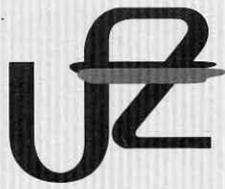


AUSLEHNERPLAR

UFZ-Umweltforschungszentrum  
Leipzig-Halle GmbH  
Zentralbibliothek  
Perimeterstraße 15  
04318 Leipzig



# *UFZ-Bericht*

UFZ-Bericht • UFZ-Bericht • UFZ-Bericht • UFZ-Bericht

Umweltforschungszentrum Leipzig-Halle GmbH

Nr. 1/1997

---

**Dynamik von Wasser  
und Schadstoffen im Boden:  
Diskrete Simulationsmethoden**

---

Hans Vollmayr

UFZ-Umweltforschungszentrum  
Leipzig-Halle GmbH  
Sektion Chemische Ökotoxikologie

UFZ-Bericht 1/1997

ISSN 0948-9452

# **Dynamik von Wasser und Schadstoffen im Boden: Diskrete Simulationsmethoden**

Abschlußbericht zum Postdoktorandenprojekt

## **Versickerungsverhalten von Chemikalien**

Autor:

Dr. Hans Vollmayr

Sektion Chemische Ökotoxikologie  
UFZ-Umweltforschungszentrum  
Leipzig-Halle GmbH  
Permoserstraße 15  
D-04318 Leipzig

# Inhaltsverzeichnis

<b>1</b>	<b>Einführung</b>	<b>3</b>
<b>2</b>	<b>Wassertransport: Gittergasmodell</b>	<b>4</b>
2.1	Mikroskopischer Algorithmus . . . . .	4
2.2	Makroskopische Flußgleichung . . . . .	7
2.3	Kalibrierung . . . . .	8
2.4	Beispiel: Vergleich mit SWACROP . . . . .	9
2.5	Alternative Sprungregeln . . . . .	11
<b>3</b>	<b>Schadstoffdynamik: Particle Tracking</b>	<b>12</b>
3.1	Algorithmus . . . . .	12
3.2	Kalibrierung . . . . .	14
3.2.1	Abbaurrate . . . . .	14
3.2.2	Sorptionsraten . . . . .	14
3.3	Beispiel: Vergleich mit PESTLA . . . . .	15
<b>4</b>	<b>Anwendungen</b>	<b>15</b>
4.1	Inhomogener Boden . . . . .	16
4.2	Unebene Bodenoberfläche . . . . .	19
4.3	Konzentrierte Kontamination . . . . .	19
<b>5</b>	<b>Bodenmodelle</b>	<b>23</b>
5.1	Grenzen der Prognose . . . . .	23
5.2	Diskret oder kontinuierlich? . . . . .	25
<b>6</b>	<b>Ausblick</b>	<b>26</b>

6.1	Gittergase . . . . .	26
6.2	Bodenwasser: Ersatzdynamiken . . . . .	27
7	Danksagungen	28
8	Literaturverzeichnis	28

# 1 Einführung

Nach der Ausbringung werden Pflanzenschutzmittel vom Regen in den Boden eingewaschen. Dies kann erwünscht sein, z.B. wenn Nematoden im Wurzelbereich bekämpft werden sollen, oder unerwünscht, wenn sich das Pestizid gegen Schädlinge oder Krankheiten im Blattbereich der zu schützenden Pflanze richtet. In beiden Fällen ist ein Verständnis des Transports im Boden notwendig, um die Exposition gegenüber Zielorganismen und Nichtzielorganismen zu beurteilen. Nach dem Eintrag gelangt das Pestizid in die ungesättigte Zone, in der das Wasser den Porenraum nur teilweise erfüllt. Durch die Geschwindigkeit, mit der der Schadstoff die ungesättigte Zone durchquert und die dort ablaufenden Prozesse wird bestimmt, ob eine Gefährdung des Grundwassers gegeben ist.

Schadstoffe im Boden sind einer vielfältigen Dynamik ausgesetzt, von der wir einige wesentliche Aspekte modelliert haben.

Der Transport wird hauptsächlich durch die Bewegung des Wassers im Porenraum beeinflusst. Dabei bewegt sich nicht der gesamte Schadstoff mit dem Wasser sondern nur der Teil, der nicht an der Feststoffmatrix adsorbiert ist. Adsorption und Desorption stehen in einem Gleichgewicht, das vom Pestizid und den Eigenschaften des Bodens stark abhängt. Starke räumliche Schwankungen der Pestizid-Konzentration werden durch Diffusion und Dispersion aufgeweicht.

Die lokale Konzentration des Schadstoffes nimmt ab durch chemische Umwandlung und biologischen Abbau. In dem unten besprochenen Modell werden beide Prozesse gemeinsam behandelt, da sie den gleichen physikalischen Effekt haben, die Konzentration zu verringern.

Von der Modellierung vorläufig ausgenommen haben wir gefrorenen Boden, Oberflächenablauf, die Verfolgung von Metaboliten und die Gasphase der ungesättigten Zone.

Für die Risiko-Abschätzung von Pestiziden existieren verschiedene Programme, die den Transport des Schadstoffes in einer Dimension (senkrecht) simulieren (PELMO, PESTLA, PLM, SESOIL, PRZM, CALF, etc.). Einige dieser Programme sind frei oder relativ preiswert (z.B. etwa DM 500,- für PESTLA) erhältlich und laufen in kurzer Zeit auf PCs (z.B. Intel 486, 66MHz, eine Minute Rechenzeit pro simuliertem Jahr). Unsere Intention war in erster Linie, über eine eindimensionale Modellierung hinauszugehen, um Effekte zu studieren, die durch laterale Inhomogenität des Bodens, gekrümmte Oberflächen, ungleichmäßigen Pestizid-auftrag und ähnliches zustande kommen.

Unter den in der modernen Landwirtschaft üblichen Verhältnissen sind die Pestizid-Konzentrationen so gering, daß die Chemikalie den Wassertransport kaum beeinflusst. Dadurch kann die Wasserbewegung unabhängig vom Pestizid berech-

net werden. Die Ergebnisse einer solchen Simulation können dann für mehrere, verschiedene Szenarien eines Schadstoffeintrages verwendet werden.

Wassertransport und Pestizidbewegung lassen sich durch partielle Differentialgleichungen beschreiben, für die erprobte, numerische Lösungsmethoden zu Verfügung stehen (BEAR und VERRUIJT 1987). Wir haben beide Dynamiken mit *diskreten* Systemen beschrieben: die kontinuierlichen Größen Wassergehalt und Pestizidkonzentration werden durch „Teilchen“ ersetzt. Ein Wasserteilchen repräsentiert z.B. 20 Milliliter Wasser. Diese Art der Modellierung hat uns zur Entwicklung eines neuen *Gittergas*-Modells (VOLLMAYR u.a. 1996) für das Bodenwasser geführt. Gittergase werden seit etwa 10 Jahren für die Simulation freier Fluide verwendet [CLOUQUEUR und D'HUMIÈRES 1987, DOOLEN 1989, 1991, FRISCH u.a. 1986, 1987]. Es gibt auch Ansätze zur Modellierung von Wasserbewegungen im Boden [BALASUBRAMANIAN u.a. 1987, PAPATZACOS 1988]. Das Pestizid wird mit der aus der Literatur bekannten *Particle Tracking* Methode beschrieben [SEMRA u.a. 1993, UFFINK 1983]. Vor- und Nachteile von beiden Methoden diskutiere ich weiter unten im Abschnitt „Bodenmodelle“.

## 2 Wassertransport: Gittergasmodell

Die Bewegung des Wassers im Boden läßt sich durch die Darcy Gleichung [DARCY 1856] beschreiben,

$$\mathbf{j} = -\kappa \nabla h. \quad (1)$$

Hierbei bezeichnet  $\mathbf{j}$  den Fluß [cm/s], der als Wassergehalt  $\theta$  mal Geschwindigkeit  $\mathbf{v}$  definiert ist,  $\mathbf{j} = \theta \mathbf{v}$ .  $h$  ist die Saugspannung (auch Druck oder Potential genannt) [cm] und  $\kappa$  die Permeabilität [cm/s]. Sowohl Permeabilität als auch Saugspannung hängen stark vom dimensionslosen Wassergehalt  $\theta$  ab. Die Abhängigkeiten  $\kappa(\theta)$  und  $h(\theta)$  werden von den Eigenschaften des Bodens, und zwar im wesentlichen durch die Korngrößenverteilung bestimmt. Beide Funktionen variieren in der Regel räumlich. Ein Stein hat z.B.  $\kappa = 0$ . Abb. 1 zeigt einige Beispiele.

### 2.1 Mikroskopischer Algorithmus

Wir haben den Wassertransport mit einem Gittergas simuliert, das jetzt vorgestellt werden soll. Dazu verwende ich ein zweidimensionales Modell, man kann aber alle Argumente und Rechnungen einfach auf drei (oder mehr) Dimensionen verallgemeinern.

Der Boden wird durch ein Quadratgitter repräsentiert, an dessen Knoten sich die *Wasserteilchen* befinden (Abb. 2). Jeder Knoten hält bis zu vier Teilchen. Diese hüpfen von einem Knoten zum nächsten durch *gerichtete Kanäle*, wobei sie

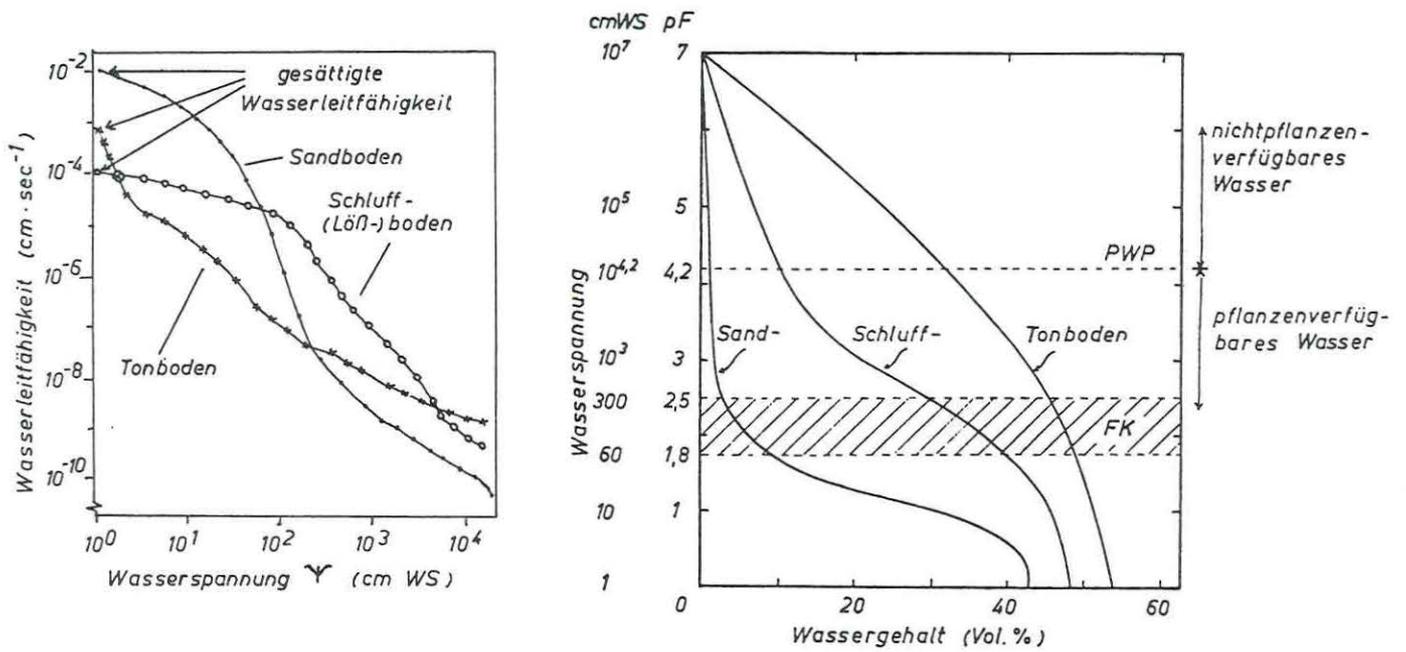


Abbildung 1: Hydraulische Funktionen Permeabilität und Saugspannung für drei verschiedene Bodentypen. Aus [Scheffer und Schachtschabel, 1979]

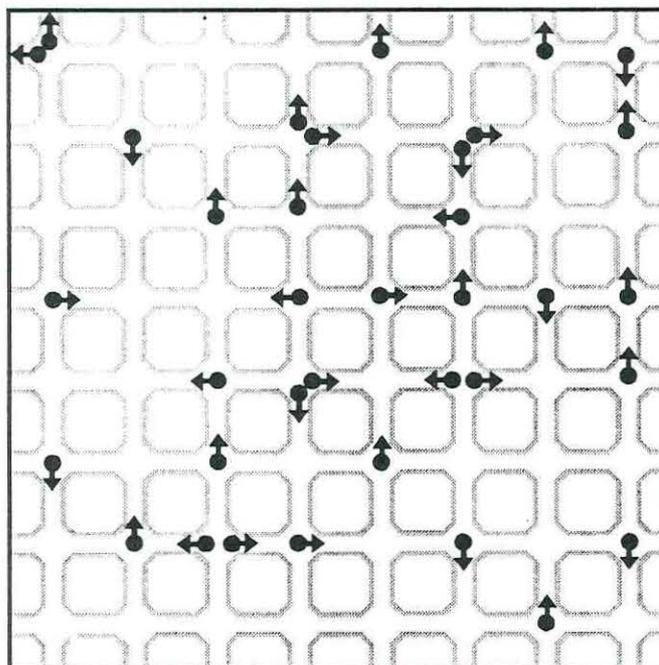


Abbildung 2: Quadratgitter mit Wasserteilchen.

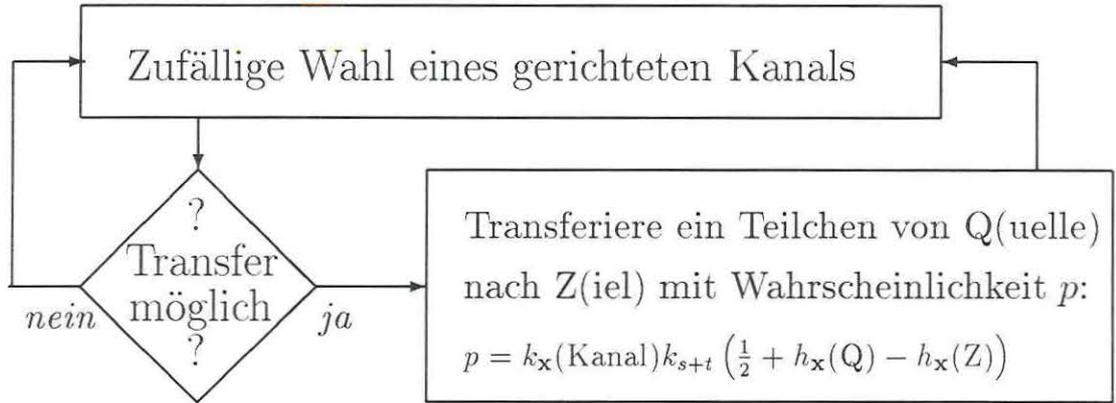


Abbildung 3: Flußdiagramm der innersten Iterationsschleife des Gittergas-Algorithmus.

stochastischen Regeln folgen. „Gerichtet“ bedeutet, daß zwei benachbarte Knoten A und B durch einen Kanal von A nach B und einen von B nach A verbunden sind.

Die Dynamik besteht aus einer ständigen Iteration der in Abb. 3 gezeigten Schleife. Zuerst wird ein gerichteter Kanal aus dem gesamten System zufällig ausgewählt. Wir nehmen an, daß der gewählte Kanal von Knoten Q (Quelle) nach Knoten Z (Ziel) führt. Durch diesen Kanal soll nun ein Teilchen transportiert werden. Dazu wird überprüft, ob ein Teilchentransfer überhaupt möglich ist, d.h. ob sich in Q mindestens ein Teilchen befindet und ob Z nicht durch vier Teilchen schon völlig aufgefüllt ist. Wenn der Transfer möglich ist, findet er mit der Wahrscheinlichkeit  $p$  statt,

$$p = k_{\mathbf{x}}(\text{Kanal}) k_{s+t} \left( \frac{1}{2} + h_{\mathbf{x}}(\text{Q}) - h_{\mathbf{x}}(\text{Z}) \right). \quad (2)$$

Vor der eigentlichen Simulation kann der Benutzer jedem Kanal mit  $k_{\mathbf{x}}(\text{Kanal})$  eine maximale Permeabilität zuordnen. Das folgt der Vorstellung, daß die Permeabilität räumlich als Ganzes (unabhängig vom Wassergehalt  $\theta$ ) variiert, also  $\kappa = k_{\mathbf{x}}(\mathbf{x}) k_{\theta}(\theta)$ . Die Saugspannung wird ebenfalls als räumlich variabel angesehen. Der Benutzer gibt hier  $h_{\mathbf{x}}(\mathbf{x})$  vor, das effektive Potential ist dann  $h = h_{\mathbf{x}}(\mathbf{x}) + h_{\theta}(\theta)$ . (Die Funktionen  $k_{\theta}(\theta)$  und  $h_{\theta}(\theta)$  erscheinen als Konsequenz des mikroskopischen Algorithmus; sie werden weiter unten diskutiert.) Man beachte, daß die Saugspannung  $h_{\mathbf{x}}(\mathbf{x})$  an den Gitterknoten verwendet wird, z.B. bei  $\mathbf{x} = \text{Q}$ , während die Permeabilität auf die Kanäle übertragen wird. Die Konstanten  $k_{s+t}$ ,  $s + t = 1, 2, \dots, 7$ , sind ebenfalls Benutzer-definiert und werden unten erläutert.

Alle Größen sind an dieser Stelle dimensionslos. Da  $p$  eine Wahrscheinlichkeit sein soll, muß  $0 \leq p \leq 1$  sichergestellt werden. Dies wird erreicht durch  $0 \leq k_{s+t}, k_{\mathbf{x}}(\mathbf{x}) \leq 1$  und  $0 \leq h_{\mathbf{x}}(\mathbf{x}) \leq 1/2$ .

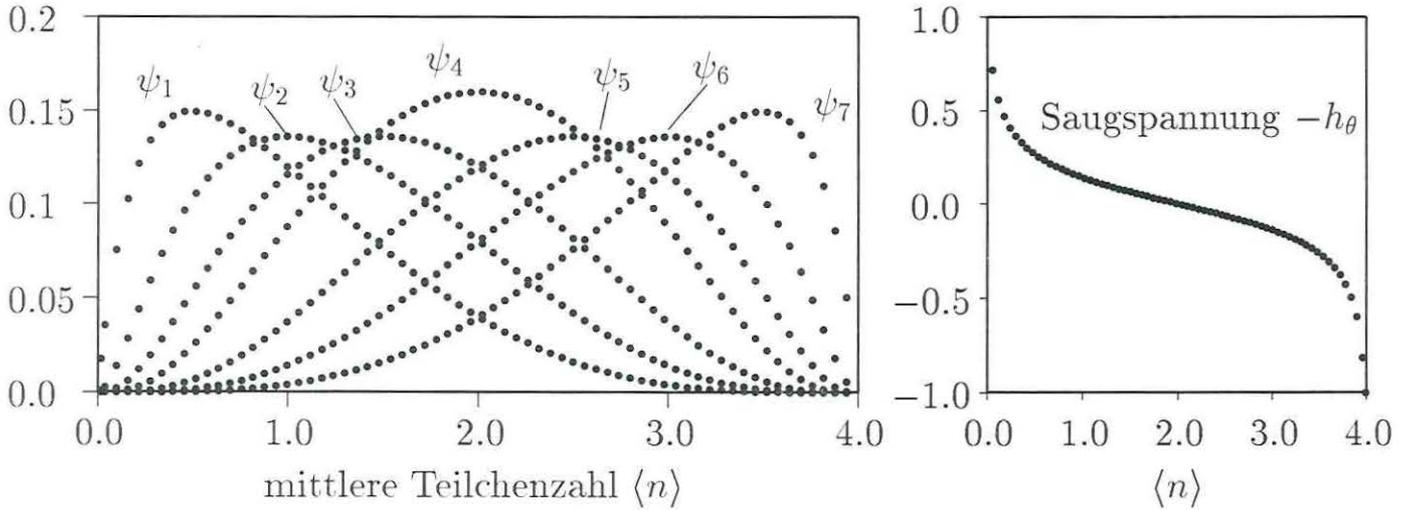


Abbildung 4: Die Permeabilität  $k_\theta(\theta)$  ist eine Superposition der links dargestellten Funktionen  $\psi_{s+t}$ . Rechts ist die Saugspannung  $h_\theta(\theta)$  gezeigt.

Wenn die Iterationsschleife sooft durchlaufen wurde, wie sich gerichtete Kanäle im System befinden, d.h. wenn jeder gerichtete Kanal im Schnitt 1 Mal ausgewählt wurde, ist ein „Zeitschritt“ vollendet<sup>1</sup>.

## 2.2 Makroskopische Flußgleichung

Mittelt man die Bewegungen der Teilchen räumlich (über  $8 \times 8$  Gitterpunkte = 1 „Zelle“) und zeitlich (über 256 Zeitschritte = 1 „Zeitintervall“), so erhält man quasikontinuierliche Werte für die Teilchenzahl pro Knoten  $\langle n \rangle$  und den (Teilchen-)Fluß  $\mathbf{j}$ . Durch das Summieren der Besetzungszahlen von vielen Knoten mitteln sich dabei die stochastischen Fluktuationen heraus.  $\langle n \rangle$  hängt mit dem Wassergehalt  $\theta$  über  $\theta = (\langle n \rangle / 4)\theta_s$  zusammen ( $\theta_s$  ist der Wassergehalt bei Sättigung). Die mikroskopischen Regeln (Abb. 3) führen zu einer Dynamik, die im Mittel der Gleichung

$$\mathbf{j} = -2k_{\mathbf{x}}(\mathbf{x}) \left( \sum_{(s+t)=1}^7 k_{s+t} \psi_{s+t}(\theta) \right) \nabla (h_{\mathbf{x}}(\mathbf{x}) + h_\theta(\theta)) \quad (3)$$

folgt. Die Funktionen  $\psi_{s+t}(\langle n \rangle)$  und  $h_\theta(\theta)$  können Abb. 4 entnommen werden. Sie sind im Anhang von [VOLLMAYR u.a. 1996] definiert.

<sup>1</sup>Die Notation kommt aus der Monte Carlo Simulation von Phasenübergängen, bei der ein „Monte Carlo Schritt“ analog definiert ist.

## 2.3 Kalibrierung

Anhand von Gl. (3) kann der Einfluß der Benutzer-definierten Parameter  $k_{s+t}$  und Funktionen  $k_{\mathbf{x}}(\mathbf{x})$  und  $h_{\mathbf{x}}(\mathbf{x})$  auf die Flußgleichung diskutiert werden. Die Gleichung läßt sich schreiben als

$$\mathbf{j} = -k_{\mathbf{x}}(\mathbf{x})k_{\theta}(\theta)\nabla(h_{\mathbf{x}}(\mathbf{x}) + h_{\theta}(\theta)) \quad (4)$$

wobei

$$k_{\theta}(\theta) = 2 \sum_{(s+t)=1}^7 k_{s+t}\psi_{s+t}(\theta). \quad (5)$$

Das bedeutet,  $k_{\theta}$  ist eine lineare Superposition der Funktionen  $\psi_{s+t}$  und der Benutzer bestimmt die Koeffizienten  $k_{s+t}$ .

Wir haben oben die naheliegende Interpretation der Teilchendichte  $\langle n \rangle$  gewählt,  $\theta = (\langle n \rangle / 4)\theta_s$ , so daß ein vollbesetztes Gitter mit 4 Teilchen pro Knoten dem gesättigten Boden entspricht und  $\langle n \rangle = 0$  völlig trockenen Boden beschreibt. Wir können das Intervall für  $\langle n \rangle$ ,  $[0 \dots 4]$ , auch auf ein anderes  $\theta$ -Intervall als  $[0 \dots \theta_s]$  legen, z.B. auf  $[0.2 \dots 3.4]$ . Dann liegt allerdings der Wassergehalt nicht unbedingt immer im sinnvollen Bereich,  $\theta < 0$  oder  $\theta > \theta_s$  wird durch die Regeln in Abb. 3, die die Besetzungszahlen zwischen 0 und 4 halten, nicht mehr ausgeschlossen. In dem Beispiel ist sogar  $\theta > 1$  möglich. Meist werden jedoch  $\theta$  und  $\langle n \rangle$  ohnehin nicht das volle Intervall ausschöpfen sondern im Mittel durch den „Teilchendruck“  $h_{\theta}$  in einem sinnvollen Bereich liegen.

Schließlich kann der Benutzer noch die Längenskala (Länge eines Kanals) und die Zeitkonstante festlegen.

Ich gehe hier auf die Möglichkeiten der Kalibrierung ausführlich ein, weil sie die Gittergas Methode begrenzen. Im Gegensatz zu einer direkten Diskretisierung der Darcy-Gleichung mit einer Finite Differenzen Methode kann man beim Gittergas die hydraulischen Funktionen  $\kappa(\theta, \mathbf{x})$  und  $h(\theta, \mathbf{x})$  nicht beliebig vorwählen. Im nächsten Abschnitt stelle ich eine beispielhafte Simulation vor, die zeigt, daß realistische hydraulische Funktionen recht gut angepaßt werden können. Außerdem wird deutlich werden, daß sich die Anpassungsfehler kaum auf die Ergebnisse auswirken.

Von einer Veränderung des Algorithmus ist im allgemeinen eine — unter Umständen drastische — Veränderung der Kalibriermöglichkeiten des Benutzers zu erwarten. Weiter unten bespreche ich andere Algorithmen, die wir untersucht haben.

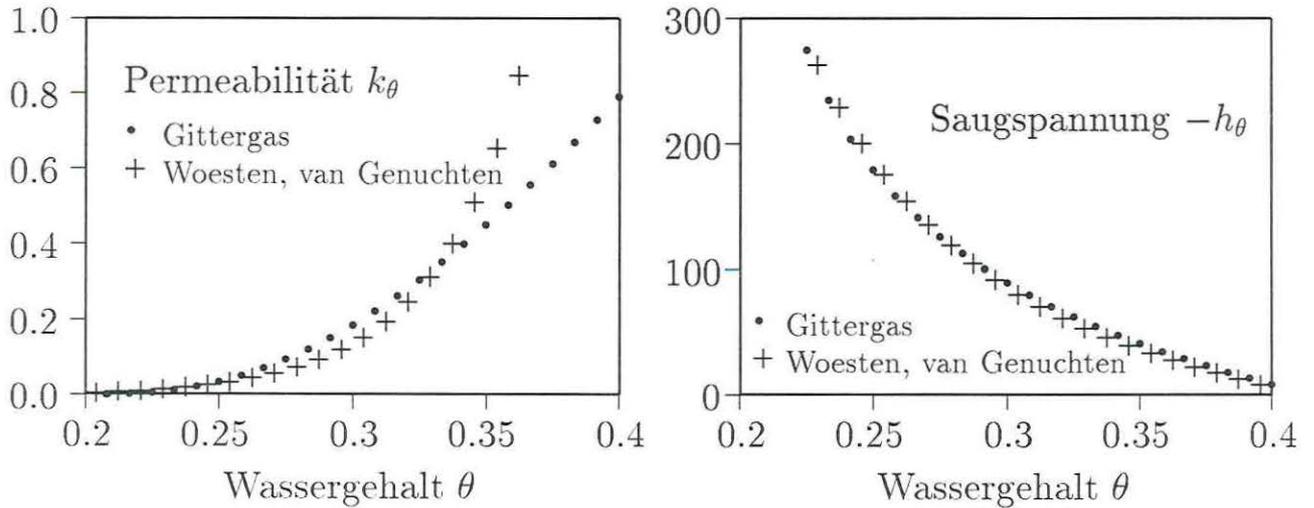


Abbildung 5: Permeabilität  $k_\theta(\theta)$  (links) und Saugspannung  $h_\theta(\theta)$  für einen Referenzboden und das geeichte Gittergas. Die Permeabilität ist in cm/Tag angegeben, das Potential in cm (Wassersäule).

## 2.4 Beispiel: Vergleich mit SWACROP

Das Programmpaket PESTLA 2.3 [Boesten 1993] beinhaltet SWACROP [WESSELING u.a. 1990] für die Berechnung des Wassertransports. SWACROP berechnet die Darcy-Gleichung, wobei der Benutzer entweder die hydraulischen Funktionen vorgeben kann oder aus einem Satz von Woesten und van Genuchten für verschiedene Böden auswählt. Wir haben für den direkten Vergleich ein homogenes System mit den Funktionen für einen Schluffboden gewählt. Der Referenzboden von Woesten und van Genuchten (Abb. 5, Kreuze) ist bei  $\theta = 0.41$  gesättigt.

Für die Gittergasanpassung (Abb. 5, Punkte) haben wir das Intervall für  $\langle n \rangle$ :  $[0 \dots 4]$  auf das Intervall für  $\theta$ :  $[0.2 \dots 1.866]$  abgebildet, d.h.  $\theta = 1/5 + (5/12) \langle n \rangle$ . Es wurde  $k_1 = k_2 = 0$  gesetzt und  $k_{s+t} = 1$  für  $s + t = 3, \dots, 7$ . Außerdem ist  $k_{\mathbf{x}}(\mathbf{x}) = 1$ . Die Spannung  $h_{\mathbf{x}}(\mathbf{x})$  gibt das Gravitationspotential wieder, da der Boden als homogen angenommen wird. Damit ist die Potentialdifferenz zwischen horizontal benachbarten Gitterknoten gleich Null,  $\Delta h_H = 0$ . Für vertikal benachbarte Knoten ist sie  $\Delta h_V = 2^{-8} = 1/256$ . Der Abstand zwischen zwei Knoten wird zu  $75/32$  cm definiert. Zusammen mit  $\Delta h_V$  skaliert dieses Längenmaß die Spannungskurve (Abb. 5, rechts). Wir schreiben noch einmal die Flußgleichung in der Form

$$\mathbf{j} = -k_\theta(\theta) \nabla (h^{\text{grav}} + h_\theta(\theta)), \quad (6)$$

wobei die Funktionen  $k_\theta(\theta)$  und  $h_\theta(\theta)$  in Abb. 5 (Punkte) gezeigt werden.

Abb. 6 zeigt die Profile für den Wassergehalt  $\theta$  einer Simulation mit einem 12 Zellen = 96 Gitterknoten breiten System, was 225 cm entspricht. Das Grundwasser ist bei 178 cm, d.h. in dieser Tiefe ist Sättigung,  $\theta = \theta_s = 0.41$  erreicht. Die Wet-

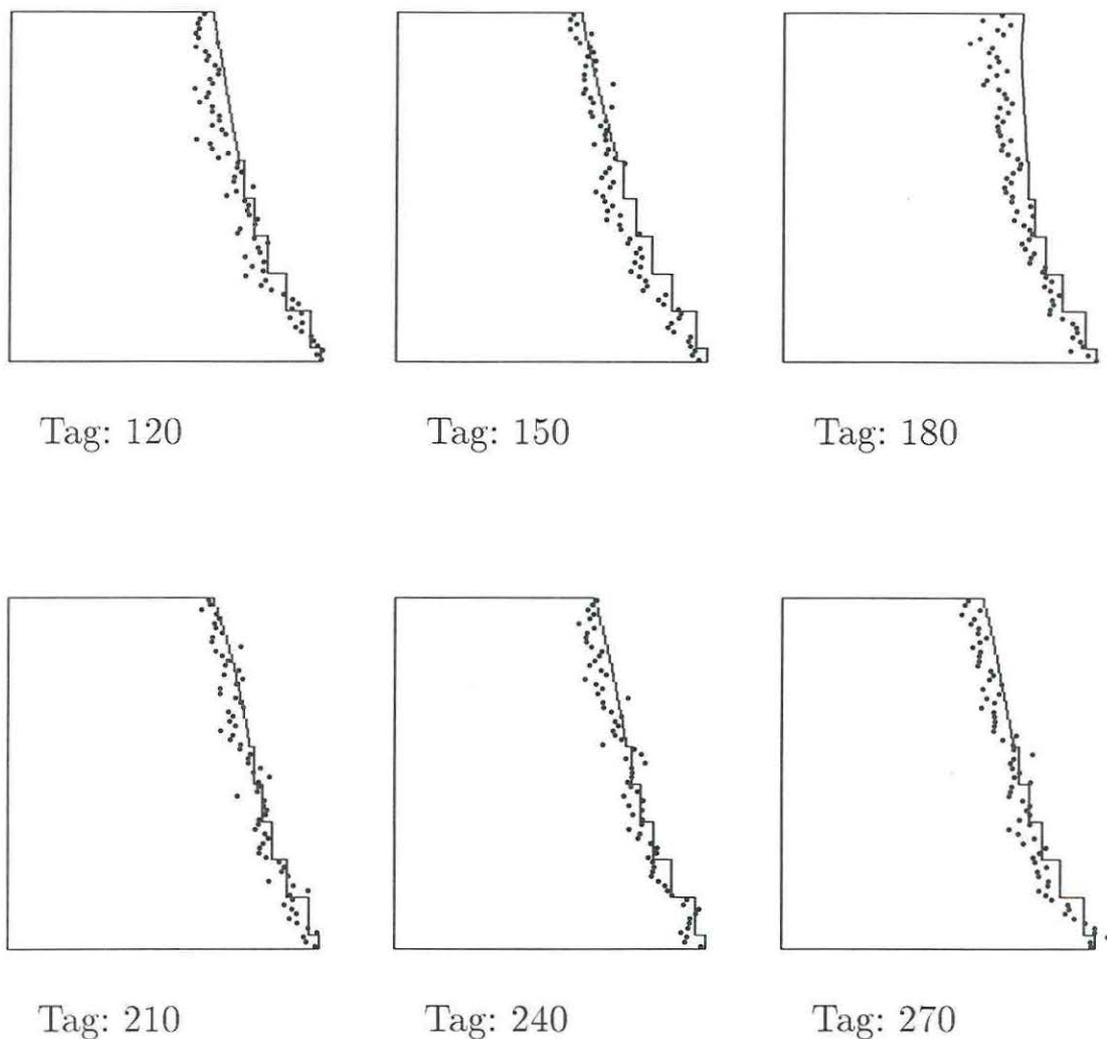


Abbildung 6: Feuchtigkeitsprofile,  $\theta$ , berechnet mit SWACROP (durchgezogene Linie) und mit der Gittergasmethode (Punkte). Die Profile sind 178 cm tief und reichen bis zum Grundwasserspiegel, wo  $\theta = \theta_s = 0.41$ .

terdaten, hier der Niederschlag, wurden aus SWACROP für 1980 in De Bilt bei Utrecht, Niederlande, übernommen. Die Simulation startet am 1.1.80 und läuft vier Monate zur Equilibrierung vor. Abb. 6 zeigt die Profile für  $\theta$  im Monatsabstand. Die durchgezogene Linie ist die SWACROP Simulation, die Punkte wurden vom Gittergas erzeugt. Es wird immer das gesamte Profil bis zum Grundwasserniveau gezeigt, d.h. jedes Profil ist 178 cm tief und der höchste Wassergehalt an der Unterkante ist  $\theta = 0.41$ .

Zwischen dem 150. und 180. Simulationstag gehen starke Niederschläge nieder. Das Gittergas läßt diese ein wenig zu rasch versickern. Wir führen diesen Effekt auf die zu hohe Permeabilität bei  $\theta \approx 0.30$  (siehe Abb. 5) zurück. Insgesamt überrascht die gute Übereinstimmung des Gittergases mit dem Referenzsystem.

Mit Blick auf die Anpassung der Permeabilität (Abb. 5, links) fällt eine drastische Abweichung für hohen Wassergehalt auf. Davon ist in der Simulation so gut wie nichts zu erkennen. Meine Vorstellung ist die, daß im wesentlichen die *langsamste* Wasserbewegung die Geschwindigkeit bestimmt. Ich vergleiche den Boden mit einer einspurigen Straße, auf der unterschiedlich leistungsstarke Fahrzeuge fahren. Ohne Überholmöglichkeiten wird sich die Geschwindigkeit an den langsamsten Fahrzeugen orientieren müssen. Wir nehmen außerdem an, daß die guten Ergebnisse, die mit Kapazitätsmodellen erzielt werden, auf diesem Effekt beruhen.

Die Gittergassimulation zeigt stochastische Fluktuationen. Das ist selbstverständlich zu erwarten, da die Dynamik stochastische Elemente beinhaltet. Diese sind nicht physikalisch, d.h. sie orientieren sich nicht am Einfluß des Zufalls in realen Systemen (z.B. zufällige Bodenstruktur). Allerdings erinnern auch die künstlichen, durch den Algorithmus bedingten Schwankungen daran, daß ein völlig glatter, deterministischer Verlauf der Profile nicht der Realität entspricht.

## 2.5 Alternative Sprungregeln

Vor der oben beschriebenen Version des Algorithmus haben wir andere Sprungregeln verwendet (VOLLMAYR 1995, 1996), die ich hier kurz diskutiere.

Die Wasserteilchen bewegen sich wieder auf einem Quadratgitter, wobei jeder Gitterpunkt bis zu vier Teilchen trägt. Das Potential  $h_{\mathbf{x}}(\mathbf{x})$ , bestehend aus Saugspannung und Gravitationspotential, wird vor der Simulation für jeden Gitterpunkt vordefiniert. Anders als beim obigen Algorithmus ist die Permeabilität  $k_{\mathbf{x}}(\mathbf{x})$  nicht für die Kanäle sondern für die Gitterpunkte selbst definiert. Jedes Teilchen bewegt sich in jedem Zeitschritt zu einem Nachbarknoten. An welche Nachbarn die Teilchen eines Knotens verteilt werden, wird probabilistisch über die Permeabilität des Knotens und das Potential der Nachbarn bestimmt.

Da durch einen Kanal immer nur jeweils ein Teilchen in jeder Richtung geschickt werden kann und in jedem Zeitschritt alle Teilchen ihren jeweils alten Knoten verlassen, können sich an keinem Knoten mehr als vier Teilchen ansammeln. Dadurch spart man sich die Abfrage, ob ein Transfer möglich ist. Andererseits kann durch die Permeabilität des Knotens nur die *gerichtete*, mittlere Bewegung beeinflusst werden. Insbesondere wenn die Permeabilität an einer Stelle verschwindet, findet weiterhin eine ungerichtete Teilchenbewegung statt. Diese führt dazu, daß sich der Wassergehalt in dem Gebiet mit verschwindender Permeabilität (z.B. einem Stein) seiner Umgebung anpaßt. Die Bewegung folgt der makroskopischen Gleichung

$$\mathbf{j} = -\kappa \nabla h_{\mathbf{x}}(\mathbf{x}) - \nabla \theta. \quad (7)$$

Auch an dieser Gleichung ist zu erkennen, daß die Permeabilität nur Auswirkungen auf den ersten Term hat.

Für praktische Anwendungen haben wir deshalb das oben ausführlicher beschriebene System verwendet. Es sollte aber festgestellt werden, daß eine Vielzahl von verschiedenen Algorithmen zu einer makroskopischen Bewegung führt, die zumindest Elemente der Darcy-Gleichung enthält. Im Ausblick gehe ich auf Erweiterungen der vorgestellten Algorithmen ein.

## 3 Schadstoffdynamik: Particle Tracking

### 3.1 Algorithmus

Beim Particle Tracking wird die Chemikalie durch eine Teilchenwolke dargestellt. Hohe Teilchendichte entspricht hoher Konzentration, wenige Teilchen kodieren für niedrige Konzentration.

Wir unterscheiden vorläufig *mobile* und *adsorbierte* Teilchen. Die mobilen Teilchen werden mit der Bewegung des Bodenwassers mitgeführt, während die an der Bodenmatrix adsorbierten Teilchen sich nicht bewegen. Jedes Teilchen ändert mit einer festgelegten Wahrscheinlichkeit pro Zeitintervall seinen Zustand, d.h. es wird absorbiert oder desorbiert.

Ein dritter Zustand, *abgebaut*, ermöglicht die Berücksichtigung von Bioabbau. In unseren Simulationen konnten adsorbierte Teilchen mit einer Wahrscheinlichkeitsrate in den Zustand abgebaut übergehen. In diesem Zustand sind die Teilchen nicht mehr von der Dynamik betroffen. Sie können entweder völlig aus dem System genommen werden oder markiert als inerte Teilchen im Speicher des Computers verbleiben.

Da wir auf eine vorberechnete Wasserdynamik zurückgreifen müssen, verwenden wir die längeren *Zeitintervalle* (im Gegensatz zu Zeitschritten) der Gittergas-simulation als Grundlage. Damit sind stochastische Fluktuationen im Flußfeld der Wasserbewegung weitgehend ausgemittelt.

Im einzelnen läuft der Algorithmus wie folgt ab. Der Zustand des ersten Teilchens wird eingelesen. Ist das Teilchen abgebaut, passiert nichts damit. Wir gehen über zum nächsten Teilchen.

Ist es adsorbiert, so wird es mit einer bestimmten Wahrscheinlichkeit<sup>2</sup> abgebaut. Falls dieser Abbau nicht stattfindet (z.B. weil die Abbau-Wahrscheinlichkeit sehr gering ist) wird das Teilchen mit der Desorptions-Wahrscheinlichkeit mobil. Danach gehen wir zum nächsten Teilchen über.

---

<sup>2</sup>Auf die Berechnung der Wahrscheinlichkeiten aus Abbauraten gehe ich im Abschnitt „Kalibrierung“ ein.

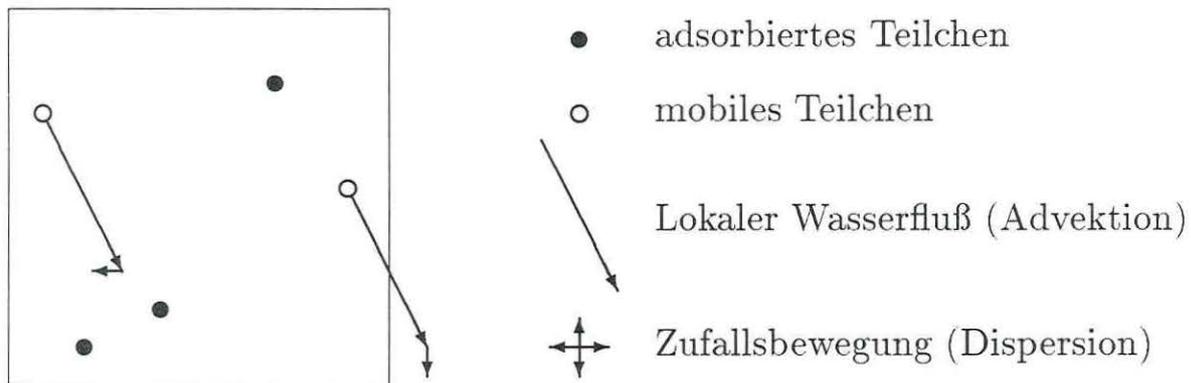


Abbildung 7: Veranschaulichung der Particle Tracking Modellierung von Advektion, Dispersion und Sorption. Das Quadrat bezeichnet eine Zelle, bestehend aus  $8 \times 8$  Gitterknoten.

Ist das Teilchen mobil, so lesen wir die lokale Wassergeschwindigkeit aus einer Datei ein, die von der vorgeschalteten Wassersimulation erzeugt wurde. Dazu benötigen wir die Koordinaten des Teilchens und den Zeitpunkt. Die Koordinaten sind direkt mit dem Teilchen assoziiert, d.h. das Teilchen ist als Objekt oder Datenstruktur definiert, die neben dem Zustand auch die Koordinaten beinhaltet. Aus der Wassergeschwindigkeit und der Länge des Zeitintervalls wird die Verschiebung des Teilchens errechnet und durchgeführt, d.h. die Koordinaten werden entsprechend verändert. Schließlich geht das Teilchen mit der Adsorptions-Wahrscheinlichkeit in den Zustand adsorbiert über und das nächste Teilchen wird behandelt.

Durch Diffusion und Dispersion wird die Konzentration einer Pestizidwolke ausgeschmiert. Diffusion ist ein molekularer, isotroper Prozeß, der aber im Boden in der Regel keine wesentliche Rolle spielt. Die wichtigere Dispersion kommt dadurch zustande, daß das mit dem Wasser mitgeführte Pestizid unterschiedlich lange Wege durch den Porenraum geht und dadurch auseinander gezogen wird. Die Dispersion ist üblicherweise stärker in Richtung der Wasserbewegung als senkrecht dazu.

Im Bild des Particle Tracking kann man die Dispersion durch eine Zufallsbewegung, die zur Advektion mobiler Teilchen addiert wird, modellieren. Am einfachsten ist die Simulation von isotroper Dispersion, aber auch anisotrope Dispersion kann durch Orientierung an der Advektionsrichtung berücksichtigt werden.

Abb. 7 faßt die beim Particle Tracking modellierten Prozesse (bis auf den Abbau) zusammen.

## 3.2 Kalibrierung

### 3.2.1 Abbaurrate

Nehmen wir an, daß adsorbiertes Pestizid mit einer Rate  $k$  abgebaut wird. Wie ist die Rate  $k$  mit der Halbwertszeit  $\tau_{1/2}$  und der Abbau-Wahrscheinlichkeit  $p$  pro Zeitintervall verbunden?

Abbau mit einer Rate  $k$  bedeutet, daß die Konzentration des Pestizids dem exponentiellen Verlauf

$$c(t) = c(0) \exp(-kt) \quad (8)$$

folgt. Sie wird durch die Differentialgleichung

$$\frac{\partial}{\partial t} c = -kc \quad (9)$$

beschrieben. Die Halbwertszeit  $\tau_{1/2}$  bedeutet, daß

$$c(\tau_{1/2}) = c(0) \exp(-k\tau_{1/2}) \equiv c(0)/2. \quad (10)$$

Daraus folgt der Zusammenhang zwischen  $k$  und  $\tau_{1/2}$

$$k = \ln(2)/\tau_{1/2}. \quad (11)$$

Als nächstes berechnen wir die relative Verringerung der Konzentration im Zeitintervall  $T$ , nämlich

$$c(T) = c(0) \exp(-kT) \approx c(0)(1 - kT). \quad (12)$$

Die letzte Näherung gilt für  $kT \ll 1$ . Daraus geht hervor, daß die Abbau-Wahrscheinlichkeit pro Zeitintervall durch

$$p = kT = \frac{k \ln(2)}{\tau_{1/2}} \quad (13)$$

gegeben ist, solange sie klein gegen 1 ist.

### 3.2.2 Sorptionsraten

Wir benennen adsorbierte bzw. desorbierte Konzentration mit  $c_A$ ,  $c_D$  und die zugehörigen Übergangsraten mit  $k_{D \rightarrow A}$ ,  $k_{A \rightarrow D}$ . Die linearen Sorptionsgleichungen sind

$$\frac{\partial}{\partial t} c_D = -k_{D \rightarrow A} c_D + k_{A \rightarrow D} c_A \quad (14)$$

$$\frac{\partial}{\partial t} c_A = k_{D \rightarrow A} c_D - k_{A \rightarrow D} c_A. \quad (15)$$

Im Gleichgewicht sind die zeitlichen Ableitungen von  $c_D$  und  $c_A$  gleich Null, und es folgt

$$K := \frac{c_A}{c_D} = \frac{k_{D \rightarrow A}}{k_{A \rightarrow D}} = \frac{k_{D \rightarrow A} T}{k_{A \rightarrow D} T} = \frac{p_{D \rightarrow A}}{p_{A \rightarrow D}}. \quad (16)$$

Das bedeutet, der Verteilungskoeffizient  $K$  bestimmt das Verhältnis der Übergangsraten und der Sorptions-Wahrscheinlichkeiten.  $p_{D \rightarrow A}$  und  $p_{A \rightarrow D}$  sollten wieder klein gegen 1 sein, damit die lineare Näherung gilt. Man wird die Wahrscheinlichkeiten aber groß genug wählen, daß eine ausreichend schnelle Equilibrierung erreicht wird. Als Richtgröße kann man die größere Wahrscheinlichkeit gleich 1/4 wählen.

### 3.3 Beispiel: Vergleich mit PESTLA

Ausgehend von dem oben diskutierten Vergleich von Simulationen mit SWACROP und einem Gittergas haben wir mit PESTLA und der Particle Tracking Methode die Versickerung eines Pestizids simuliert.

Der Gleichgewichtsquotient von adsorbiertem zu mobilem Pestizid  $K = c_A/c_D$  wurde gleich 0.4 gewählt. Die Halbwertszeit für den Abbau ist  $\tau_{1/2} = 60$  Tage bei Referenzbedingungen, nämlich 293 Kelvin (Zimmertemperatur) und -100 hPa Saugspannung. Die jeweils aktuelle Halbwertszeit und die daraus folgende Wahrscheinlichkeit für den Übergang zum abgebauten Zustand berechnen wir aus der aktuellen Spannung und Temperatur. Letztere wird aus der Simulation mit PESTLA übernommen.

Das Pestizid wurde am Tag 120 aufgebracht und fünf Monate lang verfolgt. Abb. 8 zeigt das Resultat. Wieder stellen wir eine erstaunlich gute Übereinstimmung fest. Als systematische Abweichung fällt auf, daß die PESTLA-Simulation eine etwas breitere Verteilung liefert als das Particle Tracking. Dieser Effekt wird in [VOLLMAYR u.a. 1996] erklärt.

## 4 Anwendungen

In diesem Abschnitt werden exemplarisch einige Anwendungen gezeigt. Die Beispiele diskutieren drei verschiedene Situationen, nämlich den Übergang zwischen unterschiedlichen Horizontschichtungen, unebene Bodenoberfläche und räumlich konzentrierte Kontamination.

Übergreifendes Thema ist die *zweidimensionale* Simulation. In allen drei Situationen sind laterale Flüsse zu erwarten, die mit eindimensionalen Modellen nicht erfaßt werden können.

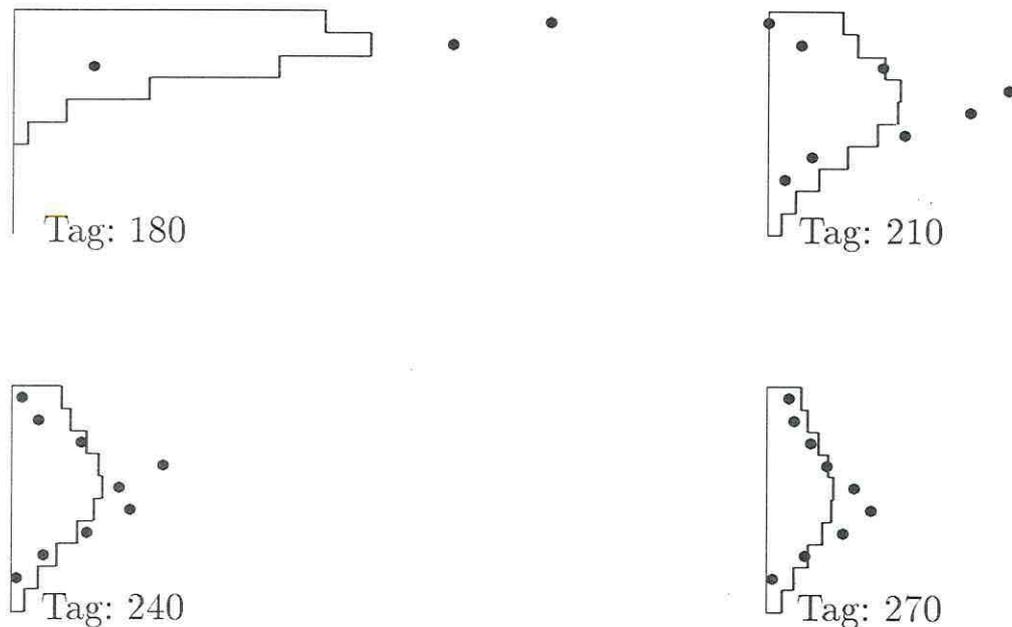


Abbildung 8: Versickerung eines Modellpestizids, das am Tag 120 ausgebracht wurde. Die durchgezogene Linie zeigt das Ergebnis einer Simulation mit PESTLA (Wasserbewegung mit SWACROP), die Punkte sind das Resultat des Particle Tracking (Wasserbewegung mit Gittergas).

## 4.1 Inhomogener Boden

Die Abb. 9-11 zeigen die Auswirkungen von Stufen in den Horizonten. Die Permeabilität ist überall durch  $\kappa = k_x(\mathbf{x})k_\theta(\theta)$  gegeben, wobei die Abhängigkeit vom Wassergehalt  $k_\theta(\theta)$  die gleiche ist wie bei der Illustration der Parameteranpassung und dem Vergleich mit PESTLA (Abb. 5). Während oben jedoch  $k_x(\mathbf{x}) = 1$  für alle Orte  $\mathbf{x}$  definiert war, ist der Vorfaktor jetzt räumlich variabel. Er wird für jedes Bodenprofil links oben in der entsprechenden Abbildung angezeigt.

Als erstes demonstrieren wir eine Situation, in der die Permeabilität der obersten Bodenschicht um den Faktor 2 höher ist als darunter (Abb. 9). Die Mächtigkeit der durchlässigeren Schicht beträgt links 37,5 cm, auf der rechten Seite nur 18,75 cm. Das Versickerungsverhalten ist offenbar von der Inhomogenität der Leitfähigkeit nicht berührt.

In Abb. 10 verläuft ein dichter Horizont links und rechts in unterschiedlicher Tiefe. Es ist gleichfalls keine Auswirkung festzustellen. Wir erklären die Null-Ergebnisse mit dem am Ende von Abschnitt 2.4 diskutierten Phänomen: Die Sickergeschwindigkeit wird hauptsächlich durch die geringste Permeabilität in der gesamten Bodensäule bestimmt; diese ist jeweils rechts und links gleich.

Die in Abb. 11 gezeigte Simulation bestätigt diese Erklärung. Hier ist die geringste Permeabilität links  $(2/3)k_\theta(\theta)$  und rechts  $(1/3)k_\theta(\theta)$ . Es ist deutlich zu erkennen,

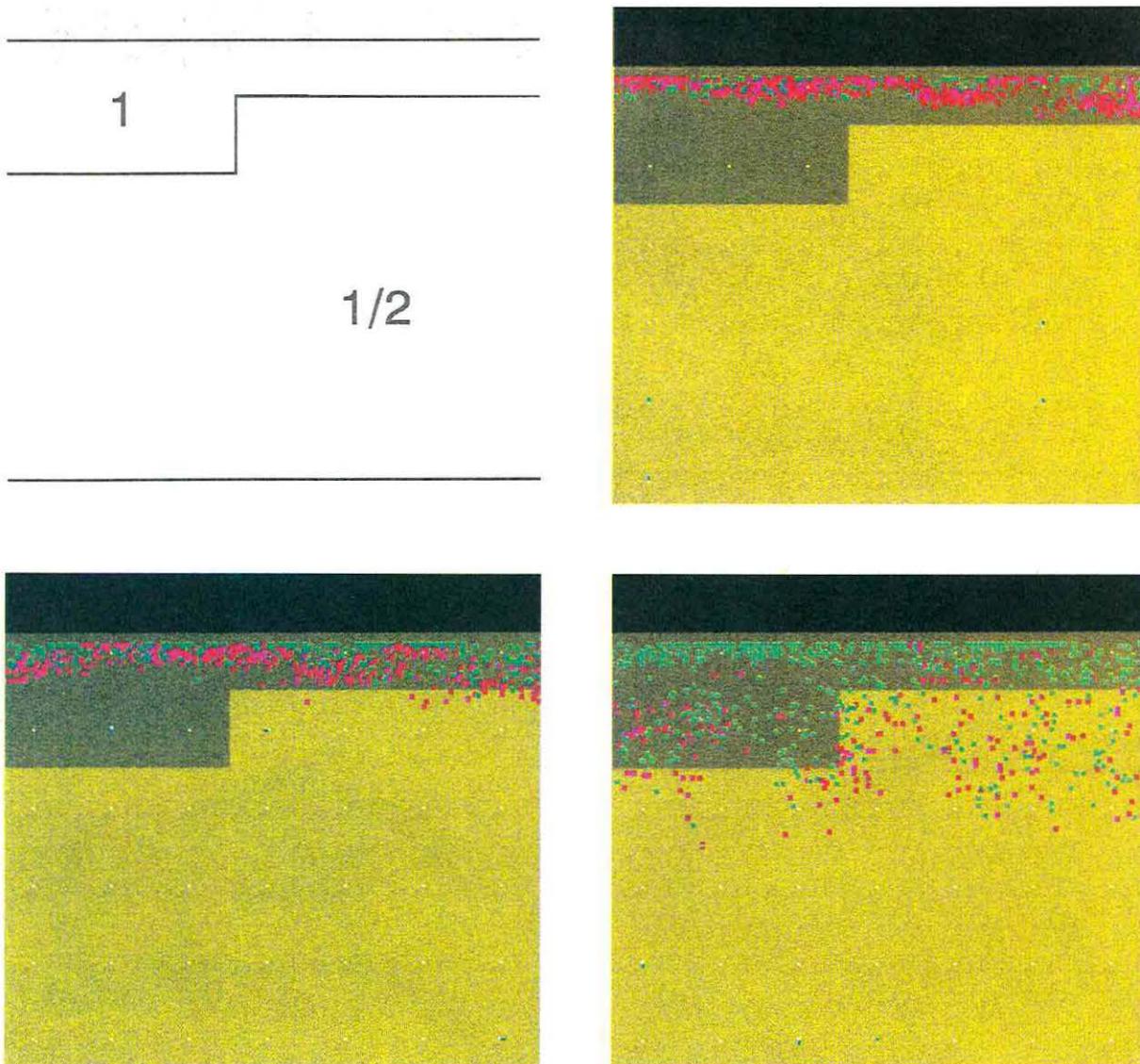


Abbildung 9: Pestizidversickerung durch eine Schicht höher durchlässigen Bodens mit lateral variierender Mächtigkeit. Links oben ist die räumliche Verteilung der Permeabilität  $k_x(x)$  gezeigt. Die anderen drei Abbildungsteile sind Momentaufnahmen 1, 2 bzw. 5 Monate nach Pestizidauftrag. Abgebaute Pestizidteilchen sind grün, mobile rot und adsorbierte violett dargestellt.

1	1/2
1/2	1

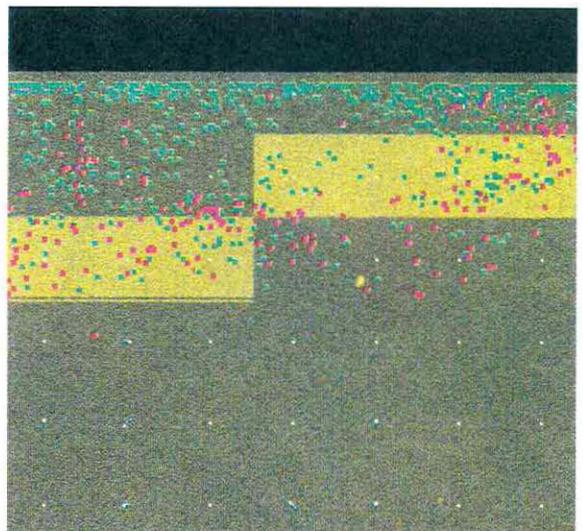
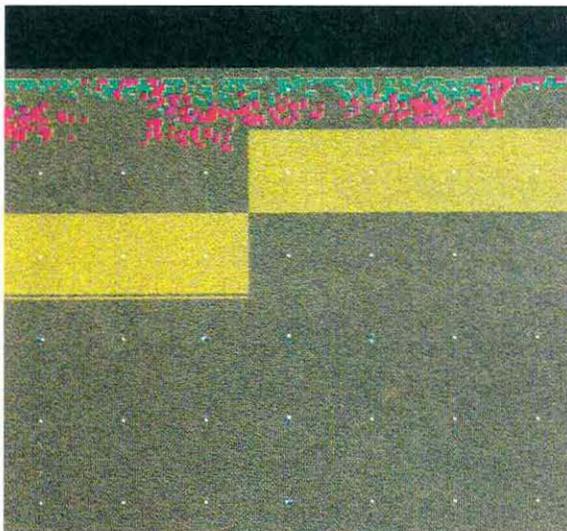


Abbildung 10: Pestizidversickerung über einer uneben verlaufenden Schicht geringer durchlässigen Bodens.

daß die Pestizidfront durch die unterschiedlichen Sickergeschwindigkeiten rechts und links verzogen wird.

## 4.2 Unebene Bodenoberfläche

Einige Nutzpflanzen, z.B. Kartoffeln, werden gelegentlich auf Erddämmen angebaut. Abb. 12 zeigt das Einwaschverhalten eines Pestizids, das gleichmäßig auf der Oberfläche ausgebracht wird. Die Pestizidfront ist durch die gekrümmte Bodenoberfläche von Anfang an uneben. Wir stellen sogar noch eine Verstärkung der Verzerrung im Laufe des Sickerprozesses fest. Dieser Effekt beruht darauf, daß Wasser seitlich vom Damm abfließt und daher in den Gräben zwischen den Dämmen mehr Wasser einsickert und das Pestizid schneller eingewaschen wird.

Dieses Ergebnis kann z.B. von Belang sein, wenn Bodenorganismen mit dem Pestizid bekämpft werden sollen. Nehmen wir z.B. an, Kartoffelpflanzen werden mit einem Nematizid behandelt. Sind die Nematoden im Wurzelbereich der Pflanzen hauptsächlich direkt unter den Dämmen zu finden, dann werden sie erst von der Pestizidfront erreicht, wenn diese zwischen den Dämmen schon wesentlich weiter fortgeschritten ist. Dort bedroht die Chemikalie unter Umständen früher das Grundwasser, als vom Zeitpunkt der beabsichtigten Wirkung aus anzunehmen wäre. Eine mögliche Gegenmaßnahme wäre hier, das Pestizid nicht gleichmäßig über den ganzen Schlag sondern nur auf die Dämme aufzutragen.

Sind wir nur an der Eindringtiefe eines Schadstoffs und nicht am räumlichen Verteilungsmuster interessiert, so kann man das Verzerren der Front als *Makrodispersion* zusammenfassen. Das bedeutet, eine eindimensionale Simulation berücksichtigt verschieden starke, makroskopische Flüsse durch einen Fickschen Term in der Bewegungsgleichung. Genauso führen auch die unterschiedlichen mikroskopischen Geschwindigkeiten zur (normalen) Dispersion.

## 4.3 Konzentrierte Kontamination

Abb. 13 zeigt einen Fall, bei dem die Chemikalie räumlich begrenzt ausgebracht wird. Das kann unbeabsichtigt geschehen, wenn z.B. im Freiland ein Pestizid abgefüllt und dabei teilweise verschüttet wird. Wir interessieren uns hier besonders für die laterale Ausbreitung der Chemikalie. Abb. 13 zeigt, daß sich die Kontamination nicht erkennbar verbreitert. Sorption und Dispersion ziehen die Verteilung in der Fließrichtung stärker auseinander als senkrecht dazu. Es ist wichtig, an dieser Stelle nochmals darauf hinzuweisen, daß wir Flüsse in der ungesättigten Zone betrachten.

Abb. 14 stellt eine Referenzsimulation mit einem quasi eindimensionalen Sy-

1	2/3
2/3	1/3

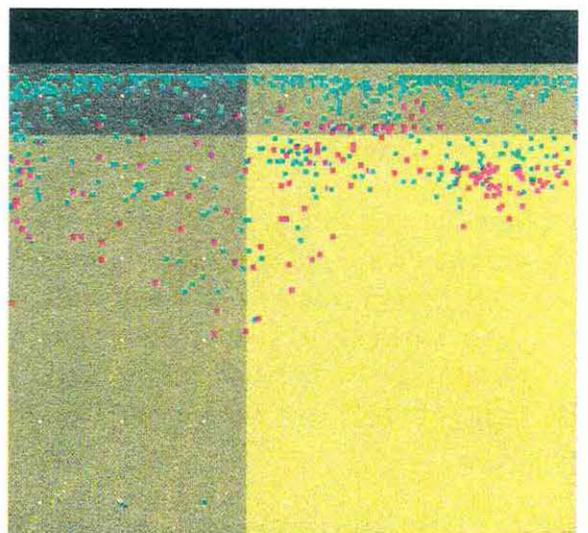
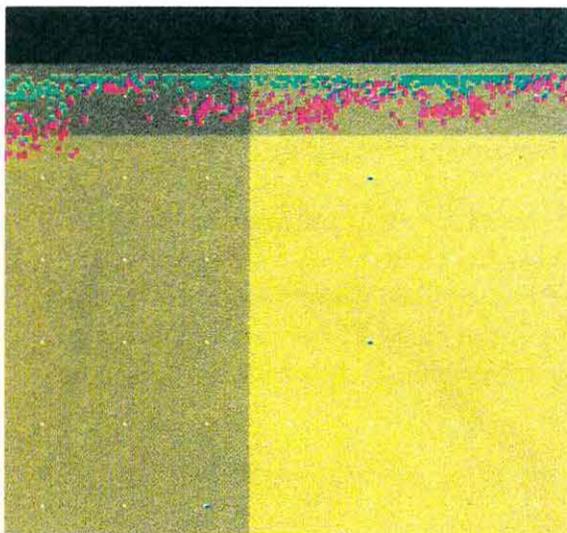
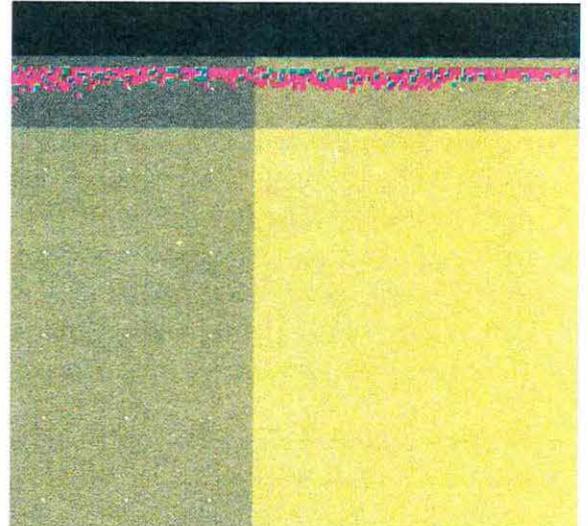


Abbildung 11: Pestizidversickerung durch zwei aneinandergrenzende, unterschiedliche Bodenprofile. Die minimale Permeabilität ist links höher als auf der rechten Seite.

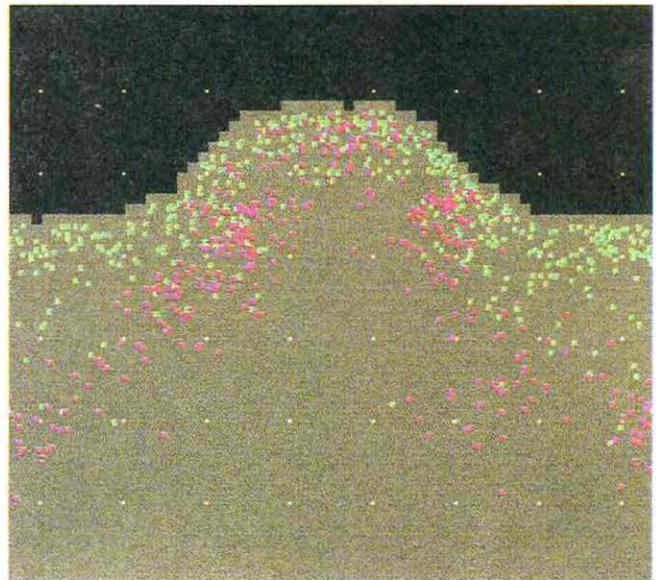
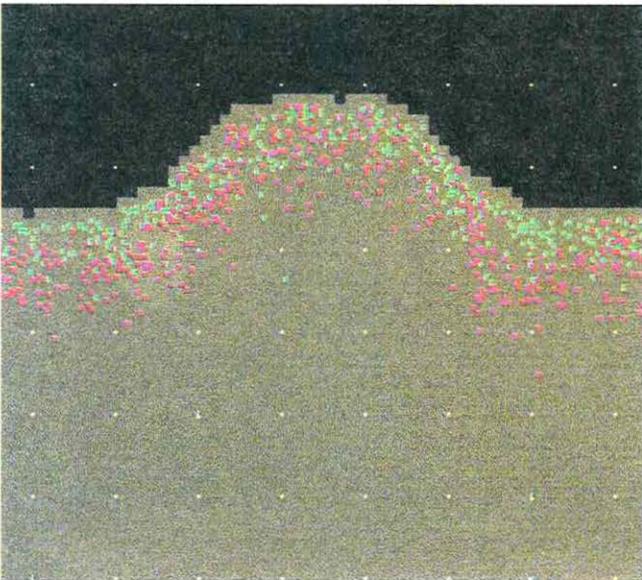
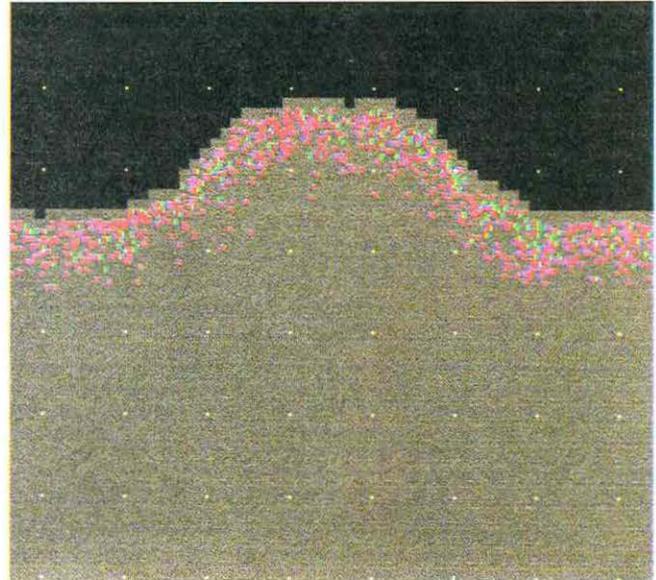
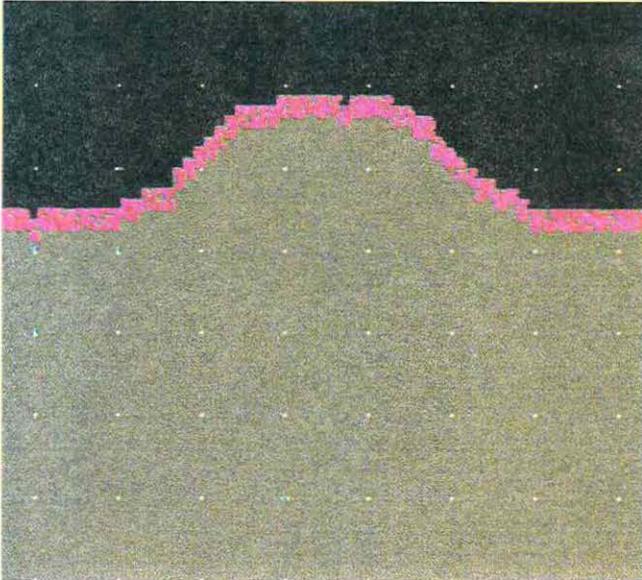


Abbildung 12: Pestizidversickerung unter einem Damm. Gezeigt ist die Situation am Tag des Pestizideintrags sowie 1, 2 und 3 Monate danach. Man beachte die höhere Sickergeschwindigkeit an den Seiten des Damms.

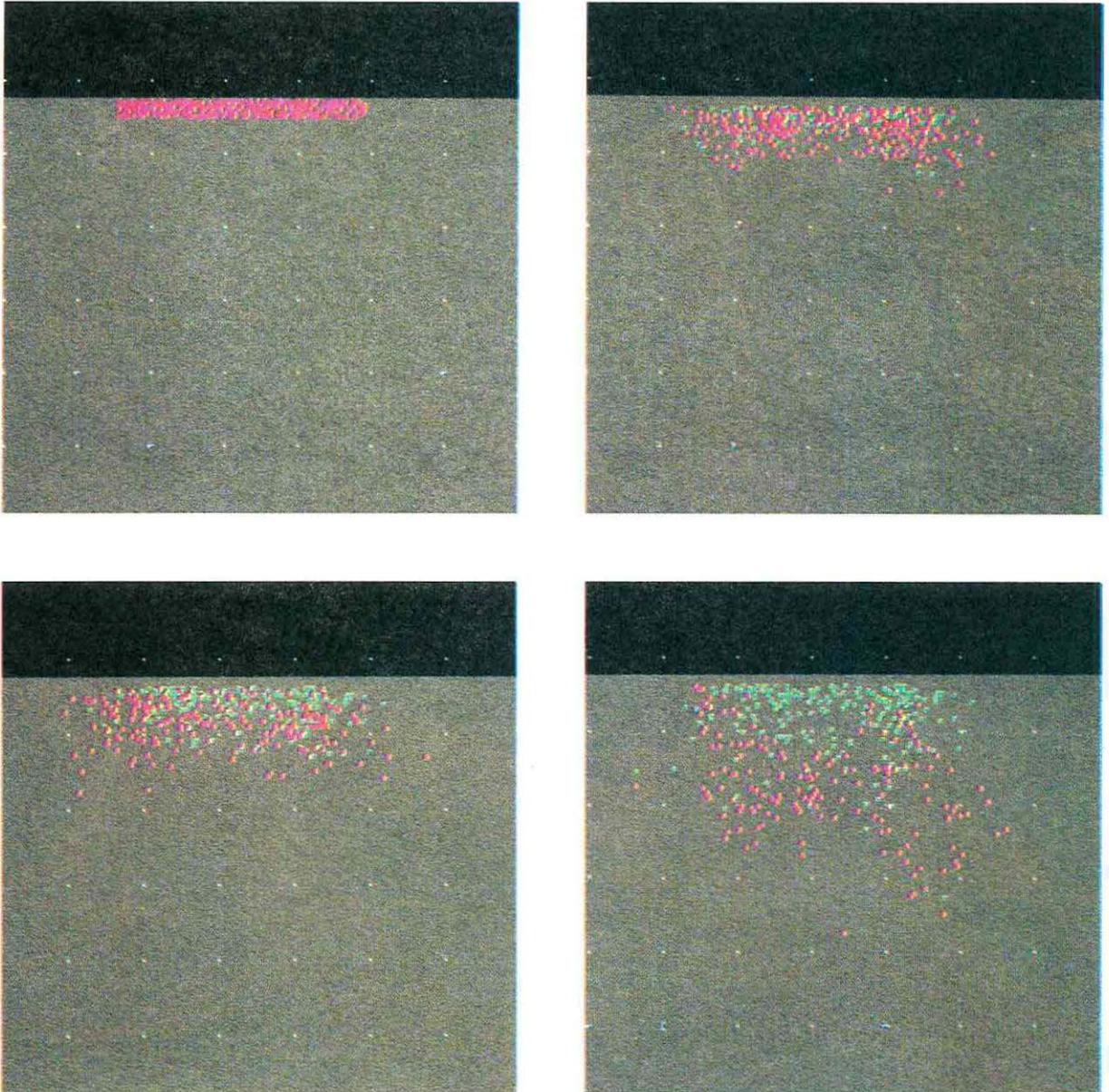


Abbildung 13: Versickern einer räumlich begrenzten Kontamination. Die Chemikalie breitet sich in der ungesättigten Zone kaum lateral aus.

stem dar. Sie wurde mit aufgenommen, um die stochastischen Schwankungen auf Grund der algorithmischen Methoden abschätzen zu können.

## 5 Bodenmodelle

### 5.1 Grenzen der Prognose

Wenn ein Simulationsmodell für Wasser- und Pestizidtransport im Boden beurteilt wird, betrachtet man die Qualität der Wiedergabe natürlich stattfindender Prozesse durch die Gleichungen, Rechenzeit- und Ressourcen-Anforderungen, Auflösung, Maßstab, Dimensionalität und ähnliches. Einige andere Aspekte, die nicht direkt im Modell begründet sind, begrenzen ebenfalls erheblich die Vorhersagefähigkeit eines Programms.

Viele Daten des Bodens sind in den meisten Fällen nicht verfügbar. Wenn ein Modell z.B. den Fluß in einem System von Trockenrissen berechnen kann, müssen erst Ort und Struktur der Risse bestimmt werden, bevor das Modell zum Einsatz kommen kann. Ebenso sind häufig die hydraulischen Funktionen Permeabilität und Saugspannung nicht bekannt, oder nicht für sämtliche Horizonttiefen. Noch strenger sind die Datenanforderungen, wenn Hysterese oder laterale Heterogenität berücksichtigt werden sollen.

Für zeitlich begrenzte Simulationen (bis zu wenigen Monaten) ist ein entscheidender Faktor prinzipiell unvorhersagbar, nämlich das Wetter im Simulationszeitraum.

Diese Punkte begrenzen drastisch die Vorhersagefähigkeit bei der Simulation von einzelnen Szenarien. Insbesondere ist auch ein ideales Modell nicht in der Lage die Situation an einem bestimmten Ort für die Zukunft genau zu prognostizieren, da die notwendigen Daten nicht verfügbar sind.

Andere Fragen lassen sich sehr viel besser beantworten. Wenn man z.B. die Exposition eines bestimmten Pestizids auf sächsischen Ackerböden beurteilen möchte, wird man verschiedene, typische Böden mit verschiedenen Wettersituationen simulieren und die statistische Verteilung der Ergebnisse betrachten. In einem anderen Fall möchte man die Auswirkung einer bestimmten Situation beurteilen, z.B. eines sehr starken Regens über einem Damm. In solchen Fällen ist die Vorhersagekraft im wesentlichen durch die Leistungsfähigkeit des Programms begrenzt und weniger durch die Verfügbarkeit der Daten.

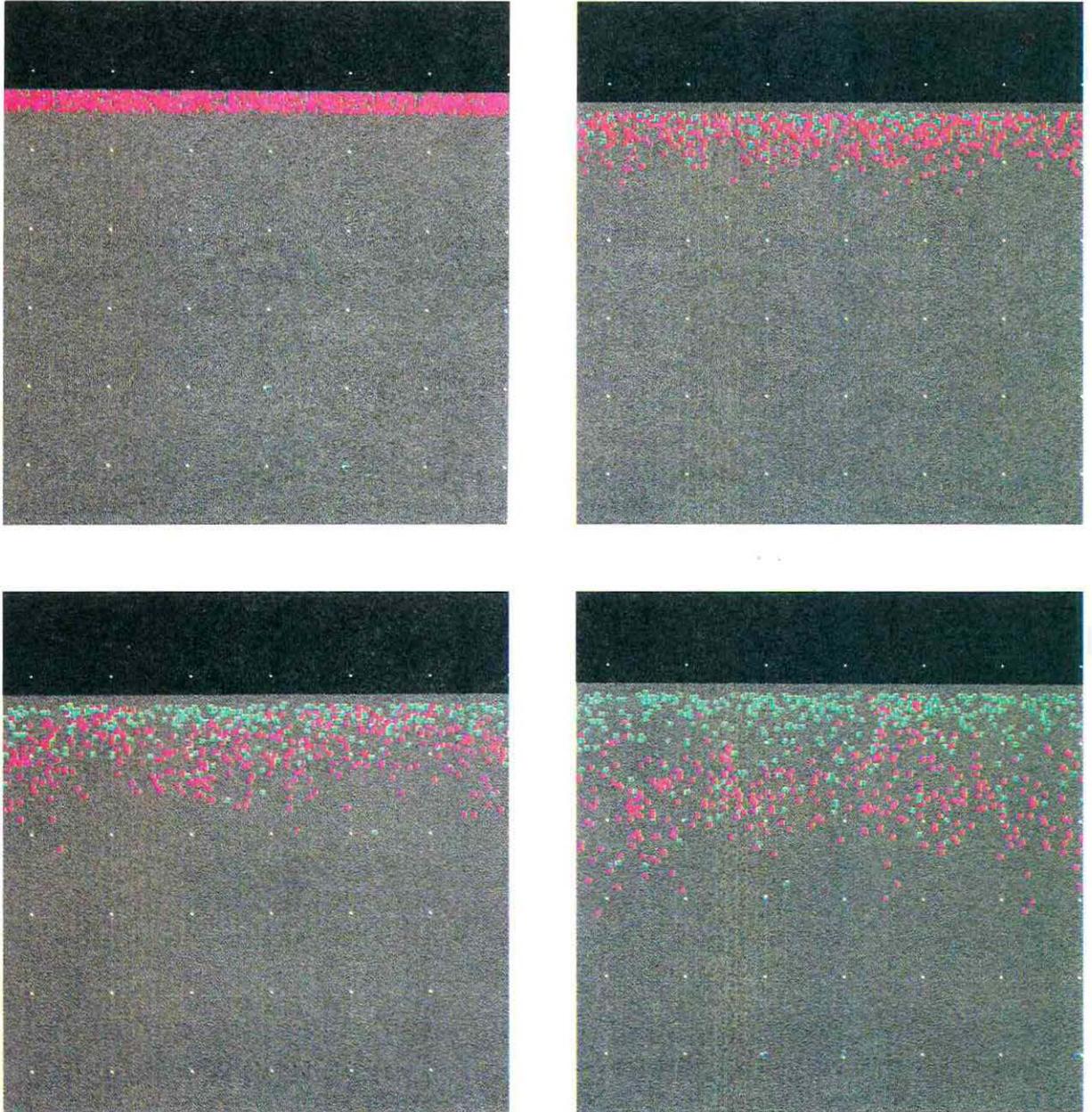


Abbildung 14: Referenzsimulation einer gleichmäßigen Pestizidverteilung über homogenem Boden mit ebener Oberfläche. Die Fluktuationen in der Verteilung sind durch die stochastischen Algorithmen bedingt.

## 5.2 Diskret oder kontinuierlich?

Wir haben Wasserbewegung und Pestizidtransport mit diskreten Algorithmen modelliert. Ob diskrete, stochastische Algorithmen oder bewährte, kontinuierliche Verfahren vorzuziehen sind, hängt entscheidend von Struktur und Zielsetzung der Simulationen ab.

Gittergase eignen sich gut zur Parallelisierung und direkten Hardware-Implementierung. Damit sind sie gute Alternativen für sehr großräumige Simulationen, bei denen der Mehraufwand der Konstruktion von Special Purpose Computern durch den Leistungsgewinn aufgehoben wird.

Der Einsatz von Gittergasen wird begrenzt durch die Schwierigkeit, hydraulische Funktionen, Permeabilität und Saugspannung, in Abhängigkeit vom Wassergehalt, nach exakten Vorgaben zu implementieren. In den meisten Anwendungen sind die hydraulischen Funktionen nicht genau bekannt und schon aus diesem Grund müssen Abschätzungen verwendet werden. Wenn allerdings gerade erprobt werden soll, wie die Wasserbewegung von Details der Funktionen oder Effekten wie Hysterese abhängt, sind Gittergase möglicherweise ungeeignet.

Die Methode des Particle Tracking bietet gewisse Vorteile bei der Parallelisierung durch Verwendung mehrerer (Größenordnung  $10^2$ ) Prozessoren. Auf solchen Rechner-Clustern werden wieder großräumige Simulationen durchgeführt, wobei oft ein Prozessor oder eine Workstation für ein bestimmtes räumliches Gebiet zuständig ist. Der Erfolg der Parallelisierung hängt unter anderem sehr davon ab, wieviel die Rechner miteinander kommunizieren müssen. Ein Computer muß seinem Nachbarn mitteilen, wieviel Pestizid gerade aus seinem Gebiet herausfließt und wo es in das Gebiet des Nachbarn eintritt. Ohne Details zu erörtern soll hier nur angemerkt werden, daß der Kommunikationsaufwand für die Randgebiete mit Particle Tracking oft geringer ist als mit Methoden, die eine Transportgleichung numerisch lösen.

Ein anderer Vorteil des Particle Tracking besteht in seiner Einfachheit. Es ist wesentlich einfacher, ein einzelnes Teilchen mit dem lokalen Wasserstrom mitführen zu lassen, als eine Transportgleichung zu formulieren. Auch die Phänomene Adsorption und Bioabbau sind in einem einfachen Zugang sehr schnell zu implementieren.

Beim Particle Tracking wird im wesentlichen nur an den Stellen gerechnet und Computerzeit verbraucht, wo sich Pestizid befindet. Mit einer konventionellen Methode wird die Transportgleichung in der Regel überall gelöst, d.h. auch dort wo die Konzentration gleich Null ist.

Kontinuierliche Berechnungen sind von Vorteil, wenn die zu untersuchenden Konzentrationen sich um mehrere Größenordnungen unterscheiden. Beim Particle

Tracking muß eine hohe Teilchendichte pro Konzentration für geringe Pestizidkonzentration verwendet werden. Wenn gleichzeitig sehr hohe Konzentrationen auftreten, führt dies auch zu sehr großen Teilchenzahlen und damit langen Rechenzeiten.

## 6 Ausblick

In diesem Abschnitt bespreche ich Möglichkeiten die oben diskutierten Arbeiten weiterzuführen. Außerdem werden einige Punkte angeschnitten, deren Wichtigkeit sich aus meinen Erfahrungen am UFZ ergibt, die aber noch nicht detailliert untersucht wurden.

### 6.1 Gittergase

Die untersuchten Gittergas Algorithmen involvieren stochastische Elemente *zur Laufzeit*. Der Zufall wird verwendet, um die kontinuierlichen Systemparameter, d.h. die hydraulischen Funktionen, mit der diskreten Teilchendynamik berücksichtigen zu können. Allerdings bremst die Berechnung von Zufallszahlen und der Vergleich mit Wahrscheinlichkeiten die „innerste Schleife“, das ist der am häufigsten durchzuführende Programmteil. Bei einer direkten Hardware-Implementierung wird entweder das für einen Gitterknoten kodierende logische System relativ kompliziert, oder die Zufallszahlen werden von einem separaten Generator erzeugt, was die Parallelisierung begrenzt.

Eine Lösung sehe ich in der Einführung sogenannter eingefrorener Unordnung. Die Kanäle sind dann nicht mehr mit einer bestimmten Wahrscheinlichkeit durchlässig. Im einfachsten Beispiel gibt es nur völlig durchlässige ( $k_{\mathbf{x}}(\mathbf{x}) = 1$ ) und isolierende Kanäle ( $k_{\mathbf{x}}(\mathbf{x}) = 0$ ). Hoch permeabler Boden wird durch vorwiegend offene Kanäle repräsentiert und undurchlässiger Boden hauptsächlich durch isolierende Kanäle. Der entscheidende Punkt besteht darin, daß die stochastische Verteilung von offenen und geschlossenen Kanälen je nach lokaler Permeabilität vor der Hauptsimulation und nur einmal erfolgt. Wesentlich für die kontinuierliche Bewegung wird hier die *räumliche* Mittelung.

Man redet hier von eingefrorener Unordnung, weil die zufälligen Elemente während der Dynamik unverändert bleiben. Im Gegensatz dazu sind die weiter oben beschriebenen Algorithmen Beispiele für dynamische Unordnung (englisch: annealed = ausgeglüht), wo vor jedem Teilchentransfer neu entschieden wird, ob der Kanal passiert werden soll.

Die theoretische Behandlung von eingefrorener Unordnung ist in der Regel wesentlich schwieriger als die Theorie dynamischer Unordnung. Wenn sich nur offene

und geschlossene Kanäle im System befinden, spricht man von Bond-Perkolation. Bei statistisch unabhängiger Verteilung der offenen Bonds mit Wahrscheinlichkeit  $p$ , wird ein Quadratgitter mit vielen Knoten für  $p < 1/2$  insgesamt isolieren. Für  $p$  knapp oberhalb von  $1/2$  muß ein Teilchen weite Umwege gehen, um das Gesamtsystem zu durchschreiten. Die Perkolation ist ein Gebiet der statistischen Physik, bei dem Phasenübergänge zweiter Ordnung beobachtet werden. An dieser Stelle eine Einführung zu geben, würde den Rahmen des Berichts bei weitem sprengen. Das Konzept der Perkolation wird hier nur erwähnt, um aufzuzeigen, daß eine theoretische Behandlung, z.B. für die Kalibrierung, an einigen Stellen durch Simulationen ersetzt werden muß.

Es ist interessant zu beobachten, daß im natürlichen Boden ebenfalls eingefrorene Unordnung realisiert ist. Das komplizierte Flechtwerk aus Poren und Kapillaren verändert sich nicht ständig, während es vom Wasser durchflossen wird.

## 6.2 Bodenwasser: Ersatzdynamiken

Wie bereits erwähnt wurde, folgt die Bewegung des Bodenwassers in der ungesättigten Zone in ausgezeichneter Näherung der Darcy-Gleichung. Für einen Großteil der Anwendungen sind aber die hydraulischen Funktionen für Permeabilität und Saugspannung nicht verfügbar. Außerdem zeigt die Spannungskurve meist deutliche Hysterese, das bedeutet beim Entwässern wird eine andere Spannung gemessen als beim Bewässern.

Ein Simulationsmodell muß sich daher nicht nur danach beurteilen lassen, wie genau es die physikalischen Verhältnisse berücksichtigt, sondern auch im Hinblick auf seine Anwendbarkeit. Eines der populärsten Modelle ist das Kapazitätsmodell, das mit der Darcy-Gleichung nur sehr wenig zu tun hat. Es kommt ohne das Konzept der Saugspannung aus und schüttet gewissermaßen die Wassermenge, die über der „Kapazität“ einer Bodenschicht liegt, in die nächst darunterliegende Schicht. Trotz erheblicher Schwächen quantitativer und auch qualitativer Art (Wasser kann z.B. nicht von unten nach oben fließen) erfreut es sich großer Beliebtheit. Die Mängel werden in Kauf genommen, weil das Modell nur sehr wenige Parameter benötigt, die relativ einfach aus Bodenproben abgeschätzt werden können. Diese sind im wesentlichen Feldkapazität, permanenter Welkepunkt und eine globale Wasserleitfähigkeit.

Die Anspruchslosigkeit bezüglich Eingabeparametern von Kapazitätsmodellen sollte man auch auf eine Darcy-Simulation übertragen können. Dazu müssen einem Satz weniger Parameter wie Feldkapazität, Korngrößenverteilung, etc. hydraulische Funktionen zugeordnet werden. Selbstverständlich kann die Modellierung nur so gut sein wie die Korrelation zwischen den globalen Parametern und hydraulischen Funktionen. Das gilt aber gleichermaßen für Kapazitätsmodelle, bei denen *zusätzlich* eine unzutreffende Modellierung akzeptiert wird. Es ist daher zu

erwarten, daß eine sorgfältige Untersuchung der Zusammenhänge zwischen leicht zugänglichen Bodenparametern einerseits und hydraulischen Funktionen andererseits ein Darcy-Modell liefert, das mindestens so gute Prognose erlaubt wie ein Kapazitätsmodell. Es wäre genauso anspruchslos bezüglich der Eingabeparameter, würde aber auch erlauben, Prozesse wie kapillaren Aufstieg zu modellieren.

## 7 Danksagungen

Diese Arbeit wurde ins Leben gerufen und kontinuierlich begleitet von Herrn Prof. Schüürmann. Sein Urteil stand mir zu Fragen der Umweltchemie und Ökotoxikologie als sichere Referenz jederzeit zur Verfügung. Von Herrn Dr. Manz und Herrn Dr. Schädlich habe ich gelernt, daß Permeabilitätskurven nicht nur aus *first principles* Technungen und von Meßprotokollen abgelesen werden können, sondern auch durch Kneten und Zerreiben von Erde mit den bloßen Händen. Die Arbeit wurde durch den Projektbereich Agrarlandschaften unterstützt. Durch dessen Leiterin, Frau Prof. Mühle, fand ich Zugang zu wertvollen Diskussionen mit Herrn Dr. Franko und Herrn Dr. Lazik, UFZ Bad Lauchstädt, Herrn Dr. Meißner, UFZ Magdeburg/Falkenberg und über die Helmholtz Gesellschaft mit Herrn Dr. Vereecken, ICG-4 Jülich. Herr Kleint und Herr Ebert haben meine sich ständig wiederholenden Fragen zum Rechnersystem bis zum Schluß beantwortet. Von vielen anderen Wissenschaftlern des UFZ, insbesondere der Sektion Chemische Ökotoxikologie, habe ich profitiert — sowohl durch ihr Wissen als auch durch die kooperative Atmosphäre. Ihnen allen sei herzlich gedankt.

## 8 Literaturverzeichnis

- Balasubramanian, K., F. Hayot, und W.F. Saam, Darcy's law from lattice-gas hydrodynamics. *Physical Review A*, **36**, 2248-2253, 1987.
- Bear, J., und A. Verruijt, *Modeling groundwater flow and pollution*, Dordrecht: Kluwer, 414 pp, 1987.
- Boesten, J.J.T.I., Users Manual for Version 2.3 of PESTLA, *Internal Communication* **275**, DLO Winand Staring Centre, Wageningen, Netherlands, 1993.
- Clouqueur, A. , und D. d'Humières, RAP1, a Cellular Automaton Machine for Fluid Dynamics, *Complex Systems*, **1**, 585-597, 1987.
- Darcy, H., *Les Fontaines Publiques de la Ville de Dijon*, Paris: Dalmont, 1856.
- Doolen, G.D., (Herausgeber), *Lattice Gas Methods for Partial Differential Equations*, Addison-Wesley, Reading, MA, 1989.

- Doolen, G.D., (Herausgeber), *Physica D* **47**, 1991.
- Frisch, U., B. Hasslacher, und Y. Pomeau, Lattice-gas automata for the Navier-Stokes equation. *Physical Review Letters*, **56**, 1505-1508, 1986.
- Frisch, U., D. d'Humières, B. Hasslacher, P. Lallemand, Y. Pomeau, und J.-P. Rivet, Lattice gas hydrodynamics in two and three dimensions. *Complex Systems*, **1**, 649-707, 1987.
- Papatzacos, P., Cellular automaton model for fluid flow in porous media. *Complex Systems*, **3**, 383-405, 1988.
- Scheffer, F. und P. Schachtschabel (Herausgeber), *Lehrbuch der Bodenkunde*, 10. Aufl., Stuttgart, 1979.
- Semra, K., P. Ackerer, und R. Mosé, Three dimensional groundwater quality modeling in heterogeneous media, in *Water Pollution II: Modeling, Measuring and Prediction*, herausgegeben von L.C. Wrobel und C.A. Brebbia, Comput. Mech. Publ., Southampton, 3-11, 1993.
- Uffink, G.J.M., A Random-walk Method for the Simulation of Macrodispersion in a Stratified Aquifer. *Proceedings of the IAHS Symposia*, **H52**, 1983.
- Vollmayr, H., Statistical Simulation of Water and Pesticide Movement in the Unsaturated Zone, in *Pesticide Movement to Water*, herausgegeben von A. Walker et al., BCPC Monograph **62**, 141-146, 1995.
- Vollmayr, H., Lattice Gas Simulation of Darcy Flow with Memory-free Collisions, *Transport in Porous Media* **22**, 137-159, 1996.
- Vollmayr, H., F. Kleint und G. Schüürmann, Discrete Modeling of Water and Pesticide Movement in Soil, eingeschickt zu *Water Resources Research*, 1996.
- Walker, A., R. Allen, S.W. Bailey, A.M. Blair, C.D. Brown, P. Günther, C.R. Leake, und P.H. Nicholls, (Herausgeber), *Pesticide Movement to Water*, BCPC Monograph **62**, 1995.
- Wesseling, J.G., J.A. Elbers, P. Kabat, P., und B.J. van den Broek, SWACROP — Instructions for Input, *Internal Communication* **80**, DLO Winand Staring Centre, Wageningen, Netherlands, 1990.

Autor:

Hans Vollmayr  
UFZ-Umweltforschungszentrum Leipzig-Halle GmbH  
Sektion Chemische Ökotoxikologie  
Permoserstraße 15, D-04318 Leipzig  
PF 2, D-04301 Leipzig  
Telefon 0341/235-2309  
Telefax 0341/235-2401