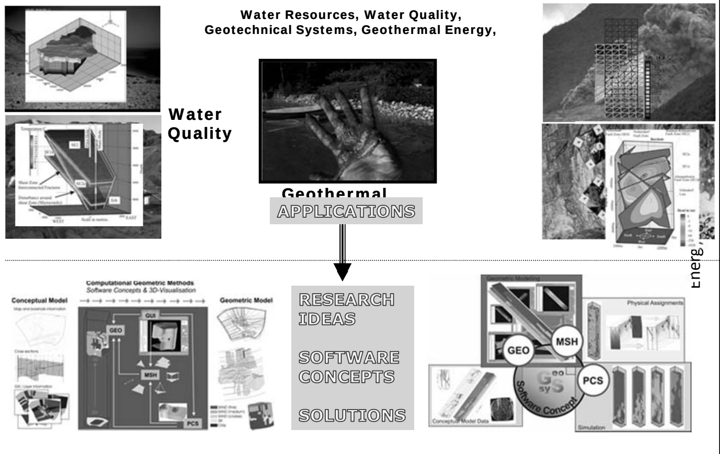
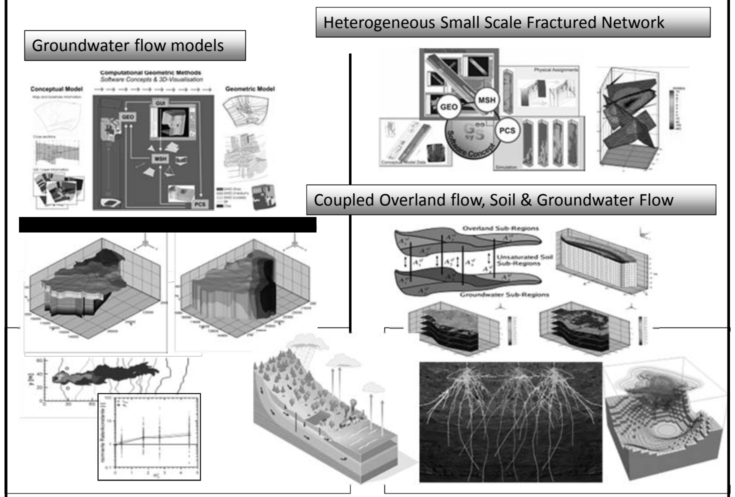
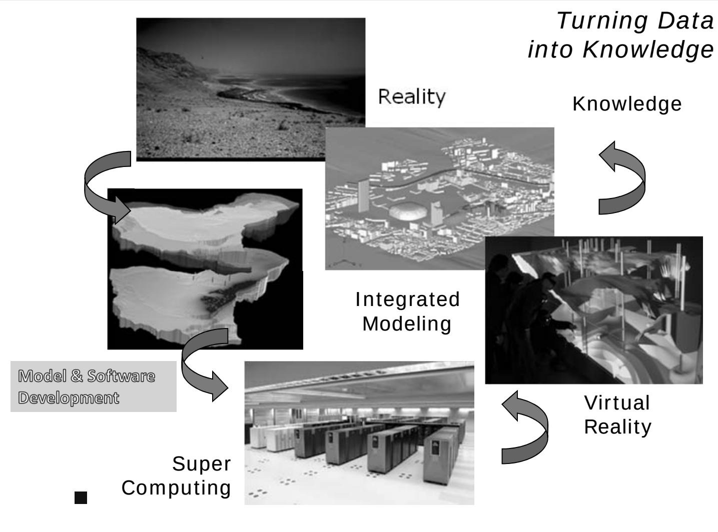
Systemanalyse & Modellierung
Bereich: modellgetriebenen Softwareentwicklung

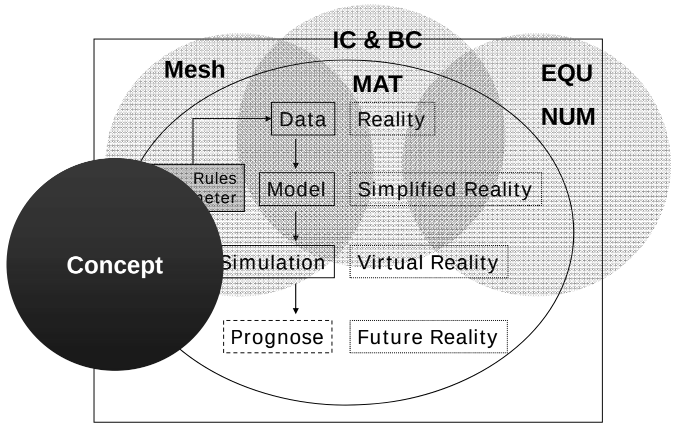


Model Types and Research



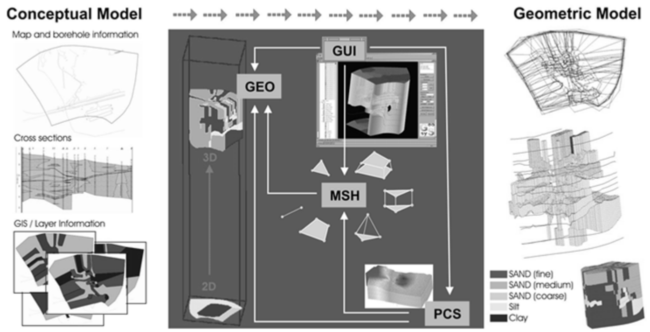


Wünsche vs. Möglichkeiten → Numerisches Rechennetz



Geometrisches Model

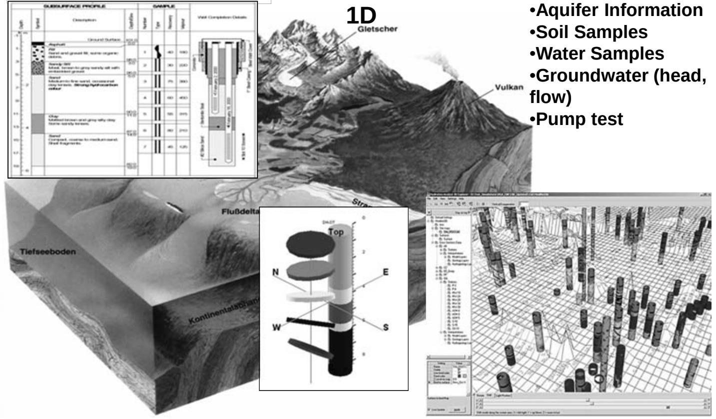
Input Data Analysis → Design of the Conceptual Model → Geometric Model Generation → Numerical Model



Datentypen, Zugehörigkeit und Verteilung

Field and Lab Data: **Borehole Data 1D**

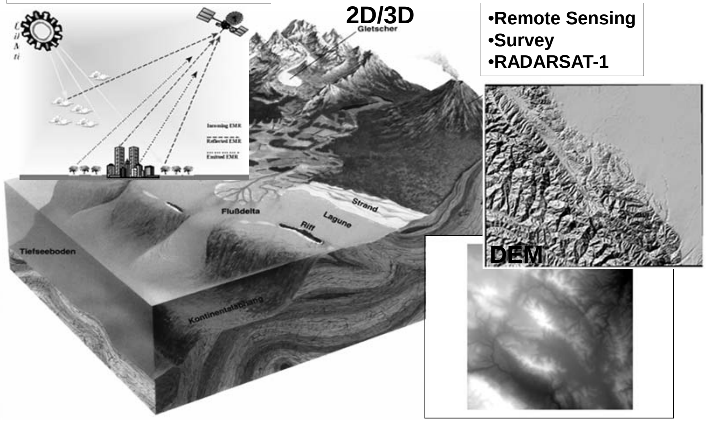
- Stratigraphic Info
- Aquifer Information
- Soil Samples
- Water Samples
- Groundwater (head, flow)
- Pump test



Datentypen, Zugehörigkeit und Verteilung

Scan / Surface-Data: **Topographic Data (point information) 2D/3D**

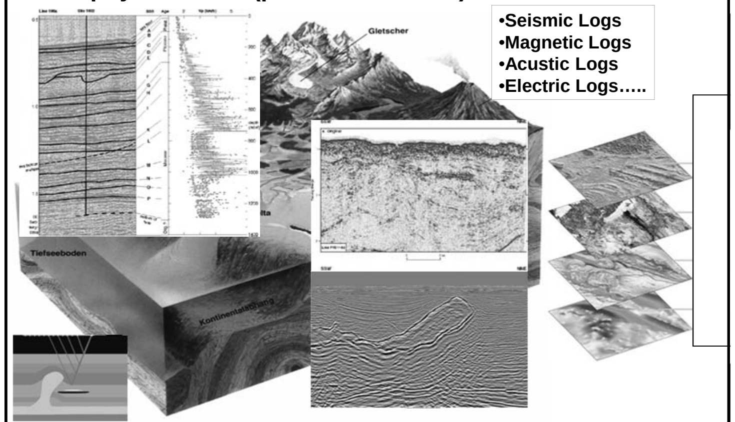
- Remote Sensing
- Survey
- RADARSAT-1



Datentypen, Zugehörigkeit und Verteilung

Geophysical Data (point information) **1D or 2D**

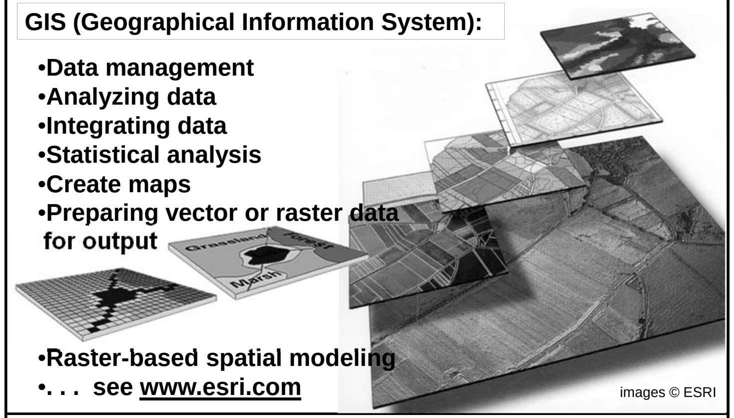
- Seismic Logs
- Magnetic Logs
- Acustic Logs
- Electric Logs…..



Daten Analyse und konzeptionelles Modell

GIS (Geographical Information System):

- Data management
- Analyzing data
- Integrating data
- Statistical analysis
- Create maps
- Preparing vector or raster data for output



- Raster-based spatial modeling
- . . . see www.esri.com

images © ESRI

Daten Analyse und konzeptionelles Modell

Common used GIS Output Data:

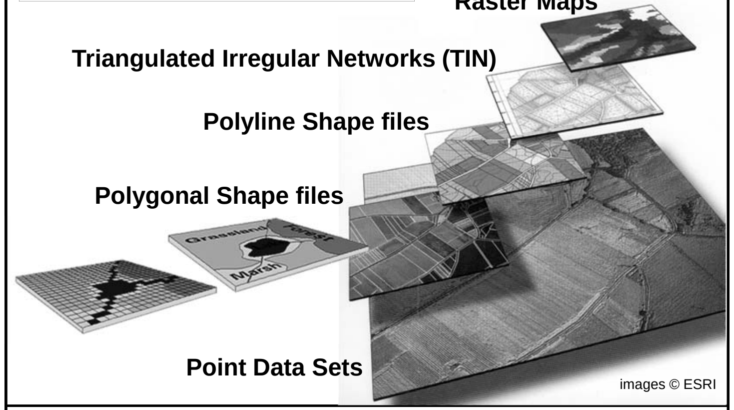
Raster Maps

Triangulated Irregular Networks (TIN)

Polyline Shape files

Polygonal Shape files

Point Data Sets

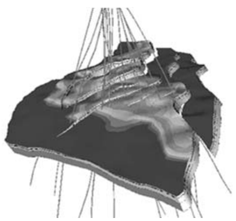


images © ESRI

Daten Analyse und konzeptionelles Modell

Geological CAD Software:

- Petrel (Schlumber)
- goCad
- EarthVision
- OpenGeo



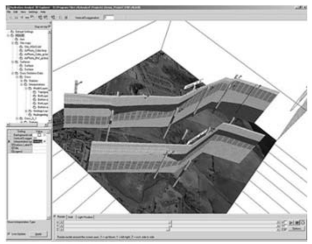
Spatial Data Output:

- Points
- Lines
- Polylines / Polygons
- Triangulated Surfaces (Earth Vision, goCad and OpenGEO)
- Structured and Deformed Grids (Petrel)
- Tetrahedra Meshes (goCad)

Daten Analyse und konzeptionelles Modell

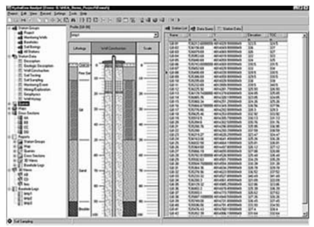
Hydrogeological Software:

- HydroGeoAnalyst
- AquiferTestPro
- …..



Spatial Data Output:

- Points
- Lines
- Polylines / Polygons (2D)
- Grids



Daten Analyse und konzeptionelles Modell

Designing the Conceptual Model with GIS, CAD or others:

General Tools of Preprocessing Software:

- Design / Modelling Tools (Shape)
- Project management tools
- Data base administration and import/export of data
- Analysing functions

Design Possibilities depend on the data set and software capabilities, e.g.

- Geometric Methods treating points, lines, polylines, polygons, surfaces (tri, quad), volumes (hex, tet)
- Visualization and analyzing options
- Data Integration and Management
- Mesh Generators e.g. surface reconstruction

Daten Analyse und konzeptionelles Modell

Designing the Conceptual Model with GIS, CAD or others:

Problems for numerical simulation models:

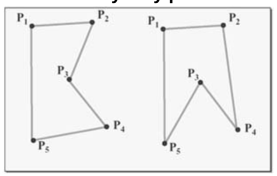
- limited appropriate geometric tools for the specific applications / data sets
- Surfaces reconstruction and meshing tools don't care about element quality of the mesh because a detailed and "more realistic" reconstruction is preferred.
- Manifold data formats, which allows poor defined geometry

Typische Probleme bei der Erstellung des Konzeptmodels

The Data Input:

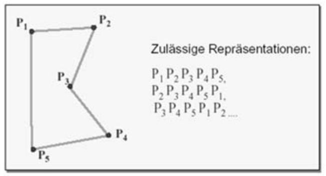
Principle of completeness
Principle of uniqueness

Definition by only points:



not complete

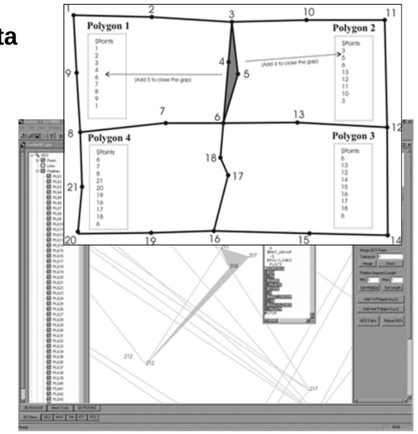
Definition by points and order:



Not Unique if we consider only the order of points
Unique if we consider the beginning/end and order of points

Typische Probleme bei der Erstellung des Konzeptmodels

Cleaning of designed data



Structural Problems:

- loop orientation inconsistencies
- missing geometry
  (e.g. gaps in polylines and gaps between polylines or surfaces)
- undefined self intersecting geometry

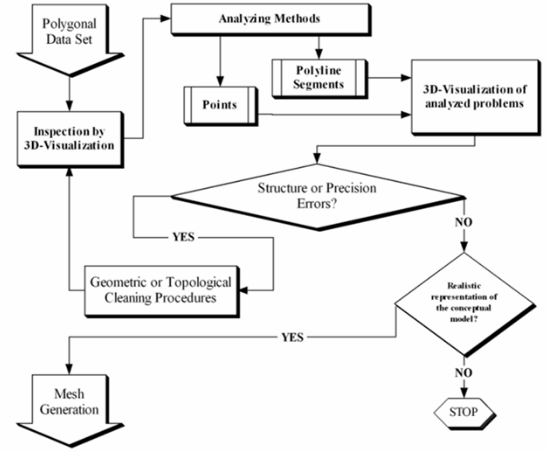
• Precision Requirements:

- gives the minimum segment lengths of polylines → mesh density distribution and mesh size

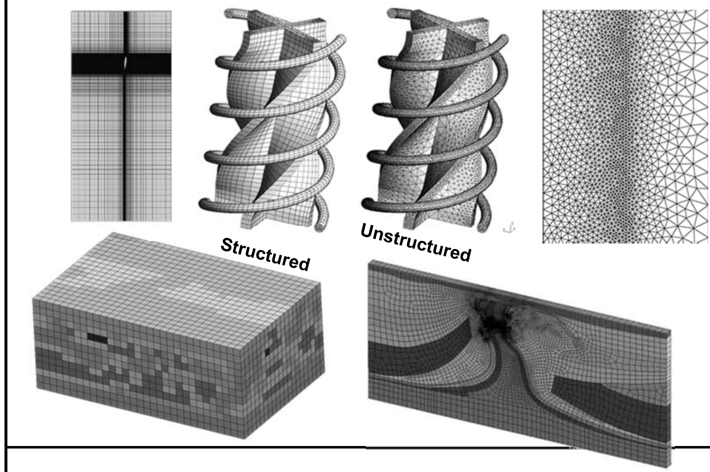
• Realism Errors:

- "not manufacturable" due to structural limitations → require further simplifications and abstractions
  (e.g. sliver faces, acute angles)

Typische Probleme bei der Erstellung des Konzeptmodels



Mesh Generation



Mesh Generation

Coarse Mesh / Fine Mesh

Mesh density distribution must consider:

- Geometry of model boundaries
- Material property distribution
- Gradients and Gradient changes

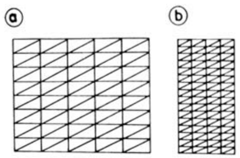


Fig. 113 Coarse and fine mesh method: (a) coarse mesh, (b) fine mesh

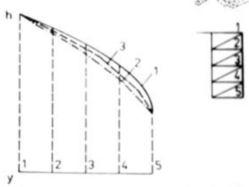


Fig. 114 Comparison of numerical and exact total head values on the upstream side of the sheet pile wall: 1 – analytical solution, 2 – coarse mesh, 3 – fine mesh

I.Kazda: Finite Element Techniques in Groundwater Flow Studies

Mesh Generation

Coarse Mesh / Fine Mesh

The element size in transport models can be approximated with the
•Grid Peclet Criteria (advective-dispersive transport , steady state)
•Courant Criteria (advective transport)
•Neumann (advective-dispersive transport, transient state)

Concerning accuracy and stability, three dimensionless numbers and three related criteria are relevant:

$$\text{Grid-Péclet number/criterion :} \quad Pe = \frac{v \cdot \Delta x}{D} \leq 2 \quad (24)$$

$$\text{Courant number/criterion :} \quad Cou = \frac{v \cdot \Delta t}{\Delta x} \leq 1 \quad (25)$$

$$\text{Neumann number/criterion :} \quad Neu = \frac{D \cdot \Delta t}{\Delta x^2} \leq \frac{1}{2} \quad (26)$$

Not fulfilled criteria: the Galerkin finite element solution usually exhibits numerical spatial oscillations - overshoot and undershoot - near the concentration (temperature) front

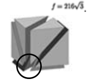
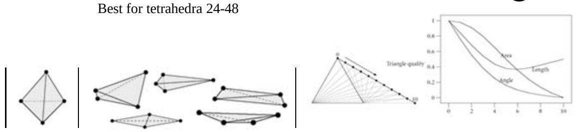
D= dispersion coefficient , Δx = grid cell length in flow direction, v = velocity, Δt = time step length

Unstructured Meshes

Analyzing Element Quality

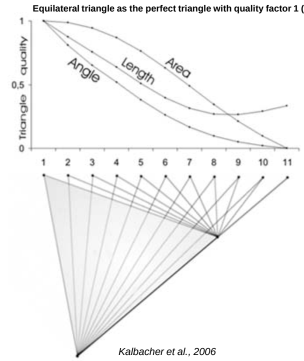
Only geometric criteria: Triangles Tetrahedra

1. **Length criteria:** ratio of the shortest edge to the longest edge.
$$q_{length} = \frac{\min(|\vec{e}_1|, |\vec{e}_2|, |\vec{e}_3|)}{\max(|\vec{e}_1|, |\vec{e}_2|, |\vec{e}_3|)}$$
2. **Angle criteria:** ratio of the smallest angle to the largest angle.
$$q_{angle} = \frac{\min(\alpha, \beta, \gamma)}{\max(\alpha, \beta, \gamma)}$$
3. **Area criteria:** compares the area with the length of the edges. **Volume criteria:** compares the volume with the triangle areas of the tetrahedra.
$$q_{area} = \frac{4\sqrt{3}A}{|\vec{e}_1|^2 + |\vec{e}_2|^2 + |\vec{e}_3|^2} \qquad q = f\frac{V^2}{(A+B+C+D)^3}, \quad f = 216\sqrt{3}$$
4. **Number of elements at one node**. Best for triangles is 6. Best for tetrahedra 24-48

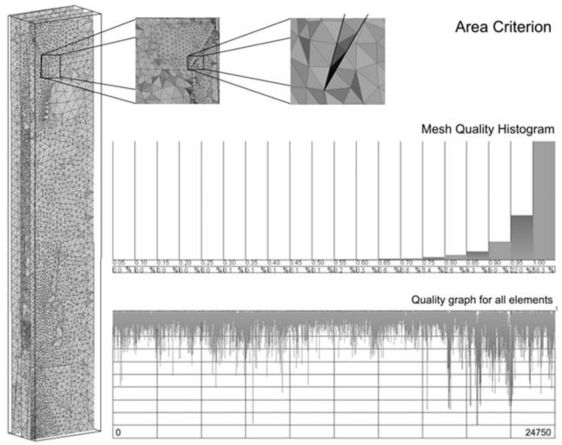
Unstructured Meshes

Mesh Generation: Analyzing Element Quality

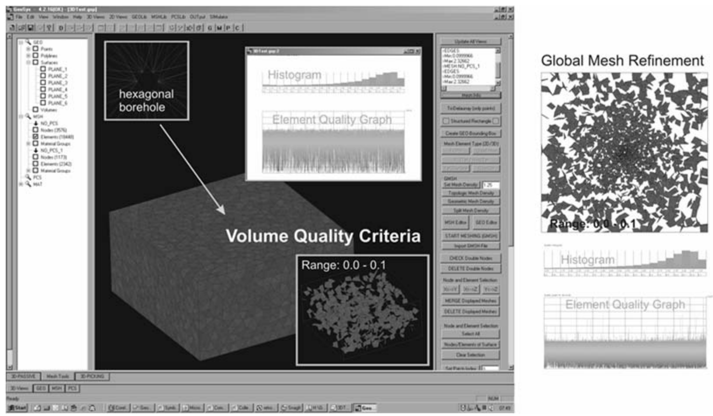


$$q_{length} = \frac{\min(|\vec{e}_1|, |\vec{e}_2|, |\vec{e}_3|)}{\max(|\vec{e}_1|, |\vec{e}_2|, |\vec{e}_3|)}$$
$$q_{angle} = \frac{\min(\alpha, \beta, \gamma)}{\max(\alpha, \beta, \gamma)}$$
$$q_{area} = \frac{4\sqrt{3}A}{|\vec{e}_1|^2 + |\vec{e}_2|^2 + |\vec{e}_3|^2}$$

Unstructured Meshes



Unstructured Meshes

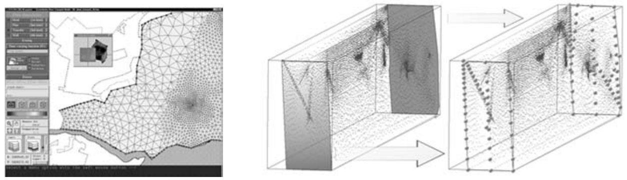


Materialeigenschaften, Anfangs- und Randbedingungen

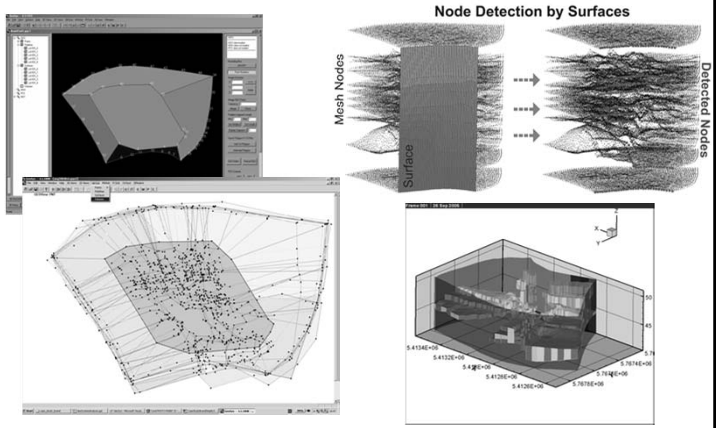
Spatial Property and Parameter Assignments:

How to bring data to the FE-Mesh?

- **Depends on the modelling software**
- **using input devices, snap-functions, e.g. Feflow**
- **assigning parameters by the use of basic geometric information (points, polylines, surfaces, volumes) and (half-)automatic, i.e. GeoSys/RockFlow**



Layered models



Zwischenfazit

Input Daten analysieren
- Voraussetzungen: Prozessabläufe verstehen und die Zusammenhänge kennen
- Limits: Softwaretools und Prozessverständnis

Konzeptmodel:
- Wo sind meine wichtigen Modelränder (BC, IC, MAT)
- Komplexität vs. Vereinfachungen bzw.
- Performance vs. Detailliertheit
- Inputmöglichkeiten des Netzgenerators und Simulationswerkzeugs

Geometrisches Model (Netz): Netzdichte bzw. Verfeinerungen sind abhängig von
- geometrischen Detailinformationen
- numerischen Ansprüchen des zu lösenden Prozesses (NUM)
- Gradienten im Ergebnis

Zwischenfazit

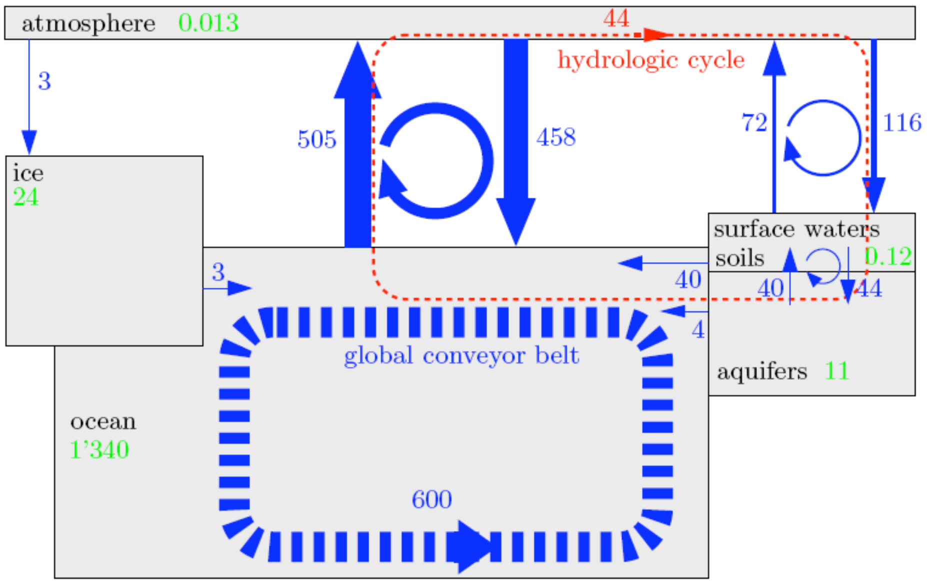
MODELLE VON HYDROSYSTEMEN SIND IMMER EINE VEREINFACHTE DARSTELLUNG DER REALEN UND NATÜRLICHEN PROZESSE !

Vereinfachungen von:
- Konzept
- Geometrie
- Ränder
- Materialverteilungen
- Mathematische Beschreibung
- Numerisches Verfahren

z.B. durch Messmethodik, Messpunktverteilung, Ansätze, Annahmen oder Interpolationen)

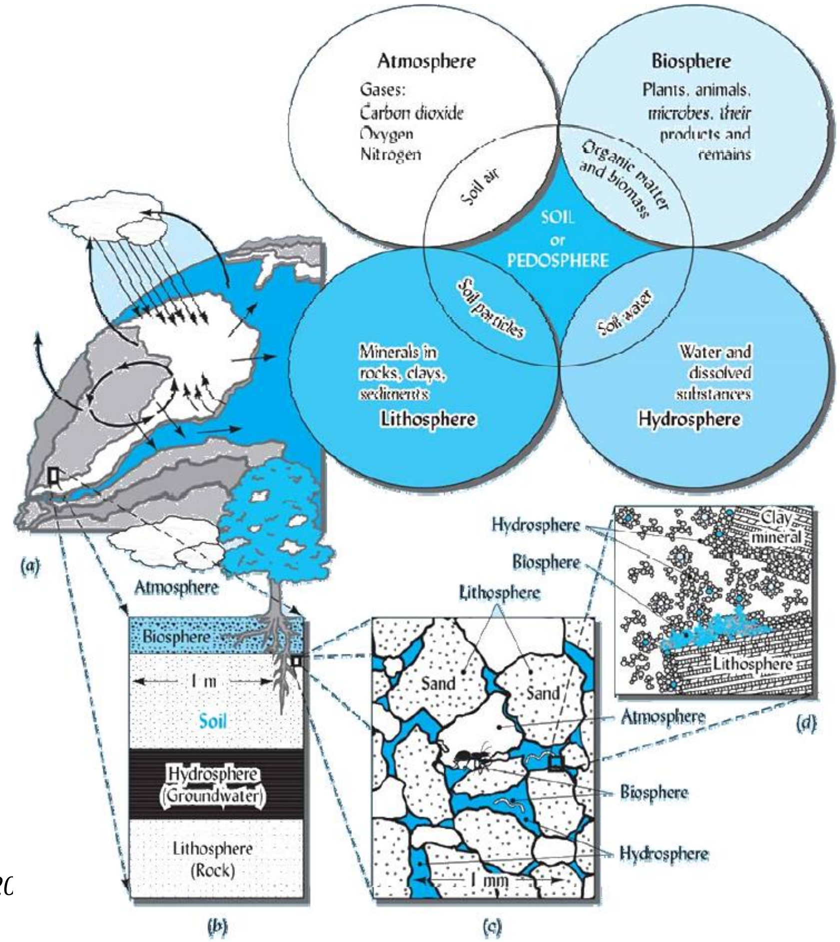
Wichtig daher ist:
Ein Grundlegendes Systemverständnis und Modelverständnis

Wasserkreislauf und die Rolle des Bodens



$X \times 10^3$ km^3/a

Roth K. 20



Open Scripts (PDF):

Soil Physics Lecture Notes, Kurt Roth Institute of Environmental Physics, University of Heidelberg (340 S.)

http://www.iup.uni-heidelberg.de/institut/forschung/groups/ts/soil_physics/students/lecture_notes05/sp-v2.2.pdf

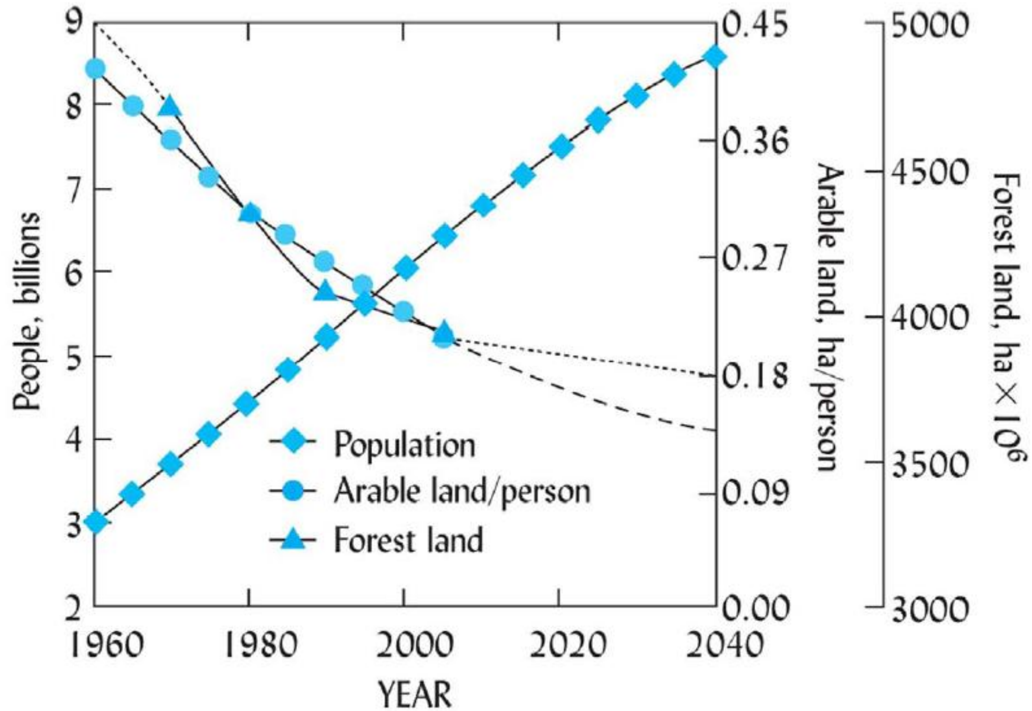
Physik der Ungesättigten Zone, Hannes Flühler, ETH Zürich und Kurt Roth, Universität Heidelberg.

http://www.iup.uni-heidelberg.de/institut/forschung/groups/ts/soil_physics/students/Physik_der_ungesaettigten_Zone.pdf

Soils were Critical to Human History, e.g.

- Early civilizations developed in river valleys with rich, fertile soil
- Collapse of many civilizations is often connected to soil degradation, salinization and erosion

→ **Management Strategies**



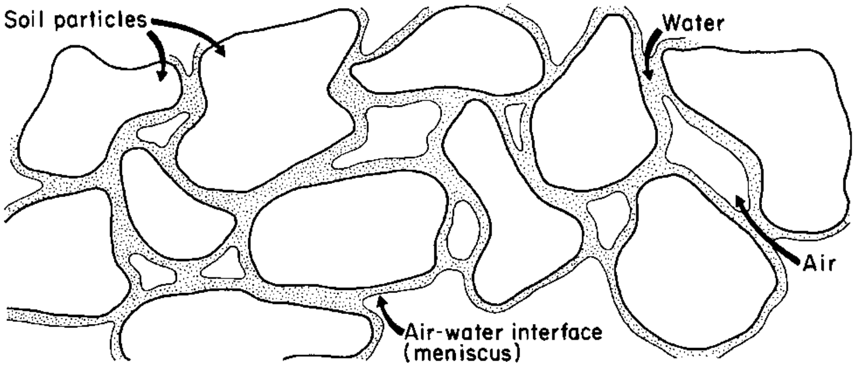
Reservoir	% of Water Global	Fresh	Residence Time
Salt Water	97.5	.	2,643 years
Glaciers	1.75	68.7	12,000 years
Ground Water	0.79	30.9	5,400 years
Surface Water	0.008	0.3	2.26 years
Soil Water	0.0012	0.05	7 weeks
Atmosphere	0.0009	0.04	9 days
Plants	0.00008	0.003	5 days

product [kg]	water consumption [kg]
potatoes	160
maize	450
wheat	1'200
rice	2'700
poultry	2'800
pork	6'000
beef	16'000

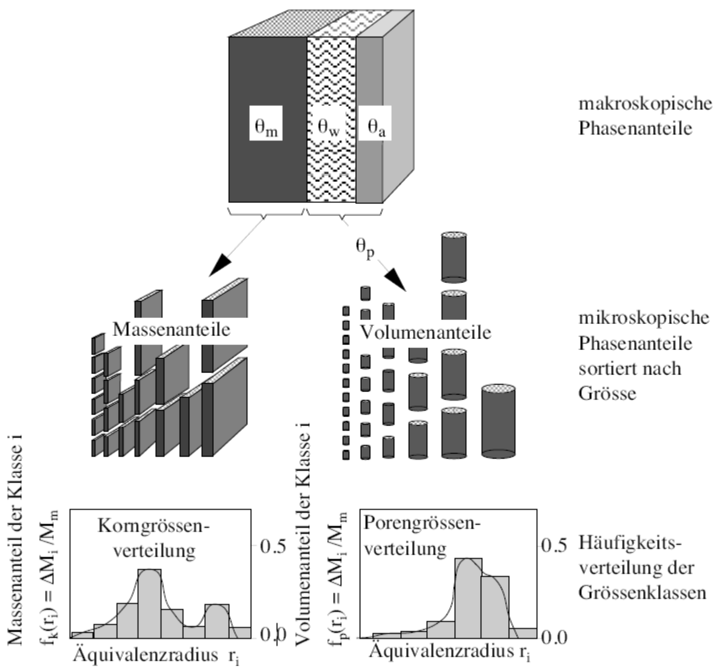
Quellen: unsicher

Die drei Phasen des Bodens

Soils = Air + Water + Solids



Mikroskopischer Phasenbestandteile



Makroskopische Volumen-, Massen- und Phasenanteile

Phase(n)	Zustandsgrösse	volumetrisch[‡]	gravimetrisch[†]
Wasser	Wassergehalt	$\theta_w = V_w/V$	$\theta_w^m = M_w/M_m$
	Wassersätti-gungsgrad	$\Theta_w = V_w/V_p$	—
Luft	Luftgehalt	$\theta_a = V_a/V$	—
	Luftsättigungs-grad	$\Theta_a = V_a/V_p$	—
Porenraum	Porosität	$\theta_p = V_p/V$	—
	Porenziffer	$n = V_p/V_m$	—
Festsubstanz	Matrixanteil	$\theta_{\mathrm{matrix}} = V_m/V$	$M_m/M_m = 1.0$
	Lagerungsdichte	$\rho_b = M_m/V$	—
	reelle Dichte, Dichte der Festsubstanz	$\rho_m = M_m/V_m$	—

M = Masse
V = Volumen

m = Matrix
w = Wasser
a = Luft

p = Porenraum
b = Boden

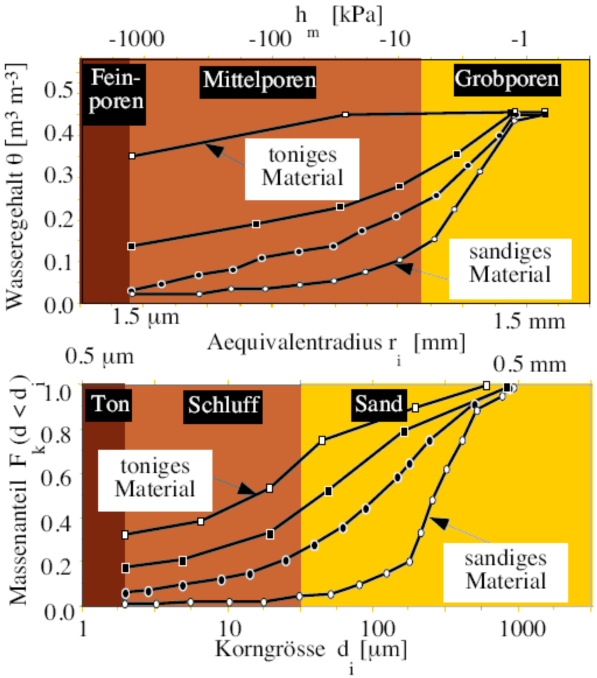
Abbildungen aus Hannes Fühler, Physik der ungesättigten Zone, 2004

$$\Delta f_k(r_i) = \frac{\Delta M_i}{M_m} \quad \text{mit} \quad M_m = \sum_i^n \Delta M_i \,.$$

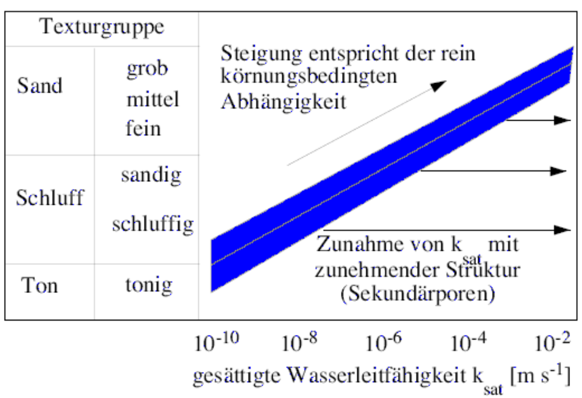
$$F_k(r_i) = \frac{1}{M_m} \int_0^{M(r_i)} dM = \int_o^{r_i} f_k(r)dr$$

$$\Delta f_p(r_i) = \frac{\Delta V_i}{V_p} \quad \text{mit} \quad V_p = \sum_i^n \Delta V_i$$

$$F_p(r_i) = \frac{1}{V_p} \int_0^{V(r_i)} dV = \int_o^{r_i} f_p(r)dr$$



Korngrößenverteilung und Bodenwassercharakteristik (pF-Kurve) von unstrukturierten Böden (umgezeichnet aus *Hartge* [1978])



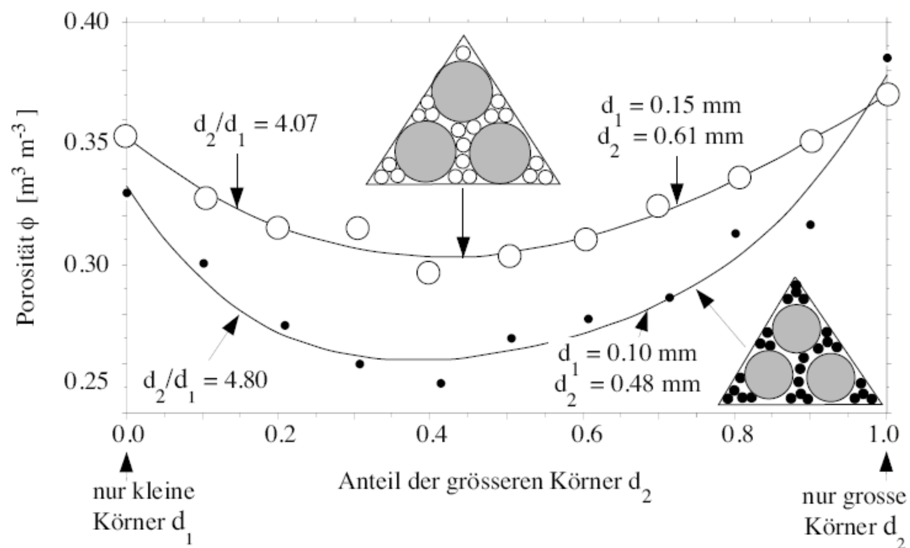
Zusammenhang zwischen Wasserleit-fähigkeit bei Wassersättigung und Textur (umgezeichnet aus *Hartge* [1978]).

Porosität:

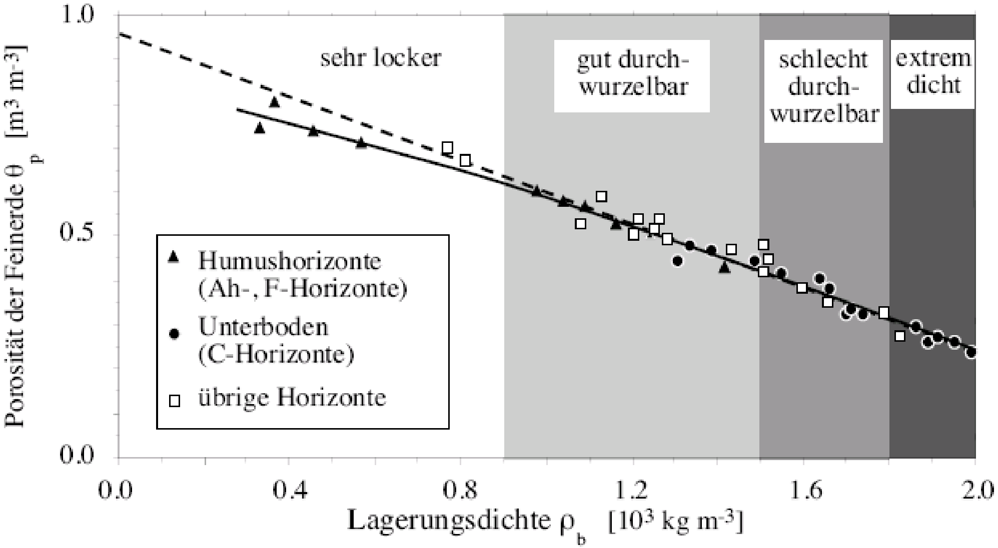
$$\theta_p = V_p/V$$

räumliche Vorstellung einer Pore	Kanäle, Röhren, Gänge, Kapillaren, Spaltflächen, Risse.
physikalische Definition einer Pore	Porenraumanteil, der durch einen bestimmten Unterdruck entwässert werden kann (operationeller Äquivalenzbegriff).
Intra*aggregatbereich*	Porenraum innerhalb der feinporigen Bereiche (z.B. Bodenkrümel). Entspricht den Zonen mit teilweise “immobilem” Wasser.
Inter*aggregatbereich*	Porenraum zwischen den feinporigen Bereichen. Entspricht den Zonen mit relativ “mobilem” Wasser.

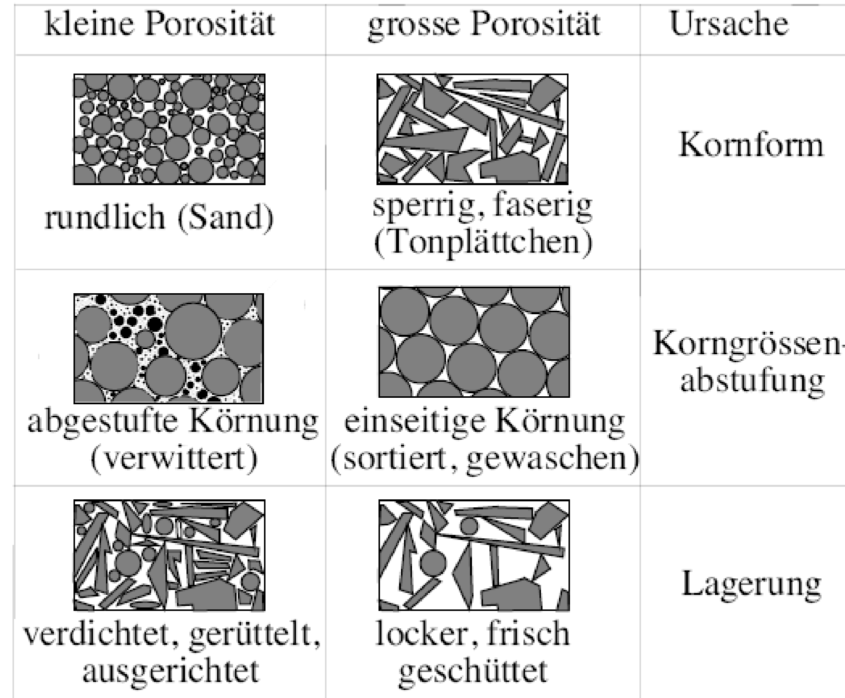
Abhängig von: der *Form* der Partikel, der *Korngrößenabstufung* und der *Lagerung* →
bei gegebener Körnung und Kornform vom Grad der Verdichtung ab



Abbildungen aus Hannes Fühler, Physik der ungesättigten Zone, 2004

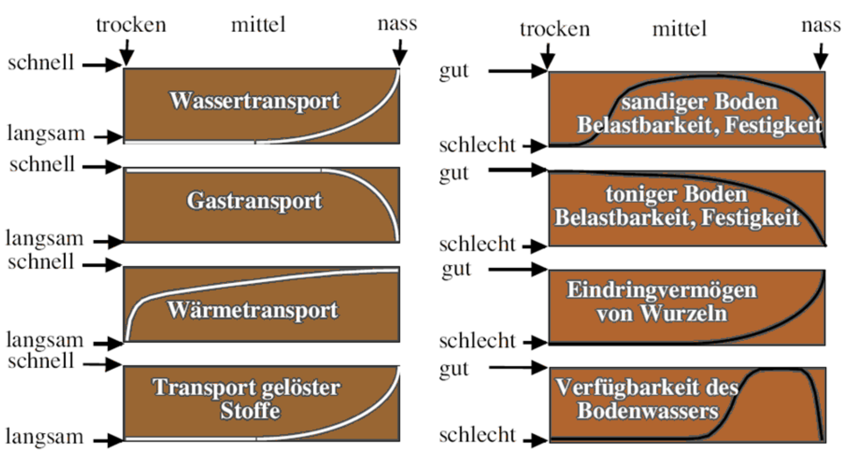


Steigung der Funktion = $1/\rho m$ mit $\rho m = 2.72 \times 10^3$ kg m^{-3}



$$\theta_p = \frac{V_p}{V} = \frac{V - V_m}{V} = 1 - \frac{V_m}{V} = 1 - \frac{V_m}{M_m}\frac{M_m}{V} = 1 - \frac{\rho_b}{\rho_m}$$

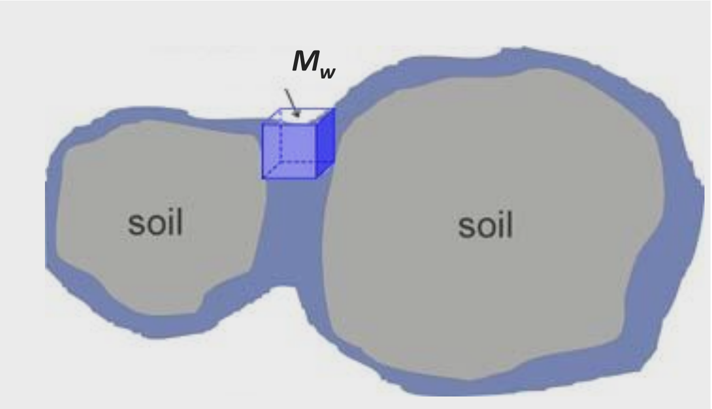
Wassergehalt und Bodeneigenschaften



Abbildungen aus Hannes Fühler, Physik der ungesättigten Zone, 2004

Der Energieinhalt G_w eines Massenelementes M_w

$$G_w = \underbrace{M_w g h_g}_{\text{Lage-energie}} + \underbrace{V_w p_b}_{\text{Druck-energie}} + \underbrace{N_\pi \mu_\pi}_{\text{osmotische Energie}} \qquad [\mathrm{J}]$$



Osmotische Energie: Die Größe μ_π bezeichnet die Änderung der freien Energie G_w infolge Zugabe oder Entnahme einer Menge von N_π Molen gelöster, osmotisch wirkenden Stoffe.

Lageenergie: Die betrachtete Menge Bodenwasser der Masse M_w auf einer bestimmten Höhe h_g im Gravitationsfeld der Erde.

$$h_g = \frac{G_w}{M_w g} \qquad [m] = \frac{J}{kg\frac{m}{s^2}} = \frac{\frac{kg\,m^2}{s^2}}{kg\frac{m}{s^2}} \qquad \psi_g = \frac{G_g}{M_w} = ghg \qquad p_g = \frac{G_g}{V_w} = \rho_g g h_g$$

Der Druck im betrachteten Wasserelement mit dem Volumen V_w beträgt p_b. Dieser ist das Ergebnis einer ganzen Reihe verschiedener Druckkomponenten, aber ohne Einbezug des osmotischen Anteils und der Lageenergie.

Druckpotential $\psi_b = \frac{G_w}{M_w} = \frac{p_b}{\rho_w}$ $\qquad p_b = \frac{G_W}{V_W}$ $\qquad \rho_W = \frac{M_w}{V_w}$

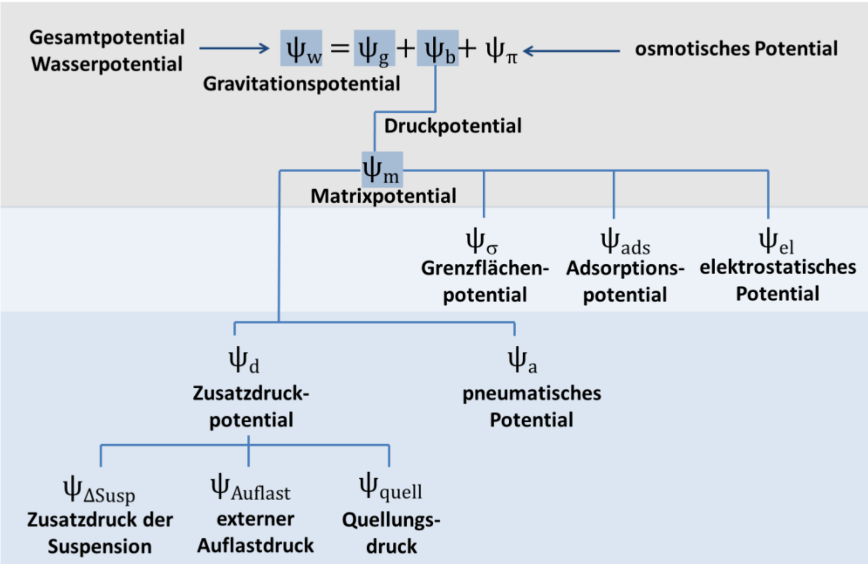
Beziehen wir die Energiemenge G_w auf die Masse M_w, dann erhalten wir die *massenbezogene Energiedichte* ψ_w

$$\psi_W = \frac{G_W}{M_W} = \psi_g + \psi_b \qquad \frac{J}{kg}$$

Gravitationspotential $\psi_g = ghg$ $\qquad M_W g h_g = G_W$

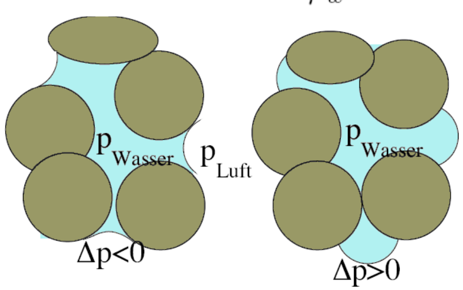
Druckpotential $\psi_b = \frac{p_b}{\rho_w}$ $\qquad \rho_W = \frac{M_w}{V_w}$ $\qquad V_W p_b = G_W$

Die Komponenten des Bodenwasserpotentiales



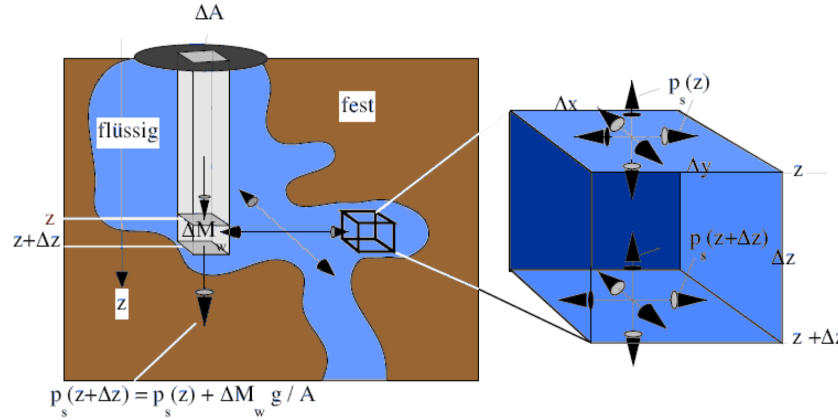
Im **Matrixpotential** ψ_m sind jene Energiekomponenten enthalten, welche die Druckdifferenz zwischen dem Bodenwasser, p_{Wasser}, und der Bodenluft p_{Luft} beeinflussen, sowie alle externen Druck- bzw. Potentialfelder, die auf den betrachteten Bodenausschnitt einwirken.

$$\psi_b = \frac{1}{\rho_w}[p_{\text{Wasser}} - p_{\text{atm}}]$$



Bei der Entwässerung des Bodens bilden sich Luft-Wasser-Grenzflächen. Ihre Krümmung ist ein Maß für die Druckdifferenz zwischen den beiden Phasen

Hydrostatisches Potential ψ_s



Das hydrostatische Potential ψ_s kommt durch das Gewicht der hydraulisch mit dem betrachteten Element verbundenen Wassersäule zustande.

$$\psi_s = p_s/\rho_w = gh_s$$

h_s = vertikale Distanz zum darüber liegenden Wasserspiegel

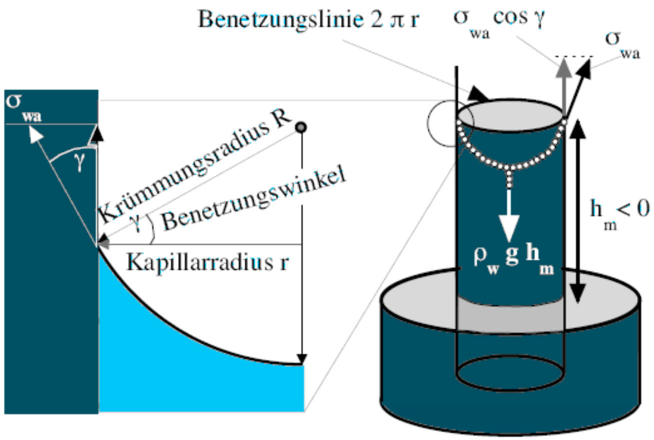
Im hydrostatischen Gleichgewicht heben sich alle Druckkräfte an jedem Punkt innerhalb der flüssigen Phase auf.

Eigengewichtes des Volumenelementes
→ vertikale hydrostatische Auflast
→ Druckdifferenz über die Distanz Δz $\qquad \Delta p_s = \rho_w g \Delta z$

Hydrostatischer Druckgradient $\qquad \frac{d}{dz} p_s = \rho_w g$

Kapillarität

Krümmungsradius an der Grenzfläche zwischen Wasser und Luft ist als Folge des mechanischen Gleichgewichts abhängig von der Druckdifferenz $\Delta p = p_a - p_w$



$$F^{\downarrow} = -Mwg = -\rho_w \pi r^2 h_m g$$

$$M_w = V_w \rho_w \; und$$
$$V_{Zylinder} = \pi r^2 h_m$$

$$F^{\uparrow} = 2\pi r \sigma_{wa} \cos\gamma$$

Benetzter Rand $2\pi r$
Oberflächenspannung σ_{wa}
Benetzungswinkel γ
Kapillare Steighöhe h_m

Gleichgewicht: $F^{\downarrow} = F^{\uparrow}$

$$-\rho_w \pi r^2 h_m g = 2\pi r \sigma_{wa} \cos\gamma$$

$$h_m = -\frac{2\sigma_{wa} \cos\gamma}{\rho_w r g} \qquad \textit{Kapillaritätsgesetz}$$

Soil Science: Zusammenfassung von Konstanten. $h_m = -\frac{0.015}{r}$ [m]

feste Phase	flüssige Phase	Benetzungswinkel γ (Grad)
Glas	Wasser	≈ 0
Quarz	Wasser	≈ 0
Glas	Quecksilber	≈ 140
Stahl	Wasser	≈ 90
trockene Ah-Horizonte in		
- Schwarzerden	Wasser	30-50
- Podsol	Wasser	80-85
- trockener Torf	Wasser	150

$$\Delta p = \rho_w h_m g = \psi_m \, \rho_w \qquad \text{Kapillardruck} \qquad \Delta p = -\frac{2\sigma_{wa} \cos\gamma}{r}$$

$$\psi_m = -\frac{2\sigma_{wa} \cos\gamma}{\rho_w r}$$

Anmerkungen zum Matrixpotential ψ_m

ψ_m ändert sich, wenn die Phasengrenzflächen verändert werden, z.B Wassergehaltsänderung.
Keine benetzenden Phase (Gas) : Matrixpotential nicht definiert.

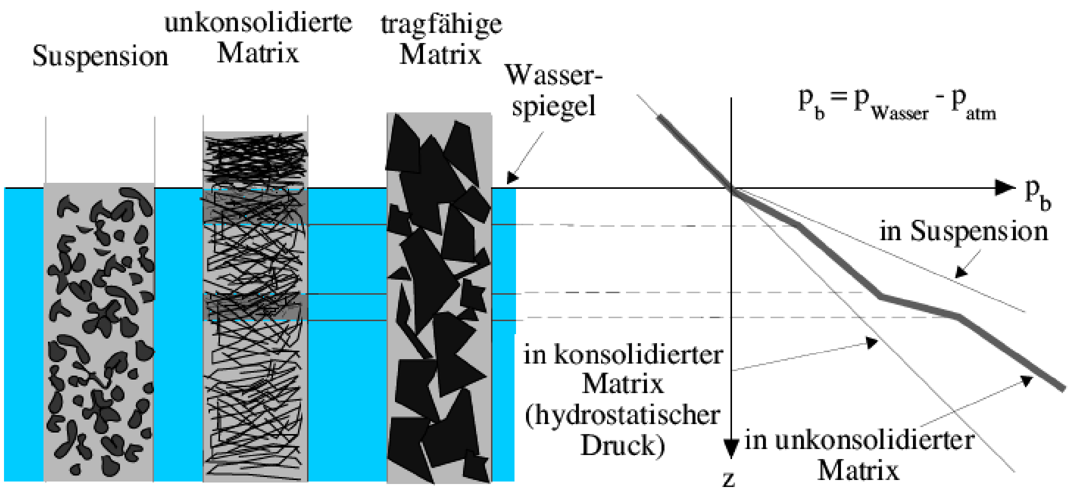
Änderung der Oberflächenenergie des Wassers
z.B. durch Erwärmung *reduziert die Anziehungskräfte im Innern der Flüssigkeit und somit die Oberflächenenergie Wasser-Luft.*
Stoffaustausch mit der Umgebung *verändert die Konzentration der im Wasser gelösten Teilchen, welche ihrerseits die Oberflächenenergie und Benetzungseigenschaften der festen Oberflächen senken oder erhöhen können.*
Gelöste Stoffe verändern das elektrische Potential in der Nähe der festen Grenzflächen und beeinflussen damit die Anordnung der drei Phasen in ungesättigten Systemen

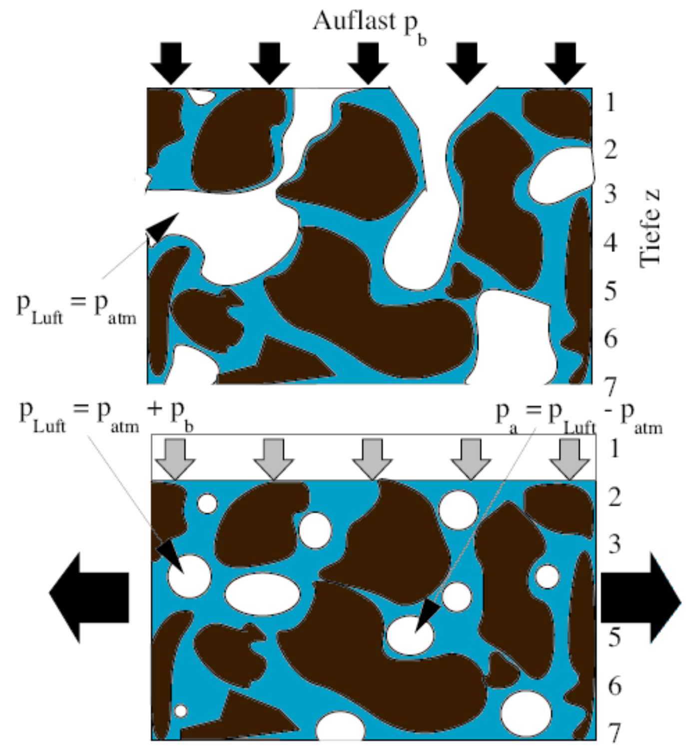
Pneumatisches Potential ψ_a

Das pneumatische Potential ψ_a (a = ”air“) entspricht der Druckdifferenz zwischen der Bodenluft und der freien Atmosphäre. Pneumatische Effekte entstehen im Boden in der Regel nur dann, wenn die Gasphase diskontinuierlich ist oder durch plötzliche Luftdruckänderungen in der freien Atmosphäre komprimiert wird.

Zusatzdruckpotential ψ_d

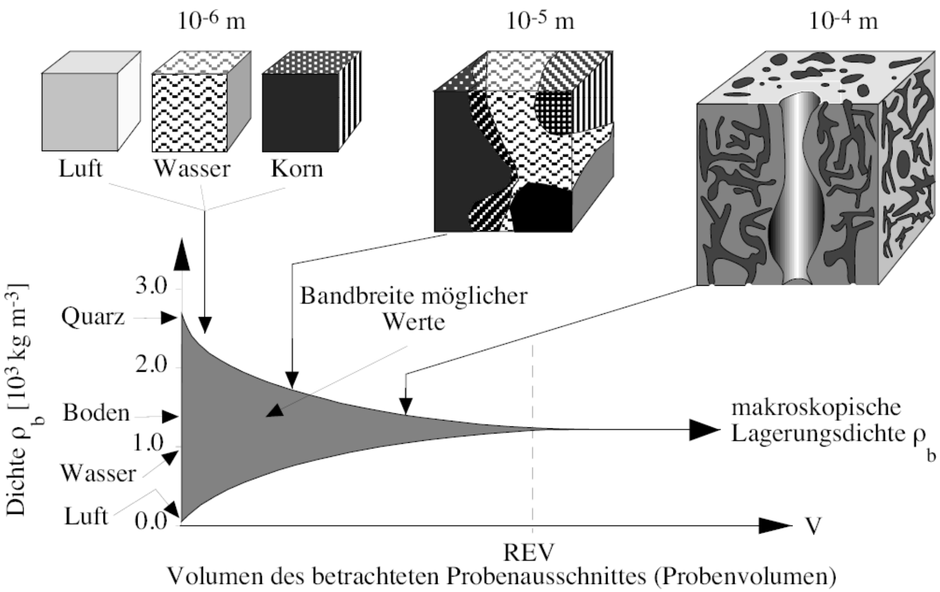
Das Zusatzdruckpotential *ψd* beschreibt jene Druckkomponente, die durch verschiedene Zusatzbelastungen zustande kommt und durch die Bodenmatrix nicht abgestützt wird: $\psi_d = \psi_{\Delta \mathrm{Susp}} + \psi_{\mathrm{Auflast}} + \psi_{\mathrm{quell}}$

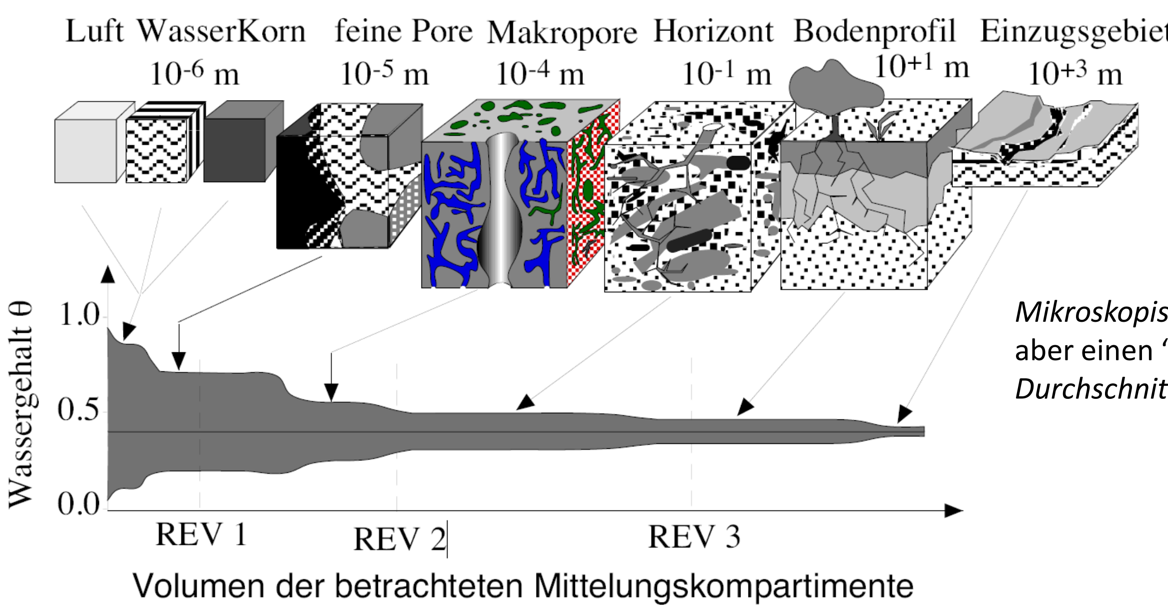




Abbildungen aus Hannes Fühler, Physik der ungesättigten Zone, 2004

Das Mittelungsvolumen, bei welchem die kleinräumige Variabilität im Vergleich zur verbleibenden grobskaligen Variabilität verschwindet, nennt man das **Repräsentative Elementarvolumen REV** *Hubbert [1956] ; Bear[1972a]*





Anmerkungen zum REV

REV ist allgemeingültig (Remote Sensing, GW&Transp.-Modellierung)

Gehalte wie θ_w, θ_a, θ_{matrix}, oder Fließgeschwindigkeiten sind

- *intensive* Variablen, d.h. nicht von der betrachteten Kompartimentgröße abhängig, sondern dem Mittelpunkt des Bezugselementes (V bzw. M_m) zugeordnet,
- Durchschnittsangaben, zur Charakterisierung eines Bodenkompartimentes.

→ angepasstes REV, innerhalb welchem sich alle wichtigen Strukturelemente genügend oft wiederholen

Die Begriffe **homogen und heterogen** hängen ab von

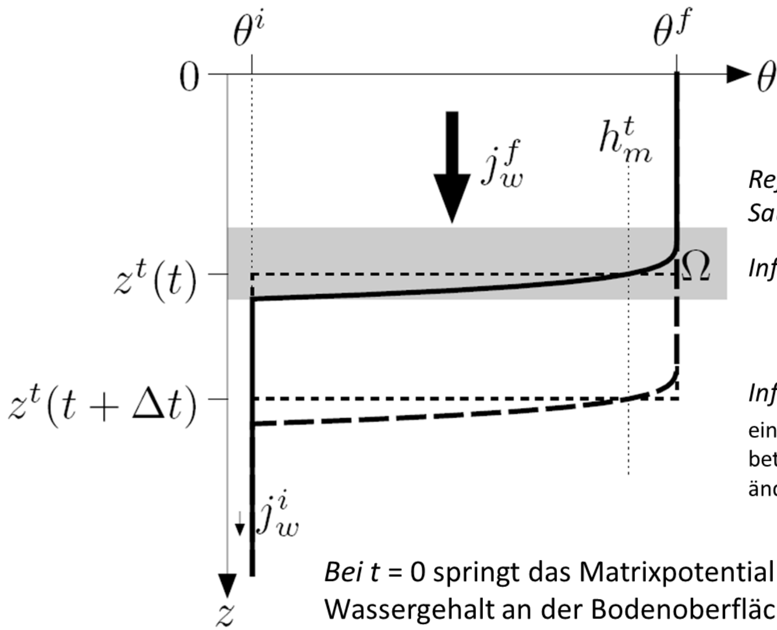
→ der Messgröße,
→ der Ausdehnung des betrachteten Systems
→ Struktur des betrachteten Systems
→ dem Mittelungsvolumen, über das die betrachtete Eigenschaft gemittelt wird, abhängen.

Mikroskopisch gesehen ist der Boden nie homogen! Wählen wir aber einen “genügend” großen Ausschnitt dann ist er “*im Durchschnitt homogen*”.

Abbildungen aus Hannes Fühler, Physik der ungesättigten Zone, 2004

Green-Ampt-Infiltrationsmodell

Aufgrund der Nichtlinearität der hydraulischen Materialeigenschaften ist die Infiltrationsfront das dominierende Ereignis bei transienter Wasserströmung.



homogener Boden
initialer Wassergehalt $\theta^i{}_w$ konstant und klein → entsprechender Wasserfluss j_w^i vernachlässigbar

Referenzpunkt in der Tiefe z^t mit der Saugspannung $h^t{}_m$

Infiltrationsfront zur Zeit t

Infiltrationsfront zur Zeit t+Δt

eine Front, deren Form sich im betrachteten homogenen Medium nicht ändert

Bei t = 0 springt das Matrixpotential und damit auch der Wassergehalt an der Bodenoberfläche auf einen finalen Wert $h^f{}_m$ und bleibt für *t* > 0 konstant.

Für die Beschreibung der Front wählen wir einen Referenzpunkt, dessen Tiefe wir mit z^t bezeichnen. Die Saugspannung an diesem Punkt sei h_m^t . Form der Front ist zeitinvariant Kurve verschiebt sich um Δz^t in die Tiefe mit $[z^t(t), z^t(t+\Delta t)]$

Wassergehalt steigt: $\theta^i{}_w \implies \theta^f{}_w$ $\quad \Delta\theta_w = \theta^f{}_w - \theta^i{}_w > 0$

Wasserfluss: $$j^f{}_w = \Delta\theta_w \lim_{\Delta t \to 0} \left(\frac{z^t(t+\Delta t) - zt(t)}{\Delta t}\right) = \Delta\theta_w \frac{d}{dt} z^t(t)$$

Darcy: Wasserfluss durch eine Säule ist proportional zur Druckdifferenz dividiert durch die Länge der Säule. Wassergesättigt!

$$j^f{}_w = -ks_{at} \frac{\partial}{\partial z} h_w$$

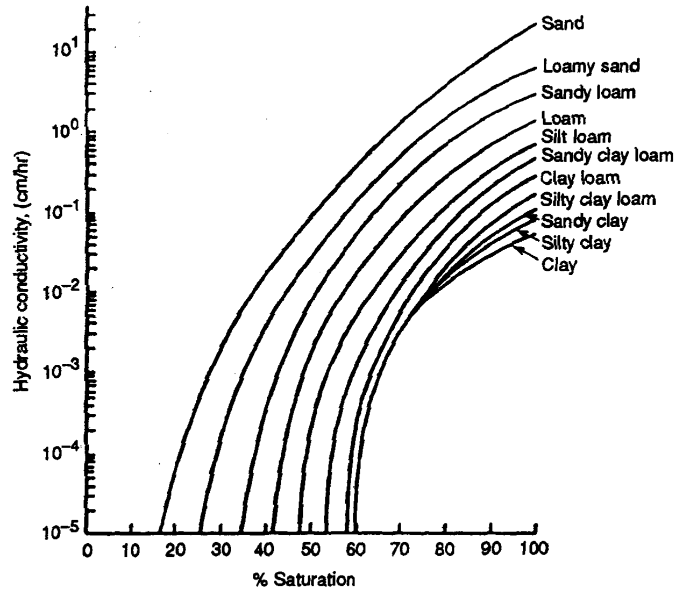
Buckingham: erweitertes Flussgesetz der hydraulischen Leitfähigkeitsfunktion $k(\theta_w)$
→ Buckingham-Darcy Gesetz bzw. *Kozeny- Carman Gleichung*

$$j^f{}_w = -k(\theta^f{}_w) \frac{\partial}{\partial z} h_w$$

$$j^f{}_w = -k(\theta^f{}_w) \frac{h_w(z^t) - hw(0)}{z^t} = -k(\theta^f{}_w) \frac{[h^t{}_m \; z^t] - hf_m}{z^t}$$

$$j^f{}_w = -k(\theta^f{}_w) \left[\frac{\Delta h_m}{z^t} - 1\right]$$

mit $\Delta hm = htm - hfm < 0$

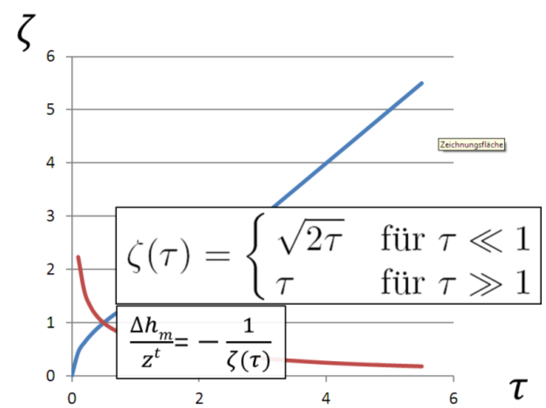


→ Beide Gleichungen beschreiben denselben Fluss

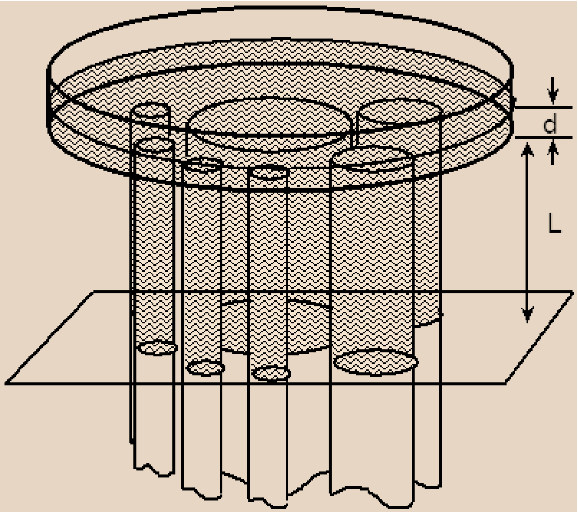
Infiltrationsfront $$\frac{d}{dt} z^t(t) = -\frac{k(\theta^f{}_w)}{\Delta\theta_w} \left[\frac{\Delta h_m}{z^t} - 1\right]$$

mit $\zeta = -\dfrac{z^t}{\Delta h_m}$ *und* $\tau = -\dfrac{k(\theta^f{}_w)}{\Delta h_m \Delta\theta_w} t$

$$\zeta(\tau) - \log(1 + \zeta(\tau)) = \tau$$



Theoretisches Beispiel: Bodenprobe mit θ_w=0, bedeckt von einer Wassersäule mit der Höhe d.
Betrachtung der vollgesättigten Infiltrationsfront



$$\frac{d}{dt} z^t(t) = -\frac{k(\theta^f_w)}{\Delta\theta_w}\left[\frac{\Delta h_m}{z^t} - 1\right]$$

vollgesättigten Infiltrationsfront → $k(\theta^f_w)$ = K_{sat}=K

Bei 100% Wassersättigung $n = \theta_w$ (*n* = Porosität)

$$\frac{d}{dt} z^t(t) = -\frac{K}{n}\left[\frac{\Delta h_m}{z^t} - 1\right]$$

Anpassung an die Abbildung:

$$\frac{dL}{dt} = \frac{K}{n}\left[\frac{h_w}{L}\right]$$

$$n\frac{dL}{dt} = K\left[\frac{h_w}{L}\right]$$

Einfache Integration

$$L = \sqrt{\frac{2\,K\;h_w\;t}{n}}$$

Damit ergibt sich für die Infiltrationslänge $L \sim \sqrt{t}$

Und mit

$$q = \frac{d}{dt} n \sqrt{\frac{2\,K\;h_w\;t}{n}}$$

$$q = \sqrt{\frac{K\;h_w\;n}{2t}} \qquad q \sim \frac{1}{\sqrt{t}}$$

Vertikale Strömung d = const

$$\frac{d}{dt} nL = K\left[\frac{h_m + d + L}{L}\right]$$

$h_w = hm + h_g$ h_g = d + L

h_m = matric head at the wetting front $h = \frac{p}{\rho g}$

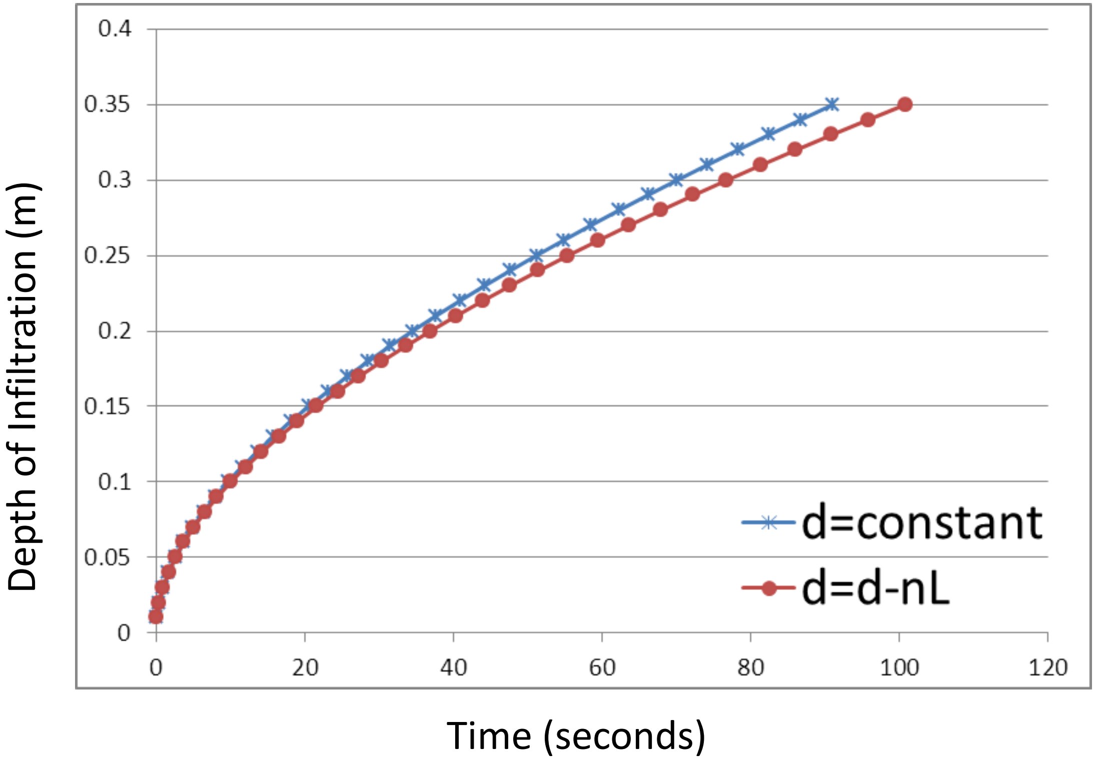
$$dt = \frac{n}{K_{sat}}\left[1 - \frac{h_m + d}{h_m + d + L}\right] dL$$

$$t = \frac{n}{K_{sat}}\left[L - (h_m + d)\ln\left(\frac{h_m + d + L}{h_m + d}\right)\right]$$

Vertikale Strömung d = d-nL

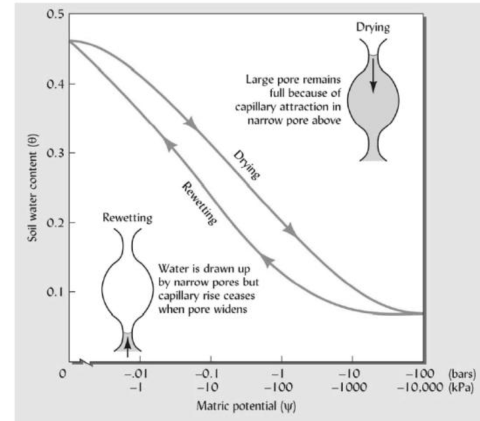
$$\frac{d}{dt} nL = K\left[\frac{h_m + d - nL + L}{L}\right]$$

$$t = \frac{n}{K_{sat}(1-n)^2}\left[L(1-n) - (h_m + d)\ln\left(\frac{h_m + d + L(1-n)}{h_m + d}\right)\right]$$

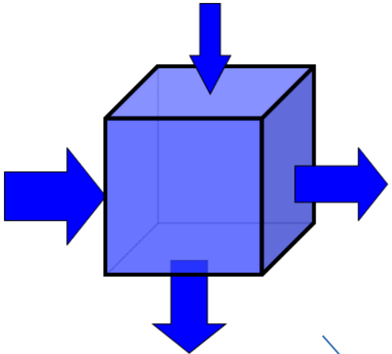


Green and Ampt model predictions for infiltration in a soil with 30% pore space, K_s = 0.03 cm/sec, h_f = 25 cm and d = 20 cm.

Wetting/Drying Hysteresis: Matric Potential Controlled by Size of Filled Pores

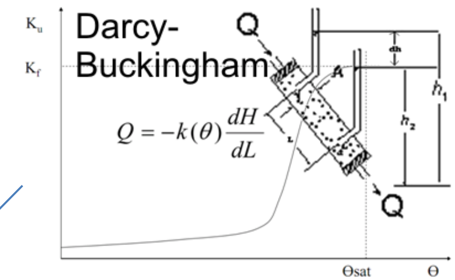


Kontinuitätsgleichung /Equation of Continuity (Conservation of Mass)



$$-\frac{\partial\theta_w}{\partial t} = \frac{\partial j_w}{\partial x} + \frac{\partial j_w}{\partial y} + \frac{\partial j_w}{\partial z} = \nabla j_w$$

The rate of change of the mass within a volume equals the mass flow across the volume's boundary



$$\mathbf{j}_w = -K(\theta_w)\nabla(\psi_m + \psi_g)$$

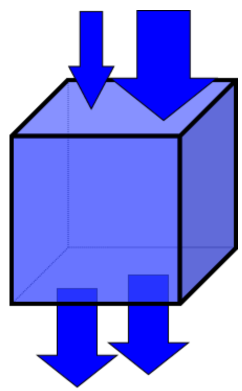
$$-\frac{\partial\theta_w}{\partial t} = -\nabla\left[K(\theta_w)\left[i\frac{\partial\psi_m}{\partial x} + j\frac{\partial\psi_m}{\partial y} + k\left(\frac{\partial\psi_m + \partial\psi_g}{\partial z}\right)\right]\right]$$

Richards' Equation

$$-\frac{\partial\theta_w}{\partial t} = \frac{\partial j_w}{\partial z} = \nabla j_w$$

$$\frac{\partial\theta_w}{\partial t} = \nabla\left[K(\theta_w)\left[\frac{\partial\psi_w}{\partial z}\right]\right] = \frac{\partial}{\partial z}\left(K(\theta_w)\frac{\partial\psi_w}{\partial z}\right)$$

$$\frac{\partial\theta_w}{\partial t} = \frac{\partial}{\partial z}\left(K(\theta_w)\frac{\partial\psi_w}{\partial z}\right)$$ **1D-Richards-Gleichung**

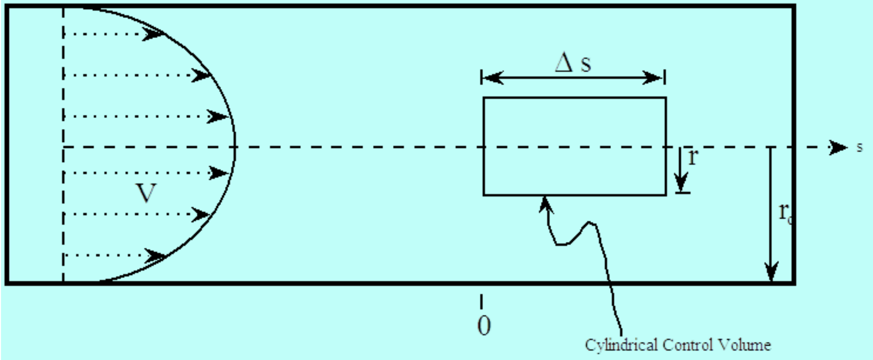


$$-\frac{\partial\theta_w}{\partial t} = -\nabla\left[K(\theta_w)\left[i\frac{\partial\psi_m}{\partial x} + j\frac{\partial\psi_m}{\partial y} + k\left(\frac{\partial\psi_m + \partial\psi_g}{\partial z}\right)\right]\right]$$

Remember that the potential gradient $\frac{\partial\psi_w}{\partial z}$, combines elevation, osmotic, pressure, and matric components (among others).

Sometimes it's convenient to separate out the elevation part:

$$\frac{\partial\theta_w}{\partial t} = \frac{\partial}{\partial z}\left(K(\theta_w)\left(\frac{\partial\psi_m}{\partial z} + 1\right)\right) \qquad \frac{\partial\theta_w}{\partial t} = \frac{\partial}{\partial x}\left(K(\theta_w)\left(\frac{\partial\psi_m}{\partial x} + 0\right)\right)$$



Kräftegleichgewicht $P\pi r^2 - (P + \Delta S\, dP/dS)\, \pi r^2 - 2\pi r \Delta S \tau = 0$

Druckkräfte am Anfang und Ende:

bei $S = 0$ $F_1 = P\pi r^2$

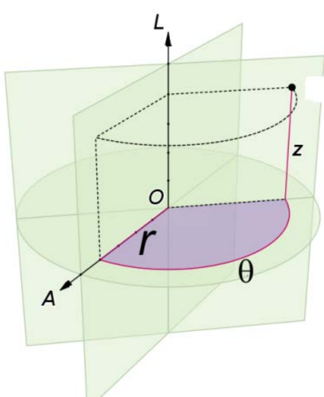
bei $S = \Delta S$ $F_2 = (P + \Delta S\, dP/dS)\, \pi r^2$

Scherkraft: $F_s = 2\pi r \Delta S \tau$

Scherspannung τ $\tau = F/A$ bzw. mit Viskosität $\tau = -\mu \frac{dv}{dr}$

$$\tau = -\frac{r}{2}\frac{dP}{dS}$$

$$\int_{v=0}^{v=v(r)} dv = \int_{r=r_0}^{r} \frac{r}{2\mu}\frac{dP}{dS}\, dr \qquad v(r) = \frac{(r^2 - r_0{}^2)}{4\mu}\frac{dP}{dS}$$

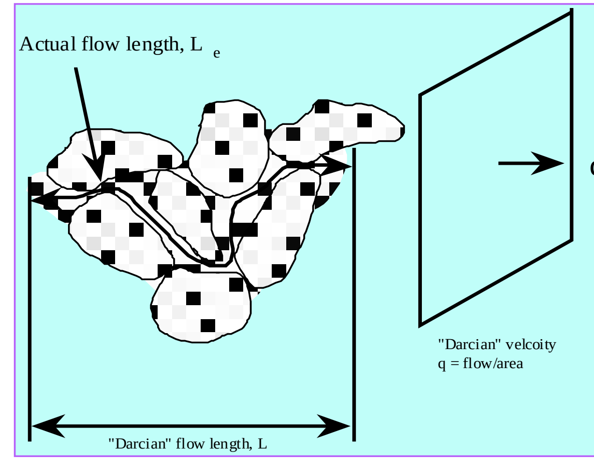


$$Q = \int_{\theta=0}^{\theta=2\pi}\int_{r=0}^{r=r_0} \frac{(r^2 - r_0{}^2)}{4\mu}\frac{dP}{dS}\, r\, dr\, d\theta$$

Hagen-Poiseuille Equation

$$Q = -\frac{\pi}{\mu}\frac{r^4}{8}\frac{dP}{dS}$$

$$v = -\frac{1}{\mu}\frac{r^2}{8}\frac{dP}{dS}$$



$$\frac{\Delta P}{\Delta L} = \frac{L_e}{L}\frac{\Delta P}{\Delta L_e}$$

L_e/L Verhältnis der wahren Fließpfadlänge zur Darcy-Länge

$$v = \frac{q}{n}\frac{L_e}{L}$$

Pore velocity (v) is related to the Darcy flux (q) by the porosity (n).

$$q = -\frac{n}{\mu}\frac{r^2}{8}\frac{\Delta P}{\Delta L}\left(\frac{L}{L_e}\right)^2$$

Vergleich mit Darcy's law

Zusammenfassung der Konstanten

$$K = C\, r^2 \left(\frac{L}{L_e}\right)^2$$

K goes down with:

Tortuosity $\tau = \left(\frac{L_e}{L}\right)^2$

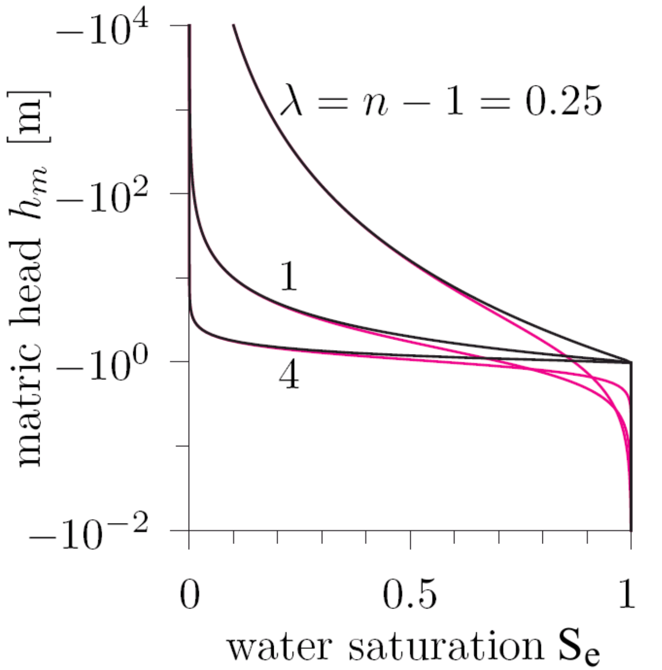
$$S_e = \frac{\theta - \theta_r}{\theta_s - \theta_r}$$

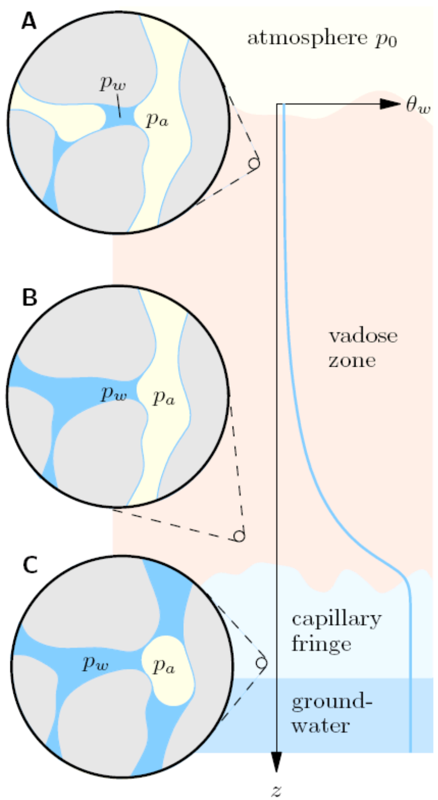
S_e = effektive Wassersättigung
θ_s = gesättigter Wassergehalt
θ_r = Rest-Wassergehalt (residual)

Brooks-Corey Parametrisierung

$$S_e(hm) = \begin{cases} \left[\frac{h_m}{h_0}\right]^{-\lambda} & ; h_m < h_0 \;, \\ 1 & ; h_m \geq h_0 \;, \end{cases}$$

$$h_m(S_e) = h_0 S_e^{-1/\lambda}$$





(A) Water content θ_w is typically small enough that the air phase is continuous through large conduits: gradients of p_a are negligible compared to those of p_w. The two phases are decoupled leading to a degenerate multiphase regime.

(B) Nearer to groundwater, or with strong infiltration fronts, θ_w increases such that the air phase remains continuous but air content a is so small that gradients of p_a are no longer negligible. The two phases become strongly coupled in this continuous multiphase regime.

(C) With θ_w increasing even further (capillary fringe) the air phase becomes discontinuous (residual) with air bubbles typically blocking large openings. In this discontinuous multiphase regime , air flow is no more continuous.

(Roth 2004)

Van Genuchten Parametrisierung

$$S_e(h_m) = [1 + [\alpha h_m]^n]^{-m}$$

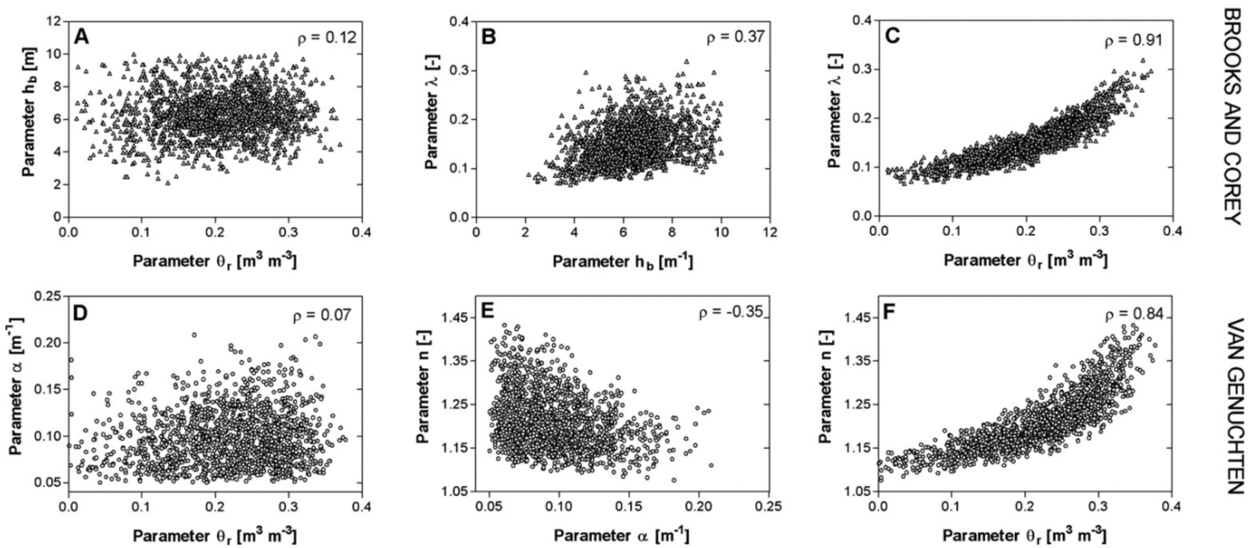
$m = 1-1/n$

$$S_e(h_m) = [1 + [\alpha h_m]^n]^{-1+\frac{1}{n}}$$

$$h_m(S_e) = \alpha^{-1}\left[S_e^{-n/[n-1]} - 1\right]^{\frac{1}{n}}$$

Optimized soil hydraulic parameters of the sandy, sandy loam, and clayey soil for the selected parametric models. Also included are the RMSE values and model adequacy values at the final solution (in parentheses).

Parameter	Unit	Sandy soil	Sandy loam	Clayey soil
		Brooks and Corey		
θ_s	$m^3\ m^{-3}$	0.34	0.37	0.55
θ_r	$m^3\ m^{-3}$	0.03	0.05	0.01
h_b	m	0.36	0.72	5.83
λ	-	2.42	0.55	0.09
$RMSE_\theta$	$m^3\ m^{-3}$	0.0089 (0.30)	0.0082 (0.30)	0.0067 (0.76)
		van Genuchten		
θ_s	$m^3\ m^{-3}$	0.35	0.38	0.55
θ_r	$m^3\ m^{-3}$	0.03	0.06	0.05
α	m^{-1}	2.13	0.82	0.08
n	-	5.65	1.80	1.13



Toward Improved Identifiability of Soil Hydraulic Parameters - On the Selection of a Suitable Parametric Model

Jasper A. Vrugt [*a], Willem Bouten[a], Hoshin V. Gupta[b] and Jan W. Hopmans

Mualem

Annahme: zufällig verbundene Kapillarbündel. Leitfähigkeit eines einzelnen Fließpfades wird durch seinen kleinste Radius bestimmt. Verzweigungen werden nicht berücksichtigt.

$$K(S_e) = K_0 {S_e}^a \left[\frac{\int_0^{S_e} (S_e - \theta) h_m(\theta)^{-2} d\theta}{\int_0^{1} (S_e - \theta) h_m(\theta)^{-2} d\theta} \right]$$

Ersetzung des kleinsten Radius durch einen effektiven Radius (Idee von Burdine [1953])

$$K(S_e) = K_0 {S_e}^a \left[\frac{\int_0^{S_e} h_m(\theta)^{-2} d\theta}{\int_0^{1} h_m(\theta)^{-2} d\theta} \right]$$

Annahme: Geometrische Ähnlichkeit der Poren
→ Geometrische Mittelbildung

$$K(S_e) = K_0 {S_e}^a \left[\frac{\int_0^{S_e} h_m(\theta)^{-1} d\theta}{\int_0^{1} h_m(\theta)^{-1} d\theta} \right]^2$$

a = freier Parameter
S_e^a = effektive Sättigung unter Berücksichtigung der Tortuosität
K_0 = gesättigte hydraulische Leitfähigkeit

Mualem-Brooks-Corey

$$h_m(S_e) = h_0 {S_e}^{-1/\lambda}$$

$$h_m(\theta) = h_0 \left[\frac{\theta - \theta_r}{\theta_s - \theta_r} \right]^{-\frac{1}{\lambda}}$$

$$K(S_e) = K_0 {S_e}^a \left[\frac{\int_{\theta_r}^{\theta} \left[h_0 \left[\frac{\theta - \theta_r}{\theta_s - \theta_r} \right]^{-\frac{1}{\lambda}} \right]^{-1} d\theta}{\int_{\theta_r}^{\theta_s} \left[h_0 \left[\frac{\theta - \theta_r}{\theta_s - \theta_r} \right]^{-\frac{1}{\lambda}} \right]^{-1} d\theta} \right]^2$$

$$\boldsymbol{K(S_e) = K_0 {S_e}^{a+2+\frac{2}{\lambda}}}$$

$$K(hm) = \begin{cases} K_0 \left[\frac{h_m}{h_0} \right]^{-2-\lambda[a+2]} & ; h_m < h_0 , \\ K_0 & ; h_m \geq h_0 , \end{cases}$$

Mualem - van Genuchten

$$h_m(Se) = \alpha^{-1} \left[{S_e}^{-n/[n-1]} - 1 \right]^{\frac{1}{n}}$$

$$K(S_e) = K_0 {S_e}^a \left[1 - \left[1 - {S_e}^{\frac{n}{[n-1]}} \right]^{1-\frac{1}{n}} \right]^2$$

$$S_e(h_m) = [1 + [\alpha h_m]^n]^{-1+\frac{1}{n}}$$

$$K(h_m) = K_0 [1 + [\alpha h_m]^n]^{-a[1-\frac{1}{n}]} \left[1 - [\alpha h_m]^{n-1} [1 + [\alpha h_m]^n]^{-1+\frac{1}{n}} \right]^2$$

Brooks and Corey

Mit a = 1 und *m = 1-1/n*

$$\frac{K(h)}{K_s} = \left(\frac{h}{h_b}\right)^{-2-3\lambda}$$

$$\Theta = \frac{\theta - \theta_r}{\theta_s - \theta_r}$$

$$\frac{K(\Theta)}{K_s} = \Theta^{3+\frac{2}{\lambda}}$$

Mualem - van Genuchten

Mit a = 1 und *m = 1-1/n*

$$\frac{K(h)}{K_s} = \frac{\left[\left(1-(\alpha h)^{n-1}\left[1+(\alpha h)^n\right]^{-m}\right)\right]^2}{\left[1+(\alpha h)^n\right]^{\frac{m}{2}}}$$

$$\Theta = \frac{\theta - \theta_r}{\theta_s - \theta_r}$$

$$\frac{K(\Theta)}{K_s} = \Theta^{\frac{1}{2}}\left[1-\left(1-\Theta^{\frac{1}{m}}\right)^m\right]^2$$

Table 5.1. Mualem-van Genuchten parameters for hydraulic properties $\theta(h_m)$, $K(\theta)$, and $K(h_m)$ shown in Figure 5.3. The parameters have been adapted from [*van Dam et al.*, 1992] who fitted them to measured data. The last column is the slope $\kappa = a - n[a+2]$ of $K(h_m)$ in a double logarithmic plot for $\alpha h_m \gg 1$ as given by (5.28). It is identical to the slope of $K(h_m)$ in the Mualem-Brooks- Corey model (5.26).

	θ_r	θ_s	α [m^{-1}]	n	a	K_0 [$m\ s^{-1}$]	κ
sand	0.03	0.32	−2.3	4.17	−1.1	$2.2 \cdot 10^{-5}$	−4.9
silt	0.01	0.41	−0.7	1.30	0.0	$1.0 \cdot 10^{-5}$	−2.6
loam	0.00	0.43	−1.6	1.25	0.0	$0.3 \cdot 10^{-5}$	−2.5

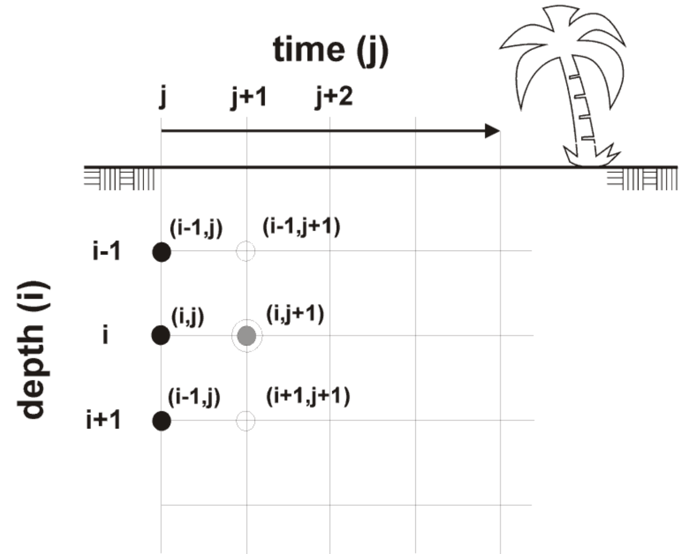
Der Hohe Grad der Nichtlinearität macht es praktisch unmöglich eine analytische Lösung zu erstellen

1) Gebietsdiskretisierung: 1D bzw. 2D (Grid)
2) Diskretisierung der partiellen Differenzialgleichung
3) Anwendung von Anfangs- und Randbedingungen.
4) Code Entwicklung, der die Gleichungen für das ganze Gebiet löst (Matrix)

$$\frac{\partial \theta}{\partial t} = \frac{\partial}{\partial z}\left(K(h)(\frac{\partial h}{\partial z} + 1)\right)$$

$$\frac{\partial \theta}{\partial t} = \frac{\theta_i^{j+1} - \theta_i^j}{\Delta t} = \frac{(h_{i-1}^j - h_i^j + \Delta z)K_{i-1/2}^j}{\Delta z^2} - \frac{(h_i^j - h_{i+1}^j + \Delta z)K_{i+1/2}^j}{\Delta z^2}$$

$$\theta_i^{j+1} = \theta_i^j + \frac{\Delta t}{\Delta z^2}\left[(h_{i-1}^j - h_i^j + \Delta z)K_{i-1/2}^j - (h_i^j - h_{i+1}^j + \Delta z)K_{i+1/2}^j\right]$$



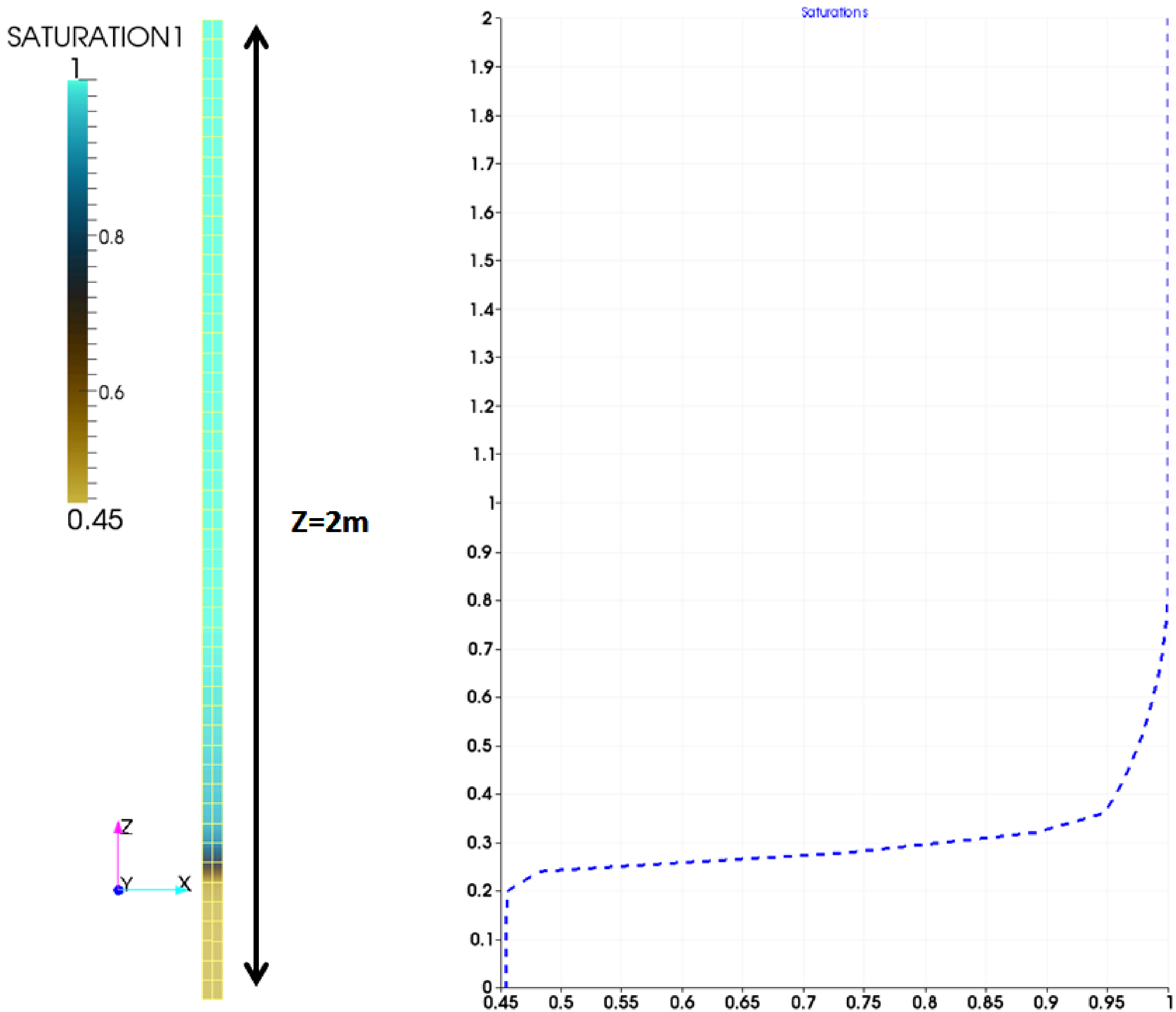
θ_i^j+1, the water content for the i-th depth increment at the next (future) time step

K relates to transfers between two soil layers K must be averaged to represent both layers as: $K([h_i^j + h_{i+1}^j]/2) = K_{i+1}^j/2$.

$$\frac{K(h)}{K_s} = \frac{\left[\left(1 - (\alpha h)^{n-1}\left[1 + (\alpha h)^n\right]^{-m}\right)\right]^2}{\left[1 + (\alpha h)^n\right]^{\frac{m}{2}}}$$

● At time j the water content for the soil profile is known (initial conditions)

● We want to evaluate the water content at the depth i and the time j+1



SATURATION1
1
0.8
0.6
0.45
Z
Y
X
Z=2m
Saturations
2
1.9
1.8
1.7
1.6
1.5
1.4
1.3
1.2
1.1
1
0.9
0.8
0.7
0.6
0.5
0.4
0.3
0.2
0.1
0
0.45
0.5
0.55
0.6
0.65
0.7
0.75
0.8
0.85
0.9
0.95
1