha}{\rho \cdot g \cdot h} \quad (7-18)$$

$$\Delta z = r_M - r_M \cdot \cos(90^\circ - \alpha) = r_M \cdot (1 - \sin \alpha)$$

$$r_M = \frac{r_K}{\cos \alpha} \rightarrow \Delta z = \frac{r_K}{\cos \alpha} \cdot (1 - \sin \alpha)$$

Abbildung 7-3: Meniskus in einer Kapillare

Beispiel 7-3: kapillare Steighöhe zwischen zwei parallelen Platten

Für einen Spalt ($r_2 = \infty$) folgt

$$p_K = \sigma / r_1; \quad r_1 = \frac{a}{2 \cdot \cos \alpha} \rightarrow p_K = \frac{2 \cdot \sigma}{a} \cdot \cos \alpha$$

$$h_K = \frac{\sigma}{\rho \cdot g} \cdot \frac{2}{a} \cdot \cos \alpha \quad (7-19)$$

- $[a] = \text{m}$ Abstand zweier Platten

7.4 Berechnung des wirksamen Korndurchmessers

Definitionsgemäß wäre bei der Berechnung des wirksamen Korndurchmessers d_w von der spezifischen Oberfläche auszugehen. Unter bestimmten, bereits von KOZENY [1927] getroffenen Annahmen für die Form der Oberfläche gilt die Gleichung 7-11

$$\frac{1}{d_w} = \int_0^1 \frac{1}{d(KV)} dKV,$$

- [d] = mm Korngröße; entspricht bei den größeren Partikeln der Maschenweite des Siebes und bei den kleineren dem Durchmesser einer Kugel von gleicher Fallgeschwindigkeit
- [KV] = dim.los Massenanteil; Verhältnis der Masse aller Teilchen mit einer Größe $\leq d$ zur Gesamtmasse der Probe m_s
- [d_w] = mm wirksamer Korndurchmesser der Gesamtprobe; jener Durchmesser, der für einen fiktiven Boden aus lauter gleich großen Primärteilchen mit dem Durchmesser d_w die gleiche spezifische Oberfläche ergibt wie der reale Boden

wobei $d(KV)$ die Inverse der Kornverteilungssummen-Kurve $KV(d)$ in dimensionslosen Massenanteilen ($0 \leq KV \leq 1$) ist. Wenn die Kornverteilung ungewöhnlicherweise in absoluten Massen gegeben ist, muss noch durch die Gesamtmasse der Probe m_s dividiert werden:

$$\frac{1}{d_w} = \frac{1}{m_s} \cdot \int_0^{m_s} \frac{1}{d(m)} dm. \quad (7-20)$$

- [m] = g Masse; Feststoffmasse aller Partikel der Probe, deren Durchmesser kleiner oder gleich d ist
- [m_s] = g Gesamtmasse der Probe

Nachdem die Verteilungssummen-Kurve im allgemeinen nicht als analytische Funktion, sondern in Form von diskreten Messpunkten bzw. Fraktionen vorliegt, besteht die Hauptaufgabe bei der Berechnung heute wie damals darin, das Integral exakt durch eine Summe aus Teilintegralen über die einzelnen Fraktionen zu ersetzen und die Integrale über die einzelnen Fraktionen durch numerische Integration zu nähern. Das schon von KOZENY erwähnte Problem dabei ist nur, dass über die Verteilung innerhalb der Fraktionsgrenzen nichts Genaueres bekannt ist. Die von ihm vorgeschlagene Lösung ist im unten stehenden Unterkapitel zu finden. In einem weiteren Unterkapitel werden Detailprobleme diskutiert.

7.4.1 Herleitung nach KOZENY [1953]

KOZENY [1953] führt in den Erläuterungen zur Berechnung der spezifischen Oberfläche bestimmte Korngrößenfraktionen an, die zum Teil heute nicht mehr zutreffen. Charakteristisch für das Verfahren ist jedoch die Aufteilung in Fraktionen und nicht die Fraktionsgrenzen; die Berechnungsmethode für O/V_s nach KOZENY kann daher auch für die heute übliche Fraktionierung angewendet werden. Heute wie damals entspricht die Korngröße d bei den größeren Arten der Maschenweite des Siebes und bei den kleineren dem Durchmesser einer Kugel von gleicher Fallgeschwindigkeit.

Es sei der Boden also durch Pipettieren oder Schlämmen in einzelne Fraktionen zerlegt worden, deren jede die Teilmasse Δm_i der Gesamtmasse der Probe m_s habe. Jede Fraktion besteht aus z_i Teil-

chen, deren Größe zwischen den Grenzen $d_{i\text{ unten}}$ und $d_{i\text{ oben}}$ liegt. Ferner seien ΔO_i die zugehörigen Teiloberflächen, wobei natürlich die Summe aller Teilmassen die Gesamtmasse und die Summe aller Teiloberflächen die gesamte Oberfläche der Bodenprobe ergibt:

$$\sum \Delta m_i = m_s \quad \text{und} \quad \sum \Delta O_i = O.$$

Dann kann man schreiben
$$O/V_s = \frac{O}{V_s} = \frac{O \cdot \rho_s}{m_s} = \frac{\rho_s}{m_s} \cdot \sum \Delta O_i, \quad (7-21)$$

worin ρ_s die Feststoffdichte ist (Pyknometer). Bei den weiteren Betrachtungen wird immer Kugelform der Teilchen angenommen und die aus dieser Idealisierung erhaltenen Werte, so auch die spezifische Oberfläche, sind natürlich keine wahren Größen, sondern nur Vergleichswerte, die aber sehr gut geeignet sind, um an Hand der Erfahrung gültige Regeln für die zweckmäßige Durchführung hydrotechnischer Maßnahmen (Dränungen usw.) zu schaffen. Um nun die Teiloberfläche einer einzelnen Fraktion zu bestimmen, ist der für diese Fraktion zutreffende wirksame Korndurchmesser – fortan als mittlerer Korndurchmesser d_i der Fraktion bezeichnet – gemäß Gleichung 7-11 zu berechnen. Bevor die Integration im Intervall zwischen den beiden Massenanteilen, die den beiden Fraktionsgrenzen $d_{i\text{ unten}}$ und $d_{i\text{ oben}}$ entsprechen, durchgeführt werden kann, muss der Verlauf zwischen den Fraktionsgrenzen festgelegt werden. Integriert man numerisch nur mit den beiden Fraktionsgrenzen als Stützwerte, ist zwar keine Kenntnis des Verlaufes innerhalb des Intervalls erforderlich, doch wird dadurch ebenfalls ein gewisser Verlauf impliziert, nämlich jener, für den die numerische Integration einen exakten Wert liefert. Infolge der geringen Krümmung der Kornverteilungslinie genügt es laut KOZENY [1953], für den mittleren Korndurchmesser d_i einer Fraktion

$$\frac{1}{d_i} = \frac{1}{3} \cdot \left(\frac{1}{d_{i\text{ unten}}} + \frac{2}{d_{i\text{ unten}} + d_{i\text{ oben}}} + \frac{1}{d_{i\text{ oben}}} \right) \quad (7-22)$$

zu setzen. Der Wert dieser Integrationsformel liegt zwischen dem der Trapezregel und dem der Simpsonschen Formel, die KOZENY ebenfalls in Erwägung gezogen hat. Bei bekannter Teilmasse der Fraktion Δm_i kann die Teilchenanzahl z_i der kugeligen Primärteilchen mit dem mittleren Durchmesser d_i und dem Volumen V_s ermittelt werden aus

$$\Delta m_i = z_i \cdot \rho_s \cdot V_s = z_i \cdot \rho_s \cdot \frac{\pi \cdot d_i^3}{6} \rightarrow z_i = \frac{6 \cdot \Delta m_i}{\rho_s \cdot \pi \cdot d_i^3}.$$

Für die Teiloberfläche der Fraktion erhält man dann

$$\Delta O_i = z_i \cdot \pi \cdot d_i^2 = \frac{6 \cdot \Delta m_i}{\rho_s \cdot d_i}.$$

Die spezifische Oberfläche der gesamten Bodenprobe folgt aus der Aufsummierung aller Teiloberflächen und der Division durch das Feststoffvolumen gemäß Gleichung 7-10

$$O/V_s = \frac{\rho_s \cdot \sum \Delta O_i}{m_s} = \frac{\rho_s \cdot \sum \frac{6 \cdot \Delta m_i}{\rho_s \cdot d_i}}{m_s}$$

bzw.

$$O/V_s = \frac{6}{m_s} \cdot \sum \frac{\Delta m_i}{d_i}.$$

Im Gegensatz zu KOZENY wird heute das Konzept des wirksamen Korndurchmessers nicht auf die einzelnen Fraktionen angewendet, sondern gleich auf die gesamte Probe. Es werden also nicht die einzelnen wirksamen Fraktionsdurchmesser d_i bestimmt und daraus die Teiloberflächen ΔO_i , die schließlich zu O aufsummiert werden um O/V_s zu erhalten, sondern es werden gleich die massengewichteten Kehrwerte von d_i aufsummiert und zu einem wirksamen Durchmesser d_w der Gesamt-

probe zusammengesetzt, mit dem dann O/V_s unter der Annahme von Gleichung 7-10 erhalten wird. Beide Vorgehensweisen führen mathematisch zum selben Resultat.

d_w ist grundsätzlich durch seine Definition in Kapitel 7.2.7 festgelegt, der Zusammenhang zwischen d_w und O/V_s durch Gleichung 7-10. Nachdem der fiktive Boden aus lauter gleich großen Partikeln mit der Größe d_w dieselbe spezifische Oberfläche ergeben muss wie der reale Boden

$$\frac{6}{d_w} = O/V_s = \frac{6}{m_s} \cdot \sum \frac{\Delta m_i}{d_i},$$

ergibt sich für den wirksamen Durchmesser schließlich

$$d_w = \frac{m_s}{\sum \frac{\Delta m_i}{d_i}}. \quad (7-23)$$

Die Bestimmung von d_w mittels Gleichung 7-23 ist nicht einfacher als mittels Gl. 7-11; es wurde nur das Gesamtintegral durch eine Summe von Teilintegralen ersetzt. Die wesentliche Erleichterung ergibt sich erst durch die Ermittlung der wirksamen Fraktionsdurchmesser d_i durch numerische Integration in den Teilintervallen gemäß Gl. 7-22. Zur vollständigen Lösung ist noch das Detailproblem mit dem Kleinstdurchmesser der feinsten Fraktion zu klären, das im übernächsten Unterkapitel abgehandelt wird.

7.4.2 Mittlerer Fraktionsdurchmesser d_i

Der mittlere Fraktionsdurchmesser d_i ist jener wirksame Korndurchmesser einer Fraktion, der dieselbe spezifische Oberfläche ergibt wie sämtliche Partikel der Fraktion. Für die Abschätzung von d_i einer Fraktion stehen mehrere Alternativen zur Verfügung.

a) KOZENY [1927] selbst betrachtet die Aufgabe rein mathematisch als numerische Lösung des Integrals 7-11 und schreibt, dass zwischen zwei genügend nahen Grenzen $d_{i \text{ unten}}$ und $d_{i \text{ oben}}$ nach der Trapezregel der Ausdruck 7-25 gesetzt werden kann, während bei der Annahme einer gleichmäßigen Verteilung über das Intervall nach der Simpsonschen Regel die erste Näherung

$$\frac{1}{d_i} = \frac{1}{6} \cdot \left(\frac{1}{d_{i \text{ unten}}} + \frac{8}{d_{i \text{ unten}} + d_{i \text{ oben}}} + \frac{1}{d_{i \text{ oben}}} \right) \quad (7-24)$$

wäre, die stets größere Werte für d_w liefert als die Trapezregel 7-25. Einen Wert, der zwischen beiden Werten aus 7-25 und 7-24 liegt, liefert die Formel

$$\frac{1}{d_i} = \frac{1}{3} \cdot \left(\frac{1}{d_{i \text{ unten}}} + \frac{2}{d_{i \text{ unten}} + d_{i \text{ oben}}} + \frac{1}{d_{i \text{ oben}}} \right),$$

die KOZENY in seinem Buch 1953 empfiehlt. KOZENY [1927] erwähnt noch Vergleichsmessungen von ATTERBERG, wonach für die gröberen Kornsorten der „tatsächliche“ Wert für d_w kleiner sei als der mittlere Wert nach, für feinere hingegen größer. Das bedeutet, dass für die gröberen Sorten die Trapezregel 7-25 bessere Werte lieferte, für feinere die Simpson-Regel 7-24; im Schnitt wies Gleichung 7-21 die geringsten Abweichungen auf.

b) VUKOVIC und SORO [1992] führen die Trapezregel bzw. das harmonische Mittel

$$d_i = \frac{2}{\frac{1}{d_{i \text{ unten}}} + \frac{1}{d_{i \text{ oben}}}} \quad (7-25)$$

an und berufen sich dabei auf KOZENY [1953], haben das Buch aber anscheinend nicht gelesen. Außer dem Verweis auf KOZENY werden keine neuen Argumente ins Treffen geführt. Die Trapezregel bzw. das harmonische Mittel wird dennoch häufig verwendet. Das harmonische Mittel ist stets kleiner oder gleich dem geometrischen Mittel, und dieses ist wiederum stets kleiner oder gleich dem arithmetischen Mittel [SPIEGEL, 1990]. Hingegen würde das geometrische Mittel bei der logarithmischen Kornverteilungslinie genau das arithmetische Mittel der logarithmischen Werte ergeben [HARTUNG et al., 1999].

c) Der Korngrößenbereich von natürlichen Böden erstreckt sich zumeist auf 3 Zehnerpotenzen und mehr. Die *Verteilungssummen-Kurve* (genormte Bezeichnung nach DIN 66141, zitiert in DIN-Taschenbuch 133 [1997]) wird daher immer mit logarithmischer Teilung der Abszisse aufgetragen, wobei die einzelnen Messpunkte oft linear verbunden werden. Dies impliziert im Gegensatz zu den Methoden a) und b) eine logarithmische Verteilung der Massenanteile der einzelnen Partikelgrößen innerhalb einer Kornfraktion. Für die lineare Verbindung der einzelnen Messwerte der logarithmischen Verteilungssummen-Kurve spricht die exakte Definition des Verlaufes zwischen den Punkten und die einfache Berechnung. Ein solcher Ansatz übergewichtet die Massenanteile der feineren Teilchen innerhalb der Fraktion. Konkret würde das z. B. für die Sandfraktion bedeuten, dass der Massenanteil des Feinsandes immer größer ist als der des Grobsandes. Tatsächlich ist die Wahrscheinlichkeit bei natürlichen Böden hierfür nicht größer als für das genaue Gegenteil. Die Verteilungssummen-Kurve wird nicht deshalb mit logarithmischer Abszisse aufgetragen, weil eine logarithmisch lineare Verteilung anzunehmen ist, sondern einfach der besseren Darstellung wegen.

d) Nebenbei schreibt DIN 66141 vor, die Punkte durch einen die Streuung der Messwerte ausgleichenden Kurvenzug zu verbinden. Weil hierdurch kein eindeutiger Verlauf definiert ist und z. B. der d_{10} -Wert vom Zeichner der Kurve abhängt, wird mitunter dennoch ein linearer Verlauf durch die Messpunkte verwendet. Durch die graphische Festlegung eines Kurvenzuges – egal ob ausgleichend oder interpolierend – bietet sich eine graphische Auswertung des Integrals 7-11 an, die früher die Hauptmethode war.

e) Durch spezielle Spline-Funktionen lassen sich auch numerisch Kurvenzüge durch die Datenpunkte legen. Diese Funktionen können hochgenau analytisch oder numerisch integriert werden, sodass sich der Fehler auf die Interpolation beschränkt. Eine solche Auswertung kann noch nicht als Stand der Technik bezeichnet werden.

7.4.3 Feinste Fraktion

Wie auch immer der mittlere Korndurchmesser d_i der einzelnen Fraktionen berechnet wird, für die feinste Fraktion ist eine zusätzliche Überlegung anzustellen. Der untere Grenzdurchmesser $d_{1\text{ unten}}$ derselben ist in der Praxis schwer zu bestimmen und verbleibt oft unbekannt. Das ist umso bedauerlicher, als die spezifische Oberfläche von Böden mit nennenswertem Tonanteil stark von $d_{1\text{ unten}}$ abhängt. Mit der nahe liegenden Annahme $d_{1\text{ unten}} = 0$ würden alle Berechnungsverfahren für den mittleren Korndurchmesser der feinsten Fraktion d_1 einen unbestimmten Wert ergeben, es muss daher ein fiktiver Wert festgesetzt werden. Eine publizierte Extrabehandlung für die feinste Fraktion bzw. die Festlegung des absolut kleinsten Korndurchmessers existiert insgesamt nur für das Verfahren b) nach VUKOVIC und SORO:

$$\frac{1}{d_1} = \frac{3}{2} \cdot \frac{1}{d_{1\text{ oben}}} \quad (7-26)$$

- $[d_1]$ = mm mittlerer Durchmesser bzw. wirksamer Durchmesser der feinsten Fraktion; jener Durchmesser, der dieselbe spezifische Oberfläche ergibt wie die unterschiedlich großen Partikel der feinsten Fraktion
- $[d_{1\text{ oben}}]$ = mm oberer Grenzdurchmesser der feinsten Fraktion. In der Praxis ist zumeist $d_{1\text{ oben}} = 0,002$ mm

Die Festlegung des mittleren Durchmessers der feinsten Fraktion in dieser Form haben VUKOVIC und SORO [1992] zur Bestimmung von d_w im Verfahren nach KOZENY (Gleichung 2-25) implementiert. Allerdings ist die Beziehung 7-26 weder in dessen Veröffentlichung aus 1927 noch aus 1953 zu finden. Sie dürfte viel mehr von ZUNKER stammen. Sie impliziert mit der Annahme, dass das einfache homogene Mittel aus oberem und unterem Grenzdurchmesser gemäß Verfahren b) bzw. Gl. 7-25 berechnet wird, folgenden unteren Grenzdurchmesser der feinsten Fraktion $d_{1\text{ unten}}$

$$\frac{1}{d_1} = \frac{3}{2} \cdot \frac{1}{d_{1\text{ oben}}} = \frac{1}{2} \cdot \left(\frac{1}{d_{1\text{ unten}}} + \frac{1}{d_{1\text{ oben}}} \right)$$

$$3 \cdot d_{1\text{ unten}} = d_{1\text{ unten}} + d_{1\text{ oben}} \quad (d_{1\text{ unten}} \cdot d_{1\text{ oben}} \neq 0)$$

$$d_{1\text{ unten}} = \frac{d_{1\text{ oben}}}{2}$$

- $[d_{1\text{ unten}}]$ = mm fiktiver unterer Grenzdurchmesser der feinsten Fraktion. In der Natur enthalten viele Bodenproben nicht wenige Partikel, die kleiner sind $d_{1\text{ unten}}$

d. h. dass bei einem oberen Grenzdurchmesser der kleinsten Fraktion von 0,002 mm der untere Grenzdurchmesser mit 0,001 mm angenommen wird.

Diese Extrabehandlung müsste übrigens bei KOZENY gemäß Verfahren a) anders lauten bzw. einen anderen unteren Grenzdurchmesser ergeben; auch $d_1 = 3/(2 d_{1\text{ oben}})$ wäre in Frage zu stellen.

7.5 Beziehungen $q - d_p - d_w$

In realen Flüssigkeiten übertragen benachbarte Flüssigkeitsteilchen in Strömungsrichtung Schubspannungen [HILLEL, 1998]. Betrachtet man die Strömung in einem sehr engen Rohr bei kleinen Geschwindigkeiten, so stellt man fest, dass die Fließbewegung eines beliebigen Flüssigkeitsteilchens und damit aller Teilchen wand- bzw. rohrachsenparallel erfolgt. Eine solche Strömung erfolgt quasi geschichtet und wird daher als laminar bezeichnet. Fließvorgänge im Boden können meist als laminar betrachtet werden [BOLLRICH und PREIBLER, 1992], obwohl sie wegen der Tortuosität der Poren und der ungleichmäßigen Porenform bei viel kleineren Reynolds-Zahlen turbulent werden als Strömungen in geraden Kreisrohren. HILLEL [1998] gibt als Richtwert für die Reynolds-Zahl, bei der sicher noch ein proportionaler Zusammenhang zwischen dem Reibungsverlust und dem Fluss bzw. laminare Strömung vorliegt, $Re = 1$.

Die Basis für die Analyse der laminaren Strömung ist das Gesetz von HAGEN und POISEUILLE für kreiszylindrische Rohre, das den Fluss Q im wesentlichen als eine Funktion des Rohrradius R darstellt.

Nachdem die Porenkanäle des Bodens alles andere als zylindrische Röhren sind, muss der zweifache Rohrradius R bzw. der Rohrdurchmesser in einen äquivalenten Porendurchmesser d_p durch eine geeignetes Modell übergeführt werden. Bei den aggregierten Böden liefert die Retentionskurve die wertvollste Information für die Ermittlung von d_p (siehe Kapitel 2.5 und 2.6). Für Böden mit vorherrschendem Einzelkorngefüge hingegen wurden hierfür überwiegend empirische Ansätze verwendet (siehe Kapitel 2.3), die d_p in erster Linie als Funktion des effektiven Korndurchmessers

d_e betrachten. Nebenbei wird der Fluss Q in der Bodenphysik im allgemeinen auf eine Kontrollquerschnittsfläche bezogen, die sowohl von Poren als auch von Feststoffen ausgefüllt wird. Dieser bezogene Fluss wird als Durchflussrate q bezeichnet.

Im letzten Unterkapitel wird schließlich eine der Modellvorstellungen, und zwar der physikalische Zusammenhang zwischen dem wirksamen Korndurchmesser d_w und dem äquivalenten Porenradius d_p vorgestellt. KOZENY hat zwar für die Herleitung seiner Gleichung 2-23 weder das Gesetz von HAGEN und POISEUILLE noch eine Modellvorstellung $d_w - d_p$ benutzt, doch lässt sich eine solche indirekt aus den Ausführungen von KOZENY und dem Gesetz von HAGEN und POISEUILLE mit Hilfe des hydraulischen Radius folgern.

7.5.1 Gesetz von HAGEN und POISEUILLE

Bei laminarer Strömung ist die viskose Reibung der ausschließliche Grund für die irreversibel in Wärme umgewandelte hydraulische Energie, kurz hydraulische Verlustenergie. Ihre Ursache liegt im Austausch von Molekülen infolge Diffusion zwischen den Schichten unterschiedlicher Geschwindigkeit. Dieses Verhalten strömender Flüssigkeiten wird als *Zähigkeit* bezeichnet und physikalisch als Schubspannung τ ausgedrückt. Für laminare Strömungen gilt das Schubspannungsgesetz für Newtonsche Flüssigkeiten, wonach die herrschende Schubspannung proportional zum Geschwindigkeitsgradienten ist. Der auftretende Proportionalitätsfaktor ist die dynamische Viskosität:

$$\tau = \eta \cdot \frac{dv}{dn} \quad (7-27)$$

- [τ] = $\text{kg} \cdot \text{m}^{-1} \cdot \text{s}^{-2}$ Schubspannung
- [η] = $\text{kg} \cdot \text{m}^{-1} \cdot \text{s}^{-1} \equiv \text{N} \cdot \text{s} \cdot \text{m}^{-2}$ oder $\text{Pa} \cdot \text{s}$ dynamische Viskosität
- [v] = $\text{m} \cdot \text{s}^{-1}$ Fließgeschwindigkeit
- [n] = m Ortskoordinate normal zur Bewegungsrichtung

Das Gesetz 7-27 wird nun verwendet, um vorerst die laminare Strömung in einem geraden, kreiszylindrischen Rohr zu untersuchen und den Volumenstrom bzw. Fluss Q zu bestimmen. Wir betrachten vorerst die im Rohrinernen auftretenden Kräfte, wobei reale Flüssigkeiten grundsätzlich reibungsbehaftet sind und zur Aufrechterhaltung der Strömung eines Gefälles im Energiepotenzial bedürfen, das bei vollgefüllten horizontalen Rohren dem Druckgefälle entspricht.

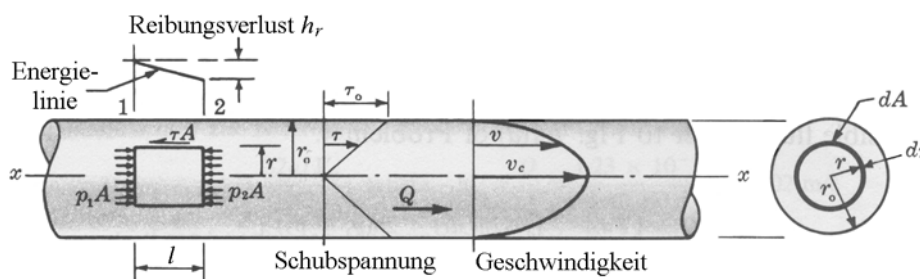


Abbildung 7-4: Kräfte- und Strömungsverhältnisse bei laminarer Strömung im Kreisrohr

Gemäß des Impulssatzes muss die Änderung des Impulsstromes gleich der Summe der angreifenden äußeren Kräfte (plus Gewichtskraft) sein. Betrachtet man das vom Radius r und der Länge l gebildete Kontrollvolumen, weist die laminare und damit ausschließlich in x -Richtung erfolgende Strömung in beiden Stirnflächen denselben Impulsstrom und damit keine Änderung auf. Die aus der Druckkraft im Eintrittsquerschnitt, der längs der Zylindermantelfläche wirkenden Reaktionskraft infolge des Reibungswiderstandes – der sich bei laminarer Strömung ausschließlich in der Schub-

spannung τ äußert – und der Druckkraft im Austrittsquerschnitt gebildete Summe der äußeren Kräfte in x -Richtung muss daher ebenfalls Null sein:

Äußere Kräfte in Strömungsrichtung: $p_1 \cdot (r^2 \cdot \pi) - p_2 \cdot (r^2 \cdot \pi) + \tau_{\text{außen}} \cdot (2 \cdot r \cdot \pi \cdot l) = 0$.

Für die Schubspannung erhält man also $\tau_{\text{außen}} = \frac{(p_2 - p_1)}{2 \cdot l} \cdot r$. (7-28)

$[\tau]$	= $\text{N} \cdot \text{m}^{-2}$	Schubspannung (in Achsenrichtung)
$[r]$	= m	Radius; $0 \leq r \leq r_0$
$[p_1]$	= Pa	Druck im ersten Querschnitt bzw. an der vorderen Stirnfläche
$[p_2]$	= Pa	Druck im zweiten Querschnitt bzw. an der hinteren Stirnfläche
$[l]$	= m	Rohrlänge, Länge des betrachteten Rohrabschnittes

Die innere Schubspannung wirkt in Fließ- bzw. Achsenrichtung und ist positiv; die entgegengesetzt gerichtete äußere Schubspannung und demzufolge auch die Differenz $p_2 - p_1$ sind negativ und p_2 stets kleiner ist als p_1 . Es sei $\tau = \tau_{\text{innen}}$; dann gilt $\tau_{\text{außen}} = -\tau$ und daher

$$\tau = \frac{(p_1 - p_2)}{2 \cdot l} \cdot r.$$

Für $r = 0$ ist die Schubspannung demnach Null und nimmt proportional mit r zu. Der Wert an der Wand mit $r = r_0$ (Rohrradius) wird als (innere) Wandschubspannung τ_0 bezeichnet. Gibt man die Druckdifferenz als Druckhöhendifferenz an, ist $(p_1 - p_2)$ durch $\rho \cdot g \cdot \Delta h_p$ zu ersetzen. Weiters entspricht nach BERNOULLI die Druckhöhendifferenz bei horizontalem Fluss dem Reibungsverlust h_r :

$$\tau = \frac{\rho \cdot g \cdot h_r}{2 \cdot l} \cdot r = \frac{\rho \cdot g \cdot l_r}{2} \cdot r \quad (7-29)$$

Dieser Ausdruck für die Schubspannung wird nun dem Gesetz 7-27 in der Form

$$\tau = -\eta \cdot \frac{dv}{dr} \quad (7-30)$$

$[v]$	= $\text{m} \cdot \text{s}^{-1}$	Fließgeschwindigkeit (in Achsenrichtung); $v = v(r)$
$[r]$	= m	Radius (radiale Ortskoordinate normal zur Rohrachse). r weist zur Wand hin und damit in die entgegengesetzte Richtung von n in Gl. 7-27: $r = r_0 - n$, $dr/dn = -1$ und $dv/dn = dv/dr \cdot dr/dn = -dv/dr$.

gegenübergestellt:
$$\frac{\rho \cdot g \cdot h_r}{2 \cdot l} \cdot r = -\eta \cdot \frac{dv}{dr}$$

Nach Variablentrennung
$$\frac{\rho \cdot g \cdot h_r}{2 \cdot l} \cdot r \, dr = -\eta \, dv$$

und Integration, wobei die von r oder v nicht abhängenden Ausdrücke h_r/l und η zusammengefasst werden

$$-\int_{v_{\text{max}}}^v dv = \frac{\rho \cdot g \cdot h_r}{2 \cdot l \cdot \eta} \cdot \int_0^r r \, dr,$$

$[v]$	= $\text{m} \cdot \text{s}^{-1}$	Fließgeschwindigkeit im Abstand r von der Rohrachse: $v = v(r)$
$[v_{\text{max}}]$	= $\text{m} \cdot \text{s}^{-1}$	maximale Fließgeschwindigkeit, Geschwindigkeit in der Rohrachse: $v_{\text{max}} = v(0)$

$$-(v - v_{\text{max}}) = \frac{\rho \cdot g \cdot h_r}{4 \cdot l \cdot \eta} \cdot r^2$$

ergibt sich für v
$$v = v_{\text{max}} - \frac{\rho \cdot g \cdot h_r \cdot r^2}{4 \cdot l \cdot \eta}$$

Gegenüber der Rohrwand herrscht zwar ebenfalls eine Schubspannung (und zwar die maximale), doch reicht diese bei laminarer Strömung nicht aus, um die von der Rohrwand auf die wandnahen Flüssigkeitsmoleküle ausgeübte Haftspannung zu überwinden. Die Haftspannung führt vielmehr

dazu, dass sich die unmittelbar angrenzenden Flüssigkeitsmoleküle an der Rohrwand anlagern und somit in Ruhe verharren. Die Geschwindigkeit an der Rohrwand ($r = R$) Null beträgt also Null. Mit diesem Wertepaar lässt sich v_{max} bestimmen:

$$0 = v_{max} - \frac{\rho \cdot g \cdot h_r \cdot R^2}{4 \cdot l \cdot \eta}$$

$$v_{max} = \frac{\rho \cdot g \cdot h_r \cdot R^2}{4 \cdot l \cdot \eta} \quad (7-31)$$

[R] = m Rohrradius; Radius der kreiszylindrischen Röhre

Für v an einer beliebigen Stelle r erhält man schließlich

$$v = \frac{\rho \cdot g \cdot h_r \cdot (R^2 - r^2)}{4 \cdot l \cdot \eta}$$

Das sich aus dieser Gleichung ergebende parabolische Geschwindigkeitsprofil ist kennzeichnend für die laminare Rohrströmung. Bei kreisrunden Rohren bildet die über der Querschnittsfläche aufgetragene Geschwindigkeitsverteilung ein Drehparaboloid mit dem Scheitel v_{max} . Weil das Volumen eines Drehparaboloids gleich dem halben Volumen des umschreibenden Zylinders ist und dieser die Höhe v_{max} besitzt, beträgt das Integral von v über die Querschnittsfläche

$$\int v \, dA = \frac{v_{max}}{2} \cdot R^2 \cdot \pi$$

Bekanntlich ist das Integral von v über A nichts anderes als der gesuchte Fluss Q

$$Q = \frac{\rho \cdot g \cdot h_r \cdot R^2}{8 \cdot l \cdot \eta} \cdot R^2 \cdot \pi$$

$$Q = \frac{\rho \cdot g \cdot h_r \cdot R^4 \cdot \pi}{8 \cdot l \cdot \eta}$$

Das ist das **Gesetz von HAGEN und POISEUILLE**, wonach der Fluss proportional mit dem Reibungsgefälle und zur vierten Potenz mit dem Radius zunimmt. Mit $R = d/2$, $I = h_r/l$ und $\eta/\rho = \nu$ lässt sich das Gesetz auch angeben durch

$$Q = \frac{\pi \cdot g \cdot d^4 \cdot I}{128 \cdot \nu} \quad (7-32)$$

[I] = dim.los Reibungsgefälle, Gefälle des Gesamtpotenzials

[ν] = $\text{m}^2 \cdot \text{s}^{-1}$ kinematische Viskosität; $\nu = \eta/\rho$

[d] = m Durchmesser der kreiszylindrischen Röhre. $d = 2 \cdot r$

Bezieht man den Volumenstrom Q auf die Rohrquerschnittsfläche A und bezeichnet diesen bezogenen Fluss als Durchflussrate q (oder auch mittlere Geschwindigkeit \bar{v}), beträgt diese nach dem Gesetz von HAGEN und POISEUILLE

$$q = \frac{Q}{A} = \frac{\pi \cdot g \cdot d^4 \cdot I}{128 \cdot \nu} \cdot \frac{4}{d^2 \cdot \pi}$$

$$q = \frac{g \cdot d^2 \cdot I}{32 \cdot \nu}$$

[q] = $\text{m} \cdot \text{s}^{-1}$ Durchflussrate; auf die Fließquerschnittsfläche bezogener Fluss

7.5.2 Äquivalenter Porendurchmesser

Die Poren im Boden sind weder kreiszylindrisch noch gerade noch weisen sie alle denselben Durchmesser auf. Überdies variiert die Querschnittsfläche und der benetzte Umfang einer einzelnen Pore entlang des Fließweges. Die Idealisierung des Porensystems in lauter gleich lange und gleich große kreiszylindrische Rohre geschieht durch die Einführung des **äquivalenten Porendurchmessers** d_p , der per Definition für eine bestimmte Anzahl kreiszylindrischer Röhren mit der Länge l bei einer Verlusthöhe von h_r denselben Fluss ergibt wie das Porensystem zwischen zwei zur Hauptströmungsrichtung normalen Schnittflächen im Abstand l (die Länge des Strömungsweges s hängt von der Tortuosität τ ab: $s = \tau \cdot l$).

Bei einer betrachteten Querschnittsfläche von A im Boden und einem Porenanteil von n , der bei Sättigung dem Wasseranteil n_l entspricht, beträgt die durchströmte Fläche $A_l = A \cdot n$, und weil die Fläche eines einzelnen Rohres mit dem äquivalenten Porendurchmesser d_p natürlich $A_R = d_p^2 \cdot \pi / 4$ beträgt, beträgt die Anzahl der Rohre in der Querschnittsfläche A genau $n \cdot R = 4 \cdot A \cdot n / (d_p^2 \cdot \pi)$. Der Fluss Q all dieser Rohre ergibt sich zu

$$Q = 4 \cdot A \cdot n / (d_p^2 \cdot \pi) \frac{\rho \cdot g \cdot h_r \cdot d_p^4 \cdot \pi}{128 \cdot l \cdot \eta}$$

Bezogen auf die Querschnittsfläche A erhält man als Filtergeschwindigkeit

$$q \equiv v_f = \frac{Q}{A} = 4 \cdot n / (d_p^2 \cdot \pi) \frac{\rho \cdot g \cdot h_r \cdot d_p^4 \cdot \pi}{128 \cdot l \cdot \eta} = \frac{n \cdot \rho \cdot g \cdot h_r \cdot d_p^2}{32 \cdot l \cdot \eta}$$

bzw. mit $I = h_r / l$ und $\eta / \rho = \nu$

$$q = \frac{n \cdot g \cdot I \cdot d_p^2}{32 \cdot \nu} \quad (7-33)$$

$[q]$	$= \text{m} \cdot \text{s}^{-1}$	Durchflussrate, Filtergeschwindigkeit
$[n]$	$= \text{dim.los}$	Porenanteil; bei der vorausgesetzten Vollsättigung zur Gänze wassergefüllt
$[d_p]$	$= \text{m}$	äquivalenter Porendurchmesser; jener Durchmesser kreiszylindrischer Rohre, die denselben Fluss pro betrachteten Querschnitt ergeben wie der Boden mit dem Porenanteil n

7.5.3 Beziehung äquivalenter Porendurchmesser d_p – wirksamer Korndurchmesser d_w

Der äquivalente Porendurchmesser lässt sich verschieden definieren [BUSCH et al., 1993].

Für die Analyse des Zusammenhanges zwischen dem äquivalenten Porendurchmesser d_p im Gesetz von HAGEN und POISEUILLE und dem wirksamen Korndurchmesser d_w z. B. in der Kozeny-Carman-Gleichung geht man am besten von der spezifischen Oberfläche aus. Die auf das Porenvolumen bezogene spezifische Oberfläche wird in Gleichung 2-20 angegeben als

$$\frac{O}{V_p} = O/V_s \cdot \frac{(1-n)}{n}.$$

O/V_p als benetzte Oberfläche bezogen auf das Fließvolumen ist nichts anderes als der Kehrwert des

hydraulischen Radius $R_h = A/U$:

$$R_h = \frac{V_p}{O} = \frac{1}{O/V_s} \cdot \frac{n}{(1-n)}$$

Für eine kreiszylindrische Pore des uniformen Kapillarenbündel-Modells mit dem Durchmesser d_p beträgt der hydraulische Radius als Quotient zwischen der Fließquerschnittsfläche $A = d_p^2 \cdot \pi / 4$ und dem benetzten Umfang $U = d_p \cdot \pi$ genau $R_h = d_p^2 \cdot \pi / (4 \cdot d_p \cdot \pi) = d_p / 4$. Daraus folgt, dass der Porendurchmesser im Gesetz von HAGEN und POISEUILLE durch

$$R_h = \frac{d_p}{4} = \frac{1}{O/V_s} \cdot \frac{n}{(1-n)} \rightarrow d_p = \frac{1}{O/V_s} \cdot \frac{4 \cdot n}{(1-n)}$$

ausgedrückt werden kann. Wird die spezifische Oberfläche über den wirksamen Korndurchmesser d_w bzw. aus der Beziehung 7-10 $O/V_s = 6/d_w$ errechnet, erhält man für den Porendurchmesser einer äquivalenten kreiszylindrischen Pore mit demselben Porenanteil und derselben spezifischen Oberfläche

$$d_p = d_w \cdot \frac{2}{3} \cdot \frac{n}{(1-n)}$$

7.6 Boltzmann-Substitution

Die allgemeine Diffusionsgleichung (z. B. 6-4) ist eine parabolische partielle Differentialgleichung zweiter Ordnung (es treten keine gemischten zweiten Ableitungen auf; die zweite Ableitung nach der Zeit ist nicht vorhanden [MEINHOLD und WAGNER, 1975]):

$$\frac{\partial \theta}{\partial t} = \frac{\partial}{\partial s} \left(D \cdot \frac{\partial \theta}{\partial s} \right) \qquad \frac{\partial T}{\partial t} = \frac{\partial}{\partial s} \left(\frac{\lambda}{C_n} \cdot \frac{\partial T}{\partial s} \right) \qquad (7-34)$$

Anfangs- und Randbedingungen:

$$\theta = \theta_i \text{ für } s > 0 \text{ und } t = 0$$

$$T = T_i \text{ für } s > 0 \text{ und } t = 0$$

$$\theta = \theta_i \text{ für } s \rightarrow \infty \text{ und } t \geq 0$$

$$T = T_i \text{ für } s \rightarrow \infty \text{ und } t \geq 0$$

$$\theta = \theta_0 \text{ für } s = 0 \text{ und } t \geq 0$$

$$T = T_0 \text{ für } s = 0 \text{ und } t \geq 0$$

Gesucht ist die Funktion der abhängigen Variablen θ bzw. T von den unabhängigen Variablen s und t . Da sich diese Funktionen nicht direkt aus der Differentialgleichung herleiten lassen, werden anstelle der Zusammenhänge $\theta(s, t)$ bzw. $T(s, t)$ die Zusammenhänge zwischen neuen Funktionen λ bzw. A und s und t und θ und λ bzw. T und A hergestellt, also $\theta(\lambda)$ und $\lambda(s, t)$ bzw. $T(A)$ und $A(s, t)$. Durch die Einführung der neuen Variablen wird aus der partiellen Differentialgleichung (die von s und t abhängt) eine gewöhnliche Differentialgleichung von λ bzw. A (die nun ihrerseits von s und t abhängen). Bei einer geeigneten Wahl von $\lambda(s, t)$ bzw. $A(s, t)$ erhofft man, dass sich für $\theta(\lambda)$ bzw. $T(A)$ einfachere Funktionen ergeben.

Diese Vorgangsweise für die obige Differentialgleichung unter Verwendung der untenstehenden Funktionen ist als *Boltzmann-Substitution* bekannt [KOOOREVAAR, MENELIK und DIRKSEN, 1983]. Die Beziehungen lauten

$$\lambda = s \cdot t^{-1/2} \qquad A = s \cdot t^{-1/2} \qquad (7-35)$$

Aus der Substitution ergeben sich auch für λ bzw. A eindeutige Randbedingungen:

$$\theta = \theta_i \text{ für } \lambda \rightarrow \infty$$

$$T = T_i \text{ für } A \rightarrow \infty$$

$$\theta = \theta_0 \text{ für } \lambda = 0$$

$$T = T_0 \text{ für } A = 0$$

Für die Transformation der partiellen Differentialgleichung sind die Ableitungen durch Ausdrücke mit λ bzw. A zu ersetzen. Hierfür werden vorerst die Gleichungen 7-35 partiell differenziert

$$\frac{\partial \lambda}{\partial s} = t^{-1/2} \quad \text{und} \quad \frac{\partial \lambda}{\partial t} = -\frac{1}{2} \cdot s \cdot t^{-3/2} = -\frac{1}{2} \cdot \lambda \cdot t^{-1} \qquad \frac{\partial A}{\partial s} = t^{-1/2} \quad \text{und} \quad \frac{\partial A}{\partial t} = -\frac{1}{2} \cdot s \cdot t^{-3/2} = -\frac{1}{2} \cdot A \cdot t^{-1}$$

Mit der Kettenregel ergibt sich

$$\frac{\partial \theta}{\partial t} = \frac{d\theta}{d\lambda} \cdot \frac{\partial \lambda}{\partial t} = -\frac{1}{2} \cdot \lambda \cdot t^{-1} \cdot \frac{d\theta}{d\lambda}$$

$$\frac{\partial T}{\partial t} = \frac{dT}{dA} \cdot \frac{\partial A}{\partial t} = -\frac{1}{2} \cdot A \cdot t^{-1} \cdot \frac{dT}{dA}$$

und

$$D \cdot \frac{\partial \theta}{\partial s} = D \cdot \frac{d\theta}{d\lambda} \cdot \frac{\partial \lambda}{\partial s} = t^{-1/2} \cdot D \cdot \frac{d\theta}{d\lambda}$$

$$\frac{\lambda}{C_n} \cdot \frac{\partial T}{\partial s} = \frac{\lambda}{C_n} \cdot \frac{dT}{dA} \cdot \frac{\partial A}{\partial s} = t^{-1/2} \cdot \frac{\lambda}{C_n} \cdot \frac{dT}{dA}$$

Der Ausdruck auf der rechten Seite von Gl. 7-34 lässt sich daher umformen zu

$$\begin{aligned} \frac{\partial}{\partial s} \left(D \cdot \frac{\partial \theta}{\partial s} \right) &= \frac{\partial}{\partial s} \left(t^{-1/2} \cdot D \cdot \frac{d\theta}{d\lambda} \right) & \frac{\partial}{\partial s} \left(\frac{\lambda}{C_n} \cdot \frac{\partial T}{\partial s} \right) &= \frac{\partial}{\partial s} \left(t^{-1/2} \cdot \frac{\lambda}{C_n} \cdot \frac{dT}{dA} \right) \\ &= t^{-1/2} \cdot \frac{\partial}{\partial s} \left(D \cdot \frac{d\theta}{d\lambda} \right) & &= t^{-1/2} \cdot \frac{\partial}{\partial s} \left(\frac{\lambda}{C_n} \cdot \frac{dT}{dA} \right) \\ &= t^{-1/2} \cdot \frac{d}{d\lambda} \left(D \cdot \frac{d\theta}{d\lambda} \right) \cdot \frac{\partial \lambda}{\partial s} & &= t^{-1/2} \cdot \frac{d}{dA} \left(\frac{\lambda}{C_n} \cdot \frac{dT}{dA} \right) \cdot \frac{\partial A}{\partial s} \\ &= t^{-1} \cdot \frac{d}{d\lambda} \left(D \cdot \frac{d\theta}{d\lambda} \right) & &= t^{-1} \cdot \frac{d}{dA} \left(\frac{\lambda}{C_n} \cdot \frac{dT}{dA} \right) \end{aligned}$$

Das Einsetzen der Ausdrücke für die linke und die rechte Seite in den Gleichungen 7-34 ergibt

$$-\frac{\lambda}{2} \cdot t^{-1} \cdot \frac{d\theta}{d\lambda} = t^{-1} \cdot \frac{d}{d\lambda} \left(D \cdot \frac{d\theta}{d\lambda} \right) \quad -\frac{A}{2} \cdot t^{-1} \cdot \frac{dT}{dA} = t^{-1} \cdot \frac{d}{dA} \left(\frac{\lambda}{C_n} \cdot \frac{dT}{dA} \right). \quad (7-36)$$

Zur Trennung der Funktionen λ und $d\theta/d\lambda$ bzw. A und dA/dT wird die Gleichung umgeformt; wenn D bzw. λ/C_n konstant sind, können sie aus den Ableitungen herausgehoben werden:

$$-\frac{\lambda}{2} d\lambda = D \cdot \frac{d\lambda}{d\theta} d \left(\frac{d\theta}{d\lambda} \right) = \frac{D}{d\theta/d\lambda} d \left(\frac{d\theta}{d\lambda} \right) \quad -\frac{A}{2} dA = \frac{\lambda}{C_n} \cdot \frac{dA}{dT} d \left(\frac{dT}{dA} \right) = \frac{\lambda}{C_n \cdot dT/dA} d \left(\frac{dT}{dA} \right)$$

Die Integration führt zu

$$-\frac{\lambda^2}{4} = D \cdot \ln \left(\frac{d\theta}{d\lambda} \right) + C \quad -\frac{A^2}{4} = \frac{\lambda}{C_n} \cdot \ln \left(\frac{dT}{dA} \right) + C$$

oder (Anmerkung: $\exp \left(-\frac{\lambda^2}{4 \cdot D} \right) \equiv e^{-\frac{\lambda^2}{4 \cdot D}}$)

$$\begin{aligned} -\frac{\lambda^2}{4 \cdot D} &= \ln \left(C_1 \cdot \frac{d\theta}{d\lambda} \right) \rightarrow & -\frac{A^2}{4 \lambda / C_n} &= \ln \left(C_1 \cdot \frac{dT}{dA} \right) \rightarrow \\ \exp \text{erfc} &= C_1 \cdot \frac{d\theta}{d\lambda} & \exp \left(-\frac{A^2}{4 \lambda / C_n} \right) &= C_1 \cdot \frac{dT}{dA}. \end{aligned}$$

Jetzt wird nach θ bzw. T umgeformt:

$$d\theta = \frac{1}{C_1} \cdot \exp \left(-\frac{\lambda^2}{4 \cdot D} \right) d\lambda \quad dT = \frac{1}{C_1} \cdot \exp \left(-\frac{A^2}{4 \lambda / C_n} \right) dA$$

Um zu einer Funktion mit bekanntem Integral zu gelangen, wird nun folgendermaßen substituiert:

$$u^2 = \frac{\lambda^2}{4 \cdot D} \rightarrow u = \frac{\lambda}{2 \cdot \sqrt{D}} \quad u^2 = \frac{A^2}{4 \lambda / C_n} \rightarrow u = \frac{A}{2 \cdot \sqrt{\lambda / C_n}} \quad (7-37)$$

$$\begin{aligned} \frac{du}{d\lambda} &= \frac{1}{2 \cdot \sqrt{D}}; \quad d\lambda = 2 \cdot \sqrt{D} du & \frac{du}{dA} &= \frac{1}{2 \cdot \sqrt{\lambda / C_n}}; \quad dA = 2 \cdot \sqrt{\lambda / C_n} du \\ d\theta &= \frac{2 \cdot \sqrt{D}}{C_1} \cdot e^{-u^2} du & dT &= \frac{2 \cdot \sqrt{\lambda / C_n}}{C_1} \cdot e^{-u^2} du \end{aligned}$$

Die Integration ergibt

$$\theta = \frac{2 \cdot \sqrt{D}}{C_1} \cdot \int e^{-u^2} du \quad T = \frac{2 \cdot \sqrt{\lambda / C_n}}{C_1} \cdot \int e^{-u^2} du \quad (7-38)$$

Während θ bzw. T entsprechend den Anfangs- bzw. den Randbedingungen von θ_0 bis θ_i bzw. von T_0 bis T_i variiert, variiert λ bzw. A und damit auch u zwischen 0 und ∞ . Mit diesen bekannten Werten der Anfangs- und Randbedingungen können die Integrationskonstanten bestimmt werden. θ bzw. T sind als Funktionen von u aufzufassen.

Nach dem Fundamentalsatz der Integralrechnung gilt $\int_a^b f(x) dx = F(b) - F(a)$

und damit

$$\theta(u) = \theta_0 + \frac{2 \cdot \sqrt{D}}{C_1} \cdot \int_0^u e^{-u^2} du$$

$$T(u) = T_0 + \frac{2 \cdot \sqrt{\lambda/C_n}}{C_1} \cdot \int_0^u e^{-u^2} du$$

oder

$$\theta(u) = \theta_i + \frac{2 \cdot \sqrt{D}}{C_1} \cdot \int_u^\infty e^{-u^2} du$$

$$T(u) = T_i + \frac{2 \cdot \sqrt{\lambda/C_n}}{C_1} \cdot \int_u^\infty e^{-u^2} du. \quad (7-39)$$

Die Gegenüberstellung ergibt

$$\theta_i - \theta_0 = \frac{2 \cdot \sqrt{D}}{C_1} \cdot \int_0^\infty e^{-u^2} du$$

$$T_i - T_0 = \frac{2 \cdot \sqrt{\lambda/C_n}}{C_1} \cdot \int_0^\infty e^{-u^2} du$$

$$C_1 = \frac{2 \cdot \sqrt{D}}{\theta_i - \theta_0} \cdot \int_0^\infty e^{-u^2} du$$

$$C_1 = \frac{2 \cdot \sqrt{\lambda/C_n}}{T_i - T_0} \cdot \int_0^\infty e^{-u^2} du \quad (7-40)$$

Das Integral ist in jedem Mathematik-Handbuch zu finden: $\int_0^\infty e^{-u^2} du = \frac{\sqrt{\pi}}{2}$.

Die Funktion $\theta(u)$ bzw. $T(u)$ lautet daher (Gl. 7-40 in Gl. 7-41 eingesetzt):

$$\theta(u) = \theta_i - \frac{2 \cdot \sqrt{D} \cdot (\theta_i - \theta_0) \cdot 2}{2 \cdot \sqrt{D} \cdot \sqrt{\pi}} \cdot \int_0^\infty e^{-u^2} du$$

$$T(u) = T_i - \frac{2 \cdot \sqrt{\lambda/C_n} \cdot (T_i - T_0) \cdot 2}{2 \cdot \sqrt{\lambda/C_n} \cdot \sqrt{\pi}} \cdot \int_0^\infty e^{-u^2} du$$

$$\theta(u) = \theta_i + (\theta_0 - \theta_i) \cdot \frac{2}{\sqrt{\pi}} \cdot \int_0^\infty e^{-u^2} du$$

$$T(u) = T_i + (T_0 - T_i) \cdot \frac{2}{\sqrt{\pi}} \cdot \int_0^\infty e^{-u^2} du \quad (7-41)$$

Die letzte Umformung ist deswegen vorteilhaft, weil sich in der rechten Klammer genau das komplementäre Wahrscheinlichkeitsintegral ergibt:

$$\frac{2}{\sqrt{\pi}} \cdot \int_u^\infty e^{-u^2} du = \operatorname{erfc}(u) = 1 - \operatorname{erf}(u) = 1 - \frac{2}{\sqrt{\pi}} \cdot \int_0^u e^{-u^2} du$$

Durch die Rücksubstitution mit Gl. 7-37 wird u in Gleichung 7-41 wieder durch λ bzw. A ersetzt:

$$\theta(\lambda) = \theta_i + (\theta_0 - \theta_i) \cdot \operatorname{erfc}\left(\frac{\lambda}{2 \cdot \sqrt{D}}\right)$$

$$T(A) = T_i + (T_0 - T_i) \cdot \operatorname{erfc}\left(\frac{A}{2 \cdot \sqrt{\lambda/C_n}}\right)$$

Die Abhängigkeit von den unabhängigen Variablen s und t erhält man schließlich durch die erneute Rücksubstitution mit den Funktionen 7-35

$$\theta(s, t) = \theta_i + (\theta_0 - \theta_i) \cdot \operatorname{erfc}\left(\frac{s}{2 \cdot \sqrt{D \cdot t}}\right)$$

$$T(s, t) = T_i + (T_0 - T_i) \cdot \operatorname{erfc}\left(\frac{s}{2 \cdot \sqrt{\lambda/C_n \cdot t}}\right) \quad (7-42)$$

Beziehungen des Wahrscheinlichkeitsintegrals:

$$\operatorname{erf}(x) = \frac{2}{\sqrt{\pi}} \cdot \int_0^x \exp(-t^2) dt = \frac{\operatorname{sgn}(x)}{\sqrt{\pi}} \cdot \int_0^x \frac{\exp(-t)}{\sqrt{t}} dt$$

Weil $\operatorname{erf}(\infty)$ genau 1 beträgt, folgt wegen $\operatorname{erf}(x) + \operatorname{erfc}(x) = 1$ und $\operatorname{erfc}(x) = \operatorname{erf}(\infty) - \operatorname{erf}(x)$

$$\operatorname{erfc}(x) = \frac{2}{\sqrt{\pi}} \cdot \int_x^{\infty} \exp(-t^2) dt.$$

7.6.1 Algorithmus zur Berechnung von Werten des Wahrscheinlichkeitsintegrals

bzw. der komplementären Funktion mit 24-bit-Genauigkeit (d. h. relativer Fehler $< 6 \times 10^{-8}$):

Das Wahrscheinlichkeitsintegral kann mit folgender Näherungsfunktion berechnet werden, wobei für den Bereich $-1,5 \leq x \leq 1,5$ ein Abbruch bei $j = 3 + \operatorname{Int}(9 \cdot |x|)$ genügt [SPANIER und OLDHAM, 1987]:

$$\operatorname{erf}(x) = \frac{2}{\sqrt{\pi}} \cdot \left[x - \frac{x^3}{3!} + \frac{x^5}{10!} - \dots \right] = \frac{x}{\sqrt{\pi}} \cdot \sum_{j=0}^{\infty} \frac{(-x^2)^j}{j! \cdot (j+1/2)}$$

Für die Berechnung der Komplementärfunktion reicht die Genauigkeit für $x > 1,5$ nicht aus, für diesen Bereich ist daher z. B. folgende abgebrochene Funktion mit fortgesetzter Bruchbildung zu benutzen:

$$\operatorname{erf}(x) = \frac{\sqrt{\frac{2}{\pi}} \cdot \exp(-x^2)}{x\sqrt{2} + \frac{1}{x\sqrt{2} + \frac{2}{x\sqrt{2} + \frac{3}{x\sqrt{2} + \frac{2 + \operatorname{Int}\left(\frac{32}{x}\right)}{x\sqrt{2}}}}}}$$

Werte für $x < -1,5$ sind mit der Formel $\operatorname{erfc}(-x) = 2 - \operatorname{erfc}(x)$ zu berechnen.

Die Berechnung kann leicht mit dem folgenden Strukturcode programmiert werden, wobei diverse Abweichungen von den obigen Formeln durch die damit erreichte höhere numerische Genauigkeit begründet sind:

Code $c = 0$: $\operatorname{erf}(x)$ wird berechnet
 $c = 1$: $\operatorname{erfc}(x)$ wird berechnet

Input code $c >>>>$

Speicherung für die Variablen c, x, j und f erforderlich

Input $x >>>>$

```

    If  $1.5 < |x|$  go to (2)
    Set  $j = 3 + \operatorname{Int}(9 \cdot |x|)$ 
    Set  $f = 1$ 
(1)  Replace  $f$  by  $1 + f \cdot x^2 \cdot (1/2 - j) / [j \cdot (1/2 + j)]$ 
    Replace  $j$  by  $j - 1$ 
    If  $j \neq 0$  go to (1)
    Replace  $f$  by  $c + f \cdot x(2 - 4 \cdot c) / \sqrt{\pi}$ 
    Go to (4)
(2)  Replace  $c$  by  $c \cdot |x| / x$ 
    Set  $j = 3 + \operatorname{Int}(32 / |x|)$ 
    Set  $f = 0$ 

```

Testwerte:

$$\operatorname{erf}(1,45) = 0,959695026$$

$$\operatorname{erfc}(1,45) = 0,0403049740$$

$$\operatorname{erf}(-0,5) = -0,520499879$$

$$\operatorname{erfc}(-0,5) = 1,52049988$$

$$\operatorname{erfc}(5) = 1,53745979 \times 10^{-12}$$

- (3) Replace f by $1 / [f \cdot j + \sqrt{2 \cdot x^2}]$
 Replace j by $j - 1$
 If $j \neq 0$ go to (3)
 Replace f by $f \cdot (c^2 + c - 1) \cdot (\sqrt{2/\pi}) \cdot \exp(-x^2) + (1 - c)$
- (4) Output f

$$\left. \begin{array}{l} f_0 \approx \operatorname{erf}(x) \\ f_1 \approx \operatorname{erfc}(x) \end{array} \right\} \lllll$$

Benötigt man Funktionswerte mit besonders hoher Genauigkeit, empfehlen sich als FORTRAN-Sourcecode die Routinen „erf.f“ und „erfc.f“ (Real*8) bzw. „derf.f“ und „derfc.f“ (Double Precision bzw. Real*16), die u. a. von einem der beiden Main-Server der NETLIB, Teilbibliothek /fn (special functions) (vom Ridge National Laboratory, USA unter „<http://www.netlib.org/>“ oder von Bergen, Norwegen unter „<http://www.netlib.no/>“), herunter geladen werden können.

Die Handhabung der Routinen erfordert jedoch ein wenig Erfahrung mit Programmbibliotheken. Zur Berechnung sind nämlich Hilfsroutinen nötig, die sich ebenfalls in der NETLIB befinden. Die Hauptroutine und alle erforderlichen Hilfsroutinen sind in den Dateien „erf.f plus dependencies“ usw. zusammengefasst. Zumeist sind sowohl erf- als auch erfc-Funktionswerte zu berechnen und damit beide Dateien erforderlich, also z. B. „derf.f plus dependencies“ und „derfc plus dependencies“. Am besten kopiert man dann beide Dateien in eine neue Datei und entfernt alle Routinen, die doppelt vorkommen. Wie auch immer, BLAS-Routinen wie z. B. „d1mach.f“ sind sehr maschinen-spezifisch, müssen daher plattformgemäß modifiziert und unbedingt mit einem FORTRAN-77-Compiler kompiliert werden, sodass auch die Komplettpakete eine nähere Befassung nicht ersparen.

7.7 Programm zur Lösung der eindimensionalen Diffusionsgleichung

[OR und WRAITH, 1997a]

```
PROGRAM FLOWT2
C—SOLUTION TO 1-D TRANSIENT FLOW IN POROUS MEDIA
C—BY DANI OR – AS OF 5/12/1989
C—THE INDEPENDENT VARIABLE: VOLUMETRIC WATER CONTENT
  DIMENSION X(42),X1(42),S(42),P(42),CONR(42),TERM(42)
  COMMON AT(42),BT(42),CT(42),F(42),Z(42)
  READ(2,*)XIC,COND,SR,PB,AMBDA,ETA      ( $\theta_{initial}/\theta_s, k_s, \theta_i/\theta_s, h_b, \lambda, \theta_s$ )
  READ(2,*)DZ,DT,TOL,NMAX,KMAX,ND      ( $\Delta z, \Delta t, \varepsilon, \text{max iterations, max time, } N$ )
  K=0
  DO 10 I=1,ND
  X(I)=XIC*ETA
10  X1(I)=XIC*ETA
  TR=SR*ETA
  AMB=1/AMBDA
  POW1=(1+3*AMBDA)/AMBDA
  POW2=(1+2*AMBDA)/AMBDA
  POW3=1/(1+3*AMBDA)
  COEF1=(1+2*AMBDA)/(4*AMBDA)
  COEF2=.5*DZ*(2+3*AMBDA)/PB/(ETA-TR)**AMB
  COEF3=-(2*DZ*DZ/DT)*AMBDA/PB/COND*(ETA-TR)**(POW2+1)
  P(1)=PB
C—NOTE – S IN THIS CASE IS THE MATRIC HEAD!
  S(1)=PB
C—THIS IS RELATIVE CONDUCTIVITY – K(Theta)/Ks
  CONR(1)=1.0
100  K=K+1
  TIME=FLOAT(K)*DT
C—A PRESCRIBED BOUNDARY CONDITION @ND
  X1(ND)=(.85*EXP(-.000003*TIME)+.15)*ETA
  P(ND)=PB/((X1(ND)-TR)/(ETA-TR))**AMB
  S(ND)=P(ND)
  CONR(ND)=(PB/P(ND))**(2+3*AMBDA)
  DO 30 I=2,ND-1
  XAV=X(I)-TR
  TERM0=X(I+1)+X(I-1)-2*X(I)
  TERM1=(COEF1/XAV)*(X(I+1)-X(I-1))**2
30  TERM(I)=TERM0+TERM1-(COEF2*XAV**AMB)*(X(I+1)-X(I-1))
  ITER=0
20  ITER=ITER+1
```



```

DO 35 I=2,ND-1
XAV=X1(I)-TR
XAV1=.5*X1(I)+.5*X(I)-TR
TERM0=X1(I+1)+X1(I-1)-2*X1(I)
TERM1=(COEF1/XAV)*(X1(I+1)-X1(I-1))**2
TERM2=(COEF2*XAV**AMB)*(X1(I+1)-X1(I-1))
TERM3=COEF3/(XAV1**POW2)*(X1(I)-X(I))
F(I)=TERM(I)+TERM0+TERM1-TERM2-TERM3
C—THE PARTIAL DERIVATIVES OF F,
AT(I)=1.-2.*(COEF1/XAV)*(X1(I+1)-X1(I-1))+(COEF2*XAV**AMB)
CT(I)=1.+2.*(COEF1/XAV)*(X1(I+1)-X1(I-1))-COEF2*XAV**AMB)
BB=-2.+COEF1/(XAV*XAV)*((X1(I+1)-X1(I-1))**2)
BB=BB-AMB*COEF2*XAV**((AMB-1)*(X1(I+1)-X1(I-1)))
BB=BB-.5*POW2*COEF3/XAV1**((POW2+1)*(X1(I)-X(I)))
BT(I)=BB-(COEF3/XAV1**POW2)
35  CONTINUE
SUM=0.0
CALL TRID(ND,SUM)
DO 45 I=2,ND-1
45  X1(I)=X1(I)-Z(I)
IF(SUM.GT.TOL.AND.ITER.LT.NMAX) GO TO 20
C—COMPUTING OTHER HYDRAULIC PROPERTIES FOR THE SOIL PROFILE
DO 55 I=2,ND
XE=(X1(I)-TR)/(ETA-TR)
P(I)=PB/(XE**AMB)
S(I)=P(I)+FLOAT(I)*DZ
CONR(I)=(PB/P(I))**(2+3*AMBDA)
55  X(I)=X1(I)
IF(((K/24)*24).EQ.K) THEN
WRITE(3,*)‘TIME = ‘,K*1, ‘HOURS‘
WRITE(3,*)‘-----I-----THETA-----PH-----H-----KR-----‘
DO 101 I=1,ND
101 WRITE(3,200)I,X(I),P(I),S(I),CONR(I)
ENDIF
IF(K.LT.KMAX) GOTO 100
200 FORMAT(4X,I4,4(F12.6))
300 FORMAT(10(F8.5))
STOP
END
C—TRIDIAGONAL MATRIX SOLUTION (The Thomas Algorithm)
SUBROUTINE TRID(NN1,SUM1)
COMMON AT(42),BT(42),CT(42),F(42),Z(42)
DIMENSION FF(42),GG(42)

```

```

AT(2)=0.0
CT(NN1-1)=0.0
FF(2)=CT(2)/BT(2)
GG(2)=F(2)/BT(2)
DO 25 I=3,NN1-1
DEN=BT(I)-FF(I-1)*AT(I)
FF(I)=CT(I)/DEN
GG(I)=(F(I)-AT(I)*GG(I-1))/DEN
25 CONTINUE
Z(NN1-1)=GG(NN1-1)
SUM1=SUM1+ABS(Z(NN1-1))
DO 35 I=NN1-2,2,-1
Z(I)=GG(I)-FF(I)*Z(I+1)
SUM1=SUM1+ABS(Z(I))
35 CONTINUE
RETURN
END

```

7.8 Herleitung der Zustandsgleichung eines idealen Gases

Der grundlegende Zusammenhang zwischen dem herrschenden Druck, der vorhandenen Temperatur und dem eingenommenen Volumen eines Gases wird durch die Zustandsgleichung beschrieben. Bei ihrer Herleitung [VOGEL, 1999, S. 208] ist von fundamentalen Gesetzen der Wärmelehre auszugehen. Die Zustandsgleichung eines idealen Gases wird in der Bodenphysik unter anderem als Näherungsansatz für die Erfassung des osmotischen Potentials und des Potentials des Wasserdampfes benutzt.

7.8.1 Wärmeenergie als kinetische Energie

Prinzipiell ist Wärme nichts anderes als ungeordnete Molekülbewegung, die kinetische Energie besitzt. Die Temperatur als ein Maß für die Wärme muss daher in engstem Zusammenhang zur kinetischen Energie stehen:

$$\overline{W_{trans}} = \frac{1}{2} \cdot m \cdot \overline{v^2} = \frac{3}{2} \cdot k \cdot T \quad (7-43)$$

$[\overline{W_{trans}}]$	= J	mittlere (nur auf der Wärmebewegung beruhende) Translationsenergie
$[m]$	= kg	Masse des betrachteten Teilchens
$[\overline{v^2}]$	= $m^2 \cdot s^{-2}$	Mittel aus den quadrierten Geschwindigkeiten der Teilchen gleicher Art
$[k]$	= $J \cdot K^{-1}$	Boltzmann-Konstante; $k = (1,380658 \pm 0,000012) \times 10^{-23} J \cdot K^{-1}$
$[T]$	= K	Temperatur

Es ist dabei egal, ob der betrachtete Stoff aus lauter gleichen oder verschiedenartigen Teilchen besteht: gemäß dem Gleichverteilungssatz ist der Mittelwert der kinetischen Energie ist für alle Teilchenarten derselbe. Daraus folgt unmittelbar, dass sich massereichere bzw. schwerere Teilchen langsamer bewegen und leichtere schneller. Diese Translationsenergie beruht nur auf der ungeordneten Molekülbewegung und ist daher unabhängig von jener etwaiger gleichzeitig vorhandener me-

chanischer Energie zu sehen, die aus der gemeinsamen und gleichgerichteten Bewegung mehrerer Moleküle resultiert.

Die Boltzmann-Konstante k dient zur Umrechnung der beiden Energie-Einheiten Joule und Kelvin. Weil die in einem einzelnen Teilchen steckende, auf der Wärmebewegung beruhende kinetische Energie so klein ist, ist der Exponent von k extrem negativ. Wenn man die Temperatur direkt in Joule messen würde, könnte man sich die Temperatureinheiten K, °C usw. und auch k sparen. Passende Einheitenfaktoren für die kinetische Energie eines Teilchens als Maß für die Temperatur wären 10^{-21} mit dem SI-Vorsatz „Zepto“ oder 10^{-24} mit dem SI-Vorsatz „Yokto“, die entsprechenden Einheiten wären das Zepto-Joule ($1 \text{ zJ} \equiv 1 \times 10^{-21} \text{ J}$) bzw. das Yokto-Joule ($1 \text{ yJ} \equiv 1 \times 10^{-24} \text{ J}$). Bezüglich der Einheitenfaktoren und SI-Vorsätze siehe ON V 118 [1996].

7.8.2 Zustandsgleichung eines idealen Gases

Als Druck wird gemäß der kinetischen Gastheorie der pro Zeit- und Flächeneinheit auf eine Wand abgegebene Impuls verstanden [VOGEL, 1999, S. 214]. Der Impuls wird durch Molekülstöße der gegen die Wand trommelnden Moleküle mit der Molekülmasse m abgegeben. Wir definieren nun die Moleküldichte ρ_M als Verhältnis der Anzahl N aller Moleküle zum Kontrollvolumen V : $\rho_M = N/V$. Unter dem Kontrollvolumen hat man sich einen Quader vorzustellen, der auf einer Seite durch eine starre Wand begrenzt wird und in der Achse normal zur Wand eine Längenerstreckung von $v \cdot dt$ aufweist. Von den sich ungeordnet im Kontrollvolumen bewegendem Molekülen wird dann ein Drittel seine Hauptbewegungsrichtung normal zur Wand haben, und die Hälfte davon wird sich auf die Wand zu bewegen. Wenn sich jedes von diesen Molekülen mit der Geschwindigkeit v auf die Wand zu bewegt, legen alle in der Zeiteinheit dt den Weg $v \cdot dt$ zurück und werden daher alle die Wand erreichen. Wenn die Wandfläche A beträgt, ist das Kontrollvolumen $A \cdot v \cdot dt$ groß und enthält $\rho_M \cdot A \cdot v \cdot dt$ Moleküle. Die Stoßzahl z pro Flächen- und Zeiteinheit beträgt demnach

$$z = \frac{1}{6} \cdot \frac{\rho_M \cdot A \cdot v \cdot dt}{A \cdot dt} = \frac{\rho_M \cdot v}{6}.$$

Jedes einzelne Molekül überträgt beim Aufprall und nachfolgender Reflexion den Impuls $2 \cdot m \cdot v$ auf die Wand. Also wird durch alle Stöße auf die Wand ein Impuls pro Zeit- und Flächeneinheit der

Größe
$$z \cdot 2 \cdot m \cdot v = \frac{\rho_M \cdot v}{6} \cdot 2 \cdot m \cdot v = \frac{\rho_M \cdot m \cdot v^2}{3}$$

übertragen. Für den Gasdruck p ergibt sich daher $p = \rho_M \cdot m \cdot v^2 / 3$. Berücksichtigt man noch die Tatsache, dass nicht alle Moleküle dieselbe Geschwindigkeit haben und ihr Geschwindigkeitsvektor nicht genau normal auf die Wand hin weist, muss man das Mittel der Quadrate der vorkommenden

Geschwindigkeiten ansetzen:
$$p = \frac{1}{3} \cdot \rho_M \cdot m \cdot \overline{v^2}.$$

Das ist die Grundgleichung der kinetischen Gastheorie von BERNOULLI. Mittels Substitution von $\overline{m \cdot v^2}$ durch $k \cdot T$ laut obiger Beziehung erhält man $p = \rho_M \cdot k \cdot T$.

Wird die Teilchenzahldichte ρ_M durch den Quotienten aus der Molekülanzahl N und dem Volumen V rücksubstituiert und die Gleichung mit V multipliziert, lautet sie

$$p \cdot V = N \cdot k \cdot T.$$

[N] = dim.los Anzahl der Moleküle im Kontrollvolumen

Wird die Anzahl der Moleküle durch die Größe n in der Einheit Mol angegeben, entsprechen $\{n\}$ mol Moleküle einer Anzahl von $n \cdot L = N$: $p \cdot V = n \cdot L \cdot k \cdot T$.

- [L] = mol⁻¹ Avogadro-Konstante oder *Loschmidtsche Zahl*;
 $L = (6,0221367 \pm 0,0000036) \times 10^{23}$ mol⁻¹.
 L gibt die Anzahl an Teilchen an, die in einem Mol bzw. pro Mol enthalten sind und ist daher jene Anzahl an Atomen des Nuklids ¹²C im Grundzustand, die eine Masse von 0,012 kg ergeben.
- [n] = mol Stoffmenge; Gesamtmenge der im Kontrollvolumen vertretenen Moleküle unterschiedlicher Art

Zur Vereinfachung fasst man noch das Produkt $L \cdot k$ zur *universellen Gaskonstante* R zusammen und gelangt letztlich zur Zustandsgleichung des Idealgases, in dem die Teilchen abgesehen von kurzzeitigen Stößen keine Kräfte aufeinander ausüben und selbst kein merkliches Eigenvolumen haben:

$$\boxed{p \cdot V = n \cdot R \cdot T}.$$

- [p] = Pa \equiv J·m⁻³ herrschender Druck im idealen Gas
 [V] = m³ Volumen
 [n] = mol Stoffmenge; Gesamtmenge der Moleküle im Kontrollvolumen
 [R] = J·K⁻¹·mol⁻¹ universelle Gaskonstante. $R = (8,314510 \pm 0,000070)$ J·K⁻¹·mol⁻¹
 (Quelle: ÖNORM ON V 118, S. 11.5 [1996])
 [T] = K herrschende Temperatur

7.9 Beispiel einer Kurvenanpassung

Häufig sind in Computerprogrammen Modellfunktionen zu implementieren, die physikalische Stoffeigenschaften in Abhängigkeit von intensiven Zustandsgrößen darstellen. In der Literatur sind zwar mitunter etliche Wertepaare angegeben, oft jedoch keine geschlossenen Funktionen. Wie man in Fällen wie diesem vorgehen kann, bei denen zwar eine Wertetabelle, aber keine analytische Beziehung bekannt ist (die vielleicht mit Hilfe der Thermodynamik und der Atomphysik aufgestellt werden könnte), soll kurz anhand der Dichte von Wasser als Funktion der Temperatur $\rho(t)$ aufgezeigt werden. Die Aufgabe und ihre Lösung sollen nur als Lehrbeispiel für die Vorgangsweise dienen. Als Modellfunktion sollte jedenfalls die in Kapitel 7.2.3 angegebene Funktion 7-7 von TANAKA et al. [2001] verwendet werden, weil sie aus einer öffentlichen Publikation stammt und daher zitiert werden kann, weil ihre Genauigkeit zur Zeit unerreichbar ist und weil sie eine wesentlich einfachere Funktion ist.

Um eine Näherungsfunktion $\hat{\rho}(T)$ für die Dichte des Wassers zu finden, könnte man einfach mit einem Kurvenanpassungsprogramm eine beliebige, vom Programm ausgewählte mehrparametrische Modellfunktion an Tabellenwerte anpassen. Diese Vorgangsweise wäre dann zu wählen, wenn die Dichte nur von der Temperatur und von keiner anderen physikalischen Größe abhinge. Geht man hingegen davon aus, dass der Wärmeausdehnungskoeffizient die wahre temperaturabhängige Größe und die Dichte nur eine laut Funktion 7-6 abgeleitete Größe darstellt, ist eine Modellfunktion vom Kompressibilitätskoeffizienten zu erstellen und diese an die Dichtewerte sowie an die gegebenen

Werte für β_p anzupassen. Am besten geht man von der Darstellung 7-6 $\hat{\rho} = \rho_b \cdot e^{-\int_{T_b}^T \beta_p dT}$ aus und

wählt als Bezugsdichte die Maximaldichte bei 4 °C. Für $\int_{T_b}^T \beta_p dT$ kann man dann eine vorerst unbekannt Funktion $\hat{f}(t)$ setzen und erhält nach Umwandlung $\hat{f}(t) = \ln \rho_b - \ln \rho(t)$. Als Messwerte $\rho(t)$

mögen die Tabellenwerte von BOLLRICH und PREIBLER dienen, mit denen die Werte $f(t)$ gebildet werden. An diese wird schließlich mit einem Kurvenanpassungsprogramm eine Unzahl an Funktionen $\hat{f}(t)$ angepasst, die alle mehr oder weniger große Abweichungen zu den Werten $f(t)$ aufweisen. Unter den fünfparametrischen Funktionen weist folgende rationale Funktion aus zwei quadratischen Polynomen einen sehr guten Regressionskoeffizienten auf:

$$\hat{f}(t) = \frac{a_0 + a_1 \cdot t + a_2 \cdot t^2}{1 + b_1 \cdot t + b_2 \cdot t^2}.$$

Um zu erzwingen, dass die Näherungsfunktion $\hat{\rho}(t)$ vor allem im unteren Teilbereich wenig von den Messwerten abweicht, wird festgelegt, dass sie im Bezugspunkt 4 °C genau die Bezugsdichte 999,97 kg/m³ ergeben soll, d. h. $e^{-\hat{f}(4)} = 1$ bzw. $\hat{f}(4) = 0$. Die Einhaltung dieser sogenannten Nebenbedingung kann man entweder durch Erweiterung des Funktionsansatzes um den Linearfaktor $(t-4)$ oder durch Elimination eines Funktionsparameters erreichen. Bleibt man bei der fünfparametrischen Funktion, wird die Nebenbedingung genau dann erfüllt, wenn der Nenner für $t = 4$ Null wird: $a_0 + a_1 \cdot 4 + a_2 \cdot 4^2 = 0 \rightarrow a_0 = -4 \cdot a_1 - 4^2 \cdot a_2$ und der Nenner wird zu $a_1 \cdot (t-4) + a_2 \cdot (t^2 - 4^2)$. Eine Näherungsfunktion für die Dichte von Wasser lautet somit mit den vier Koeffizienten a bis d (die Genauigkeit von 4 Nachkommastellen reicht vollkommen aus)

$$\rho_w = 999,97 \cdot e^{-\left(\frac{a \cdot (t-4) + b \cdot (t^2 - 4^2)}{1 + c \cdot t + d \cdot t^2}\right)} \quad \rho_w \text{ in kg} \cdot \text{m}^{-3} \quad (7-44)$$

$a = -6,4290 \times 10^{-5}$	$b = 8,1275 \times 10^{-6}$	$0 \text{ °C} \leq t \leq 15 \text{ °C}$
$c = 9,6989 \times 10^{-3}$	$d = -2,0424 \times 10^{-5}$	$t \text{ in °C}$

Von 0 bis 30 °C beträgt der absolute Fehler gegenüber den Tabellenwerten weniger als 0,006 kg/m³, von 0–100 °C weniger als 0,012 kg/m³. Die Modellfunktion mit den obigen Parameterwerten wäre insbesondere für den Bereich $0 \text{ °C} \leq t \leq 15 \text{ °C}$ zu empfehlen.

Eine Kurvenanpassung der Modellfunktion 7-44 an die Werte der Tabelle 7-9 ergab folgende Parameterwerte:

$a = -7,7146 \times 10^{-5}$	$b = 9,1552 \times 10^{-6}$	$15 \text{ °C} \leq t \leq 40 \text{ °C}$
$c = 16,2395 \times 10^{-3}$	$d = -9,0365 \times 10^{-5}$	

Eine andere Modellfunktion $\rho(t)$ wird von MALCHEREK [2000] zitiert. Das Joint Panel on Oceanographic Tables and Standards der UNESCO habe eine empirische Zustandsgleichung definiert, die die international anerkannten Messwerte des US Naval Hydraulic Office reproduziere. Die Funktion legt die Dichte reinen Wassers $\rho_{\text{H}_2\text{O}}(t)$ in kg/m³ als Polynom fünften Grades von der Temperatur t in Grad Celsius als

$$\rho_{\text{H}_2\text{O}}(t) = a_0 + a_1 \cdot t + a_2 \cdot t^2 + a_3 \cdot t^3 + a_4 \cdot t^4 + a_5 \cdot t^5 \quad (7-45)$$

fest, mit

$a_0 = +999,842594$	$a_1 = +6,793952 \times 10^{-2}$	$a_2 = -9,095290 \times 10^{-3}$
$a_3 = +1,001685 \times 10^{-4}$	$a_4 = -1,120083 \times 10^{-6}$	$a_5 = +6,536332 \times 10^{-9}$

Interessant ist folgende Aussage von MALCHEREK: „Die maximale Dichte von 1000 kg/m³ erreicht es bei 4 °C (genauer 3,94 °C)“. Es überrascht, dass der Dichtewert nicht auf zwei Nachkommastellen angegeben wurde – eine fünfparametrische Modellfunktion lässt eine höhere Genauig-

keit als die angegebene Einerstelle erwarten. Ein Vergleich der Funktionswerte mit der Tabelle 7-9 ergab eine Abweichung von höchstens einem Hundertstel.

Zumindest im Bereich der Zimmertemperatur ist die Modellfunktion 7-44 deutlich genauer als das quintische Polynom 7-45, stimmen doch die Funktionswerte jener Modellkurve im Gegensatz zu letzterer mit den im Bereich $15\text{ }^{\circ}\text{C} \leq t \leq 40\text{ }^{\circ}\text{C}$ gegebenen Werten des ISO/TR auf die angegebene Kommastelle exakt überein. Wie auch immer, in Anbetracht der Güte der Funktion 7-7 von TANAKA et al. sind die beiden in diesem Kapitel vorgestellten Modellfunktionen nur Makulatur.

LITERATURVERZEICHNIS

- ABBOTT M B. 1990. Water and the numbers. IAHR-Bulletin, Volume 7, Nr 4
- AHUJA L R, CASSEL D K, BRUCE R R, BARNES B B. Evaluation of Spatial Distribution of Hydraulic Conductivity Using Effective Porosity Data. Soil Science SOSCOK Vol 148, No 6, 404–411
- ALLEN R G, PEREIRA L S, RAES D, SMITH M. 1998. Crop evapotranspiration (FAO irrigation and drainage paper No 56). Rom: FAO
- ARBEITSGRUPPE BODEN. 1996. Bodenkundliche Kartieranleitung. Berichtigter Nachdruck der 4ten Aufl. Hannover
- BEAR J, VERRUIJT A. 1994. Modeling Groundwater Flow and Pollution. Verbessertes Reprint der ersten Auflage von 1987. Dordrecht: D Reidel Publishing Company; The Netherlands
- BHABANI S D, KLUITENBERG G J. 1995. Using Pore Size Distribution to Model the Unsaturated Hydraulic Conductivity of Soil. (In: PARLANGE M B, HOPMANS J W. 1999. Vadose Zone Hydrology. Oxford, UK: Oxford University Press)
- BOHL W. 1989. Technische Strömungslehre. 8te Aufl. Würzburg: Vogel Buchverlag
- BOLLRICH G, PREIBLER G. 1992. Technische Hydromechanik Band 1. 2te Aufl. Berlin: Verlag für Bauwesen
- BOSSEL H. 1992. Modellbildung und Simulation. Wiesbaden: Vieweg
- BREITENECKER F. 1988. Unterlagen – Hochschulkurs Simulationstechnik. TU Wien
- BREITENECKER F, ECKER H, BAUSCH-GALL I. 1993. Simulieren mit ACSL. Wiesbaden: Vieweg
- BUSCH K F, LUCKNER L, TIEMER K. 1993. Geohydraulik. (Lehrbuch der Hydrogeologie Band 3) 3te Aufl. Berlin Stuttgart: Gebrüder Borntraeger
- CARSEL R F, PARRISH R S. 1988. Developing Joint Probability Distributions of Soil Water Retention Characteristics. Water Resources Research Vol 24, No 5: 755–769
- COREY R T, BROOKS R H. 1999. The Brooks-Corey Relationships. (In: van GENUCHTEN M Th, LEIJ F J, WU L (Hrsg). Characterization and Measurement of the Hydraulic Properties of Unsaturated Porous Media Part 1 (Proceedings of the International Workshop October 1997 in Riverside, CA). Riverside, CA: Riverside: U S Salinity Laboratory, Agricultural Research Service). 13–18
- DANE J H, TOPP G C (eds). 2002. Methods of Soil Analysis Part 4 – Physical Methods (Agronomy No 5). Wisconsin: Soil Science Society of America
- DANIELSON R E, SUTHERLAND P L. 1990. Porosity. (In: KLUTE A (ed). 1986. Methods of Soil Analysis Part 1: Physical and Mineralogical Methods. 2nd ed. (Agronomy No 9). Wisconsin: Soil Science Society of America). 443–461

- DE LAETER J R, BÖHLKE J K, DE BIÈVRE P, HIDAKA H, PEISER H S, ROSMAN K J R, TAYLOR P D P. 2003. Atomic Weights of the Elements: Review 2000 (IUPAC Technical Report) (Pure Appl. Chem., Vol. 75, No. 6, pp. 683–800)
- DIN 19682 Blatt 10. 1973. (Bodenuntersuchungsverfahren im landwirtschaftlichen Wasserbau) Felduntersuchungen: Bestimmung des Makrogefüges. Berlin: Deutsches Institut für Normung
- DIN 4047 Blatt 3. 1971. Landwirtschaftlicher Wasserbau; Begriffe, Boden. Berlin: Deutsches Institut für Normung
- DENNY M W. 1993. Air and Water. Princeton University Press
- DIRKSEN Ch. 1995. Soil Physics Measurements. Skriptum zur Lehrveranstaltung K150-304 des Department of Water Resources; Wageningen Agricultural University
- DIRKSEN Ch. 1999. Soil Physics Measurements. Reiskirchen, Deutschland: Catena-Verlag
- DIRKSEN C; KOOL J B, KOOREVAAR P, van GENUCHTEN M Th. 1993. HYSWASOR – Simulation Model of Hysteretic Water and Solute Transport in the Root Zone. (In: RUSSO D, DAGAN G (Hrsg). Water Flow and Solute Transport in Soils: Advanced Series in Agricultural Sciences 20. Berlin: Springer Verlag). 99–120
- DURADO-NETO D, NIELSEN D R, HOPMANS J W, PARLANGE M B. 1995. Estimation of Empirical Parameters for Soil-water Retention Curves (Handbuch zum SWRC-Programm)
- DVWK-Heft 115. 1980. Bodenkundliche Grunduntersuchungen im Felde zur Ermittlung von Kennwerten meliorationsbedürftiger Standorte Teil I: Grundansprache von Böden (DVWK-Regeln zur Wasserwirtschaft, Heft 115). Hamburg: Kommissionsverlag Paul Parey
- DVWK-Heft 116. 1982. Bodenkundliche Grunduntersuchungen im Felde zur Ermittlung von Kennwerten meliorationsbedürftiger Standorte Teil II: Ermittlung von Standortkennwerten mit Hilfe der Grundansprache der Böden (DVWK-Regeln zur Wasserwirtschaft, Heft 116). Hamburg: Kommissionsverlag Paul Parey
- DURNER. 1992. Predicting the unsaturated hydraulic conductivity using multi-porosity water retention curves. (In: GENUCHTEN M Th van, LEIJ F J, LUND L J (eds). 1992. Indirect Methods For Estimating Soil Hydraulic Properties Of Unsaturated Soils: Proceedings of the International Workshop in Riverside, Ca, Oct 11–13 1989. Riverside, CA: University of California) 185–202
- FAYER M J, SIMMONS S C. 1995. Modified soil water retention functions for all matric suctions. Water Resources Research, Vol 31 No 5: 1233–1238
- FEDDES R A, KOWALIK P J, ZARADNY H. 1978. Simulation of Field Water Use and Crop Yield. Simulation Monographs. Wageningen: Pudoc; pp 189
- FEDDES R A, KOOPMANS R W R. 1995. Agrohydrology. Skriptum des Department of Water Resources, Wageningen University
- FINK A. 1991. Stofftransport im ungesättigten Bodenbereich. Diplomarbeit am Institut für Hydraulik und landeskulturelle Wasserwirtschaft, Universität für Bodenkultur Wien

- FLÜHLER H. 1991. Konzepte und Grundlagen der Bodenphysik. Skriptum an der Eidgenössischen Technischen Hochschule Zürich
- FROST H. 1978. Die neuen Einheiten. Frankfurt am Main: AEG-Telefunken
- GENUCHTEN M Th van. 1980. A closed-form Equation for Predicting the Hydraulic Conductivity of Unsaturated Soils. Soil Science Society of America Journal, Vol 44: 892–898
- GENUCHTEN M Th van, LEIJ F J, YATES S R. 1991. The RETC Code for Quantifying the Hydraulic Functions of Unsaturated Soils (EPA/600/2-91/065). Ada, Oklahoma: Robert S Kerr Environmental Research Laboratory, Office of Research and Development, US Environment Protection Agency
- GREENKORN R A. 1983. Flow Phenomena in Porous Media. New York und Basel: Marcel Dekker
- HARTGE K H, HORN R. 1989. Die physikalische Untersuchung von Böden. 2te Auflage. Stuttgart: Ferdinand Enke Verlag
- HARTUNG J, ELPELT B, KLÖSENER K-H. 1999. Statistik – Lehr- und Handbuch der angewandten Statistik. Wien: R Oldenbourg Verlag
- HILLEL D. 1998. Environmental Soil Physics. London: Academic Press
- HOHMANN K. 1971. Technische Wärmelehre. Braunschweig: Vieweg
- HUTSON J L, WAGENET R J. 1992. LEACHM Leaching Estimation and Chemistry Model V3. Ithaca, New York: New York State College of Agriculture and Life Sciences, Cornell University, Dep of Soil, Crop and Atmospheric Sciences (Research Series No 92-3)
- ISO/TR 3666. 1998. Viscosity of Water. Reference Number ISO/TR 3666:1998/(E). 2nd edition. Genève, Switzerland: International Organization for Standardization
- JAKUBKE H D, KARCHER R (Hrsg). 1998. Lexikon der Chemie; Erster Band A bis Gese. Heidelberg: Spektrum Akademischer Verlag
- JURY W A, GROVER R, SPENCER W F, FARMER W J. 1983. Behavior assessment model for trace organics in soil: I Model description. Journal for Environmental Quality: 12; 558–564
- JURY W A, GARDNER W R, GARDNER W H. 1991. Soil Physics. 5th ed. John Wiley & Sons, Inc
- KAMMERER G. 1994. Aspekte zur Implementierung der Randbedingungen geohydraulischer Strömungsprobleme in der Finite-Elemente-Methode. (In: Wiener Mitteilungen Abwasser – Wasser – Gewässer, Band 119). 136–154
- KASTANEK F. 1998. Bodenphysik. Unveröffentlichtes Skriptum des Institutes für Hydraulik und landeskulturelle Wasserwirtschaft; Universität für Bodenkultur Wien
- KASTANEK et al. 1980. Zur Nomenklatur in der Bodenphysik. Mitteilungen der Österreichischen Bodenkundlichen Gesellschaft, Heft 22 55–72
- KEMPER W D, van SCHAIK J C. 1966. Diffusion of salts in clay-water systems. Soil Science Society of America Proceedings, 131: 303–312

- KITCHING R, RUSHTON K R, WILKINSON W B. 1975. Groundwater yield estimation from Models. (In: Engineering Hydrology Today. Int Civil Eng. London). 101–12
- KLUTE A, DIRKSEN Ch. 1986. Hydraulic Conductivity and Diffusivity: Laboratory Methods. (In: KLUTE A (ed). 1986. Methods of Soil Analysis Part 1: Physical and Mineralogical Methods. 2nd ed. (Agronomy No 9). Wisconsin: Soil Science Society of America). 687–734
- KNUPP P, STEINBERG S. 1993. Fundamentals of Grid Generation. Boca Raton – Ann Arbor – London – Tokyo: CRC Press
- KLUTE A (ed). 1965. Methods of Soil Analysis Part 1: Physical and Mineralogical Properties, Including Statistics of Measurement and Sampling. 6th print 1986. (Agronomy No 9). Wisconsin: Soil Science Society of America
- KLUTE A (ed). 1986. Methods of Soil Analysis Part 1: Physical and Mineralogical Methods. 2nd ed. (Agronomy No 9). Wisconsin: Soil Science Society of America
- KOBUS H. 1992. Schadstoffe im Grundwasser Band 1. VCH
- KOOREVAAR P, MENELIK G, DIRKSEN C. 1983. Elements of Soil Physics. Band 13 der Reihe Developments in Soil Science. Amsterdam: Elsevier
- KOZENY J. 1927. Über kapillare Leitung des Wassers im Boden (Aufstieg, Versickerung und Anwendung auf die Bewässerung). Sitzungsberichte der österreichischen Akademie der Wissenschaften, Klasse IIa Jg 1927: 271–306
- KOZENY J. 1953. Hydraulik: Ihre Grundlagen und praktische Anwendung. Wien: Springer Verlag
- KREYSZIG E. 1988. Advanced Engineering Mathematics. 6th ed. New York: John Wiley & Sons
- KUTILEK M, NIELSEN D R. 1994. Soil Hydrology. Cremlingen-Destedt, Deutschland: Catena Verlag
- LEIJ F J, RUSSELL W B, LESCH S M. 1997. Closed-Form Expressions for Water Retention and Conductivity Data. Ground Water Vol 35 No 5: 848–858
- LEIJ, F J, ALVES W J, van GENUCHTEN M Th, WILLIAMS M Th. 1996. Unsaturated Soil Hydraulic Database UNSODA 1.0: User's Manual (Report EPA/600/R-96/095). Ada, Oklahoma: US Environmental Protection Agency
(siehe Website “ <http://www.ussl.ars.usda.gov/MODELS/unsoda.htm>”)
- LIDE D R (Hrsg). 2002. CRC Handbook of Chemistry and Physics. 83rd ed. Boca Raton, Florida: CRC Press
- LIGGETT J A. 1977. Location of free surface in porous media. J Hydraul Div, Am Soc Civil Eng, 103, HY4:333–65.
- LOISKANDL W, KLIK A. 1994. Long term field observations to estimate the soil water balance. (In: ZANNETTI P (ed). Computer Techniques in Environmental Studies V. Southampton-Boston: Computational Mechanics Publications) Vol. I: 69–74.
- LOISKANDL W, KARNER Ch. 1994. Aspekte zur numerischen Modellierung des Stofftransportes. Wiener Mitteilungen Wasser Abwasser Gewässer, Band 119 84–94.

- LOISKANDL W, KLIK A, BAUMER O W. 1996. Automated Soil Water Monitoring in Eastern Austria. (In: CAMP C R, SADLER E J, YODER R E (Eds). Evapotranspiration and Irrigation Scheduling: Proc of the International Conf. San Antonio, Texas: American Society of Agricultural Engineers) 910–915.
- LOISKANDL W, KAMMERER G, JANOTTA M. 1997. Soil Water Balance: Field Observation and Simulation. MMEP 97, Madrid. Computational Mechanics Publications, Southampton-Boston: 497–506.
- LUCKNER L, SCHREIBER G. 1980. Parametermodelle für die Saugspannungs-Sättigungs-Verteilung und den kapillaren k-Wert ungesättigter Böden. Geodätische und geophysikalische Veröffentlichungen, Reihe VI, Heft 32 (Modellierung der Prozesse der Wasserbewegung in ungesättigten Medien): 99–109. Berlin: Nationalkomitee für Geodäsie und Geophysik bei der Akademie der Wissenschaften der DDR
- LUCKNER L, van GENUCHTEN M Th, NIELSEN D R. 1989. A Consistent Set of Parametric Models for the Two-Phase Flow of Immiscible Fluids in the Subsurface. Water Resources Research, Vol 25 No 10: 2187–2193
- LUCKNER L, SCHESTAKOW W. 1991. Migration Processes in the Soil and Groundwater Zone. Chelsea, Michigan: Lewis Publishers
- MALCHEREK A. 2000. Physik und Numerik der Oberflächengewässer. Version 4-1 (Bundesanstalt für Wasserbau, Außenstelle Küste, Hamburg). Im Internet veröffentlicht
- MARSHALL T J. 1958. A Relation between Permeability and Size Distribution of Pores. Journal of Soil Science, Vol 9 No 1: 1–8
- MARSHALL T J, HOLMES J W, ROSE C W. 1996. Soil Physics 3rd ed. USA: Cambridge University Press
- MASSIE W W (ed). 1986. Coastal Engineering. Volume I – Introduction. Skriptum des Department of Civil Engineering, Delft University of Technology
- McCORD J T. 1991. Application of Second-Type Boundaries in Unsaturated Flow Modeling. Water Resources Research, Vol 27, No 12: 3257–3260
- MEINHOLD P, WAGNER E. 1975. Partielle Differentialgleichungen. (BEYER O, ERFURTH H, GREUEL O, et al (Hrsg). Mathematik für Ingenieure, Naturwissenschaftler, Ökonomen und Landwirte: Band 8). Leipzig: B. G. Teubner.
- MERMOUD A, GAILLARD G. 1991. Comparison of Unsaturated Transfer Models with Experimental Results. (In: KIENIETZ G, MILLY P C D, van GENUCHTEN M Th, ROSBJERG D, SHUTTLEWORTH W J. Hydrological Interactions Between Atmosphere, Soil and Vegetation. IAHS Publication No 204). 263–270
- MICHEL B E, RADCLIFFE D. 1995. A Computer Program Relating Solute Potential to Solution Composition for Five Solutes. Agronomy Journal Vol 87:126–130
- MOORE W J. 1990. Grundlagen der Physikalischen Chemie. Berlin, New York: Walter de Gruyter
- MORTIMER Ch. 1996. Chemie: Das Basiswissen der Chemie. 6te Aufl; übersetzt und bearbeitet von U Müller. Stuttgart: Georg Thieme.

- MUALEM Y. 1976. A New Model for Predicting the Hydraulic Conductivity of Unsaturated Porous Media. *Water Resources Research*, Vol 12, No 3: 513–522
- NINOMIYA H, ONISHI K. 1991. *Flow Analysis Using a PC*. Southampton, UK: Computational Mechanics Publications
- OR D, WRAITH J M. 1997a. *Unsaturated Flow and Transport*. Course Notes Fall 1997
- OR D, WRAITH J M. 1997b. *Agricultural and Environmental Soil Physics*. Course Notes Fall 1997
- ÖNORM B 2400. 1986. *Hydrologie: Hydrographische Fachausdrücke und Zeichen*. Wien: Österreichisches Normungsinstitut
- ÖNORM B 4490, 1981. *Erd- und Grundbau: Begriffe, Symbole und Einheiten*. Wien: Österreichisches Normungsinstitut
- ÖNORM L 1063. 1988. *Bestimmung der Druckpotential-Wasseranteilsbeziehung von ungestörten Bodenproben*. Wien: Österreichisches Normungsinstitut
- ÖNORM L 1064. 1988. *Bestimmung der Hygroskopizität*. Wien: Österreichisches Normungsinstitut
- ON V 118. 1996. *Größen und Einheiten in Physik und Technik*. Wien: Österreichisches Normungsinstitut
- OLSEN S R, KEMPER W D. 1968. Movement of nutrients to plant roots. (In: *Advances in Agronomy* 20). 91–151
- ÖSTERREICHISCHER WASSERWIRTSCHAFTSVERBAND (Hrsg). 1992. *Empfehlungen für Bewässerungswasser*. ÖWWV-Arbeitsbehelf Nr. 11
- PACHEPSKY Ya A, TIMLIN D, VARALLYAY G. 1996. Artificial Neural Networks to Estimate Soil Water Retention from Easily Measurable Data. *Soil Science Society of America Journal* 60:727-733
- PINDER G F, GRAY W G. 1977. *Finite element simulation in surface and subsurface hydrology*. San Diego CA: Academic Press
- PLAGGE R. 1991. Bestimmung der ungesättigten hydraulischen Leitfähigkeit im Boden. (BORK H-R, RENGGER M (Hrsg). *Bodenökologie und Bodengenese*. Heft 3). Berlin: Fachgebiete Bodenkunde und Regionale Bodenkunde, Institut für Ökologie, Technische Universität Berlin
- POPPER K R. 1994. *Alles Leben ist Problemlösen; über Erkenntnis, Geschichte und Politik*. München: Piper
- PREGL O. 1980. *Studienunterlagen zur Lehrveranstaltung Bodenmechanik I*. Wien: Institut für Geotechnik und Verkehrsbau, Universität für Bodenkultur
- PRICKETT Th A. 1975. *Modeling Techniques for Groundwater Evaluation*. New York: Academic Press
- RATTAY F. 1994. *Diskretisierung von partiellen Differentialgleichungen für Simulationssprachen*. Seminarunterlagen S22 der Abt Regelungsmathematik und Simulationstechnik. TU Wien
- RAUSCH R, SCHÄFER W, WAGNER Ch. 2002. *Einführung in die Transportmodellierung im Grundwasser*. Stuttgart: Gebrüder Borntraeger

- RICHARDS L A. 1931. Capillary conduction of liquids through porous mediums. *Physics* 1: 318–333
- ROSSI C, NIMMO J R. 1994. Modeling of soil water retention from saturation to oven dryness. *Water Resources Research*, Vol 30 No 3: 701–708
- RUSHTON K R, REDSHAW C. 1979. *Seepage and Groundwater Flow*. Chichester, New York, Brisbane, Toronto: Wiley and Sons
- SCHAAP M. 1999. ROSETTA (Software-Programm). Kalifornien: USDA-ARS George E Brown Jr Salinity Lab (<http://www.ussl.ars.usda.gov/models/rosetta/rosetta.HTM>)
- SCHAUM D, ROSENBERG J L. 1976. *Übungen zur Allgemeinen Chemie. Schaum's Outline Überblicke/Aufgaben*. McGraw-Hill Book Company (UK) Limited
- SHYY W. 1994. *Computational Modeling for Fluid Flow and Interfacial Transport*. Amsterdam-Oxford-New York-Tokyo: Elsevier
- ŠIMUNEK J, VOGEL T, van GENUCHTEN M Th. 1994. The SWMS_2D code for Simulating Water Flow and Solute Transport in Two-Dimensional Variably Saturated Media V 1_2. Research Report No 132. Riverside, CA: US Salinity Laboratory; Agricultural Research Service
- ŠIMUNEK J, van GENUCHTEN M Th. 1994. The CHAIN_2D Code for Simulating the Two-Dimensional Movement of Water, Heat, and Multiple Solutes in Variably Saturated Porous Media V 1_1. Research Report No 136. Riverside, CA: US Salinity Laboratory; Agricultural Research Service
- ŠIMUNEK J, ŠEJNA M, van GENUCHTEN M Th. 1999. The HYDRUS_2D Software Package for Simulating the Two-Dimensional Movement of Water, Heat, and Multiple Solutes in Variably-Saturated Media. V 2. Riverside, CA: US Salinity Laboratory; Agricultural Research Service
- SINGH S. 1998. *Fermats letzter Satz: die abenteuerliche Geschichte eines mathematischen Rätsels*. Aus dem Englischen übersetzt von Klaus Fritz. München: Hanser Verlag
- SMITH M. 1992. *Expert Consultation of Revision of FAO Methodologies for Crop Water Requirements*. FAO-Report of Land and Water Development Division. Rom: FAO
- SOIL SCIENCE SOCIETY OF AMERICA (ed). 1997. *Glossary of Soil Science Terms*. Wisconsin: Soil Science Society of America
- SOKOL W. 1989. *Gerätebeschreibung – Datenerfassungsanlage BODA*. Interne Mitteilung, Institut für Hydraulik und landeskulturelle Wasserwirtschaft, Universität für Bodenkultur Wien
- SPIEGEL M R. 1990. *Statistik (Schaum's Outline)*. 2te Auflage. Hamburg: McGraw-Hill Book Company
- TAMARI , WÖSTEN J H M. 1999. Using Artificial Neural Networks to Develop Pedotransfer Functions of Soil Hydraulic Properties (In: van GENUCHTEN M Th, LEIJ F J, WU L (Hrsg). *Characterization and Measurement of the Hydraulic Properties of Unsaturated Porous Media Part 2 (Proceedings of the International Workshop October 1997 in Riverside, CA)*. Riverside, CA: Riverside: U S Salinity Laboratory, Agricultural Research Service). 1251–1260.

- TANAKA M, GIRARD G, DAVIS R, PEUTO A, BIGNELL N. 2001. Recommended table for the density of water between 0 °C and 40 °C based on recent experimental reports. *Metrologia* 38, 301–309
- TAXENBACHER B. 1993. Anwendung eines numerischen Modells (LEACHM) zur Simulation des Stofftransports im ungesättigten Bodenbereich. Diplomarbeit am Institut für Hydraulik und landeskulturelle Wasserwirtschaft, Universität für Bodenkultur Wien
- TRUCKENBRODT E. 1980a. Fluidmechanik Band 1. 2te Aufl. Berlin: Springer Verlag
- TRUCKENBRODT E. 1980b. Fluidmechanik Band 2. 2te Aufl. Berlin: Springer Verlag
- VERRUIJT A. 1970. Theory of Groundwater Flow. London and Basingstoke: Macmillan and Co Ltd
- VERWEY A. 1988. Mathematical Modelling for Hydraulic And Environmental Engineering. Lecture Notes- International Course in Hydraulic Engineering, IHE Delft
- VOGEL H. 1999. Gerthsen Physik. 20te Aufl. Berlin: Springer Verlag
- VUKOVIC M, SORO A. 1992. Determination of hydraulic conductivity of porous media from grain-size composition. Littleton, Colorado: Water Resources Publications
- WAGENET R J, HUTSON J L. 1989. LEACHM – Leaching Estimation and Chemistry Model: Vol 2, Version 2. Ithaca, NY: Center For Environmental Research, Cornell University
- WANG H F, ANDERSON M P. 1982. Introduction to Groundwater Modeling; Finite Difference and Finite Element Methods. New York: Freeman & Company
- WÖSTEN J H M, LILLY A, NEMES A, LE BAS C. 1999. Development and use of a database of hydraulic properties of European soils. *Geoderma*, 90: 169–185
(siehe auch Website “<http://www.macauley.ac.uk/hypres/>”)
- ZIENKIEWICZ O C. 1977. Methode der finiten Elemente. 2te Auflage. München, Wien: Hanser Verlag