



RUPRECHT-KARLS-UNIVERSITÄT  
HEIDELBERG

FORTGESCHRITTENEN PRAKTIKUM II

FP39

Bodenphysik

«Wasser- und Lösungstransport im porösen Medium»

erstellt von

Martin Wolf, Moritz Zaiss

<mail@martin-wolf.org, moritz.zaiss@urz.uni-hd.de>

Datum: 20.05.2007

Als besondere Auswertung testiert: Datum, Unterschrift:

© Copyright Martin Wolf, Moritz Zaiss, 2007.

# Abstract

Water and solute transport in porous media

The Navier Stokes equation describes the nature for transport phenomenons of fluids. Its the fundamental equation, and today it is possible to solve the equation at least numerically if the boundaries are given. However, a porous media is a very complicated boundary condition. You need the whole three dimensional matrix of the medium, which is chaotic and complex. Because it is impossible to solve this problem, there are makrosopic methods used: the mikroskopisc properties in the average of a big enough volume lead to some hydraulic properties of the medium with special material properties. This experiment is made for the determination of these properties;

In the first part of the experiment we determine the hydraulic conductivity and the matric potential and their dependency of the water content of the material (here: sand). Our method is a multistep outflow experiment where we change the boundary conditions through a applied pressure (which is linked with the matric potential) and measure (automatically via pc) the outflow and therefore the water content. Through this inverse modelling we get the hydraulic properties by optimal fitting of the numerical solutions of the makrosopic equations; the optimal fit parameters are the wanted hydraulic properties.

In the second part we used the results of part one to measure and parameterize a solute transport through the porous media. Here we used a tracer (Brilliant Blue) that do not interact with the solid phase through sorption or any reaction. Solute transport in porous media is typically characterized by significant dispersion processes because of the heterogeneous structure of most porous media what implies a wide range of velocities due to the different size and different continuity of pores. So an originally sharp solute pulse is blurred by the wide spectrum of microscopic velocities in addition to molecular diffusion and is called hydrodynamic dispersion. The aim this part is to measure and model this dispersion to be able to answer questions like: „When will the first percent of some contaminant reach the groundwater?“ in a special porous media (here: sand).

# Inhaltsverzeichnis

<b>1</b>	<b>Einleitung</b>	<b>4</b>
<b>2</b>	<b>Ermittlung der hydraulischen Eigenschaften</b>	<b>4</b>
2.1	Theoretische Grundlagen . . . . .	5
2.1.1	Beschreibung der Wasser-Dynamik . . . . .	5
2.1.2	Hydraulische Eigenschaften und Zustandsvariablen . . . . .	5
2.1.3	Modellbildung . . . . .	6
2.2	Durchführung Teil 1 - Multistep-Outflow-Experiment . . . . .	6
2.2.1	Grundprinzip der Messung . . . . .	6
2.2.2	Aufbau und Vorbereitung der Messung . . . . .	8
2.2.3	Start der Nachtmessung . . . . .	11
2.2.4	Auswertung . . . . .	11
2.2.5	Diskussion . . . . .	14
<b>3</b>	<b>Messung und Parametrisierung des Transports gelöster Stoffe</b>	<b>16</b>
3.1	Theoretische Grundlagen . . . . .	16
3.1.1	Konvektions-Dispersions-Modell (CD) . . . . .	16
3.1.2	Erweiterung des CD-Modells: Mobil-Immobil-Modell (MIM) . . . . .	17
3.2	Duchführung Teil 2 - Durchflussexperiment . . . . .	18
3.2.1	Grundprinzip der Messung . . . . .	18
3.2.2	Aufbau und Vorbereitung der Messung . . . . .	19
3.2.3	Start der Nachtmessung . . . . .	20
3.2.4	Auswertung . . . . .	20
3.2.5	Diskussion . . . . .	21
<b>4</b>	<b>Zusammenfassung</b>	<b>22</b>

# 1 Einleitung

Die Bodenphysik beschäftigt sich mit Bodenanalysen. Typische Fragestellungen kommen aus dem Alltag und dem Umweltschutz. So zum Beispiel fragt man sich bei Verschmutzungen durch Gefahrstoffe, wie schnell der Gefahrstoff das Grundwasser erreicht und somit kontaminiert. Um diese Fragen beantworten zu können, müssen die hydraulischen Eigenschaften, wie z.B. die Leitfähigkeit, des Bodens erforscht werden. In unserem Versuch wurde deshalb die hydraulischen Eigenschaften und der Lösungstransport in einer speziellen Bodenprobe genauer untersucht.

**Mikroskopisch** wirken auf das Wasser im porösen Medium Gravitations- und Kapillarkräfte. Die Dynamik wird dabei beschrieben durch die Navier-Stokes-Gleichung mit der komplizierten Porenstruktur der Bodenprobe als Randbedingung. Da dies beliebig schwierig zu Lösen ist, wird ein **makroskopisches Modell** verwendet, das die mikroskopischen Eigenschaften statistisch mittelt und dadurch die makroskopischen Phänomene beschreibt.

In diesem Versuch wurde ein existierendes Modell verwendet, dessen Parameter mittels Durchflussuntersuchungen bestimmt wurden. Dazu ist allerdings zu sagen, dass mit dieser Methode, dem sogenannten „inversen Modellieren“ nicht geklärt werden kann, ob das verwendete Modell physikalisch korrekt ist, da nur Parameter von mathematischen Gleichungen ermittelt werden, die die Versuchsergebnisse am besten wiedergeben (fittet).

Ziel des Versuches war es, die hydraulischen Eigenschaften einer Bodenprobe und eine Parametrisierung eines Lösungstransportes durch diese Bodenprobe zu ermitteln. Dazu ist der Versuch in zwei Teile gegliedert. Im ersten Versuchsteil wurden die hydraulischen Eigenschaften der Probe untersucht und danach wurden im zweiten Teil des Versuches die Eigenschaften des Transports einer chemischen Lösung (Tracer) durch die Bodenprobe ermittelt.

## 2 Ermittlung der hydraulischen Eigenschaften

In diesem ersten Versuchsteil haben wir die hydraulischen Eigenschaften der Bodenprobe gemessen. Dies geschah indem wir das System durch Anlegen verschiedener Drücke angeregt und dessen Reaktion (Response) gemessen haben. Durch späteres Fitten der Ergebnisse konnten wir die hydraulischen Parameter und deren Abhängigkeiten von den Zustandsvariablen bestimmen.

## 2.1 Theoretische Grundlagen

### 2.1.1 Beschreibung der Wasser-Dynamik

Für eine quantitative Beschreibung des Wasserflusses in porösen Medien setzt man zunächst die Kontinuitätsgleichung an:

$$\partial_t \theta + \nabla \cdot j_w = 0 \quad (1)$$

Dabei ist  $\theta$  der Wassergehalt pro Volumen und  $j_w$  der Volumenfluss des Wassers. Der Wasserfluss ist linear mit dem Gradienten der potentiellen Energieverteilung  $\Psi_w$  des Wassers über die vom Wassergehalt abhängige hydraulische Leitfähigkeit  $K(\theta)$  verknüpft (*Buckingham-Darcy-Gesetz*):

$$j_w = -K(\theta) \nabla \Psi_w \quad (2)$$

Durch Einsetzen der Buckingham-Darcy-Gleichung 2 in die Kontinuitätsgleichung 1 erhält man die Richards-Gleichung für die Dynamik der Wasserbewegung:

$$\partial_t \theta - \nabla \cdot [K(\theta) \nabla \Psi_w] = 0 \quad (3)$$

### 2.1.2 Hydraulische Eigenschaften und Zustandsvariablen

Für die poröse Struktur der Bodenprobe lassen sich folgende Materialeigenschaften einführen:

- **Porosität**  $\Phi$  [-]  
Dies ist der Volumenanteil der Poren.
- **Wasser Charakteristik**  $\theta(\psi)$   
Dies ist der Zusammenhang von Wassergehalt und Wasserpotenzial.
- **gesättigte hydraulische Leitfähigkeit**  $K_s$  [ $ms^{-1}$ ]  
Dies ist die hydraulische Leitfähigkeit des Bodens wenn alle Poren mit Wasser gefüllt sind.

Aus den Materialeigenschaften resultieren folgende Zustandsvariablen:

- **Wassergehalt**  $\theta$  [-]  
Dies ist der Volumenanteil der mit Wassers gefüllten Poren.
- **Wasser-Energiedichte bzw. Wasser-Potenzial**  $\Psi_w$  [ $Jm^{-3}$ ]  
Dies ist das Wasserpotential, das in erster Näherung die Gravitations- und Kabillarkräfte beinhaltet.

### 2.1.3 Modellbildung

Das totale Wasserpotential  $\Psi_w$  setzt sich zusammen aus zwei Komponenten: dem Gravitationspotential  $\Psi_g$  und dem Matrixpotential  $\Psi_m$ , welches die Kapillarkräfte beinhaltet:

$$\Psi_w = -\rho_w g [z - z_0] + \Psi_m \quad (4)$$

Desweiteren nehmen wir an, dass die Young-Laplace-Gleichung für das Matrixpotential gilt:

$$\Psi_m = p_w - p_a = \frac{2\sigma_{wa}}{r} \quad (5)$$

Dabei ist  $p_w$  der Wasserdruck,  $p_a$  der Luftdruck,  $\sigma_{wa}$  die Oberflächenenergie von Wasser-Luft mit Wert  $\sigma_{wa} = 0.0725 \text{ Jm}^{-2}$  und  $r$  der Kapillarradius.

Somit können wir über den Druck das Matrixpotential einstellen. Dabei benutzen wir die äquivalente Wassersäulenhöhe über die Beziehung

$$h_i = \frac{\Psi_i}{\rho_w g} \quad (6)$$

## 2.2 Durchführung Teil 1 - Multistep-Outflow-Experiment

Der Aufbau unseres Multistep-Outflow Experiments zur Bestimmung der hydraulischen Eigenschaften ist in der Abbildung 1 dargestellt. Dabei kommt es in diesem ersten Teil des Versuchs nur auf den blau umrandeten Bereich sowie die Bodenprobe an und die Hähne M stehen in Position M1.

### 2.2.1 Grundprinzip der Messung

Die Dynamik des Systems (Wassergehalt in der Bodenprobe als Funktion der Zeit) kann durch die Richards Gleichung (3) bestimmt werden, falls die hydraulischen Eigenschaften bekannt sind. Da diese hier zunächst noch unbekannt sind, beschreiten wir einen anderen Weg. Wir beobachten die Dynamik des Systems und wählen die hydraulischen Eigenschaften anschließend genau so, dass diese die Beobachtungen beschreiben. Diese Vorgehensweise wird als inverses Modellieren (inverse modeling) bezeichnet.

Im speziellen werden dabei die Magnetventile V1 und V2 von einem Computer angesteuert, der auf diese Art und Weise eine vorgegebene Anzahl verschiedener Drücke an der Bürette einstellt und somit das System anregt. Diese Drücke werden mit Hilfe des Drucksensors DS1 an der porösen Platte unterhalb der Bodenprobe gemessen. Für jeden Druck wird dann der induzierte Wasserfluss (aus der Burette in den Boden bzw. umgekehrt) durch den Drucksensor DS2 gemessen (in Form des Wasserstandes in der Bürette) sowie das Matrixpotential im Boden durch das Tensiometer mit Drucksensor DS3. Als Ergebnis der Messung

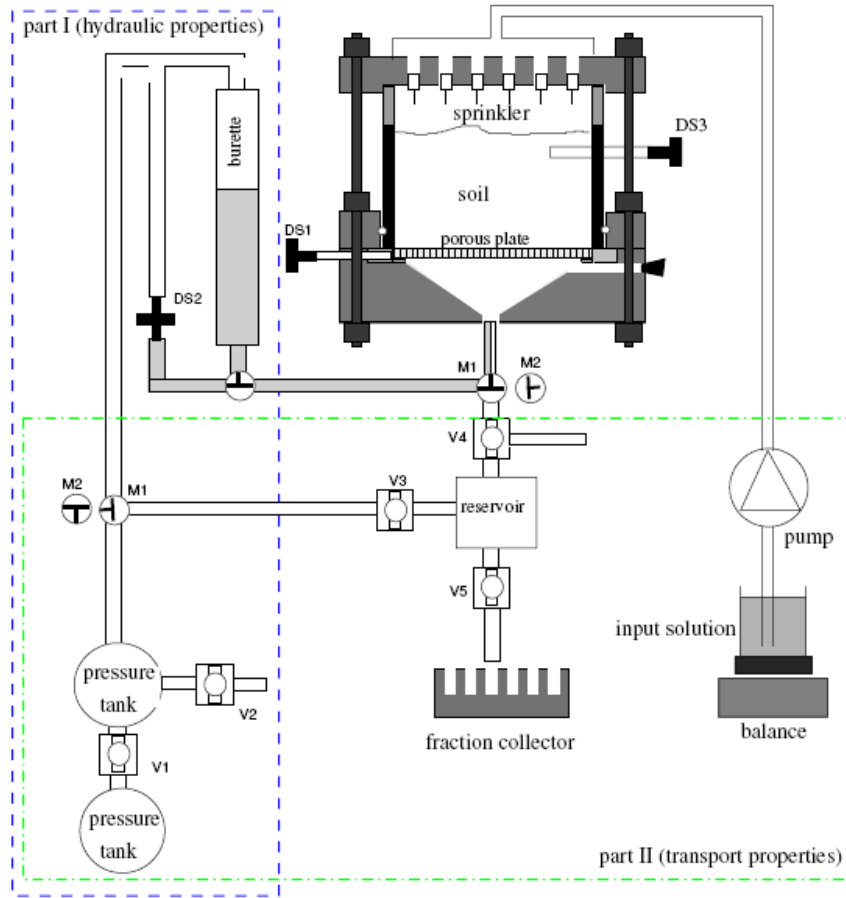


Abbildung 1: Schematischer Aufbau des Experimentes

bekommt man also 3 Kurven: den Druck, den Wasserstand und das Matrixpotential, jeweils als Funktion der Zeit. Unter Verwendung der van Genuchten Parametrisierung für die Wassercharakteristik

$$\theta(\Psi) = \frac{\theta - \theta_r}{\theta_s - \theta_r} = [1 + [\alpha\Psi]^n]^{-1+\frac{1}{n}} \quad (7)$$

mit  $\theta$  als Wassersättigung  $\in [0; 1]$ ,  $\theta_r$  als remanentem Wassergehalt (immobiles Wasser),  $\theta_s$  als Sättigungswassergehalt sowie den empirischen Parametern  $\alpha$  und  $n$  und dem Modell für die hydraulische Konduktivitätsfunktion von Mualem

$$K(\theta(\Psi)) = K_0\theta(\Psi)^\tau \left[ \frac{\int_0^\theta \Psi^{-1} d\theta}{\int_0^1 \Psi^{-1} d\theta} \right]^2 = K_0\theta(\Psi)^\tau \left[ 1 - [1 - \theta(\Psi)^{\frac{n}{n-1}}]^{1-\frac{1}{n}} \right]^2 \quad (8)$$

wobei nach dem 2. Gleichheitszeichen die Gleichung (7) eingesetzt wurde und  $K_0$  und die Tortuosität  $\tau$  weitere Fitparameter sind, kann die Richardsgleichung (3) numerisch gelöst werden.

Da das Ergebnis jedoch von den Parametern  $\alpha$ ,  $n$ ,  $\theta_r$ ,  $\theta_{s_s}$ ,  $\tau$  und  $K_0$  abhängt, ist es unsere Aufgabe, diese so abzuschätzen, dass sich die vom Computer berechnete numerische Lösung der Richardsgleichung für die Wasserdynamik mit der Kurve „Wasserstand in der Burette als Funktion der Zeit“ deckt sowie die Lösung der Richardsgleichung für den Druck am Tensiometer mit dem gemessenen Druck am Tensiometer übereinstimmt.

## 2.2.2 Aufbau und Vorbereitung der Messung

In den folgenden Schritten haben wir das Experiment aufgebaut und vorbereitet. Die entsprechenden Einstellungen haben wir in die Konfigurationsdateien *instruments.dat* und *dynamics.dat* eingetragen.

1. Kalibration der Drucksensoren DS1, DS2 und DS3 mittels einer Wassersäule  
Die schematische Vorgehensweise zur Kalibrierung der Drucksensoren zeigt die Abbildung 2. Dabei wurde das Vorratsglas in verschiedenen Höhen befestigt und die

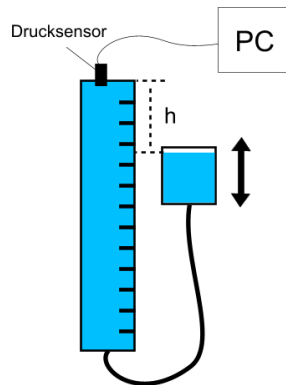


Abbildung 2: Schematischer Aufbau zur Sensorkalibrierung

Höhendifferenz  $h$  zwischen Wasseroberfläche im Vorratsbehälter und Drucksensor gemessen. Die Umrechnung der Wassersäulenhöhe in cm in die Digitausgabe des Sensors geschah dabei mittels dem zur Verfügung gestellten Programm „kalib“.

Den Sensor DS2, der sich fest an der Burette befand, haben wir nicht mit der externen Kalibrierungsanlage gemäß Abbildung 2 durchgeführt, sondern durch Einstellen unterschiedlicher Wassersäulenhöhen in der Burette. Das physikalische Prinzip ist allerdings analog dem der Abbildung 2.

2. Anschluss des Drucksensors DS1 an die poröse Platte Beim Anschluss des Drucksensors DS1 an die poröse Platte musste ein Offset eingestellt werden, da sich die Oberfläche der mit Wasser gesättigten Bodenprobe 10cm über dem Anschluss von DS1 befand. Der Sensor sollte deshalb nach der Kalibration 10cm anzeigen. Der tatsächliche Wert betrug -15cm, also haben wir einen Offset von 25cm eingestellt.



3. Anschluss von DS2 an die Bürette Der Drucksensor DS2 war bereits fest an der Bürette installiert.
4. Anschluss von DS3 an die Bodenprobe Es musste darauf geachtet werden, dass sich keine Luft mehr im Anschlussschlauch befindet. Deshalb haben wir mit einer Wasserspritze die enthaltene Luft im Schlauch verdrängt.
5. Magnetventile konfigurieren Die Magnetventile V1 und V2 waren bereits angeschlossen. Das Ventil 1 (V1), vom Tank zum Mutterfass, öffnet dabei zum Druckabsenken (Unterdruck im Mutterfass) und das Ventil 2 (V2), vom Tank zur Atmosphäre, öffnet zur Druckerhöhung.
6. Probe mit Wasser sättigen Durch in Schritten langsames Anheben des Wasservorratsgefäßes wurde gleichzeitig Wasser in die Burette und die Bodenprobe gelassen bis ein Wasserfilm auf der Probenoberfläche sichtbar war, was auf die Sättigung zurückzuführen ist.
7. Bestimmung der Anregungsdruckschritte

Um die einzustellenden Anregungsdrücke festzulegen muss nach der Young-Laplace-Gleichung 5

$$\Psi_m = \frac{2\sigma_{wa}}{r} = \rho gh \quad (9)$$

$$h = \frac{2\sigma}{\rho gr} \quad (10)$$

der mittlere Porenradius bestimmt werden. Die Vorgehensweise dazu zeigt die Abbildung 3.

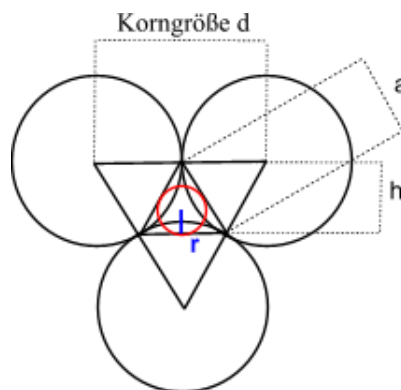


Abbildung 3: Bestimmung des mittleren Porenradius

Für den Porenradius gilt mit der Höhe  $h$  und dem Innenkreisradius  $r$  des kleinen gleichseitigen Dreiecks in der Mitte:

$$a = \frac{d}{2} \quad (11)$$

$$h = \sqrt{a^2 - \frac{a^2}{4}} = \frac{\sqrt{3}}{2}a \quad (12)$$

$$r = \frac{1}{3}h = \frac{1}{4\sqrt{3}}d \quad (13)$$

Die Korngröße betrug für den in diesem Experiment verwendeten Sand  $d = 0.63..1.25\text{mm}$ . Der Mittelwert ist  $d = 0.94\text{mm}$ .

Für die Wassersäulenhöhe  $h$  ergibt sich dementsprechend:

$$h = \frac{2\sigma}{\rho g r} = \frac{8\sqrt{3}\sigma_{wa}}{\rho g d} \quad (14)$$

$$h = \frac{8\sqrt{3} \cdot 0.0725 \frac{\text{J}}{\text{m}^2}}{1000 \frac{\text{kg}}{\text{m}^3} \cdot 9.81 \frac{\text{m}}{\text{s}^2} \cdot 0.0094\text{m}} \quad (15)$$

$$h = (-)10.9\text{cm} \quad (16)$$

Der abzufahrende Druckbereich sollte sich von großen Drücken kommend bis  $\approx h - 10\text{cm}$  und wieder zurück erstrecken. Wir entschieden uns für einen Druckbereich von  $-4\text{cm}$  bis  $-20\text{cm}$ . Die Tabelle 1 zeigt die verwendete Messtabelle mit den jeweiligen Zeitdauern je Druckstufe.

*Tabelle 1: Anregungsdruckschritte*

Druck [cm]	Zeitdauer [s]	Druck [cm]	Zeitdauer [s]
+10	300	-12	3600
-4	1800	-10	3600
-6	1800	-8	1800
-8	1800	-6	1800
-10	1800	-4	1800
-12	1800	-2	900
-14	3600	+0	900
-16	3600	+2	900
-18	5200	+4	900
-20	5200	+6	900
-18	5200	+8	900
-16	3600	+10	900
-14	3600		

### 2.2.3 Start der Nachmessung

Nachdem wir die obige Konfiguration des Experimentes durchgeführt haben, starteten wir schließlich die Nachmessung.

### 2.2.4 Auswertung

Für die Auswertung stand uns ein Computerprogramm zur Verfügung, das nach Eingabe der Parameter  $\alpha_1$ ,  $\alpha_2$ ,  $n$ ,  $\theta_s$ ,  $\theta_r$ ,  $K_0$  und  $\tau$  mit Hilfe der van Genuchten Parametrisierung (vgl. Gleichung 7) und dem Mualem Modell (vgl. Gleichung 8) die Richardsgleichung löst und somit die Funktionen  $\theta(\Psi)$  und  $K(\theta)$  berechnet. Die einzelnen Parameter haben dabei die folgenden Bedeutungen:

$\alpha_1$  Der Druck bei dem das Wasser bei der Entwässerung aus den Poren zu laufen beginnt.

$\alpha_2$  Der Druck bei dem das Wasser bei erneuter Bewässerung wieder in die Poren zu laufen beginnt.

$n$  Anstieg des Wassergehaltes beim kritischen Druck. (Breite der Porengrößenverteilung)

$\theta_s$  Sättigungswassergehalt, bei Sand  $\approx 0.3$

$\theta_r$  Restwassergehalt, hier annähernd null

$K_0$  Die absolute Amplitude der Funktion  $K(\Psi)$

$\tau$  Ein weiterer Fitparameter,  $\approx 0.5$ , der erst am Ende verändert wird

Die beiden verschiedenen Alphas,  $\alpha_1$  für die Entwässerung und  $\alpha_2$  für die Bewässerung kommen vom Effekt der Hysterese. Durch die komplizierte Konnektivität der Poren untereinander ist das kritische Matrixpotential für die Entwässerung  $\Psi_1$  ungleich dem kritischen Matrixpotential  $\Psi_2$ , bei dem die Poren beim Bewässern wieder vollaufen. Die Abbildung 4 veranschaulicht diesen Sachverhalt.

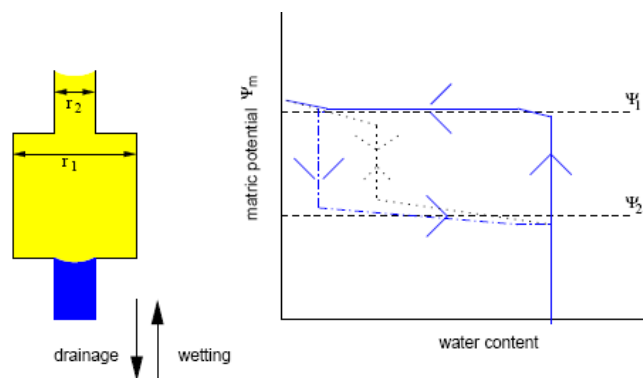


Abbildung 4: Hysterese

Mit den vorgegebenen Parametern ergebende Kurven für den Wasserstand in der Bürette bzw. den Druck am Tensiometer konnten in einem gemeinsamen Diagramm mit den Messwerten ausgegeben werden. Wir sollten die o.g. Parameter zunächst durch Probieren möglichst gut wählen. Die Tabelle 2 zeigt die von uns letztendlich ausgewählten Parameter.

Tabelle 2: von Hand ausgewählte Parameter zum Lösen der Richardgleichung

Parameter	Wert	Parameter	Wert
$\alpha_1$	$0.089\text{cm}^{-1}$	$\theta_r$	0.030
$\alpha_2$	$0.130\text{cm}^{-1}$	$\theta_s$	0.355
$n$	13.2	$\tau$	0.5
$K_0$	$140.8\text{cm/h}$		

Mit den von uns per Hand ausgewählten Parametern in Tabelle 2 ließen wir diese nun vom Computer mit Hilfe des *Levenberg-Marquardt* Algorithmus weiter optimieren.

Tabelle 3: von Levenberg-Marquardt berechnete Parameter zum Lösen der Richardgleichung

Parameter	Wert	95% Konfidenzintervall
$\alpha_1$	$0.0894\text{cm}^{-1}$	$0.0886\text{cm}^{-1}$ bis $0.0902\text{cm}^{-1}$
$\alpha_2$	$0.1509\text{cm}^{-1}$	$0.1499\text{cm}^{-1}$ bis $0.1520\text{cm}^{-1}$
$n$	12.4221	12.0975 bis 12.7467
$K_0$	$271.9512\text{cm/h}$	$271.0400\text{cm/h}$ bis $272.8623\text{cm/h}$
$\theta_s$	0.349	0.3474 bis 0.3507
$\tau$	0.2658	0.2528 bis 0.2789

Die Abbildung 5 zeigt das resultierende Diagramm für die von Levenberg-Marquardt berechneten Parameter in Tabelle 3.

In Abbildung 5 haben die folgenden Zeichen und Linien die folgende Bedeutung:

**Kreise**

gemessener Wasserstand in der Bürette

**Dreiecke**

gemessener Druck am Tensiometer

**gestrichelte Linie**

Druck an der porösen Platte zur Anregung des Systems

**dicke durchgezogene Linie**

gefittete Lösung der Richardsgleichung für die Wasserdynamik

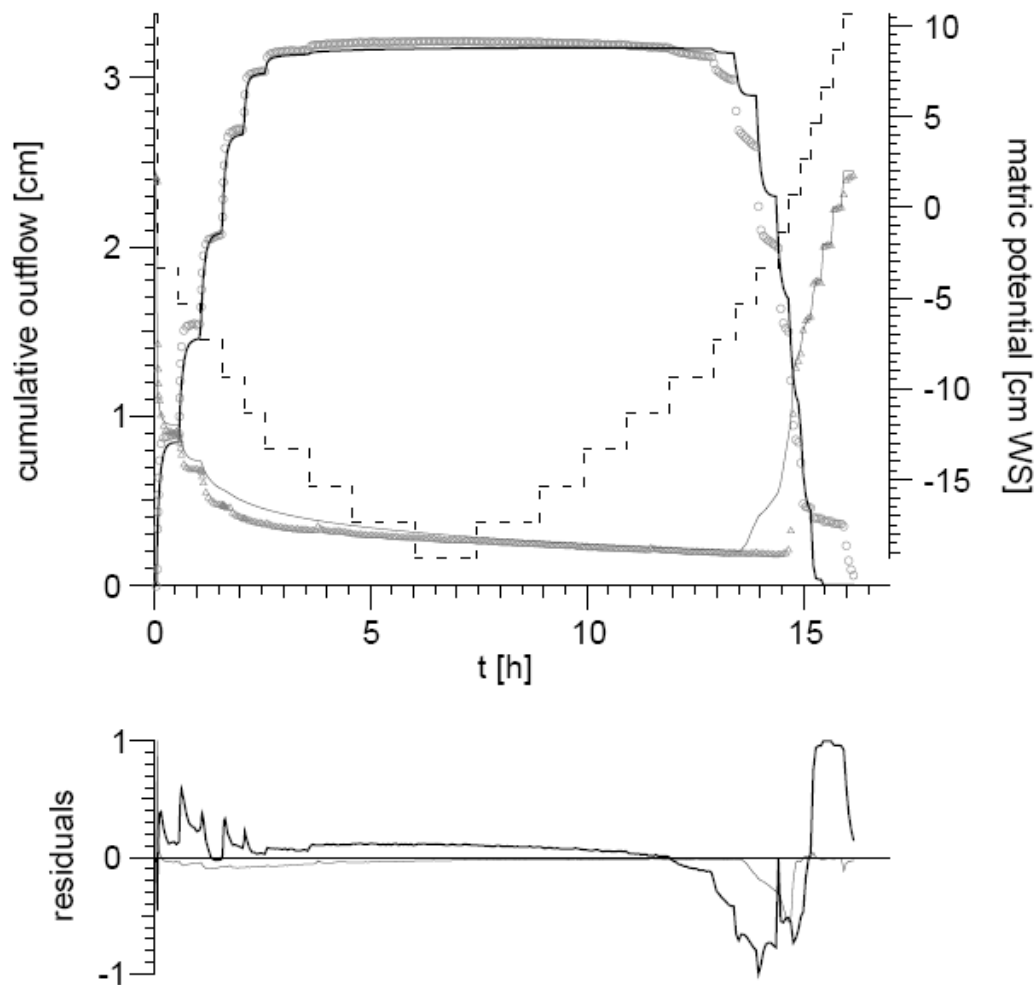


Abbildung 5: Lösung der Richardsgleichung mittels den von Levenberg-Marquardt berechneten Parametern

### dünne durchgezogene Linie

gefittete Lösung der Richardsgleichung für den Druck am Tensiometer

Durch Variation von  $\alpha_1$  (linker Teil des Diagramms),  $\alpha_2$  (rechter Teil des Diagramms) und  $n$  konnte die Position der Kanten und die Höhe der Kurve festgelegt werden. Die Kanten wurden eckiger bei großem  $\theta_s$  und rundlicher bei kleinem  $\theta_s$  während  $K_0$  die Höhe des oberen flachen Plateaubereichs regelte. Mit  $\tau$  konnten wir schließlich die dünne Kurve anpassen. An der Asymmetrie zwischen linkem und rechtem Teil des Diagramms ist die Hysterese zu erkennen.

Die beiden Abbildungen 6 und 7 zeigen schließlich die resultierenden hydraulischen Eigenschaften der Bodenprobe, um deren Bestimmung es in diesem Experimentteil von entscheidender Bedeutung ging. Dabei stellen jeweils die dicken Kurven den LM-Fit und die dünnen Kurven den Fit von Hand dar.

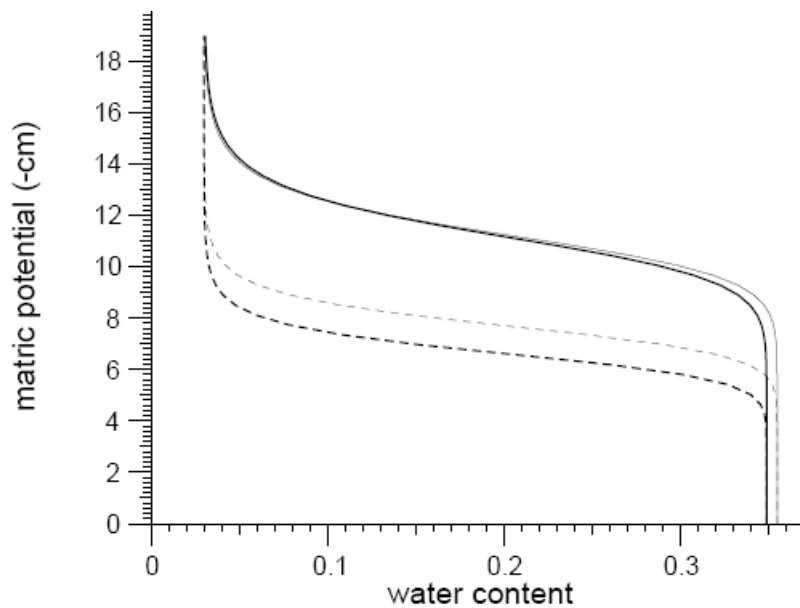


Abbildung 6: Wassercharakteristik

Die Abbildung 6 zeigt die Wassercharakteristik des verwendeten Sandes. An der geringen Abweichung zwischen den dicken und dünnen Linien kann man erkennen, dass  $\alpha_1$ ,  $\alpha_2$  und  $n$  bereits relativ gut von Hand abgeschätzt wurden. Ebenfalls gut zu erkennen ist der Effekt der Hysterese. Dabei ist die durchgezogene Linie die Entwässerung und die gestrichelte Linie die Bewässerung.

Bei der hydraulischen Konduktivitätsfunktion in Abbildung 7 erkennt man, dass bei  $\Psi = 0$  der Levenberg-Marquardt-Fit deutlich über der dünnen Kurve liegt. Dies ist ein Hinweis darauf, dass  $K_0$  von uns zu klein gewählt wurde, wobei unser Ausgangswert auch so schon fast unphysikalisch hoch ist. Anstatt  $K_0$  als Parameter offen zu lassen wäre es wohl besser  $K_0$  mit einem separaten Durchflussexperiment zu messen.

### 2.2.5 Diskussion

Wie aus den Tabellen 2 und 3 ersichtlich ist, führt der Levenberg-Marquardt-Algorithmus zu keiner wesentlichen Verbesserung. Lediglich  $\alpha_2$  und  $K_0$  scheinen wir zunächst zu grob von Hand gewählt zu haben. Der Bereich des Entwässerns wurde unserer Meinung nach besser angenähert, wo hingegen der Bereich des erneuten Bewässerns eine schlechtere Approximation lieferte. Die von uns gewählten Parameter liegen im 95% Konfidenzintervall der Levenberg-Marquardt-Werte. Die gute Übereinstimmung äußert sich auch bei Betrachtung der Wassercharakteristik in Abbildung 6, wo beide Kurven relativ nahe beieinander liegen. Lediglich beim Parameter  $K_0$  lagen wir mit 140.8cm/h recht weit daneben (entsprechendes 95% Konfidenzintervall von 271.0400cm/h bis 272.8623cm/h). Wegen dieser Abweichung

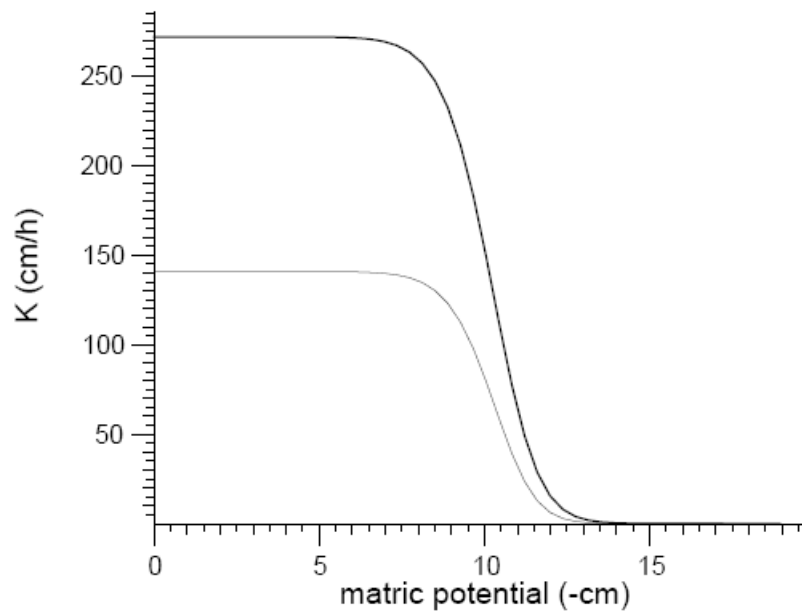


Abbildung 7: hydraulische Konduktivitätsfunktion

stimmen folglich auch die beiden hydraulischen Konduktivitätskurven in Abbildung 7 nicht gut überein.

Mögliche Korrelationen der Parameter untereinander werden durch sogenannte Korrelationskoeffizienten offenbart, die vom Computer nach folgendem Prinzip berechnet werden: Plottet man einen Parameter gegen einen Anderen und die Abhängigkeit ist linear, so ergibt dies den Korrelationskoeffizienten 1. Je weiter die Abhängigkeit von der Linearität abweicht, desto mehr strebt der entsprechende Korrelationskoeffizient gegen null. Zwei Parameter gelten im Allgemeinen als korreliert, wenn der Koeffizient  $\geq 0.95$  ist. Die verschiedenen Koeffizienten wurden uns vom Programm in Form einer 6x6-Matrix (6 Parameter) ausgegeben:

$$\begin{pmatrix} 1 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 \\ +0.36549 & 1 & 0 & 0 & 0 & 0 \\ -0.08132 & +0.03690 & 1 & 0 & 0 & 0 \\ -0.19172 & +0.63441 & +0.10273 & 1 & 0 & 0 \\ -0.57759 & -0.56711 & +0.00417 & -0.04653 & 1 & 0 \\ -0.27193 & -0.89641 & -0.09181 & -0.71898 & +0.26645 & 1 \end{pmatrix} \quad (17)$$

Einige Nichtdiagonal-Korrelationskoeffizienten sind bei uns relativ nahe eins. Dies deutet möglicherweise auf eine Überbestimmung des beschriebenen Systems, d.h. einige Parameter sind mit anderen korreliert und deshalb möglicherweise überflüssig. Es ist daher denkbar, dass ein besseres physikalisches Modell mit weniger Parametern existiert.

## 3 Messung und Parametrisierung des Transports gelöster Stoffe

Wie im ersten Versuchsteil beschrieben, bilden die hydraulischen Eigenschaften poröser Medien zusammen mit der Richardgleichung die Basis für das Modellieren der Dynamik von Flüssigkeiten in porösen Medien. In diesem Versuchsteil soll es nun darum gehen die hydrodynamische Dispersion eines scharfen Lösungspulses durch die Bodenprobe in einem Transportexperiment zu messen und zu parametrisieren.

### 3.1 Theoretische Grundlagen

#### 3.1.1 Konvektions-Dispersions-Modell (CD)

Zunächst stellen wir das Konvektions-Dispersions-Modell (CD: convection-dispersion model) vor. Wir nehmen an, dass gelöste Moleküle hauptsächlich den Stromlinien des heterogenen Geschwindigkeitsfeldes entlang wandern. Durch Diffusion können sie sich allerdings zwischen den Stromlinien bewegen und so ihre Geschwindigkeit ändern. Wir können bei genügend langen Wegstrecken sogar annehmen, dass jedes Molekül alle möglichen Geschwindigkeiten durchläuft. In diesem Fall ist der zentrale Grenzwertsatz anwendbar: Die nach einer Zeit  $\Delta t$  zurückgelegten Wegstrecken  $\Delta z$  der Moleküle folgen einer Gaußverteilung mit dem Mittelwert  $\langle z \rangle = \bar{v} \cdot t$ , wobei  $\bar{v}$  die mittlere Geschwindigkeit des Wassers ist. Der Teilchentransport erfolgt durch Konvektion und diffusive Prozesse gemeinsam mit hydrodynamischer Dispersion. Wir betrachten die konvektive und die dispersive Komponente des Teilchenflusses getrennt:

$$j_T^{\text{conv}} = j_w c_w \quad (18)$$

$$j_T^{\text{disp}} = -D_{\text{eff}} \partial_z c_w \quad (19)$$

Hierbei bezeichnet  $j_w$  den Volumenfluss des Wassers,  $c_w$  die Lösungskonzentration im Wasser und  $D_{\text{eff}}$  den effektiven Diffusionskoeffizienten, der Dispersion und molekulare Diffusion berücksichtigt. (Wir gehen hier davon aus, dass sich die Teilchenkonzentration entlang der horizontalen x- und y-Achse nur geringfügig ändert.) Der Teilchenfluss ergibt sich damit zu:

$$j_T = j_w c_w - D_{\text{eff}} \partial_z c_w \quad (20)$$

Entsprechend der Kontinuitätsgleichung (vgl. Gleichung 1) bekommt man die Massenerhaltung für den gelösten Stoff:

$$\partial_t \theta c_w + \partial_z j_T = 0 \quad (21)$$



Unter Verwendung von  $V := \bar{v} = \frac{J_w}{\theta}$  und dem Dispersionskoeffizienten  $D := \frac{D_{\text{eff}}}{\theta}$  erhalten wir aus den Gleichungen 20 und 21 die Konvektions-Dispersions-Gleichung:

$$\partial_t c_w + V \partial_z c_w - D \partial_z^2 c_w = 0 \quad (22)$$

$V$  und  $D$  sind dabei die freien Parameter des Konvektions-Dispersions-Modells (CDE). Hieraus ergeben sich für die zurückgelegte Wegstrecke  $z$ :

$$\langle z \rangle = Vt \quad (23)$$

$$\sigma_z^2 = 2Dt \quad (24)$$

Analog findet man für die Zeit  $t$ , die die Teilchen für die Wegstrecke  $z$  benötigen:

$$\langle t \rangle = \frac{z}{V} \quad (25)$$

$$\sigma_t^2 = \frac{2Dz}{V^3} \quad (26)$$

Diese Verteilungen sollten im Experiment beim Fluss einer Farblösung (Brilliant Blue) durch die Sand-Bodenprobe gemessen werden.

### 3.1.2 Erweiterung des CD-Modells: Mobil-Immobil-Modell (MIM)

Im Konvektions-Dispersions-Modell (CD) nehmen wir an, dass das gesamte Wasser in der Probe zu gleichen Teilen zum Stofftransport beiträgt. Wie wir wissen, ist dies eine Idealisierung: Nicht-ideale Flüssigkeiten können an Porenwänden unbewegliche Schichten bilden, die sich nicht am Stofftransport beteiligen. Um das zu berücksichtigen, erweitert man das Konvektions-Dispersions-Modell zum Mobil-Immobil-Modell (MIM), in dem man den Wassergehalt  $\theta$  in eine mobile Phase  $\theta_m$  und eine immobile Phase  $\theta_{im}$  aufteilt. Statt  $c_w$  wird jetzt nur noch die Konzentration  $c_m$  im mobilen Anteil des Wassers betrachtet. Zusätzlich gibt es jedoch auch die Möglichkeit, dass gelöste Stoffe von der immobilen in die mobile Phase gelangen und umgekehrt. Die Gleichung 22 wird demzufolge folgendermaßen erweitert:

$$\partial_t c_m + \frac{\theta_{im}}{\theta_m} \partial_t c_{im} + V \partial_z c_m - D \partial_z^2 c_m = 0 \quad (27)$$

Um den Austausch zwischen den Phasen zu beschreiben, führt man den Parameter  $\omega$  ein, der nicht-negative reelle Werte annehmen kann:

$$\partial_t c_{im} = -\omega(c_{im} - c_m) \quad (28)$$

Die mittlere Aufenthaltszeit der Teilchen in der immobilen Phase ist proportional zu einem neuen Parameter  $R$ , der Verzögerungsfaktor genannt wird:

$$R = \frac{\theta}{\theta_m} = 1 + \frac{\theta_{im}}{\theta_m} \quad (29)$$

Im MIM-Modell stehen uns also zur Diffusionskonstanten  $D$  und zur mittleren Geschwindigkeit  $V$  die zwei zusätzlichen Parameter  $\omega$  und  $R$  zur Verfügung.

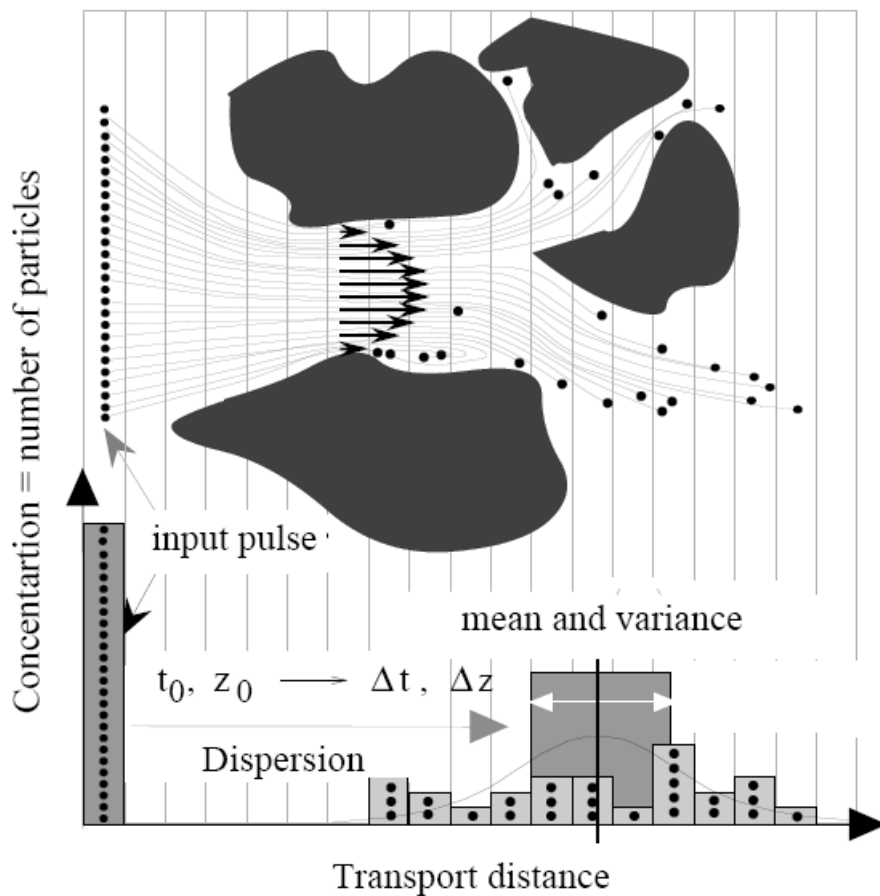


Abbildung 8: Dispersion eines Lösungspulses durch ein heterogenes Geschwindigkeitsfeld

## 3.2 Durchführung Teil 2 - Durchflussexperiment

Dieser Experimententeil sollte die Gültigkeit der beiden vorgestellten Modelle zum Lösungstransport durch eine poröse Probe testen. Der experimentelle Aufbau ähnelt dem in Teil 1. Statt dem blau umrandeten Teil, wurde jetzt der grün umrandete Teil verwendet (vgl. Abbildung 1). Die Sand-Bodenprobe war dabei dieselbe.

### 3.2.1 Grundprinzip der Messung

Über einen Sprinkler wurde zunächst gleichmäßig Wasser und im stationären Zustand dann eine Farblösung (Brilliant Blue) über die Oberfläche der Probe gegeben. Dabei sollte ein Durchfluss von 2cm/h mit einheitlichen konstantem Matrixpotenzial erzeugt werden. Der Durchfluss wurde dabei mit Hilfe einer Pumpe realisiert. Dabei sollte das Wasser in der Probe während des Experimentes etwa fünf Mal ausgetauscht werden. Die durch die Probe gelaufene Lösung wurde in einem Reservoir gesammelt und in regelmäßigen Abstän-

den in Reagenzgläser abgefüllt. Dadurch konnte die Farbkonzentration des Durchflusses in Abhängigkeit von der Zeit bestimmt werden und man erhält eine sogenannte Tracer-Durchbruchskurve. Dazu wurden insgesamt 91 Lösungen aus verschiedenen Reagenzgläsern spektrometrisch untersucht.

### 3.2.2 Aufbau und Vorbereitung der Messung

In den folgenden Schritten haben wir das Experiment aufgebaut und vorbereitet.

1. Hähne M von Position 1 auf Position 2 gestellt und Wasser unterhalb der Keramikplatte entfernt.
2. Anschluss der Wasserpumpe und der Magnetventile an den Computer  
Die jeweiligen verwendeten Anschlüsse am Computer haben wir dabei in die Konfigurationsdatei *instruments.dat* eingetragen.
3. Kalibration der Wasserpumpe mittels dem Programm *pkalib*.
4. Bestimmung des benötigten Matrix-Potenzials  
Um einen Durchfluss von 2cm/h zu erreichen muss aus dem Versuchsteil 1 aus der Abbildung 7 das Matrix-Potenzial für Konduktivität von 2cm/h abgelesen werden. Wir laßen  $\Psi_m = -13\text{cmWC}$  ab. Dieses Potenzial haben wir in die Konfigurationsdatei *dynamics.dat* eingetragen.
5. Berechnung der Messdauer  $t_{mess}$   
Mit der Oberfläche  $A = 206\text{cm}^2$  und der Höhe  $h = 10\text{cm}$  der Probe, einem Volumenstrom  $j_w = 2\text{cm/h} \cdot A = 412\text{ml/h}$ , dem Matrixpotenzial  $\Psi_m = -13\text{cmWC}$ , dem Wassergehalt  $\theta(\Psi_m) \approx 9\%$  (vgl. Abbildung 6) und dass das Wasser 5 Mal ausgetauscht werden soll, ergibt sich für die Messdauer  $t_{mess}$  der Messung:

$$V_w = 5 \cdot A \cdot h \cdot \theta(\Psi_m) = 927\text{cm}^3 \quad (30)$$

$$t_{mess} = \frac{V_w}{j_w} = 2.25\text{h} \quad (31)$$

6. Berechnung der Fülldauer pro Reagenzglas des Fraktiometers  
Das Fraktiometer besaß 95 Reagenzgläser. Somit ergab sich eine Fülldauer von  $t_F = t_{mess}/95 = 85\text{s}$ .
7. Probe mit reinem Wasser fluten, um ein konstantes Fließfeld zu erzeugen.
8. Herstellen der Brilliant-Blue-Lösung  
Wir haben eine Brilliant-Blue-Lösung mit einer Konzentration von  $\approx 20\text{mg/l}$  hergestellt. Die spätere Konzentrationsmessung  $19.5097 \text{ mg/l}$ .

### 3.2.3 Start der Nachtmessung

Nachdem sich ein konstantes Fließverhalten ausgebildet hatte, starteten wir die Messung mit dem Brilliant-Blue. Leider wurden die ersten vier Reagenzgläser durch ein experimentelles Missgeschick unsererseits nicht gefüllt und somit fehlen uns  $4 \cdot 85\text{s} = 5.7\text{min}$  Messdaten. Die ersten vier Reagenzglaskonzentrationen haben wir mit reinem Wasser gemessen.

### 3.2.4 Auswertung

Aus den gemessenen Konzentrationen (vgl. Abbildungen 9 und 10) erhält man  $\langle t \rangle \approx 40\text{min}$  und  $\sigma_t^2 \approx 23.5\text{min}^2$ . Daraus lassen sich über die Beziehungen 25 und 26 die Parameter  $V$  und  $D$  bestimmen. Man erhält:

$$V = \frac{z}{\langle t \rangle} = \frac{10\text{cm}}{40\text{min}} = 0.25 \frac{\text{cm}}{\text{min}} \quad (32)$$

$$D = \frac{\sigma_t^2 \cdot V^3}{2 \cdot z} = \frac{23.5^2 \text{min}^2 \cdot 0.25^3 \text{cm}^3 / \text{min}^3}{2 \cdot 10\text{cm}} = 0.43 \frac{\text{cm}^2}{\text{min}} \quad (33)$$

Für diese Parameter wurde die Konvektions-Dispersions-Gleichung gelöst und damit eine theoretische Durchbruchkurve berechnet, die wir mit dem gemessenen Verlauf verglichen.

Durch Variation der beiden Parameter konnten wir den theoretischen Verlauf weiter an den gemessenen angleichen, das Vorgehen war analog zum inversen Modellieren im ersten Teil des Versuchs. Anschließend ließen wir wieder einen optimalen Fit über den Levenberg-Marquardt-Algorithmus berechnen:

$$V_{\text{LM,CD}} = (0.24084 \pm 0.00019) \frac{\text{cm}}{\text{min}} \quad (34)$$

$$D_{\text{LM,CD}} = (0.4256 \pm 0.0017) \frac{\text{cm}^2}{\text{min}} \quad (35)$$

$$\text{Korrelationsmatrix} : \begin{pmatrix} 1 & 0 \\ -0.1747 & 1 \end{pmatrix} \quad (36)$$

Alle drei Verläufe zeigt das Diagramm in Abbildung 9.

Für das MI-Modell wurde das gleiche Verfahren gewählt: Wir versuchten zunächst durch Variation der vier Parameter den Verlauf möglichst gut anzunähern und wählten schließlich folgende Startparameter für den späteren Levenberg-Marquardt-Algorithmus:

$$V = 0.26 \frac{\text{cm}}{\text{min}} \quad (37)$$

$$D = 0.28 \frac{\text{cm}^2}{\text{min}} \quad (38)$$

$$R = 2.0 \quad (39)$$

$$\omega = 0.0018 \quad (40)$$

Die obigen Parameter haben wir als Startwerte für den Levenberg-Marquardt-Algorithmus verwendet, der schließlich zu folgendem Ergebnis kam:

$$V_{\text{LM,MIM}} = (0.2981 \pm 0.0011) \frac{\text{cm}}{\text{min}} \quad (41)$$

$$D_{\text{LM,MIM}} = (0.2164 \pm 0.0027) \frac{\text{cm}^2}{\text{min}} \quad (42)$$

$$R_{\text{LM,MIM}} = (1.313 \pm 0.004) \quad (43)$$

$$\omega_{\text{LM,MIM}} = (0.0268 \pm 0.0006) \quad (44)$$

$$\text{Korrelationsmatrix} : \begin{pmatrix} 1 & 0 & 0 & 0 \\ -0.8519 & 1 & 0 & 0 \\ +0.9136 & -0.8480 & 1 & 0 \\ +0.8583 & -0.6678 & +0.6355 & 1 \end{pmatrix} \quad (45)$$

Alle drei Verläufe zeigt das Diagramm in [Abbildung 10](#).

### 3.2.5 Diskussion

Wir wollten mit dem Experiment überprüfen, inwiefern CD- und MI-Modell zur Beschreibung des Stofftransports durch eine poröse Bodenprobe geeignet sind. Es wurden jeweils zwei Fits erstellt: Die Parameter wurden zunächst von Hand angepasst und dann über einen Algorithmus weiter verbessert. Eine Betrachtung der beiden Diagramme sollte nun Aufschluss darüber bringen, welche Methode die geeignetere ist. In [Abbildung 9](#) ist sichtbar, dass die beiden theoretischen Verläufe zum Ende hin über der tatsächlichen Konzentration liegen. Die Konzentration erreichte ihr Maximum also langsamer als vom KD-Modell vorausgesagt. Dies ist einer der Nachteile des KD-Modells gegenüber dem MI-Modell, in dem berücksichtigt wird, dass sich die Lösungsmoleküle teilweise lange in der immobilen Phase des Wassers aufhalten können und deshalb zusätzlich verzögert werden.

Die Diagramme eignen sich nicht zu einem eindeutigen Nachweis, aber tatsächlich scheint das MI-Modell sehr viel bessere Voraussagen zu liefern, als das CD-Modell, da in [Abbildung 10](#) der LM-Fit sehr genau die Konzentrationen fittet. Die Abweichungen des Hand-Fits sind natürlich auf mangelhafte Anpassung zurückzuführen. Per Hand konnte der Verlauf im CD-Modell zu Beginn zwar recht gut angepasst werden, doch hatte dies allerdings noch stärkere Abweichungen zum Ende des Experiments hin zur Folge.

Die kleinen, an die [Abbildungen 9](#) und [10](#) angefügten Graphen geben Auskunft darüber, wie stark der Einfluss eines Parameters auf den theoretischen Konzentrationsverlauf ist. Aus dem Verlauf von  $\partial_D C$  beispielsweise kann man qualitativ erkennen, dass  $D$  die Varianz der Durchlaufzeiten einzelner Lösungsmoleküle steuert: Bei großem  $D$  wird der Anstieg flacher, bei sehr kleinem  $D$  nähert sich der Verlauf einer Stufenfunktion.  $V$  reguliert dagegen die Lage der Kurve: Größere  $V$  verschieben sie zu kleineren Zeiten hin. Die Fitparameter für die beiden Modelle wurden zusätzlich auf lineare Zusammenhänge untereinander überprüft.

Dabei konnte keine solche Korrelation festgestellt werden (vgl. Korrelationsmatrizen). Im Experiment konnten wir zeigen, dass das MI-Modell den Stofftransport durch unsere Probe besser beschreibt als das CD-Modell. Beide Modelle beschreiben den Verlauf jedoch nicht exakt, leichte Abweichungen konnten nicht vermieden werden. Ob dies generell zutrifft, ob also die Notwendigkeit besteht, ein weiteres, noch besser angepasstes Modell zu verwenden, kann auf der Grundlage dieses einzelnen Versuches allerdings nicht beurteilt werden. Immerhin konnten Parameter für das MI-Modell gefunden werden, die unsere Probe für Anwendungen ausreichend genau beschreiben: Möchte man beispielsweise wissen, ab wann ein bestimmter Bereich im Boden nachweisbare Mengen eines ausgetretenen Giftstoffes enthält, oder ab wann dieser Giftstoff nicht mehr nachweisbar sein wird, so wird wohl hauptsächlich die Exaktheit am Anfang und am Ende der gemessenen Verläufe wichtig sein. Diese kann in unserem Fall mit dem MI-Modell erreicht werden.

## 4 Zusammenfassung

In diesem Experiment konnten die hydrodynamischen Eigenschaften einer Sand-Bodenprobe durch inverses Modellieren bestimmt werden. Zudem konnte eine Konzentrationsdurchbruchkurve für eine Brilliant Blue-Lösung aufgenommen und mit zwei theoretischen Modellen (CD- und MI-Modell) beschrieben werden. Wobei das MI-Modell sehr viel bessere Vorhersagen lieferte als das CD-Modell, da es die Immobilität der Lösung mit berücksichtigt. Dieses Experiment kann also als erfolgreiches weiteres Indiz für die mögliche Richtigkeit des MI-Modell gelten.

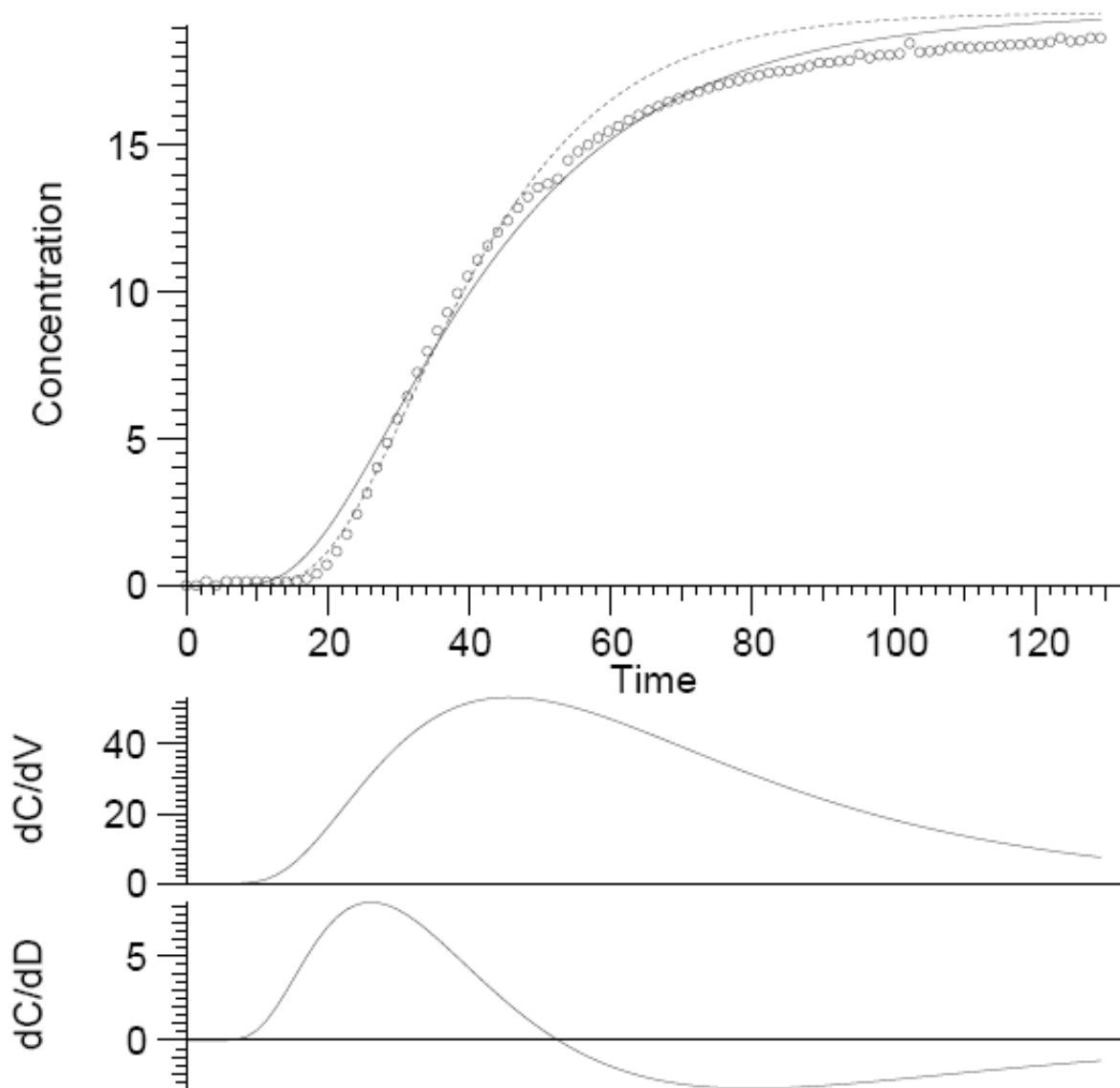


Abbildung 9: **CD-Modell:** Die Durchbruchkurve für die Konzentration in mg/l von Brilliant Blue in Abhängigkeit von der Zeit in Minuten. Gestrichelte Kurve: Fit von Hand; durchgezogene Kurve: Levenberg-Marquardt-Fit. Die unteren zwei Diagramme zeigen die Abhängigkeit des Fits von den jeweiligen Parametern. Für die Einheiten gilt:  $[\partial_V C] = \frac{\text{mg} \cdot \text{min}}{\text{l} \cdot \text{cm}}$ ,  $[\partial_D C] = \frac{\text{mg} \cdot \text{min}}{\text{l} \cdot \text{cm}^2}$

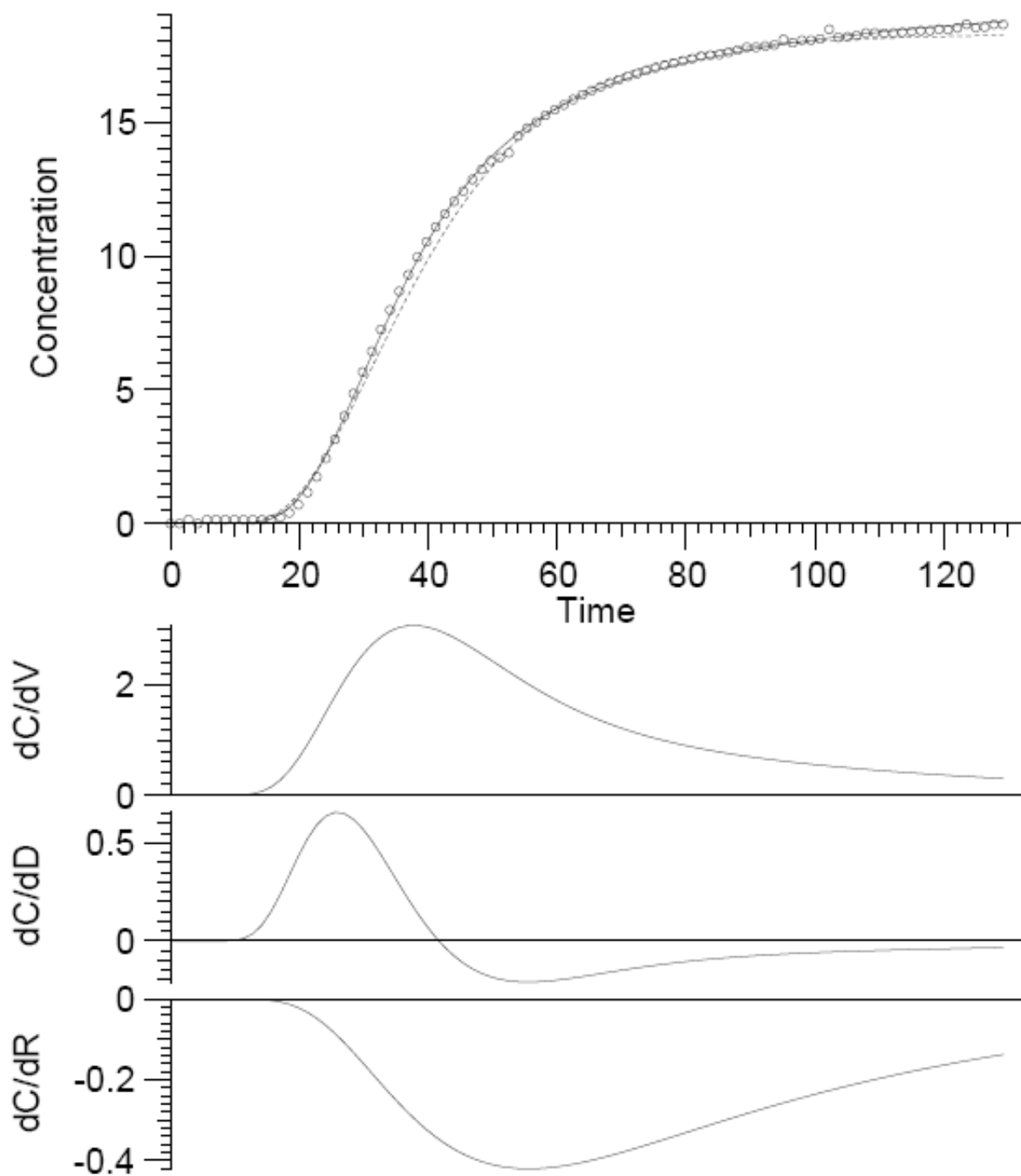


Abbildung 10: **MI-Modell:** Die Durchbruchskurve für die Konzentration in mg/l von Brilliant Blue in Abhängigkeit von der Zeit in Minuten. Gestrichelte Kurve: Fit von Hand; durchgezogene Kurve: Levenberg-Marquardt-Fit. Die unteren zwei Diagramme zeigen die Abhängigkeit des Fits von den jeweiligen Parametern. Für die Einheiten gilt:  $[\partial_V C] = \frac{\text{mg} \cdot \text{min}}{\text{l} \cdot \text{cm}}$ ,  $[\partial_D C] = \frac{\text{mg} \cdot \text{min}}{\text{l} \cdot \text{cm}^2}$ ,  $[\partial_R C] = \frac{\text{mg}}{\text{l}}$