



TECHNISCHE  
UNIVERSITÄT  
WIEN  
Vienna University of Technology

## DIPLOMARBEIT

# Simulation der Wasseraufnahme von Pflanzenwurzeln in verschiedenen Bodenarten

Ausgeführt am Institut für  
Analysis und Scientific Computing  
der Technischen Universität Wien  
und am Department für  
Bodenforschung  
der Universität für Bodenkultur Wien

unter der Anleitung von  
Ao.Univ.Prof. Dipl.-Ing. Dr.sc.med. Dr.techn. Dr.rer.nat. Frank Rattay  
Dipl.-Ing. Dr Sabine Klepsch  
Dipl.-Ing. Dr Daniel Leitner  
Dipl.-Ing. Dr Andrea Schnepf

durch  
Birgit Hischenhuber  
1220 Wien



## Zusammenfassung

Diese Arbeit untersucht mittels Simulation die Wasseraufnahme von Pflanzenwurzeln in verschiedenen Bodenarten, um herauszufinden, in welchem Boden die Pflanze am besten Wasser aufnehmen kann. Außerdem wird untersucht, in welchem Ausmaß die relative Sättigung des Bodens eine Rolle spielt.

Ausgehend von der Modellgleichung, einer nichtlinearen Richardsgleichung, wird nach einer geeigneten mathematischen Methode gesucht, die sich dem Problem optimal anpasst. Hierzu werden drei Finite Elemente Methoden verglichen, die Galerkin-Methode, die Stromliniendiffusionsmethode und die diskontinuierliche Galerkin-Methode. Auf Grund des parabolischen Verhaltens der Gleichung wird mit der Galerkin-Methode gearbeitet. Die nichtlinearen Funktionen in der Richardsgleichung werden mit Hilfe des Newton-Verfahrens gelöst. Sie werden linearisiert und in die diskretisierte schwache Formulierung eingesetzt.

Die Simulationen werden mit VienneFEM durchgeführt, einem auf C++ basierendem Programm, bei dem die volle mathematische Flexibilität der Problemstellung erhalten bleibt. Die Visualisierung erfolgt mittels ParaView.

Das Verfahren ist nun auch praktisch anwendbar, dabei werden üblicherweise die Boden- und Wurzelparameter gemäß einer Transformation aus Kapitel 5 dimensionslos gemacht. Das Computereperiment wird in einem  $1 * 1 * 1 \text{ m}^3$  Würfel, der den Boden darstellt, ausgewertet. Anschließend wird als Vergleich ein dimensionales Beispiel präsentiert.

Aus den Ergebnissen in Kapitel 6 zeigt sich, dass die Wurzeln in *Touchet* schluffigem Löss und in *Hygiene* Sandstein das Wasser schneller aufnehmen, als in den Bodenarten *Beit Netofa* Klei und schluffigem Löss. Weiters zeigen die Ergebnisse, dass *Touchet* schluffiger Löss und *Hygiene* Sandstein schnell gesättigt sind.

Außerdem wird der Unterschied zu einer niedrigeren relativen Anfangssättigung gezeigt. Durch Änderung der Randbedingung wird schlussendlich ein Beispiel einer Evaporation dargestellt.

## Abstract

This diploma thesis analyses through mathematical simulation the wateruptake of plant roots in various soils. The aim is to find out the best suitable soil for the plant. Furthermore, the degree of the relative saturation of the earth is determined.

Based on the equation of the model, a nonlinear Richards equation, an appropriate mathematical method is searched, which optimally adjusts the problem. Therefore three finite element methods are compared, the Galerkin Method, the Streamline Upwind Petrov-Galerkin Method and the discontinuous Galerkin Method. Due to parabolic characteristic, the Galerkin Method ist used to solve the equation. The nonlinear functions in the Richards equation are solved with the Newton method. They are linearised and used in the discrete, weak formulation. The simulations are run with ViennaFEM, a program which is based on C++. The fully mathematical flexibility of a problem is implemented in this program. Finally the results are visualised in ParaView.

This method is now practically applicable. The soil- and rootparameters are transformed in nondimensional parameters with equations described in chapter 5. The computer experiment is evaluated in a  $1 * 1 * 1 \text{ m}^3$  cube, which represent the soil. Additionally a dimensional example is presented as comparison.

Based on the results of the simulations of the wateruptake in various soils in chapter 6, the roots in Touchet Silt Loam and Hygiene Sandstone take up the water faster than in Beit Netofa Clay and Silt Loam. Moreover the results show that Touchet Silt Loam and Hygiene Sandstone are saturated very fast. Furthermore the difference incomparison to a lower relative saturation at the beginning is presented. By changing the boundary condition an example of an evaporation is demonstrated.

## Danksagung

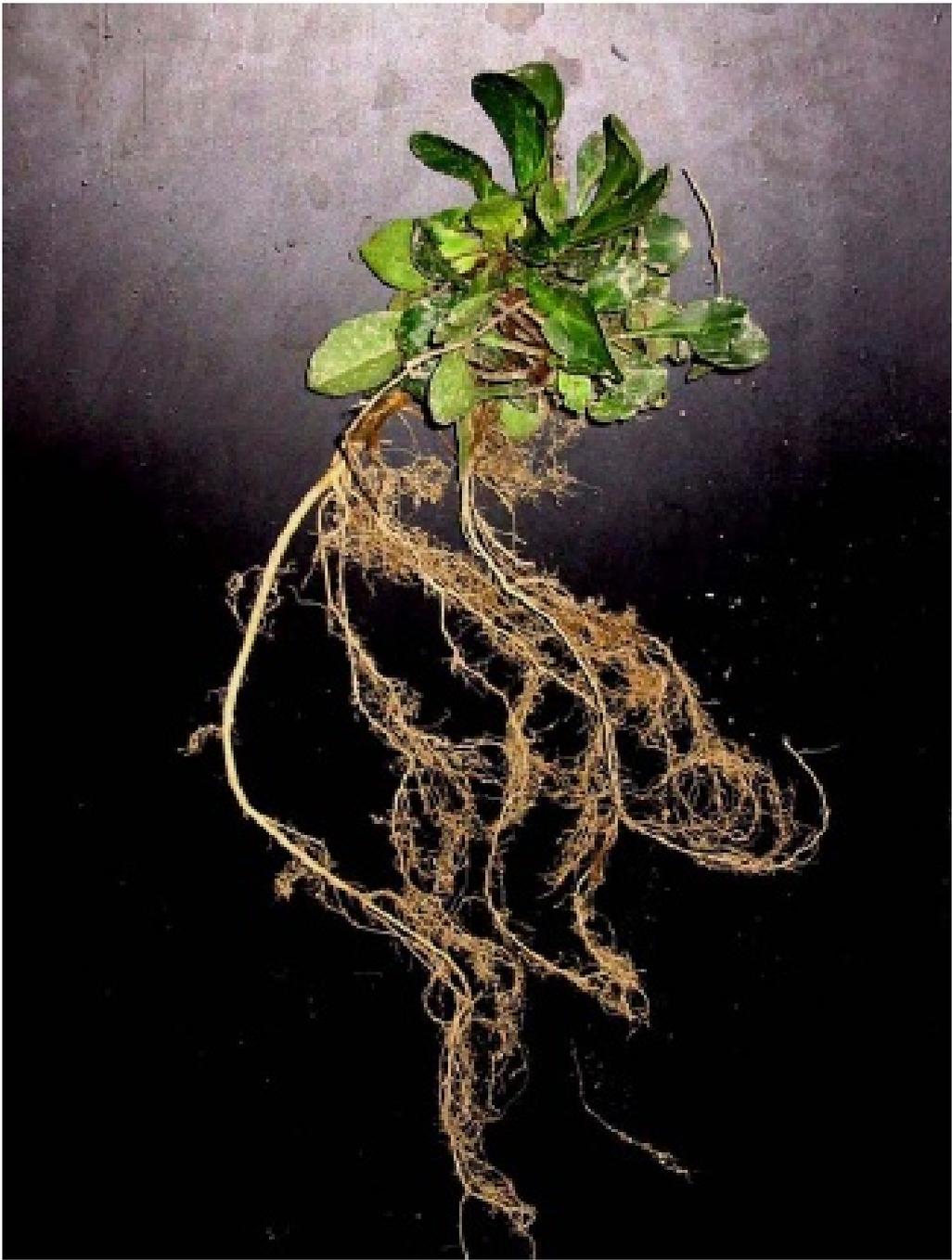
Ich möchte mich bei Professor Frank Rattay bedanken, der mir dieses interessante Thema vermittelt hat, sowie beim Team des Departments für Bodenforschung, das mich beim Einarbeiten in die Bodenphysik sehr unterstützte.

Ich möchte mich auch bei Karl Rupp bedanken, der mir sein Programm *Vienna-FEM* für die Implementierung einer Richardsgleichung zur Verfügung stellte.

Ein großer Dank geht an meine Eltern, die mir dieses Studium ermöglicht haben und meine Familie, die mich immer wieder unterstützt hat.

Weiters möchte ich mich bei meinen Freunden und Studienkollegen für die Motivation und die gute Zusammenarbeit während des Studiums bedanken.







---

# Inhaltsverzeichnis

---

Inhaltsverzeichnis	i
<b>1 Einleitung</b>	<b>1</b>
<b>2 Bodenphysikalische Grundlagen</b>	<b>5</b>
2.1 Eigenschaften und Einteilung des Bodens und des Bodenwassers . . .	5
2.1.1 Der Boden . . . . .	5
2.1.2 Das Bodenwasser . . . . .	7
2.2 Potentiale . . . . .	9
2.3 Sättigung und Van-Genuchten-Kurve . . . . .	12
2.3.1 Effektive Sättigung $S$ . . . . .	12
2.3.2 Van-Genuchten-Kurve . . . . .	13
2.4 Bewegung des Bodenwassers . . . . .	14
<b>3 Das Modell der Wasseraufnahme in 3D</b>	<b>19</b>
3.1 Beschreibung der Wasserbewegung im Boden . . . . .	19
3.1.1 Die Richardsgleichung . . . . .	20
3.1.2 Die Randbedingungen . . . . .	22
3.2 Wasseraufnahme durch Wurzeln - Bestimmung eines Quellterms $F_W$	22
3.2.1 Wasseraufnahme durch eine einzelne Wurzel . . . . .	23
3.2.2 Wasseraufnahme durch ein Wurzelsystem . . . . .	29
3.3 Zusammenfassung in 3D . . . . .	32
<b>4 Finite Elemente Methoden</b>	<b>35</b>
4.1 Einleitung in die Finite Elemente Methoden . . . . .	35
4.2 Galerkin Verfahren . . . . .	36
4.2.1 Grundidee des Galerkin-Verfahrens . . . . .	36
4.2.2 Beispiel anhand eines Konvektions-Diffusions-Problems . . .	40
4.2.3 Konvergenzanalyse des Galerkin-Verfahrens . . . . .	42
4.3 Stromliniendiffusionsmethode . . . . .	44

4.3.1	Demonstration anhand eines Konvektions-Diffusions-Problems	44
4.3.2	Konvergenzanalyse der Stromliniendiffusionsmethode . . .	45
4.4	Diskontinuierliche Galerkin-Methode . . . . .	50
4.4.1	Demonstration anhand eines Reaktion-Diffusions-Problems	50
4.4.2	Demonstration anhand eines Konvektion-Problems . . . . .	53
4.4.3	Demonstration anhand eines Konvektions-Diffusions-Problems	55
4.5	Zeitdiskretisierung . . . . .	56
<b>5</b>	<b>Diskretisierung der Richardsgleichung und Simulation</b>	<b>57</b>
5.1	Parameterwahl und Nichtdimensionalisierung . . . . .	57
5.1.1	Parameterwahl . . . . .	57
5.1.2	Nichtdimensionalisierung der Richardsgleichung . . . . .	58
5.1.3	Nichtdimensionalisierung der Erhaltungsgleichung . . . . .	60
5.1.4	Linearisierung durch das Newtonverfahren . . . . .	61
5.2	Umsetzung der Richardsgleichung in ViennaFEM . . . . .	63
5.2.1	Wichtigste Programmausschnitte . . . . .	63
5.2.2	Implementierung der Richardsgleichung . . . . .	65
<b>6</b>	<b>Ergebnisse und Auswertung</b>	<b>71</b>
6.1	Simulationsergebnisse . . . . .	71
6.1.1	Vergleich verschiedener Böden . . . . .	73
6.1.2	Nacht . . . . .	79
6.1.3	Sättigungsänderungen . . . . .	80
6.1.4	Evaporation . . . . .	81
6.1.5	Dimensionales Modell . . . . .	83
6.2	Schlussfolgerung . . . . .	84
6.3	Ausblick . . . . .	84
6.3.1	Koppelung mit der Erhaltungsgleichung für den Wurzelin- nendruck . . . . .	85
6.3.2	Wurzelstruktur . . . . .	85
6.3.3	Randbedingungen . . . . .	85
	<b>Literaturverzeichnis</b>	<b>89</b>
	<b>A Vektorräume</b>	<b>93</b>
	<b>B Konvergenzordnungsabschätzungen</b>	<b>97</b>
	<b>C Numerische Verfahren</b>	<b>101</b>
C.1	Implizites Euler-Verfahren . . . . .	101
C.2	Newton-Verfahren . . . . .	101
	<b>Abbildungsverzeichnis</b>	<b>103</b>

*INHALTSVERZEICHNIS*

iii

**Tabellenverzeichnis**

**106**



# Kapitel 1

---

## Einleitung

---

In der heutigen Zeit nimmt der Umweltschutzgedanke eine immer größere Rolle in unserer Gesellschaft ein. Er ist ein zentrales Thema in Politik, Wissenschaft und Wirtschaft. Industrie und Forschung erzeugen immer schneller neuere Technologien, gleichzeitig werden gewisse Ressourcen knapper. Der Großteil der Unternehmen betrachtet die Umwelt nicht mehr als selbstverständlich, sondern legt Wert auf umweltfreundlichere Produktionen und auf einen effizienteren Umgang mit den zur Verfügung stehenden Ressourcen. Vor allem im Bereich der Land- und Forstwirtschaft wird dieses Verhalten deutlich. Jahrelang wurden durch einen großen Technik- und Energieaufwand die Böden zur Produktion immer größerer Biomassen gebracht. Dieses Verhalten führte im Laufe der Zeit dazu, dass teilweise die Kapazitäten der Böden deutlich überschritten wurden. Sie wurden erosionsanfälliger und die Qualität der Böden sank. Inzwischen werden viele Schäden durch umfassende Grundlagenforschungen und die daraus resultierenden neuen Umwelttechnologien im Vorfeld abgefangen.

Heutzutage steht die interdisziplinäre Zusammenarbeit im Vordergrund der Forschung. Somit arbeiten Disziplinen, die bis vor kurzem noch eher theoretisch orientiert waren mit angewandten Disziplinen zusammen. Anstelle von Experimenten und langzeitigen Beobachtungen von Naturphänomenen setzt man immer öfter auf die Entwicklung passender Modelle, die mit Hilfe des Computers simuliert werden können. Auch in der Bodenforschung werden zusätzlich zu so genannten *Blumentopffexperimenten* mathematische Modelle erstellt, die verschiedenste Bodenvorgänge beschreiben.

Eines dieser Forschungsprojekte läuft derzeit unter dem Namen *Mathematics and Rhizotechnology, Mathematical methods for upscaling of rhizosphere control mechanisms* an der *Universität für Bodenkultur* in Wien unter der Leitung von

Andrea Schnepf und Sabine Klepsch. Projektpartner sind die *Technische Universität Wien* und die *University of Oxford*. Ziel dieses Projekts ist die Entwicklung neuer Modelle für die in der Rhizosphäre vorkommenden Prozesse zwischen Boden und Pflanze. Der Begriff *Rhizosphäre* bezeichnet den durch eine Wurzel beeinflussten Raum im Boden, der sich durch vielfache Wechselwirkung zwischen Wurzel und Bodenorganismen, wie Pilzen oder Nematoden, auszeichnet. Es wird nun versucht mit Hilfe dieser Prozesse die pflanzliche Erzeugung zu optimieren, indem man direkt oder indirekt auf einen oder mehrere Prozesse Einfluss nimmt, und somit zum Beispiel das Pflanzenwachstum auf natürliche Weise maximiert. Weiters möchte man gewisse Prozesse, die nur im kleinen Maßstab einer einzelnen Wurzel untersucht worden sind, auf das ganze Wurzelsystem übertragen und eventuelle Veränderungen beobachten. Hierzu benötigt man allerdings eine Methode zur Modellierung eines ganzen Wurzelsystems. Für einfache Wurzelgeometrien gibt es derzeit einige akzeptable Approximationen, doch für komplexere Wurzelstrukturen gibt es bis jetzt keine zufrieden stellenden Modellierungen. Zur Entwicklung solcher Strukturen wird mit Upscaling-Methoden wie Averaging und Homogenisierung gearbeitet. Die Forschungsergebnisse sollen in den Bereichen der Nahrungsmittelqualität, Nahrungsmittelsicherheit, Umweltverträglichkeit von Anbautechniken und der Sanierung kontaminierter Böden mit Hilfe von Pflanzen von Nutzen sein.

Im Zuge dieses Projekts entstand diese Diplomarbeit, die sich als Hauptthematik mit der Wasseraufnahme von Pflanzenwurzeln beschäftigt. Das Modell stammt von Tiina Roose [Roose et al., 2004] und wird dreidimensional simuliert. Es handelt sich hierbei um eine so genannte *Richardsgleichung*, einer partiellen Differentialgleichung, die die Strömung in einem porösen Medium beschreibt. In dem Modell wird die Wasserbewegung vom Boden in die Wurzel beschrieben. Die Geometrie der Wurzel wird in diesem Modell durch einen Senkterm modelliert.

Die numerischen Simulationen werden mit ViennaFEM [Rupp, 2008], einem auf C++ - basierendem Programm zum Lösen von Differentialgleichungen, durchgeführt. Das zugrunde liegende numerische Verfahren ist das Galerkin-Verfahren, eine Finite Elemente Methode. Für die Visualisierungen und nachträgliche Bearbeitungen wird das Programm ParaView [ParaView, 2008] verwendet.

Kapitel 2 beinhaltet die bodenphysikalischen Grundlagen, die für das Verständnis des Modells notwendig und hilfreich sind. Darunter wird die Einteilung des Bodens, die Definitionen der Potentiale, die Definition der Sättigung und die van-Genuchten-Gleichung, die für das Modell verwendet wird, sowie die Bewegung des Wassers beschrieben.

In Kapitel 3 wird das Modell der Wasseraufnahme von Wurzeln hergeleitet. Dieses Kapitel beruht auf dem Paper von Tiina Roose [Roose et al., 2004].

Kapitel 4 stellt drei Verfahren vor, die zu den Finite Elemente Methoden gehören. Dazu zählen das Galerkin-Verfahren, das am bekanntesten ist, sowie die Stromliniendiffusionsmethode und die diskontinuierliche Galerkin-Methode. Die Richardsgleichung des Modells weist parabolisches Verhalten auf, darum wird in dieser Arbeit mit der Galerkin-Methode gearbeitet.

Die Diskretisierung der Richardsgleichung aus Kapitel 3 und Implementierung in ViennaFEM sind Inhalt von Kapitel 5. Außerdem werden die nichtlinearen Funktionen mit Hilfe des Newtonverfahrens linearisiert. Aus ViennaFEM werden einige relevante Programmausschnitte vorgestellt, wie die Eingabe der Randbedingungen oder die Aufstellung der Systemmatrix.

Die Auswertungen und Ergebnisse werden im Kapitel 6 beschrieben.

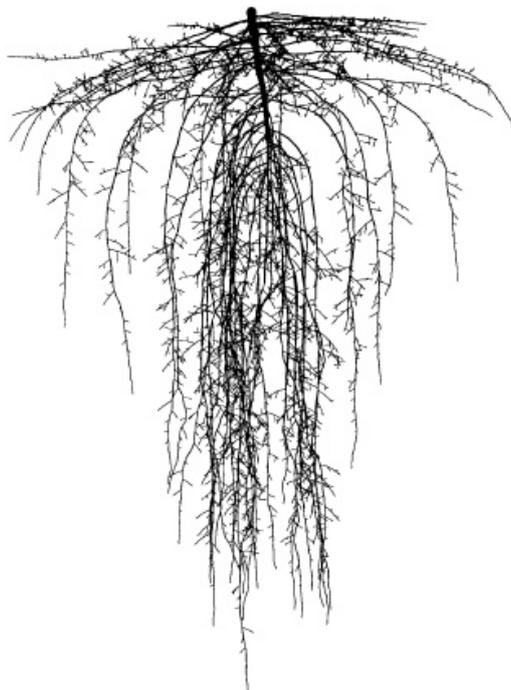


Abbildung 1.1: Simuliertes Wurzelsystem der *Euphorbia hetioscopa*; [Pages et al., 2004].



## Kapitel 2

---

# Bodenphysikalische Grundlagen

---

Für das Modell, das in Kapitel 3 beschrieben wird, werden einige bodenphysikalische Grundlagen benötigt, die in diesem Kapitel eingeführt werden sollen.

### 2.1 Eigenschaften und Einteilung des Bodens und des Bodenwassers

#### 2.1.1 Der Boden

Der Boden ist ein poröses *Mehrphasensystem*. Er besteht aus Feststoffen und Poren, welche Wasser und Luft enthalten.

Eine *Phase* eines betreffenden Stoffes nennt man Materie mit homogener chemischer Zusammensetzung und räumlich konstantem physikalischem Zustand. [Atkins, 2006]

Eine *Pore* kann, räumlich gesehen, ein Kanal, eine Röhre, eine Kapillare, eine Spaltfläche oder ein Riss sein. Physikalisch gesehen ist eine Pore ein Porenraumanteil, der in einem bestimmten Wasserspannungsbereich entwässert wird (Äquivalenzbegriff).

Die Porenstruktur des Bodens ist für das hydraulische Leit- und Speicherverhalten von entscheidender Bedeutung. Der Zusammenhang zwischen den Kapillarkräften (in Form des Kapillardrucks bzw. der kapillaren Steighöhe), den geometrischen Abmessungen (Porenradius, Kornradius, Porenlänge) und dem gehaltenen Wasservolumen kann bei einfachen geometrischen Formen physikalisch nahezu exakt hergestellt werden. Die Porenstruktur ist extrem variabel. Man darf also nicht davon ausgehen, dass die *Bodenmatrix* aus lauter gleich großen Kugeln oder

zylindrischen Poren besteht.

Modellierung der Porenstruktur:

Annahme: Der betrachtete Boden befindet sich in einem Stechzylinder.

Eine kreiszylindrische Ersatzpore hat 2 Parameter, durch die sie festgelegt ist: Länge  $l$  und Durchmesser  $d$ .

Die Länge  $l$  der Ersatzpore wird gleich der Stechzylinderhöhe  $h$  gesetzt. Der Durchmesser der kreiszylindrischen Ersatzpore ist der bestimmende Parameter für das hydraulische Verhalten. Es wird ein *äquivalenter Porendurchmesser*  $d$  gesucht, sodass die Ersatzpore unter denselben Bedingungen entwässert (oder Wasser aufnimmt) wie die echte Pore. Für eine sehr theoretische Porenform lässt sich ein eindeutiger Porendurchmesser zuordnen, und zwar entspricht er bei einem sich nach unten öffnenden Kegelstumpf dem Kleinstdurchmesser der Pore, weil diese genau dann entwässert, wenn die Wasserspannung die Haltekraft des oberen (kleineren) Meniskus übersteigt.

In Folge kann man nun ein ganzes Porensystem mit Hilfe des so genannten *Kapillarenbündel-Modells* modellieren. Man hat nun jeder echten Pore eine kreiszylindrische Pore mit der Länge  $h$  und dem Durchmesser  $d$  zugeordnet, wobei es unterschiedlich viele Ersatzporen wie echte Poren gibt (auf Grund der Längenkompensation). Man erhält nun ein Bündel an unterschiedlich dicken kreiszylindrischen Kapillaren, wobei grundsätzlich viel mehr kleinere Durchmesser als große vertreten sind. Diese Vorstellung vom Porensystem nennt man Kapillarenbündel-Modell [Loiskandl et al., 2010].

Bei *gesättigten Böden* sind alle Poren mit Wasser gefüllt, während bei *ungesättigten Böden* auch Luft in den Poren enthalten sein kann.

Für theoretische Überlegungen werden nun folgende Voraussetzungen für den Boden angenommen:

Es muss ein *Bezugs- bzw. Kontrollvolumen* festgelegt werden, um z.B. die anteiligen Volumina der einzelnen Phasen oder Poren in einem Punkt des Bodens angeben zu können. Bei diesem Modell der Strömungslehre handelt es sich um ein Raumelement, das von einer geschlossenen Kontrollfläche berandet ist. Auf dieser Kontrollfläche sind strömungsrelevante Parameter bekannt, wie z.B. Druck, Geschwindigkeit, . . . .

Für den Wasser- und Stofftransport sind die Poren ausschlaggebend. Bei der Modellierung der Wasserbewegung und des Stofftransports in Böden auf makroskopischer Ebene ist die Berücksichtigung der komplexen mikroskopischen Struktur der Poren unrealistisch. Die geometrische Struktur der Poren wird daher meist

vernachlässigt. Dazu wird das Modell des so genannten *repräsentativen Elementarvolumens* (REV) herangezogen, womit man ein durchströmtes poröses Medium als Kontinuum darstellt. Jedem Punkt wird ein infinitesimales Volumenelement zugeordnet, sodass es für einen relevanten Parameter hinreichend groß ist, um einen statistisch verlässlichen Mittelwert dieses Parameters zu repräsentieren. Allerdings sollte das Volumenelement so hinreichend klein sein, dass sich beim Übergang zum benachbarten REV der Parameter nur quasi stetig ändert. Daraus folgt, dass die Eigenschaften im Boden von der Größe des Kontrollvolumens und vom betrachteten Raumpunkt abhängen. Die Größe der Eigenschaften als auch deren Abhängigkeit sind variabel mit der Größe des Kontrollvolumens bzw. des REV.

Mikroskopisch gesehen ist der Boden nie homogen; makroskopisch (wenn man einen genügend großen Ausschnitt betrachtet) kann er jedoch homogen sein [Loiskandl et al., 2010].

Die Volumen- oder Massenanteile, die räumliche Anordnung der Feststoffphase und damit indirekt des Porenraums können für viele Probleme als zeitlich konstant erachtet werden. Anders ist es bei den Anteilen der wässrigen Phase und der Bodenluft, die zeitlich variabel sind und den Zustand des Bodens in bodenphysikalischen Prozessen charakterisieren.

Die Bodenmatrix, die aus Feststoffpartikel gebildet ist, ist am Wasser- und Stofftransport nur indirekt beteiligt und spielt eher bei der Bodenmechanik eine größere Rolle, das heißt, äußere Kräfte (wie z.B. eine Bodenbelastung durch Befahren, . . .) werden im ungesättigten Boden ausnahmslos von den Feststoffpartikel aufgenommen, die auf diese Kräfte durch (geringe) gegenseitige Verschiebung reagieren [Loiskandl et al., 2010].

### 2.1.2 Das Bodenwasser

Das Bodenwasser wird in *Grundwasser* und *Haftwasser* eingeteilt. Beim Haftwasser wird weiters in *Adsorptionswasser* und *Kapillarwasser* unterschieden.

Das Grundwasser ist unterirdisches Wasser, das die Hohlräume der Erdrinde zusammenhängend ausfüllt und unter gleichem oder größerem Druck steht als er in der Atmosphäre herrscht, und dessen Bewegung wird durch Schwerkraft und Reibungskräfte bestimmt [ÖNORM, 1986].

Das Adsorptionswasser ist jenes Wasser, das an die gesamte Oberfläche der Teilchen durch osmotische und Adsorptionskräfte angelagert wird.

Das Kapillarwasser wird in den kapillaren Zwischenräumen durch Oberflächen-

spannung festgehalten.

Das Wasser tritt im Boden überwiegend als benetzende flüssige Phase auf. Im Bodenwasser bzw. in dieser benetzenden flüssigen Phase sind Inhaltsstoffe im Allgemeinen in größeren Konzentrationen als im Grundwasser gelöst. Die *Dichte des Wassers*  $\rho$  ( $[\rho] = \text{kg m}^{-3}$ ) in der Flüssigphase kann für die meisten bodenphysikalischen Vorgänge als konstant betrachtet werden.

In der Bodenluft tritt Wasser bei durchschnittlich viel höheren relativen Luftfeuchtigkeiten als in der freien Atmosphäre als Dampf auf. Die Bodenluft ist thermodynamisch als Gas-Dampf-Gemisch zu betrachten. Ihre Dichte ist stark vom Druck, von der Temperatur bzw. von den dort herrschenden thermodynamischen Zuständen abhängig.

Ein anderer Begriff, der im Zuge dieser Arbeit im Zusammenhang mit Bodenwasser zu betrachten ist, ist jener der *Viskosität*. Man unterscheidet zwischen *dynamischer Viskosität*  $\eta$  und der *kinematischen Viskosität*  $\nu = \eta/\rho$ .

Die dynamische Viskosität ist eine stark stoffabhängige Größe und in erster Linie eine Funktion in Abhängigkeit der Temperatur. Sie steht nur gering in Relation zum Druck. Unter der dynamischen Viskosität versteht man die Kraft pro Flächeneinheit, die erforderlich ist, um eine Geschwindigkeitsdifferenz von 1 m/s zwischen zwei Flüssigkeitsschichten im Abstand von 1 m aufrecht zu erhalten. Frisches, doppelt destilliertes Wasser bei 20 °C und einem Druck der Normatmosphäre von 0,101325 MPa hat eine dynamische Viskosität von

$$\eta = 1,0016 \text{ m Pa s.}$$

Anmerkung: Die Viskosität von Wasser wird mit zunehmender Temperatur geringer (ca. 3% pro 1 °C). (Bei Luft ist es umgekehrt.)

Die *spezifische Wärmekapazität*  $c$  ist von der Molekülmasse  $m$ , der Anzahl der Freiheitsgrade  $f$  (kommen durch die Bewegung der Moleküle zustande) und von der Temperatur abhängig.

Ein homogener Körper mit der Masse  $M$ , dessen Moleküle die Masse  $m$  besitzen und  $f$  Freiheitsgrade der Bewegung aufweisen, enthält  $M/m$  Moleküle und die mittlere Gesamtenergie ist gegeben durch:

$$W = \frac{M}{m} \cdot \frac{f}{2} \cdot k \cdot T, \quad (2.1)$$

$W \dots [W] = \text{J}$ , Energie,  
 $M \dots [M] = \text{kg}$ , Masse des homogenen Körpers,  
 $m \dots [m] = \text{kg}$ , Masse eines einzelnen Moleküls,  
 $f \dots$  Anzahl der Freiheitsgrade,  
 $k \dots [k] = \text{JK}^{-1}$ , Boltzmann-Konstante,  $k = (1,380658 \pm 0,000012) \times 10^{-23} \text{JK}^{-1}$ ,  
 $T \dots [T] = \text{K}$ , Temperatur in Kelvin.

Um den Körper um  $\Delta T$  zu erwärmen, muss man  $\Delta W$  Energie zuführen:

$$\Delta W = \frac{M}{m} \cdot \frac{f}{2} \cdot k \cdot \Delta T, \quad (2.2)$$

$\Delta T \dots [\Delta T] = \text{K}$ , Temperaturerhöhung.

Das Verhältnis

$$C_{K\oerper} = \frac{\Delta W}{\Delta T} = \frac{M}{m} \cdot \frac{f}{2} \cdot k \quad (2.3)$$

wird als Wärmekapazität  $C_{K\oerper}$  ( $[C_{K\oerper}] = \text{JK}^{-1}$ ) des Körpers bezeichnet. In der Bodenphysik wird die Wärmekapazität im Allgemeinen auf das Volumen bezogen. Wenn der homogene Körper die Masse  $M$  und die Dichte  $\rho = M/V$  besitzt, so beträgt sein Volumen  $V = M/\rho$ .

Die volumenbezogene Wärmekapazität, in der Bodenphysik kurz *Wärmekapazität*  $C$  genannt, beträgt daher [Kastenek, 1980]:

$$C = \frac{C_{K\oerper}}{V_{K\oerper}} = \frac{\Delta W}{\Delta T} \cdot \frac{\rho}{M} = \frac{\rho}{m} \cdot \frac{f}{2} \cdot k \quad (2.4)$$

$C \dots [C] = \text{Jm}^{-3}\text{K}^{-1}$ , Wärmekapazität eines Stoffes.

Wird die Wärmekapazität eines Stoffes hingegen auf seine Masse bezogen, so erhält man die *spezifische Wärmekapazität*  $c$  [Loiskandl et al., 2008], [Loiskandl et al., 2010]:

$$c = \frac{C_{K\oerper}}{M_{K\oerper}} = \frac{\Delta W}{\Delta T \cdot M} = \frac{f \cdot k}{2 \cdot m}, \quad (2.5)$$

$c \dots [c] = \text{Jkg}^{-1}\text{K}^{-1}$ , spezifische Wärmekapazität eines Stoffes.

## 2.2 Potentiale

Die Internationale Bodenkundliche Gesellschaft (IBG) definiert den Energiezustand des Bodens in Form von verschiedenen Energieinhalten (Potentiale) [IBG-Bulletin, 1976]. Auf Grund der geringen Fließgeschwindigkeiten wird der kinetische Anteil vernachlässigt.

Wasserbewegung kommt nur zustande, wenn Unterschiede im Energieinhalt vorhanden sind, denn dann bewegt sich das Wasser vom höheren zum niedrigeren Potential. In der Bodenphysik werden Potentiale als Energie pro Massen-, Volums- oder Gewichtseinheit angegeben.

Das *Bodenwasserpotential*  $\psi$  entspricht per Definition jener Arbeit, die pro Einheit einer gewählten Bezugsgröße an reinem Wasser aufgewendet werden muss, um eine infinitesimale Menge Wasser von einem Bezugs- oder Ausgangssystem reversibel und isothermal in ein Zielsystem bzw. an den betrachteten Punkt im Boden zu bewegen [Soil Science Of America, 1997].

Das *Gesamtpotential*  $\psi_t$  des Wassers im Boden bei der Temperatur  $T_0$  entspricht jener Arbeit pro Masseneinheit reinem Wasser in J/kg, welche erforderlich ist, um eine infinitesimale Menge Wasser reversibel und isothermal aus einem Standardsystem  $S_0$  in das Wasser im Boden im betrachteten Punkt zu bewegen.

Das *Standardsystem*  $S_0$  ist definiert als ein Behälter mit reinem (d.h. das Wasser darf nicht durch gelöste Salze beeinflusst sein, somit ist das osmotische Potential gleich 0), freiem (d.h. das Wasser darf nicht vom Boden beeinflusst werden - Kapillarität) Wasser mit der Temperatur  $T_0$  in der Höhenlage  $h_0$  und bei einem atmosphärischen Druck  $P_0$ .

Da die Kräfte, die auf das Bodenwasser ausgeübt werden, unterschiedlichster Natur sind, kann das Gesamtpotential in verschiedene Teilpotentiale aufgeteilt werden:

$$\text{Gesamtpotential } \psi_t = \psi_g + \psi_o + \psi_p. \quad (2.6)$$

Das *Schwerkraftpotential*  $\psi_g$  des Wassers im Boden bei der Temperatur  $T_0$  entspricht jener Arbeit pro Masseneinheit reinen Wassers in J/kg, welche erforderlich ist, um eine infinitesimale Menge Wasser reversibel und isothermal aus dem Standardsystem  $S_0$  in das System  $S_1$  zu bewegen.

Das System  $S_1$  ist definiert als ein Behälter reinen, freien Wassers (wie in  $S_0$ ), jedoch in der Höhenlage des betrachteten Punktes bei sonst gleichen Bedingungen wie in  $S_0$ .

Dieses Potential kann aus der Höhendifferenz  $\Delta z = z_1 - z_0$  zwischen  $S_0$  und  $S_1$  ausgedrückt werden:

$$\psi_g = g \cdot \Delta z, \quad (2.7)$$

$g \dots [\text{g}] = \text{ms}^{-1}$ , Gravitationsbeschleunigung.

Durch das Schwerkraftpotential wird die Arbeit ausgedrückt, die erforderlich ist, um Wasser über die Erdoberfläche gegen die Schwerkraft zu heben.

Das *osmotische Potential*  $\psi_o$  des Wassers im Boden bei der Temperatur  $T_0$  entspricht jener Arbeit pro Masseneinheit reinem Wasser in J/kg, welche erforderlich ist, um eine infinitesimale Menge Wasser reversibel und isothermal aus einem System  $S_1$  in das System  $S_2$  zu bewegen.

Das System  $S_2$  ist definiert als ein Behälter mit einer Lösung der gleichen Zusammensetzung wie die Flüssigkeit im betrachteten Punkt, die einen osmotischen Druck besitzt, bei sonst gleichen Bedingungen wie  $S_1$ .

Dieses Potential kann in Form des messbaren osmotischen Druckes einer Lösung ausgedrückt werden:

$$\psi_o = - \int_0^\pi \bar{V}_w dP, \quad (2.8)$$

$\bar{V}_w$  ... spezifisches Volumen der Bodenwasserlösung.

Im osmotischen Potential kommt der verschiedene Energieinhalt von wässrigen Lösungen unterschiedlicher Konzentration zum Ausdruck.

Das *Druckpotential*  $\psi_p$  des Wassers entspricht jener Arbeit pro Masseneinheit reinem Wasser in J/kg, welche erforderlich ist, um eine infinitesimale Menge reinem Wasser reversibel und isothermal aus dem System  $S_2$  in den betrachteten Punkt im Boden bei dem dort herrschenden Wassergehalt zu bewegen. Dieses Potential kann durch den mit Tensiometern messbaren Druck des Bodenwassers ausgedrückt werden. Der Tensiometerdruck, in Pascal oder Bar, relativ zum Luftdruck, ist jener mit dem Tensiometer gemessene Druck, dem eine Bodenlösung bei dem Luftdruck  $p_0$  und der Temperatur  $t_0$  ausgesetzt ist, um über eine Membran in dem betrachteten Punkt mit dem Wasser im Boden im Gleichgewicht zu stehen. Analog zu (2.8) kann es wie folgt beschrieben werden:

$$\psi_p = \int_0^p \bar{V}_w dP, \quad (2.9)$$

Der negative Wert davon wird als *Wasserspannung*  $h$  bezeichnet:

$$h = -\psi_p. \quad (2.10)$$

Anmerkung: Das osmotische Potential  $\psi_o$  und das Schwerkraftpotential  $\psi_g$  werden in der Literatur übereinstimmend definiert, während es beim Druckpotential  $\psi_p$  Definitionsunterschiede gibt [Or et al., 1997].

Zusammenfassend folgt nun für das Gesamtpotential:

$$\psi_t = \psi_g + \psi_o + \psi_p = g \cdot \Delta h - \int_0^\pi \bar{V}_w dP + \int_0^p \bar{V}_w dP, \quad (2.11)$$

Das Druckpotential kann nun in folgende Teilkomponenten zerlegt werden:

$$\psi_p = \psi_m + \psi_a, \quad (2.12)$$

wobei  $\psi_m$  das Matrixpotential und  $\psi_a$  das Gasdruckpotential ist.

Der Unterschied im Energieinhalt, den das Wasser erfährt, wenn es mit der Bodenmatrix in Verbindung tritt, wird als *Matrixpotential*  $\psi_m$  bezeichnet [Jury et al., 1991]. Beim Matrixpotential ist der Bezugsdruck für den Bodenluftdruck definitionsgemäß gleich dem atmosphärischen Luftdruck.

Wenn nun der Fall eintritt, dass ein Bodenluft-Überdruck vorliegt, d.h. der Bodenluftdruck ist höher als der atmosphärische Luftdruck, muss das Druckpotential neben dem Matrixpotential aus einem zusätzlichen Potential, dem *Gasdruckpotential*  $\psi_a$ , bestehen. Das Gasdruckpotential  $\psi_a$  entspricht der Zunahme von  $p$  infolge eines zusätzlichen Gasdruckes  $\Delta P_a = P_a - P_0$  auf einen Boden mit einem bestimmten Wassergehalt und einer Auflast. Wenn  $P_a$  die Geometrie der festen Bodenbestandteile nicht beeinflusst, kann das Potential folgendermaßen beschrieben werden:

$$\psi_a = \int_0^{\Delta P_a} \bar{V} dP. \quad (2.13)$$

Das Matrixpotential ist gleich dem Wert von  $\psi_p$  in einem Boden bei einem bestimmten Wassergehalt und einer bestimmten Auflast. Im Matrixpotential kommen die Kräfte, denen das Bodenwasser im Dreiphasensystem, Boden-Wasser-Luft, ausgesetzt ist, zum Ausdruck. Sein Maß ist die in einem Punkt gemessene Wasserspannung [Loiskandl et al., 2010].

## 2.3 Sättigung und Van-Genuchten-Kurve

Das Modell von Van Genuchten kommt in fast allen gebräuchlichen Modellen, die auf der Richardsgleichung beruhen, zum Einsatz.

### 2.3.1 Effektive Sättigung $S$

$$S(\theta) = \frac{\theta - \theta_r}{\theta_s - \theta_r}, \quad (2.14)$$

- $S$  ... effektive Sättigung,
- $\theta$  ... Wasseranteil,
- $\theta_r$  ... Restwasseranteil,
- $\theta_s$  ... Sättigungswasseranteil.

Der *Restwasseranteil*  $\theta_r$  ist jener Wasseranteil im Boden, der entweder vom Fließpfad abgeschnitten ist, oder wegen der starken Adsorption an die Bodenmatrix nicht zum Fluss der wässrigen Phase beiträgt.

Der *Sättigungswasseranteil*  $\theta_s$  entspricht näherungsweise dem Porenanteil  $n$ . Unter natürlichen Bedingungen ist  $\theta_s$  wegen Lufteinschlüssen oder gelöster Luft etwa 5 – 10% kleiner als  $n$  [VanGenuchten et al., 1991].

### 2.3.2 Van-Genuchten-Kurve

Die *Van-Genuchten-Kurve* ist ein Modell zur Beschreibung der Wassersättigung. Da es in diesem Modell keinen eigenen Bereich der Vollsättigung  $\theta_s$  ( $0 \leq h \leq h_e$ , wobei  $h_e$  der 'Lufteintrittspunkt' ist) gibt, entspricht  $\theta$  daher nur für  $h = 0$  im Allgemeinen der Vollsättigung.

Das Van-Genuchten-Modell lautet in seiner klassischen dreiparametrischen Form [Van Genuchten, 1980]:

$$S(h) = \left( \frac{1}{1 + (\alpha h)^n} \right)^m, \quad (2.15)$$

bzw.

$$\theta(h) = \theta_r + (\theta_s - \theta_r) \left( \frac{1}{1 + (\alpha h)^n} \right)^m, \quad (2.16)$$

- $h$  ...  $[h] = \text{cm}$ , negativ genommene Matrixpotentialhöhe,
- $\alpha$  ...  $[\alpha] = \text{cm}^{-1}$ , Formparameter,
- $n$  ... Formparameter,
- $m$  ... Formparameter.

Die Wasserspannung  $h$  (siehe auch (2.10)) wird auch als *Kapillardruckhöhe* bezeichnet und ist stets positiv.  $\alpha$  ist abhängig von der Dimension von  $h$ . Dieser Formparameter beschreibt, wie stark sich die Kurve an die Vollsättigung anschmiegt. Da  $h$  positiv ist, sind nur positive Werte für  $\alpha$  sinnvoll.  $n$  beschreibt die Krümmung der Kurve.  $m$  gibt an, wie stark sich die Kurve an  $S = 0$  bzw.  $\theta_r$  anschmiegt. Die beiden Kurvenparameter  $n$  und  $m$  sind deutlich voneinander abhängig, sodass oft ein überbestimmtes System vorliegt, das durch Elimination eines Parameters bereinigt werden kann. Es wird oft die Einschränkung

$m = 1 - 1/n$  getroffen und auf diese Weise ein Freiheitsgrad der Van-Genuchten-Kurve eliminiert:

$$S(h) = \left( \frac{1}{1 + (\alpha h)^n} \right)^{1-1/n}. \quad (2.17)$$

Die Umkehrfunktion lautet:

$$h(S) = \frac{1}{\alpha} (S^{-1/m} - 1)^{1/n}, \quad (2.18)$$

bzw. die zweiparametrische Funktion ( $m = 1 - 1/n$ ):

$$h(S) = \frac{1}{\alpha} (S^{n/(1-n)} - 1)^{1/n}. \quad (2.19)$$

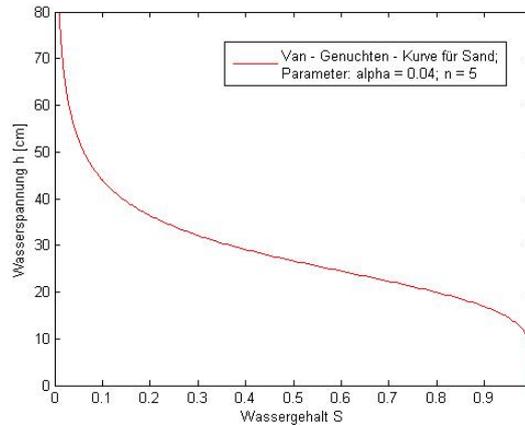


Abbildung 2.1: Van-Genuchten - Kurve für Sand ( $\alpha = 0.04$ ,  $n = 5$ ).

## 2.4 Bewegung des Bodenwassers

Die Grundwasserbewegung wird durch das *Gesetz von Darcy* beschrieben. In der klassischen Arbeit von Henry Darcy aus dem Jahre 1859 ('Les fontaines publiques de la ville de Dijon') beschreibt er ein Experiment, das besagt, dass die Wassermenge  $Q$ , die eine Fläche  $A$  in einem porösen Medium durchströmt, direkt proportional zum Standrohrspiegelgefälle (Differenz der Standrohrspiegelhöhen dividiert durch Weglängen. Die *Standrohrspiegelhöhe* ist definiert durch die Summe aus geodätischer Höhe und der Druckhöhe für einen Punkt in einem betrachteten Grundwasserkörper. Sie steht für ein Potential, dem so genannten *hydraulischen Potential* und dient der Beschreibung der Grundwasserspiegelhöhe.) ist. Die klassische Formulierung lautet:

$$\frac{Q}{A} = K_s \frac{\Delta h}{L}, \quad (2.20)$$

$h$  ... Standrohrspiegelhöhe,  
 $L$  ... Länge.

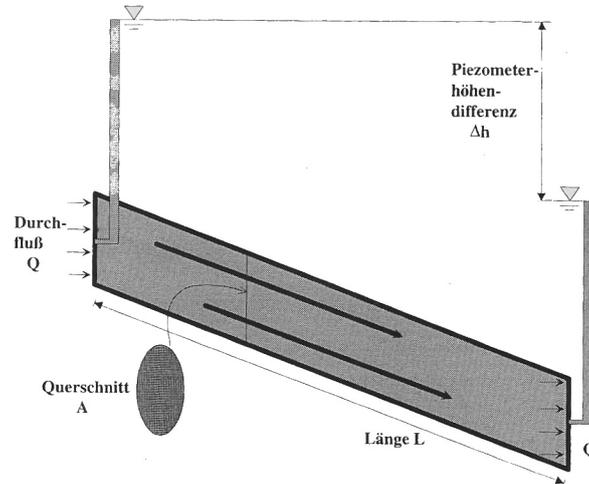


Abbildung 2.2: Anordnung eines Darcy-Versuchs, [Holzbecher, 1996]

Der Proportionalitätsfaktor  $K_s$  bezeichnet die *gesättigte hydraulische Leitfähigkeit* (auch *k-Wert* genannt), er ist ein Kennwert für das poröse Medium. Die Leitfähigkeit ist eine Bodeneigenschaft, die bei voller Sättigung auch als *Durchlässigkeitsbeiwert* und bei Teilsättigung als *kapillares Leitvermögen* bezeichnet werden kann. Wegen der Richtungsabhängigkeit ist  $k$  eigentlich ein Tensor (mit symmetrischen Nebendiagonalelementen) [Kastenek, 1980].

Es lassen sich von der Leitfähigkeit  $K_s$  die Fluideigenschaften Viskosität  $\mu$  und Dichte  $\rho$  abspalten, sodass die Gesteinseigenschaft Permeabilität  $k_s$  übrigbleibt:

$$K_s = \frac{k_s \rho g}{\mu}. \quad (2.21)$$

Bestimmung der Leitfähigkeit:

- Rechnerisch mit Hilfe bestimmter Bodenparameter (Körnung, SW-Linie),
- im Labor (stationär, instationär),
- im Feld (bei Anwesenheit bzw. bei Fehlen von Grundwasser).

Die Bedingungen, die für die verschiedenen Formulierungen des Darcy-Gesetzes angegeben werden, sind meistens sehr viel allgemeiner als diejenigen im Grundversuch. Um nun das Ganze zu verallgemeinern, wird die Gleichung in eine infinitesimale Form gebracht, die an jedem Punkt des betrachteten Systems gilt:

$$u_x = -K_s \frac{\partial h}{\partial x}. \quad (2.22)$$

Bemerkung: Die x-Achse liegt in Richtung der betrachteten Strömung.

Der positive k-Wert in der neuen Formulierung erhält ein negatives Vorzeichen, da der Fluss in Richtung abnehmender Standrohrspiegelhöhe erfolgt. Der Quotient  $\Delta h/L$ , der für das Durchfließen der Strecke L bestimmend ist, wird durch den Differentialquotienten ersetzt.

Die mehrdimensionale Formulierung lautet:

$$u = -K_s \nabla h. \quad (2.23)$$

Man kann das Gesetz nun wie folgt beschreiben: Die Darcy-Geschwindigkeit ist proportional zum negativen Gradienten des hydraulischen Potentials. Durch diese Formulierung ist das Gesetz nun formal genauso aufgebaut wie andere wichtige Gesetze in der Physik. In Analogie zur Begriffsbildung in der Physik nennt man  $h$  auch *hydraulisches Potential*. (2.23) sagt aus, dass der Vektor der Geschwindigkeit parallel zum Gradienten der Matrixpotentialhöhe  $h$  verläuft, und dass die Komponenten proportional sind.

In den meisten Formulierungen, wie auch in jener in Kapitel 3, die auf [Roose et al., 2004] basiert, wird die Matrixpotentialhöhe  $h$  durch den Gesamtdruck  $p$  ersetzt:

$$h = \frac{p}{\rho g} - z = \frac{p_{dyn}}{\rho g}. \quad (2.24)$$

Die z-Achse zeigt in Richtung der Schwerkraft. Der dynamische Druck ist gegeben durch:

$$p_{dyn} = p - \rho g z. \quad (2.25)$$

Er ist meistens kleiner als der Gesamtdruck. Damit bekommt man nun eine weitere Formulierung:

$$u = -\frac{1}{\mu} k_s \cdot (\nabla p - \rho g \vec{e}), \quad (2.26)$$

$\vec{e}$  ... Einheitsvektor (die positive z-Richtung ist nach unten gerichtet).

Als *vadose Zone* wird jener Bereich des aus Lockermaterial bestehenden Bodens bezeichnet, der sich über einem etwaigen Grundwasserkörper und dessen geschlossenem Kapillarsaum befindet. Er weist in der Regel ungesättigte Poren auf. Hier erfolgt die Bewegung des Wassers daher in ungesättigtem Zustand. Das *kapillare Leitvermögen* kann als hysteresis Funktion sowohl des Wasseranteils als auch der Wasserspannung betrachtet werden:  $k = f(\theta)$  bzw.  $k = f(h)$ . Als *relatives kapillares Leitvermögen*  $k_r$  wird das Verhältnis zwischen dem kapillaren

Leitvermögen bei gegebener Wasserspannung  $k(h)$  und der Leitfähigkeit  $k_s$  bei voller Sättigung bezeichnet [Mualem, 1976].

Auch Strömungen im ungesättigten Bereich können mit dem Darcy-Gesetz beschrieben werden. Es wird der Gesamtdruck als Funktion aufgefasst, die in der ungesättigten Zone negativ und im *Aquifer* (Grundwasser) positiv ist. Am Grundwasserspiegel gilt  $q = 0$ . Im Ungesättigten wird der Gesamtdruck  $p$  mit umgekehrtem (positivem) Vorzeichen als *Saugspannung* oder *Kapillardruck*  $p_c$  bezeichnet.

Für die entsprechende Variable  $h_c = p_c/(\rho g)$  ergibt sich dann folgende Formulierung:

$$u = -K K_s \cdot \nabla(-h_c - z), \quad (2.27)$$

$K$  ... relative Permeabilität.

In der ungesättigten Zone ist wesentlich zu beachten, dass die Durchlässigkeit bzw. Permeabilität von der Sättigung  $S$  bzw. von der *volumetrischen Feuchte*  $\phi S$  abhängen. (2.27) ist eine Verallgemeinerung von (2.23). Die Matrixpotentialhöhe  $h = -h_c - z$  kann in den ungesättigten Bereich fortgesetzt werden. Damit ist eine Formulierung gefunden, die sowohl für Strömungsprozesse oberhalb als auch unterhalb des Grundwasserspiegels geeignet ist.

Neben den Leitfähigkeitsbegriffen gibt es noch die *Filtergeschwindigkeit*, welche zu den Strömungsgeschwindigkeiten zählt. Sie ist definiert als der Quotient aus Grundwasserdurchfluss  $Q$  und der zugehörigen Fläche des Grundwasserdurchflussquerschnitts  $A$  [ÖNORM, 1986].

Der Begriff *Durchflussrate* wird als Synonym verwendet:

$$q = Q/A. \quad (2.28)$$

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

Um Strömungsgleichungen herleiten zu können, braucht man die *Kontinuitätsgleichung*, oder anders genannt, *das Prinzip der Massenerhaltung*:

$$\frac{\partial}{\partial t} \phi S \rho = -\nabla \cdot \rho u + Q, \quad (2.29)$$

$Q$  ... Quellterm.

Dieses Gesetz sagt aus, dass die Flüssigkeit, die in ein Medium hineinfließt, auch wieder herausfließen muss, oder es muss sich der Inhalt ändern. Die Differenz

zwischen den in ein bestimmtes betrachtetes Volumenelement je Zeiteinheit ein- und ausströmende Massen muss dementsprechend gleich der Massenänderung in diesem Volumenelement sein. Diese Beziehung ist genau dann gültig, wenn Bewegung und Verformung des porösen Mediums vernachlässigt werden können. Eine alternative Formulierung von Gleichung (2.29) entsteht durch Differentiation auf der linken Seite der Gleichung:

$$\rho \cdot \frac{\partial}{\partial t} \phi S + \phi S \frac{\partial}{\partial t} \rho = -\nabla \cdot \rho u + Q \quad (2.30)$$

Bei Strömungsproblemen ergeben sich in der Bodenphysik wegen der Abhängigkeit des kapillaren Leitvermögens von der Wasserspannung bzw. dem Wassergehalt nichtlineare partielle Differentialgleichungen. Mathematisch gesehen vereinfachen sich diese Probleme meistens, wenn man sie eindimensional betrachtet. In dieser Arbeit wird eine dreidimensionale nichtlineare Differentialgleichung behandelt, die so genannte *Richardsgleichung*, die durch Zusammenfügen der Kontinuitätsgleichung und dem Gesetz von Darcy für den ungesättigten Boden entsteht. Da der Schwerpunkt dieser Arbeit das numerische Lösen der Richardsgleichung ist, wird die Herleitung der Richardsgleichung in Kapitel 3 gezeigt.

## Kapitel 3

---

# Das Modell der Wasseraufnahme in 3D

---

Das Modell beschreibt die Wasseraufnahme von Pflanzenwurzeln im ungesättigten Boden. Es wird gleichzeitig der Fluss innerhalb des Wurzelgeflechtes und des Bodens modelliert.

Ziel dieses Modelles ist es, die Wassermenge, die eine Pflanze zum Wachsen benötigt, zu quantifizieren. Diese ist normalerweise durch das Gleichgewicht, das zwischen der Wasseraufnahme und der Transpiration der Blätter herrschen muss, festgelegt.

Es können zwei Extremfälle auftreten:

- Sollte es zu wenig Wasser im Boden geben, dann trocknet der Boden bis zum so genannten *permanenten Welkepunkt* aus, und die Pflanze welkt, da die Wurzeln nicht mehr genügend Wasser aufnehmen können, um die Wasserbalance zu halten.
- Sollte der Boden auf Grund von Regenfällen, wassergesättigt sein, und diese Sättigung hält lange an, kann es passieren, dass die Wurzeln faulen und die Pflanze abstirbt.

### 3.1 Beschreibung der Wasserbewegung im Boden

Bei diesem Modell wird vorausgesetzt, dass es sich um einen homogenen Boden handelt, das heißt etwaige natürliche Erscheinungen wie Bodenrisse oder Kanäle werden vernachlässigt. Außerdem folgt daraus, dass man nur vertikalen Wasserfluss betrachtet und den Fluss in horizontaler Richtung vernachlässigt. Diese

Voraussetzungen entsprechen eher den Bedingungen in einem (Labor-) Blumentopf als jenen in der Natur. Die Bodenfeuchtigkeit wird als Funktion der Bodentiefe aufgefasst. Da man dieses Modell für Ackerfrüchte verwenden möchte, treffen diese Voraussetzungen näherungsweise zu, weil bei diesen Pflanzen die Wurzellängendichte horizontal fast nicht variiert.

Um die Bodenwasserbewegung makroskopisch zu beschreiben, nimmt man folgende Voraussetzungen an: Das Wurzelsystem sei mikroskopisch gesehen homogen, sodass man Größen wie Wurzeldichte und Wasseraufnahme pro Einheit Bodenvolumen definieren kann [Roose et al., 2004].

Diese Bodenwasserbewegung wird mit Hilfe einer partiellen Differentialgleichung, der *Richardsgleichung*, modelliert. Diese wird im nächsten Abschnitt hergeleitet.

### 3.1.1 Die Richardsgleichung

*Lorenzo A. Richards* verknüpfte das Darcy-Gesetz mit dem Kontinuitätsgesetz. Er erhielt eine partielle Differentialgleichung, die die zeitliche Veränderung der Wassermenge in einem Bodenvolumen beschreibt.

Es wird nun die Darstellung (2.29) der Kontinuitätsgleichung verwendet,

$$\frac{\partial}{\partial t} \phi S \rho = -\nabla \cdot \rho u + Q,$$

wobei die ganze Gleichung durch  $\rho$  dividiert wird, und der dadurch entstehende Quellterm mit  $F_w$  bezeichnet wird:

$$\phi \frac{\partial S}{\partial t} = -\nabla \cdot u + F_w. \quad (3.1)$$

Darstellung (3.1) beschreibt die Erhaltung des Wassers im Boden.

Für die Formulierung des Darcy-Gesetzes, wird Gleichung (2.26) verwendet,

$$u = -\frac{1}{\mu} k_s \cdot (\nabla p - \rho g \vec{e}),$$

$\vec{e}$  ... Einheitsvektor in z-Richtung.

Eine Approximation der Permeabilität  $k$  ist durch folgende Formel gegeben [Van Genuchten, 1980]:

$$k = k_s K(S) = k_s S^{1/2} [1 - (1 - S^{1/m})^m]^2, \quad 0 < m < 1, \quad (3.2)$$

$K(S)$  ... experimentell bestimmte Funktion.

$K(S)$  beschreibt die Reduktion in der Wassermobilität im Boden auf Grund der Reduktion der relativen Sättigung.

Analog kann der Wasserdruck in den Bodenporen mittels der Saugcharakteristik mit der relativen Sättigung verknüpft werden [Van Genuchten, 1980]:

$$p_a - p = p_c f(S), \quad f(S) = (S^{-1/m} - 1)^{1-m}, \quad (3.3)$$

- $p$  ... Bodenwasserdruck,
- $p_a$  ... Atmosphärendruck,
- $p_c$  ... charakteristischer Saugdruck, bestimmt durch experimentelle Daten,
- $m$  ... Formparameter, experimentell bestimmt für verschiedene Böden,

Es ist üblich  $p_a = 0$  zu setzen, was hier auch gemacht wird. Gleichung (2.26) wird nun noch umgeformt, um die *Wasserdiffusivität* einzuführen:

$$\Leftrightarrow u = -\frac{k}{\mu} \frac{\partial p}{\partial S} \nabla S + \frac{k}{\mu} \rho g \vec{e}, \quad (3.4)$$

$$\Leftrightarrow u = -D_0 D(S) \nabla S + K_S K(S) \vec{e}, \quad (3.5)$$

$K_S = \frac{\rho g k_s}{\mu}$  ... Durchlässigkeitsbeiwert.

Gleichung (3.5) beschreibt, wie auch schon in Kapitel 2 erwähnt, die Fließgeschwindigkeit einer Flüssigkeit durch ein poröses Medium, angetrieben durch einen herrschenden Druckgradienten.

Die *Richardsgleichung* erhält man nun, indem man (3.5) in (3.1) einsetzt:

$$\phi \frac{\partial S}{\partial t} = \nabla \cdot [D_0 D(S) \nabla S - K_S K(S) \vec{e}] + F_w. \quad (3.6)$$

Die Richardsgleichung beschreibt den Zusammenhang zwischen der Veränderung des Wassergehalts eines Bodenvolumens in einer Zeiteinheit und dem Fluss, der durch einen Potentialgradienten hervorgerufen wird.

$D_0$  und  $D(S)$  sind durch die Terme

$$D_0 = \frac{p_c k_s}{\mu} \left( \frac{1-m}{m} \right), \quad (3.7)$$

und

$$D(S) = S^{1/2-1/m} [(1 - S^{1/m})^{-m} + (1 - S^{1/m})^m - 2], \quad (3.8)$$

gegeben [Roose et al., 2004].

### 3.1.2 Die Randbedingungen

Man muss die Randbedingungen an der Oberfläche des Bodens und an der Basis der Bodenschicht gesondert betrachten.

#### Häufige Randbedingungen an der Bodenoberfläche:

- *Flussrandbedingung an der Bodenoberfläche:* Diese Randbedingung an der Bodenoberfläche beschreibt die Menge des Wassers, die in den Boden auf Grund von Regen oder Bewässerung fließt:

$$-D_0 D(S) \frac{\partial S}{\partial z} + K_S K(S) = q_S \quad \text{an } z = 0, \quad (3.9)$$

$q_S \dots$  Volumendurchfluss des Wassers/Bodenoberfläche/Zeit.

- *Vollständige Sättigung:* Sollte der Boden auf Grund von starken Regenfällen wassergesättigt sein, so wird die Randbedingung ersetzt durch:

$$S = 1 \quad \text{an } z = 0. \quad (3.10)$$

#### Häufige Randbedingungen an der Basis der Bodenschicht:

- *Vollständige Sättigung:* Unter der Voraussetzung, dass der Grundwasserspiegel an  $z = l_w$  fixiert ist, setzt man

$$S = 1 \quad \text{an } z = l_w. \quad (3.11)$$

Diese Randbedingung bekommt man, wenn man effiziente Entwässerung, wie z.B. in Agrarkulturen, betrachtet.

- *Free drainage - Randbedingung:* Der Gradient des Gesamtpotentials in z-Richtung wird gleich 1 gesetzt. Dies liefert eine Randbedingung folgender Art:

$$-D_0 D(S) \frac{\partial S}{\partial z} + K_S K(S) = -K_S K(S) \quad \text{an } z = l_w. \quad (3.12)$$

- *No flux - Randbedingung:* Bringt man z.B. einen Grundwasserhemmer an der Basis an, so setzt man einen Fluss gleich Null fest.

$$-D_0 D(S) \frac{\partial S}{\partial z} + K_S K(S) = 0 \quad \text{an } z = l_w. \quad (3.13)$$

## 3.2 Wasseraufnahme durch Wurzeln - Bestimmung eines Quellterms $F_W$

Zuerst wird die Wasseraufnahme für eine einzelne zylindrische Wurzel und anschließend in Kapitel 3.2.2 der Quellterm für ein ganzes Wurzelsystem hergeleitet.

### 3.2.1 Wasseraufnahme durch eine einzelne Wurzel

Das Wasser fließt von den Wurzeln durch so genannte *Xylemröhren* zu den Blättern. Die Xylemröhren liegen im zentralen Teil der Wurzeln und dienen auch zum Transport der Nährstoffe oder Nährsalze.

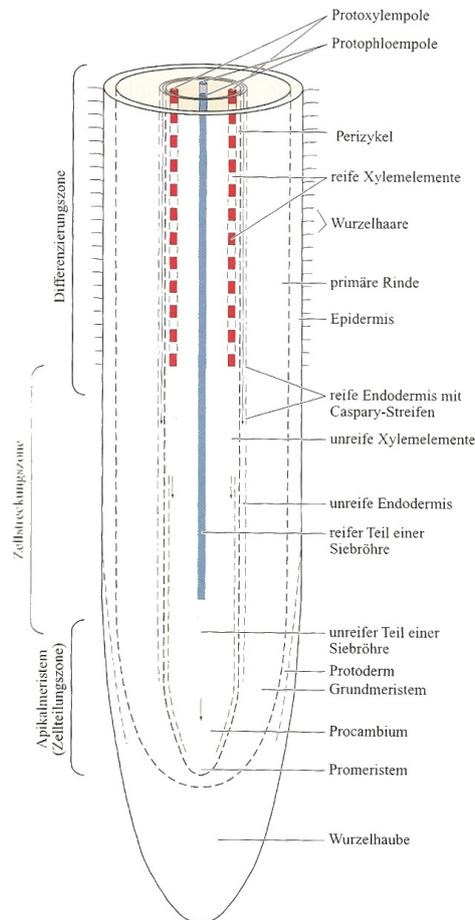


Abbildung 3.1: Darstellung der frühen Entwicklungsstadien einer Wurzelspitze [Raven et al., 2006]

Man unterscheidet zwischen drei verschiedenen Xylemröhren:

- Die *Protoxylem Röhren*, die die kleinsten Radien haben, sind bei den meisten Wurzellängen 'offen'.
- Die *frühen Metaxylem Röhren* sind größer als die Protoxylem Röhren. Sie sind allerdings nur in der Nähe der Wurzelspitze 'offen' und funktionsfähig.
- Die *späten Metaxylem Röhren* haben den größten Radius und sind nur

zwischen der Wurzelspitze und den nicht verzweigten Zonen 'offen' und funktionsfähig.

Es gibt zwei Haupttypen der apikalen Organisation der Wurzeln, den 'geschlossenen' Typ und den 'offenen' Typ. Beim 'geschlossenen' Typ gehen Wurzelhaube, Zentralzylinder und primäre Rinde auf 3 verschiedene Lagen von Zellen im Apikalmeristem, einem Bildungsgewebe der Pflanzen, zurück. Beim 'offenen' Typ gehen alle Wurzelregionen oder zumindest die primäre Rinde und die Wurzelhaube aus ein und derselben Gruppe Initiale, relativ wenig teilungsaktiven Zellen, hervor [Raven et al., 2006].

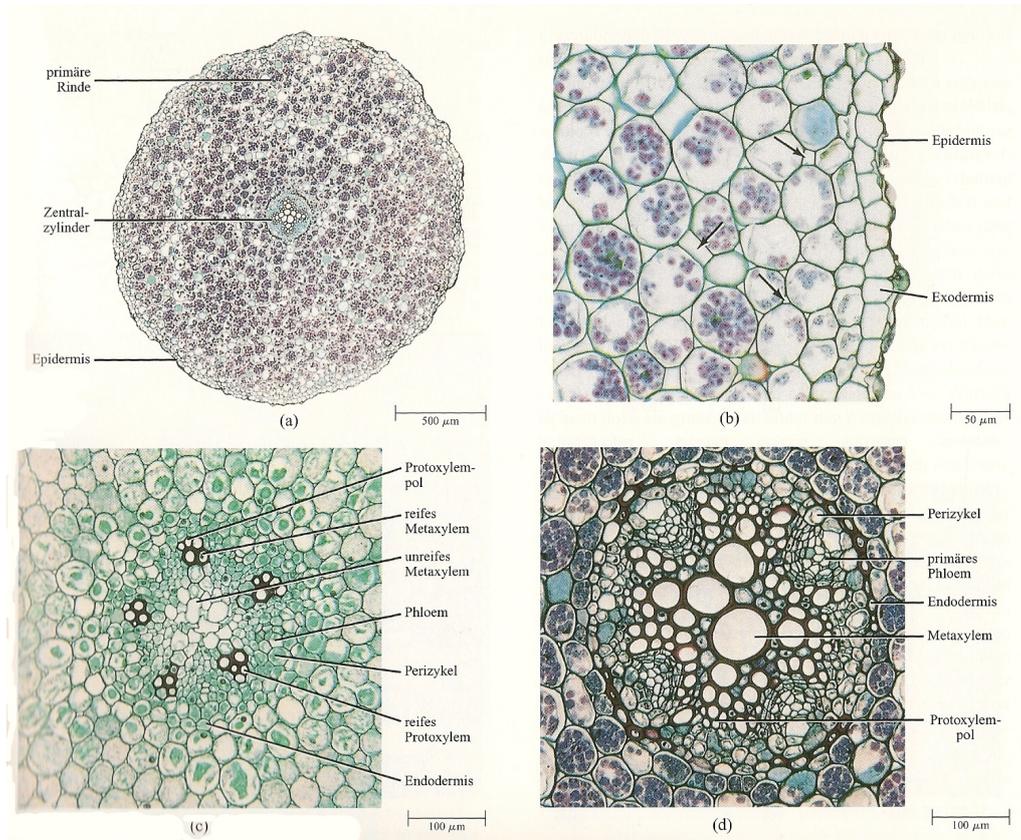


Abbildung 3.2: Querschnitt durch die Wurzel von *Zea mays* (Mais), [Raven et al., 2006]. (a) Ausdifferenzierte Wurzel, Gesamtüberblick. (b) Ausschnitt aus dem Randbereich einer reifen Wurzel. (c) Ausschnitt aus dem unreifen Zentralzylinder. (d) Ausschnitt aus dem reifen Zentralzylinder

Um den Wasserfluss entlang der Xylemröhren zu charakterisieren, wird der Wasserfluss (in  $z$ -Richtung) in der Wurzel durch die Summe aller Flüsse in jeder offenen funktionsfähigen Xylemröhre angegeben, d.h.:

$$q_z = -k_z \left[ \frac{\partial p_r}{\partial z} - \rho g \right], \quad (3.14)$$

wobei

$$k_z = \sum_i \frac{\pi n_i R_i^4}{8\mu}, \quad (3.15)$$

- $q_z \dots [q_z] = m^3 s^{-1}$  Wasserfluss,
- $p_r \dots$  Wurzelinnendruck in einer Xylemröhre,
- $z \dots$  Position entlang der Wurzel,
- $k_z \dots [k_z] = m^4 Pa^{-1} s^{-1}$  Wurzeldurchlässigkeitsbeiwerte,
- $R_i \dots$  Radius der Xylemröhre,
- $n_i \dots$  Anzahl der offenen Xylemröhren ( $R_i$ )/Wurzelquerschnitt,
- $i \dots$  Index für die verschiedenen Radiuskategorien.

Die Erforschung des Vorgangs der Bodenwasserbewegung entlang der Wurzelrinde zu den Xylemröhren ist noch nicht sehr fortgeschritten. Im Allgemeinen dringt das Wasser in das Wurzelringengewebe über zwei Leitungen, der apoplastischen und der symplastischen Leitung, ein.

Bei der *apoplastischen Leitung* (passive Leitung) fließt das Wasser zwischen den Zellen als Antwort auf den Druckgradienten zwischen den Xylemröhren und dem Boden in das Wurzelringengewebe hinein.

Bei der *symplastischen Leitung* (aktive Leitung) wird das Wasser mit Hilfe von Proteinen durch die Membranen von Zelle zu Zelle transportiert.

Da die Wasserbewegung im Wurzelsystem hauptsächlich passiv ist, wird in diesem Modell vorausgesetzt, dass es sich um apoplastische Leitungen handelt.

Der radiale Fluss des Wassers  $q_r$  ist auf Grund der passiven radialen Leitungen, gegeben durch:

$$q_r = k_r(p - p_r), \quad (3.16)$$

- $q_r \dots [q_r] = m s^{-1}$  radialer Fluss,
- $k_r \dots [k_r] = m Pa^{-1} s^{-1}$  radialer Durchlässigkeitsbeiwert.

Die Dicke der Wurzelrinde  $\Delta a$  ist proportional zum Wurzelradius  $a$ . Daraus folgt, dass der Wert  $2\pi a k_r$  für Wurzeln verschiedener Radien konstant ist. Die altersbedingte Änderung der radialen Durchlässigkeitsbeiwerte wird vernachlässigt [Roose et al., 2004].

Aus (3.14) und (3.16) erhält man die Erhaltungsgleichung des inkompressiblen Wassers in einer einzelnen zylindrischen Pflanzenwurzel:

$$2\pi a k_r (p - p_r) = -k_z \frac{\partial^2 p_r}{\partial z^2}. \quad (3.17)$$

Den Bodenwasserdruck gewinnt man aus Gleichung (3.3). Durch die Ableitung des axialen Flusses wird in (3.17) die Änderung in z-Richtung beschrieben.

Weiters wird angenommen, dass die strukturellen Eigenschaften der Wurzelspitze einen axialen Fluss unmöglich machen, also lautet die Bedingung an der Spitze:

$$\frac{\partial p_r}{\partial z} - \rho g = 0 \quad \text{an} \quad z = L, \quad (3.18)$$

$L$  ... Länge der Wurzel.

An der Basis der Wurzel wird eine Druckrandbedingung vorgegeben:

$$p_r = P \quad \text{an} \quad z = 0, \quad (3.19)$$

$P$  ... negativ (relativ zum Atmosphärendruck).

Dieser vorgegebene Druck ist eine Funktion der Zeit, da untermittags, wenn die Pflanze Fotosynthese betreibt,  $P \neq 0$  und nachts  $P \approx 0$  gilt. Lösen von (3.17)-(3.19) liefert die Erkenntnis, dass während des Tages der Druck in dicken Wurzeln konstant ist und durch den Druck an der Basis der Wurzel approximiert werden kann:

$$p_r(z) \approx P. \quad (3.20)$$

In dicken langen Wurzeln ist die Wasserbewegung entlang der Wurzel größer, da es mehrere größere und offene Xylemröhren gibt, d.h.:

$$k_z \gg 2\pi a k_r L^2. \quad (3.21)$$

Die Wassermenge, die durch diese Wurzeln aufgenommen wird, kann durch die Variation des Wasserdruck vollständig bestimmt werden.

Betrachtet man allerdings dünnere Wurzeln, wie Wurzeln 1. oder höherer Ordnung (so heißen jene Wurzelstücke, die nach der 1. oder höheren Verzweigung wachsen), ist der Druck für die meisten Abschnitte gleich dem Druck im Boden. Ausgenommen ist die dünne Region nahe der Basis der Wurzeln, dort beeinflusst der vorgegebene Druck  $P$  den Wurzeldruck, woraus das Druckprofil

$$p_r(z) = p(z) - [P - p(0)]e^{-\kappa z}, \quad (3.22)$$

der Wurzel entsteht, wobei

$$\kappa = \sqrt{2\pi a k_r L^2 / k_z}, \quad (3.23)$$

$\kappa$  ... Verhältnis des axialen und radialen Durchlässigkeitsbeiwerts.

Während der Nacht ( $P \approx 0$ ) gibt es keine Wasseraufnahme. Allerdings kann die Pflanze, abhängig vom Wasserdruck im Boden, Wasser 'ausbluten'. In großen dicken Wurzeln wird der Innendruck durch

$$p_r(z) \approx \frac{\rho g z}{L} \quad (3.24)$$

approximiert. Eine Pflanze kann irgendwo entlang der Wurzel ausbluten, aber am wahrscheinlichsten ist es nahe der Spitze, da die Wasserförderhöhe dort am höchsten ist. Schmale dünne Wurzeln bluten selten aus, manchmal allerdings in Regionen nahe der Basis der Wurzel, also in der Nähe der Verzweigungspunkte, da in dünnen Wurzeln keine Förderhöhe aufgebaut wird. Die dazugehörige Randbedingung wäre  $p = 0$  an  $z = 0$ , allerdings sind diese Regionen sehr klein, ungefähr 0.7 cm [Roose et al., 2004].

Bis jetzt wurde ein Modell für den Wurzelinnendruck  $p_r$  in Abhängigkeit des Bodenwasserdruckes  $p$  hergeleitet. Nun wird der Fluss des Wassers im Boden untersucht:

Die Wasserbewegung im Boden wird durch die Richardsgleichung für ungesättigte Böden beschrieben. Es wird angenommen, dass man ein kleines Stück Wurzel als geraden Zylinder approximieren kann. Auf Grund der vielen Wurzeln im Boden rechnet man sich die durchschnittliche Distanz zwischen den Wurzeln, die durchschnittlichen Radien und eine durchschnittliche Wurzellängenverteilung pro Einheit Volumen des Bodens aus. Makroskopisch gesehen würde es sinnvoll erscheinen Aufnahme und Sättigung durch eine Wurzeldichte zu beschreiben. Allerdings kann es im Mikroskopischen passieren, dass das Wasser räumlich stark variiert, und dies dann die Berechnungen der Wasseraufnahme beeinflussen kann. Um andere im Boden vorkommende Wurzeln zu modellieren, wird ein Maß für die durchschnittliche Distanz zwischen den Wurzeln  $a_{int}$  eingeführt. Dies wird gleichzeitig als Position für reflektierende Ränder (also Nullflussrand) der einzelnen zylindrischen Wurzeln verwendet. Weiters werden die Gravitationseffekte vernachlässigt.

In radialzylindrischen Koordinaten schreibt sich das Modell als

$$\phi \frac{\partial S}{\partial t} = \frac{1}{r} \frac{\partial}{\partial r} (D_0 D(S) r \frac{\partial S}{\partial r}), \quad (3.25)$$

mit den Randbedingungen

$$D_0 D(S) \frac{\partial S}{\partial r} = k_r [p(S) - p_r] \quad \text{an} \quad r = a, \quad (3.26)$$

$$\frac{\partial S}{\partial r} = 0 \quad \text{an} \quad r = a_{int}, \quad (3.27)$$

$p(S) = -p_c(S^{-1/m} - 1)^{1-m}$  ... Van Genuchten Saugcharakteristikfunktion,  
 $a$  ... Radius der Wurzel,  
 $a_{int}$  ... Maß der internen Verzweigungsdistanzen,  
 $k_r$  ... radialer Wurzeldurchlässigkeitsbeiwert,  
 $p_r, P \leq p_r \leq p(S)$  ... interner Wurzeldruck.

Die dimensionslose Gleichung erhält man, indem man  $r \sim a$ ,  $t \sim \phi a^2/D_0$  und  $p_r \sim |P|$  setzt,

$$\frac{\partial S}{\partial t} = \frac{1}{r} \frac{\partial}{\partial r} \left[ r D(S) \frac{\partial S}{\partial r} \right], \quad (3.28)$$

mit den dimensionslosen Randbedingungen

$$D(S) \frac{\partial S}{\partial r} = \lambda [-\epsilon_w f(S) - p_r] \quad \text{an} \quad r = 1, \quad (3.29)$$

$$\frac{\partial S}{\partial r} = 0 \quad \text{an} \quad r = a_{int}/a, \quad (3.30)$$

$\lambda = k_r a |P| / D_0$  ... dimensionsloser Wasseraufnahmeparameter,  
 $\epsilon_w = p_c / |P|$  ... dimensionsloser Van Genuchten Parameter,  
 $f(S) = (S^{-1/m} - 1)^{1-m}$  ... dimensionslose Saugcharakteristikfunktion.

Zeitskalen der Bodenwasserbewegung sind meistens viel kleiner als Zeitskalen des Pflanzenwachstums. Sie berichten über Umwelteinflüsse, welche über Tage, Wochen und Monate gehen können. Sogar eine Zeitskala eines plötzlichen Regens ist länger als die Zeitskala der Diffusion des Wassers in einer einzelnen Wurzel. Das Sättigungsprofil rund um die Wurzel ist sehr glatt.

Die makroskopische Wasseraufnahme des Wurzelsystems errechnet man sich durch den Ausdruck des Flusses an der Wurzel in (3.26) - (3.27), multipliziert mit der Wurzeloberfläche pro Einheit Volumen.  $S$  kann als die lokale durchschnittliche Sättigung im Boden verstanden werden. Somit lautet der dimensionale Ausdruck für die Bodenwasseraufnahme:

$$F_w = 2\pi a l_d k_r [-p_c f(S) - p_r], \quad (3.31)$$

$l_d$  ...  $[l_d] = \text{cm}$  der Wurzel pro  $\text{cm}^3$  des Bodens, Wurzellängendichte.

Es folgt die Beziehung

$$l_d \sim [\pi(a_{int} - a)^2]^{-1} \approx [\pi a_{int}^2]^{-1}, \quad (3.32)$$

die für Wurzeln mit einem fixen Radius  $a$  verwendet werden kann. Da aber angenommen wurde, dass  $2\pi a k_r$  für verschiedene Wurzeln konstant ist, kann der Ausdruck auch allgemein für verschiedene Wurzeln verwendet werden [Roose et al., 2004].

### 3.2.2 Wasseraufnahme durch ein Wurzelsystem

Auf Grund der Vernetzung des Wurzelsystems ist der Ausdruck (3.31) für die Wasseraufnahme keine gute Approximation.

Darum betrachtet man folgendes einfache Modell der Wurzelarchitektur, das nur

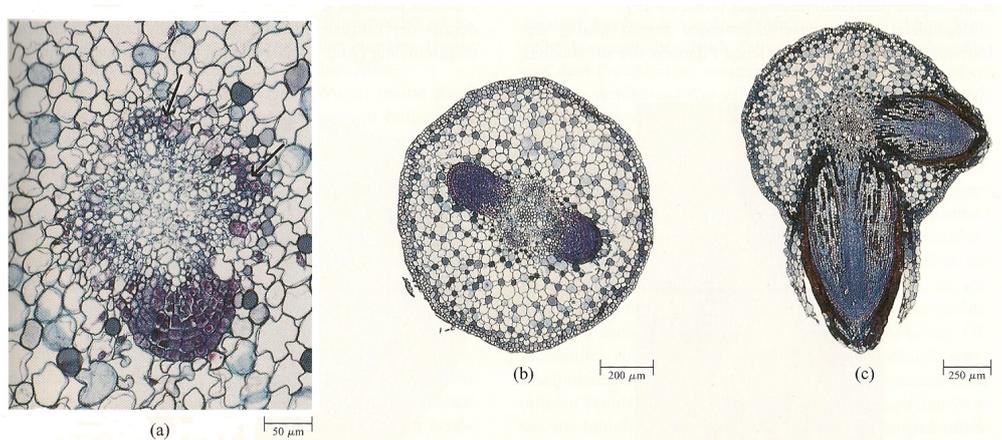


Abbildung 3.3: Entwicklung von Wurzelverzweigungen [Raven et al., 2006]. (a) Seitenwurzelanlage. (b) Zwei Seitenwurzelanlagen. (c) Eine ausgetretene Seitenwurzel und eine, die gerade dabei ist.

aus Wurzeln 0. und 1. Ordnung besteht. Dieser Ansatz kann prinzipiell auf beliebige Ordnungen ausgeweitet werden. Die Grundidee besteht darin, dass man das Modell der einzelnen Wurzel aus Kapitel 3.2.1 für die Wurzeln mit dem geringsten Durchmesser verwendet. Der daraus resultierende Fluss dieser Wurzeln dient als Input der Wurzeln nächstniedrigerer Ordnung. Die Modellherleitung wird anhand einer Maispflanze demonstriert.

Um ein Modell für die Wasseraufnahme eines Wurzelsystems herzuleiten, muss man zuerst beobachten, wie Pflanzenwurzeln eigentlich wachsen. Wurzeln von Einjährigen wachsen, indem sie an der Spitze der Wurzeln Gewebe bilden. Zusätzlich können Nebenverzweigungen gebildet werden, die nach demselben Prinzip wachsen. Auch bei den Seitenverzweigungen kann man dieses Entwicklungsmuster beobachten. Es gibt allerdings auf Grund von internen hormonellen Regelungen eine Zone nahe der Wurzelspitze und eine Zone nahe der Basis bzw. des Verzweigungspunktes, wo sich keine Nebenverzweigungen entwickeln können. Daraus folgt: Falls die Länge der Zone an der Spitze  $l_a$  und die Zone an der Basis  $l_b$  beträgt, kann die Wurzel nur dann Nebenverzweigungen entwickeln, wenn die Gesamtlänge  $l$  größer als die Summe der die Zonenlängen ist:

$$l > l_a + l_b. \quad (3.33)$$

Bei Maispflanzen können drei Wurzelordnungen vertreten sein:

- Wurzeln 0. Ordnung sind jene, die von den Samen weg wachsen.
- Wurzeln 1. Ordnung sind jene, die aus Verzweigungen von Wurzeln 0. Ordnung entstehen.
- Wurzeln 2. Ordnung sind jene, die aus Verzweigungen von Wurzeln 1. Ordnung entstehen.

Wurzeln 2. Ordnung werden allerdings im Falle der Maispflanze vernachlässigt, da sie nur sehr wenig Wasser aufnehmen und keine großen Auswirkungen auf das Ergebnis haben [Roose et al., 2004].

Da die Wurzeln 1. Ordnung aus den Wurzeln 0. Ordnung entstehen, wachsen sie natürlich in eine andere Richtung. Im Modell wird also angenommen, dass die Wurzeln 0. Ordnung senkrecht nach unten wachsen und die Wurzeln 1. Ordnung unter einem Winkel  $\beta$  herauswachsen, wobei die Koordinate  $z_1$  durch  $z_1 = z/\cos\beta$  gegeben ist.

Ein zusätzlicher Parameter, der betrachtet werden muss, ist die Geschwindigkeit des Wurzelwachstums, die abhängig ist:

- von Nährstoffen,
- vom Wasserstatus im Boden,
- von der Aufnahme durch Pflanzen,
- von der Temperatur des Bodens,
- von der Temperatur der Luft.

Um das Modell nicht zu erschweren, wird davon ausgegangen, dass das Wurzelwachstum vorbestimmt ist [Pages et al., 1989]. Die Geschwindigkeit der Wurzeldehnung ist als experimentell gemessener Parameter  $r_i$  gegeben, wobei  $i$  die Ordnung der Wurzel bezeichnet. Zusätzlich wird die maximal mögliche Länge  $K_i$  angegeben. Die Wurzeldehnung wird mathematisch durch

$$\frac{\partial l_i}{\partial t} = r_i \left(1 - \frac{l_i}{K_i}\right) \quad (3.34)$$

beschrieben. Wenn man diese Differentialgleichung mit den Anfangsbedingungen  $l_i = l_{i,0}$  löst, wobei  $l_{i,0}$  die Anfangslänge der Wurzel  $i$ -ter Ordnung bei  $t = 0$  ist, erhält man eine Funktion der Länge  $l_i$ :

$$l_i(t) = K_i + [l_{i,0} - K_i] \exp\left(-\frac{r_i t}{K_i}\right). \quad (3.35)$$

Wie bereits erwähnt (siehe (3.22)), ist der Wasserdruck in einer einzelnen Wurzel (einer Maispflanze) durch

$$p_r(z_1) \approx p(z_1) + [p_r(z') - p(z')]e^{-\kappa z_1} \quad (3.36)$$

gegeben, mit

$$\kappa = \sqrt{\frac{2\pi a k_r L_1^2}{k_{z,1}}}, \quad (3.37)$$

- $k_r$  &  $k_{z,1}$  ... radiale und axiale Durchlässigkeitsbeiwerte der 1.Nebenverzweigung,
- $a$  ... Radius der 1.Nebenverzweigung,
- $L_1$  ... Länge der 1.Nebenverzweigung,
- $z'$  ... Ort des Verzweigungspunktes an der Wurzel 0. Ordnung,
- $z_1$  ... wird entlang der Wurzel 1. Ordnung gemessen.

Es gibt nur eine sehr dünne Region nahe der Basis der Wurzel, d.h. nahe  $z'$ , die resistent gegen den Wasserfluss ist, da im Rest der Region der Wasserdruck in der Wurzel gleich dem Wasserdruck im Boden ist. Der approximierte Ausdruck für den dimensionalen aufwärts gerichteten Wasserfluss lautet

$$-q_z \approx (2\pi k_r k_{z,1})^{1/2} [p(z') - p_r(z')]. \quad (3.38)$$

Die mittlere (radiale) Distanz  $a_m$  zwischen den Pflanzen wird durch

$$a_m = a_0 + L_1 \sin \beta, \quad (3.39)$$

- $a_0$  ... Radius der Wurzel 0.Ordnung,

definiert. Sei  $\psi_i(z)$  die Dichte der Wurzeln  $i$ . Ordnung, d.h. zum Beispiel in einer Länge  $dz$  der Wurzel 0. Ordnung, dann gibt es  $\psi_1(z)dz$  Wurzeln 1. Ordnung. Damit kann die Wasseraufnahme  $F_1(z)$  durch Wurzeln 1. Ordnung mit Hilfe des Ausdrucks

$$F_1(z) = \frac{[2\pi a k_r k_{z,1}]^{1/2} \psi_1(z)}{\pi (a_0 + L_1 \sin \beta)^2} [p(S) - p_r], \quad (3.40)$$

- $p(S)$  ... Wasserdruck im Boden,
- $p_r$  ... Wasserdruck in der Wurzel 0. Ordnung,
- $F_W$  ...  $[F_W] = \text{m}^3(\text{Wasser})\text{s}^{-1}\text{m}^{-3}(\text{Boden})$ ,

mit

$$p(S) = -p_c (S^{-1/m} - 1)^{1-m}, \quad (3.41)$$

beschrieben werden. Zusätzlich zu ihrer radialen Wasseraufnahme aus dem Boden nimmt eine Wurzel 0. Ordnung auch Wasser von den Nebenverzweigungen auf. Daraus folgt, dass der totale Fluss pro Höheneinheit der Wurzel 0. Ordnung durch

$$[2\pi ak_r + [2\pi ak_r k_{z,1}]^{1/2} \psi_1(z)](p - p_r) \quad (3.42)$$

gegeben ist. Damit ergibt sich die entsprechende Gleichung für den internen Wurzelwasserdruck der 0. Ordnung (Massenbilanz):

$$[2\pi ak_r + [2\pi ak_r k_{z,1}]^{1/2} \psi_1(z)](p - p_r) = -k_{z,0} \frac{\partial^2 p_r}{\partial z^2}. \quad (3.43)$$

Brauchbare Randbedingungen für diese Gleichung sind durch

$$p_r = P \quad \text{an} \quad z = 0, \quad (3.44)$$

$$\frac{\partial p_r}{\partial z} - \rho g = 0 \quad \text{an} \quad z = l_0, \quad (3.45)$$

$l_0$  ... Wurzellänge 0. Ordnung,

definiert. Durch diese Voraussetzungen ist  $\psi_i$  die Inverse der durchschnittlichen Distanz zwischen den Teilverzweigungen in der Verzweigungsregion. Man nimmt nun an, dass die Verzweigung standardnormal verteilt ist, sodass in der verzweigten Region  $\psi_i = 1/l_n$  und in der nichtverzweigten Region  $\psi_i = 0$  gilt.

Die direkte Wasseraufnahme  $F_0$  durch die Wurzel 0. Ordnung pro Einheit Volumen ist nach Gleichung (3.31) durch

$$F_0 = \frac{2\pi ak_r}{\pi(a_0 + L_1 \sin \beta)^2} [p - p_r] \quad (3.46)$$

gegeben. Die gesamte Wasseraufnahme durch das Wurzelsystem erhält man durch Addition von (3.40) und (3.46):

$$F_W = F_0 + F_1 = \frac{2\pi ak_r + [2\pi ak_r k_{z,1}]^{1/2} \psi_1(z)}{\pi(a_0 + L_1 \sin \beta)^2} [p(S) - p_r]. \quad (3.47)$$

Man erhält nun den Quellterm, der in der Richardsgleichung (3.6) verwendet wird [Roose et al., 2004].

### 3.3 Zusammenfassung in 3D

Richardsgleichung (Formulierung wie in (3.6)):

$$\nabla \cdot [D_0 D(S) \nabla S - K_s K(S) \vec{e}] = \frac{\partial S}{\partial t} + F_W, \quad (3.48)$$

$\vec{e}$  ... Einheitsvektor in z-Richtung,

also in 3D:

$$\nabla \cdot \begin{pmatrix} D_0 D(S) \frac{\partial S}{\partial x} \\ D_0 D(S) \frac{\partial S}{\partial y} \\ D_0 D(S) \frac{\partial S}{\partial z} - K_S K(S) \end{pmatrix} = \frac{\partial S}{\partial t} + F_W, \quad (3.49)$$

wobei (siehe (3.47))

$$F_W = \frac{2\pi a k_r + [2\pi a k_r k_{z,1}]^{1/2} \psi_1(z)}{\pi(a_0 + L_1 \sin \beta)^2} [p(S) - p_r], \quad (3.50)$$

mit

$$p(S) = -p_c (S^{-1/m} - 1)^{1-m}, \quad (3.51)$$

(siehe (3.41)) und der interne Wurzelldruck  $p_r$  wird aus folgender Gleichung gewonnen:

$$[2\pi a k_r + [2\pi a k_r k_{z,1}]^{1/2} \psi_1(z)] (-p_c f(S) - p_r) = -k_{z,0} \frac{\partial^2 p_r}{\partial z^2}, \quad (3.52)$$

(siehe (3.43)), mit den Randbedingungen (siehe (3.44) und (3.45))

$$p_r = P \quad \text{an} \quad z = 0, \quad (3.53)$$

$$\frac{\partial p_r}{\partial z} - \rho g = 0 \quad \text{an} \quad z = l_0. \quad (3.54)$$

Betrachtet wird ein Einheitsquader. Die positive  $z$ -Richtung zeigt nach unten, d.h.:

$$n_x = \begin{pmatrix} 1 \\ 0 \\ 0 \end{pmatrix}, n_y = \begin{pmatrix} 0 \\ 1 \\ 0 \end{pmatrix}, n_z = \begin{pmatrix} 0 \\ 0 \\ -1 \end{pmatrix}. \quad (3.55)$$

Die Randbedingungen lauten

- z-Randbedingungen an der Bodenoberfläche:

- *Flussrandbedingung*: (siehe auch (3.9))

$$D_0 D(S) \frac{\partial S}{\partial z} - K_S K(S) = q_S \quad \text{an} \quad z = 0, \quad (3.56)$$

- *Wassergesättigte Randbedingung*: (siehe auch (3.10))

$$S = 1 \quad \text{an} \quad z = 0. \quad (3.57)$$

- z-Randbedingung an der Basis:

– *Vollständige Sättigung*: (siehe auch (3.11))

$$S = 1 \text{ an } z = l_w, \quad (3.58)$$

– *Free drainage - Randbedingung*: (siehe auch (3.12))

$$-D_0 D(S) \frac{\partial S}{\partial z} + K_S K(S) = -K_S K(S) \text{ an } z = l_w, \quad (3.59)$$

– *No flux - Randbedingung*: (siehe auch (3.13))

$$-D_0 D(S) \frac{\partial S}{\partial z} + K_S K(S) = 0 \text{ an } z = l_w. \quad (3.60)$$

- x-Randbedingungen:

$$-D_0 D(S) \frac{\partial S}{\partial x} = 0 \text{ an } x = 0, \quad (3.61)$$

$$-D_0 D(S) \frac{\partial S}{\partial x} = 0 \text{ an } x = l_w. \quad (3.62)$$

- y-Randbedingungen:

$$-D_0 D(S) \frac{\partial S}{\partial y} = 0 \text{ an } y = 0, \quad (3.63)$$

$$-D_0 D(S) \frac{\partial S}{\partial y} = 0 \text{ an } y = l_w. \quad (3.64)$$

Die Funktionen  $D(S)$  (siehe (3.8)),  $K(S)$  (siehe (3.2)) und  $f(S)$  (siehe (3.3)) lauten

$$D(S) = S^{1/2-1/m} [(1 - S^{1/m})^{-m} + (1 - S^{1/m})^m - 2], \quad (3.65)$$

$$K(S) = S^{1/2} [1 - (1 - S^{1/m})^m]^2, \quad (3.66)$$

$$f(S) = (S^{-1/m} - 1)^{1-m}. \quad (3.67)$$

Zusätzlich ist die Anfangsbedingung der relativen Wassersättigung  $S$  zur Zeit  $t = 0$  durch  $S = S_\infty$  gegeben.

Das Wachstumsgesetz für die Wurzeln 0. Ordnung (siehe (3.35)) ist durch

$$l_0 = K_0 + [l_{0,0} - K_0] \exp\left(-\frac{r_0 t}{K_0}\right) \quad (3.68)$$

formuliert.

## Kapitel 4

---

# Finite Elemente Methoden

---

Vorgänge und Reaktionen in der Biologie, Physik und Chemie lassen sich mit Hilfe von Funktionen, die partiellen Differentialgleichungen genügen, beschreiben. Die wenigsten Differentialgleichungen lassen sich analytisch lösen, somit greift man auf numerische Lösungsmethoden zurück. Das kontinuierliche System wird diskretisiert, sodass es unendliche Freiheitsgrade hat, und erhält dadurch ein endliches Gleichungssystem, das gelöst werden kann. Doch auch hier ist nicht jedes Verfahren für jede Differentialgleichung geeignet. Die Standardmethoden sind die *Finite Differenzen Methoden* und die *Finite Elemente Methoden* (FEM). Bei der *Finite Differenzen Methode* werden die Ableitungen durch Differenzenquotienten ersetzt. In dieser Arbeit wird jedoch das Grundprinzip der *Finite Elemente Methoden* vorgestellt und anschließend speziellere Verfahren, wie die *Stromlinien-diffusionsmethode* und die *Diskontinuierliche Galerkin Methode* erklärt. Die Idee dieser Verfahren ist die Approximation der gesuchten Lösung durch Lösungen endlichdimensionaler Probleme. Vorteile der FEM sind die einfache Koordination von komplizierten Geometrien sowie das theoretische Fundament, das diesen Methoden zu Grunde liegt. Der Fehler der approximierten Lösung kann mathematisch analysiert und abgeschätzt werden.

### 4.1 Einleitung in die Finite Elemente Methoden

Sei eine abstrakte Variationsformulierung in einem Hilbertraum  $H$  mit einem inneren Produkt  $(\cdot, \cdot)_H$  und der dazugehörigen Norm  $\|\cdot\|_H$  gegeben:

Bestimme  $u \in H$  mit

$$a(u, v) = g(v) \tag{4.1}$$

für alle  $v \in H$ .

Dabei sei  $a(\cdot, \cdot)$  eine stetige, elliptische Bilinearform, das heißt es existiert eine Konstante  $K > 0$ , so dass

$$|a(u, v)| \leq K \|u\|_H \|v\|_H \quad \forall u, v \in H \quad (\text{Stetigkeit}) \quad (4.2)$$

gilt und eine Konstante  $\kappa > 0$ , so dass

$$a(u, u) \geq \kappa \|u\|_H^2 \quad \forall u \in H \quad (\text{Elliptizität}) \quad (4.3)$$

erfüllt ist und  $g(\cdot)$  sei ein stetiges Funktional.

Die eindeutige Lösbarkeit des Variationsproblems folgt unmittelbar aus folgendem Lemma [Jüngel, 2008]:

Lemma von Lax-Milgram:

Seien  $H$  ein Hilbertraum mit Skalarprodukt  $(\cdot, \cdot)$ ,  $a : H \times H \rightarrow \mathbb{R}$  eine stetige und koerzive Bilinearform und  $g \in H'$  (siehe (A.6)), dann existiert genau ein  $u \in H$ , so dass  $a(u, v) = g(v) \quad \forall v \in H$ . Für diese Lösung gilt:  $\|u\|_H \leq \kappa^{-1} \|g\|_{H'}$ .

## 4.2 Galerkin Verfahren

Das *Galerkin-Verfahren* ist das historisch älteste Finite-Elemente-Verfahren und dient auch als Basis für speziellere Verfahren, wie der Stromliniendifusionsmethode. Die meisten Differentialgleichungen können mit diesem Verfahren behandelt werden. Hyperbolische Differentialgleichungen machen unter Umständen Probleme, da bei diesen Schockwellen auftreten können, die zu numerischen Instabilitäten führen.

### 4.2.1 Grundidee des Galerkin-Verfahrens

Beim *Galerkin Verfahren* wird die Lösung des Variationsproblems durch endlichdimensionale Teilräume approximiert. Die Bilinearform  $a(\cdot, \cdot)$  sei beschränkt und elliptisch. Man wähle einen  $n$ -dimensionalen Unterraum  $V_h \subset H$ , der durch stückweise polynomiale  $C^0$ -stetige Basisfunktionen aufgespannt wird:

$V_h = [w_1 \dots w_n]$ . Die diskrete Variationsformulierung des Galerkin-Verfahrens lautet:

Bestimme  $u_h \in V_h$ , sodass

$$a(u_h, v_h) = g(v_h) \quad \forall v_h \in V_h \quad (4.4)$$

gilt.

Für  $u_h$  wird der Ansatz

$$u_h = u_1 w_1 + \dots + u_n w_n \quad (4.5)$$

gewählt. Außerdem folgt aus der linearen Unabhängigkeit der Basis  $V_h = [w_1 \dots w_n]$ , dass Gleichung (4.4) äquivalent zu  $a(u_h, w_j) = g(w_j)$ ,  $j = 1, \dots, n$  ist. Daraus erhält man:

$$a\left(\sum_{i=1}^n u_i w_i, w_j\right) = \sum_{i=1}^n u_i a(w_i, w_j) = g(w_j), \quad j = 1, \dots, n. \quad (4.6)$$

Aus dieser Darstellung bekommt man ein Gleichungssystem für den gesuchten Koeffizientenvektor  $u = (u_1, \dots, u_n)^T$ :

$$Au = b, \quad (4.7)$$

wobei

$$A = \begin{pmatrix} a(w_1, w_1) & \dots & a(w_1, w_n) \\ \vdots & & \vdots \\ a(w_n, w_1) & \dots & a(w_n, w_n) \end{pmatrix} \quad (4.8)$$

und

$$b = \begin{pmatrix} g(w_1) \\ g(w_2) \\ g(w_3) \end{pmatrix}. \quad (4.9)$$

Die eindeutige Lösbarkeit folgt aus dem Lax-Milgram-Lemma [Auzinger, 2007].

Eine Aussage bezüglich der Konvergenz der Lösung liefert das folgende Lemma:

Lemma von Céa:

Es sei  $a(.,.)$  eine beschränkte, elliptische Bilinearform auf einem Hilbertraum  $H$  und  $V_h \subset H$  ein linearer Teilraum von  $H$ . Dann gilt für die Differenz der Lösungen  $u^* \in H$  bzw.  $u_h \in V_h$  der Variationsformulierungen (4.1) bzw. (4.4) die Abschätzung:

$$\|u_h - u^*\|_H \leq \frac{M}{\gamma} \inf_{v_h \in V_h} \|v_h - u^*\|_H. \quad (4.10)$$

Mit Hilfe dieses Lemmas kann man nun Aussagen bezüglich der Wahl eines geeigneten Unterraums  $V_h$  und dessen Basis  $W_h$  treffen. Wählt man  $V_h$  möglichst dicht

in  $H$ , so wird zwar die Approximationsqualität optimiert, allerdings ist dann die Matrix  $A$  sehr stark besetzt, was zu unnötiger Rechenzeit führt. Ziel ist es daher die Basis so zu wählen, dass möglichst viele Produkte  $a(w_i, w_j)$  Null werden, da die Struktur von  $A$  nur von der gewählten Basis abhängt. Dies wird erreicht, wenn die  $w_i$  möglichst kleinen Träger besitzen.

Beispiele für passende Basisfunktionen:

- Im eindimensionalen Fall werden als Ansatzfunktionen so genannte *Hutfunktionen* gewählt. Dazu sei ein Intervall  $[a, b]$  gegeben, das in  $N$  Teilintervalle  $[x_{i-1}, x_i]$  der Länge  $h$ ,  $i = 1, \dots, N$ , geteilt wird. Die Hutfunktionen  $w_i(x)$  sind durch

$$w_i(x) := \begin{cases} \frac{x-x_{i-1}}{h} & \text{für } x \in [x_{i-1}, x_i], \\ \frac{x_{i+1}-x}{h} & \text{für } x \in [x_i, x_{i+1}], \\ 0 & \text{sonst,} \end{cases} \quad (4.11)$$

definiert. Wie (4.11) erkennen lässt, erstreckt sich der Träger jeder der Funktionen  $w_i(x)$  nur über das Intervall  $[x_{i-1}, x_{i+1}]$  und somit ist  $A$  eine Tridiagonalmatrix.

- Im zweidimensionalen Fall wird das Gebiet  $\Omega$  in ein gleichmäßiges Dreiecksgitter unterteilt (Gitterfeinheit  $h$  in  $x$ - und  $y$ - Richtung,  $h = 1/N$ ). (Für Demonstrationszwecke wird hier ein gleichmäßiges Dreiecksgitter verwendet, die Idee für ein ungleichmäßiges ist allerdings dieselbe.)

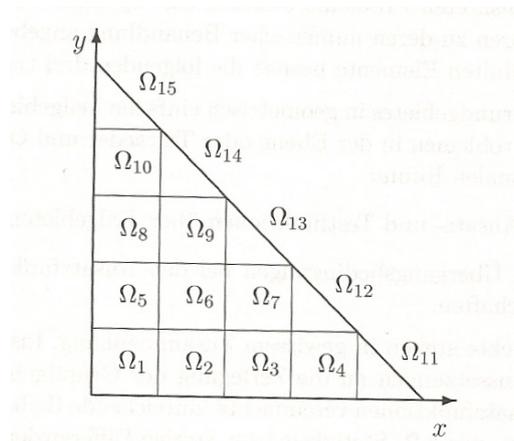


Abbildung 4.1: Beispiel einer Gebietszerlegung, [Großmann et al., 2005].

An jedem inneren Gitterpunkt  $x_{ij}$  wird eine stückweise lineare Basisfunktion  $w_{ij}(x)$  definiert, deren Träger  $T_{ij}$  die Vereinigung von 6 benachbarten Dreiecken ist ( $x_{ij}$  ist der gemeinsame Eckpunkt). Für diese Basisfunktionen

gilt  $w_{ij}(x_{ij}) = 1$  und  $w_{ij}(x) = 0$  an allen anderen Gitterpunkten  $x$ . Die Koeffizienten  $a(w_{ij}, w_{kl})$  der Matrix  $A$  werden durch Integrale über die Menge  $T_{ij} \cap T_{kl}$  mit stückweise konstanten Integranden berechnet. Die Berechnung über die verschiedenen lokalen Gebiete  $T_{ij}$  erfolgt mittels Substitution auf ein Referenzdreieck  $T_{\text{ref}}$ .

*Lemma: Parametrisierung mittels eines Referenzdreiecks*

Es seien  $\bar{x}_1 = (x_1, y_1)$ ,  $\bar{x}_2 = (x_2, y_2)$  und  $\bar{x}_3 = (x_3, y_3)$  die Eckpunkte eines Dreiecks  $T$ , und  $T_{\text{ref}}$  sei das Einheitsdreieck mit den Eckpunkten  $[(0, 0), (0, 1), (1, 0)]$ . Dann gilt:

1. Die affine Funktion

$$\Phi(\bar{\xi}) = \Phi(\xi, \eta) := \bar{x}_1 + \xi(\bar{x}_2 - \bar{x}_1) + \eta(\bar{x}_3 - \bar{x}_1) \quad (4.12)$$

bildet  $T_{\text{ref}}$  auf  $T$  ab.

2. Die Funktionaldeterminante von  $\Phi$  lautet

$$\det \Phi' = (x_2 - x_1)(y_3 - y_1) - (y_2 - y_1)(x_3 - x_1) \quad (4.13)$$

für beliebiges  $\bar{\xi}$ .

3. Ein Integral über den Bereich  $T$  transformiert sich gemäß

$$\int_T u(x, y) \, dx dy = [(x_2 - x_1)(y_3 - y_1) - (y_2 - y_1)(x_3 - x_1)] \cdot \int_{T_{\text{ref}}} u(\Phi(\xi, \eta)) \, d\xi d\eta. \quad (4.14)$$

- Der dreidimensionale Fall wird analog dem zweidimensionalen Fall behandelt. Das Gebiet wird allerdings in Tetraeder oder Polygone unterteilt [Auzinger, 2007].

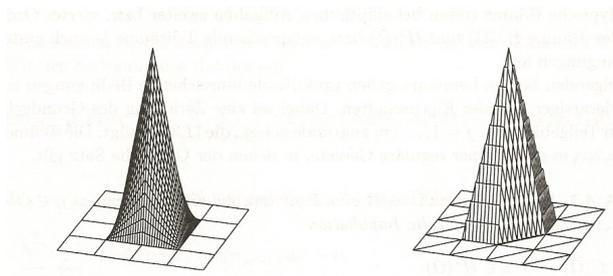


Abbildung 4.2: Ansatzfunktionen

### 4.2.2 Beispiel anhand eines Konvektions-Diffusions-Problems

Sei als Modellproblem eine *Konvektions-Diffusions-Gleichung*

$$\begin{aligned} -\nabla \cdot (K \cdot \nabla u) + c \cdot \nabla u + ru &= f && \text{in } \Omega, \\ u &= u_D && \text{auf } \Gamma_D, \\ n \cdot K \cdot \nabla u &= t_N && \text{auf } \Gamma_N, \end{aligned} \quad (4.15)$$

wobei

$\Gamma_D$  ... Der Rand, auf dem Dirichlet-Bedingungen vorgegeben sind,

$\Gamma_N$  ... Der Rand, auf dem Neumann-Randbedingungen vorgegeben sind,

gegeben. Durch Multiplizieren mit einer Testfunktion  $v \in V$  und Integrieren über das Gebiet  $\Omega$  ergibt sich die dazugehörige Variationsgleichung

$$-\int_{\Gamma_N} t_N v \, d\Gamma_N + \int_{\Omega} K \cdot \nabla u \nabla v \, d\Omega + \int_{\Omega} (c \nabla u + ru) v \, d\Omega = \int_{\Omega} f v \, d\Omega, \forall v \in V. \quad (4.16)$$

Die Bilinearform  $a(.,.)$  und das lineare Funktional  $g(.)$  sind hier definiert als

$$\begin{aligned} a(u, v) &:= \int_{\Omega} K \cdot \nabla u \nabla v \, d\Omega + \int_{\Omega} (c \nabla u + ru) v \, d\Omega, \\ g(v) &:= \int_{\Gamma_N} t_N v \, d\Gamma_N + \int_{\Omega} f v \, d\Omega. \end{aligned} \quad (4.17)$$

Für  $u, v \in H^1(\Omega)$  ist die Bilinearform  $a(.,.)$  wohldefiniert. Der *Sobolevraum*  $H^k(\Omega)$  ist charakterisiert durch

$$H^k(\Omega) := \{u \in L^2(\Omega) : D^\alpha u \in L^2(\Omega) \forall |\alpha| \leq k\}, \quad (4.18)$$

mit

$D^\alpha u$  ... Distributionelle Ableitung von  $u$ .

Da die Lösung  $u$  auf dem Dirichlet-Rand  $\Gamma_D$  gleich  $u_D$  sein muss, lautet die schwache Formulierung:

Finde ein  $u \in H_D^1(\Omega)$ , so dass

$$a(u, v) = g(v) \quad \forall v \in H_0^1(\Omega), \quad (4.19)$$

wobei

$$H_D^1(\Omega) = \{w \in H^1(\Omega) : w = u_D \text{ auf } \Gamma_D\}, \quad (4.20)$$

$$H_0^1(\Omega) = \{w \in H^1(\Omega) : w = 0 \text{ auf } \Gamma_D\}. \quad (4.21)$$

Diskretisiert man die Variationsgleichung mittels Galerkin-Verfahren, so erhält man die diskrete Variationsformulierung

$$\int_{\Omega} K \cdot \nabla u_h \nabla v_h \, d\Omega + \int_{\Omega} (c \nabla u_h + r u_h) v_h \, d\Omega = \int_{\Omega} f v_h \, d\Omega + \int_{\Gamma_N} t_N v_h \, d\Gamma_N, \quad v_h \in V_h \quad (4.22)$$

mit

$$a(u_h, v_h) := \int_{\Omega} K \cdot \nabla u_h \nabla v_h \, d\Omega + \int_{\Omega} (c \nabla u_h + r u_h) v_h \, d\Omega, \quad (4.23)$$

$$g(v_h) := \int_{\Omega} f v_h \, d\Omega + \int_{\Gamma_N} t_N v_h \, d\Gamma_N. \quad (4.24)$$

Wie in (4.4)-(4.6) beschrieben, wird das Gebiet  $\Omega$  mittels geeigneter Triangulierung zerlegt und als Ansatzfunktionen folgende Linearkombinationen

$$\begin{aligned} v_h &= \sum_{i=1}^n w_i v_i = Wv, \\ \nabla v_h &= \sum_{i=1}^n \nabla w_i v_i = \bar{W}v, \\ u_h &= \sum_{i=1}^n w_i u_i = Wu, \\ \nabla u_h &= \sum_{i=1}^n \nabla w_i u_i = \bar{W}u, \end{aligned} \quad (4.25)$$

gewählt, wobei

$n = 3 \dots$  Anzahl der Knoten pro Element (hier Dreieckselemente),  
 $w_i(x, y) \dots$  Lineare Interpolationsfunktion.

Es gilt die Beziehung  $w_j(x_i, x_j) = \delta_{ij}$  ( $\delta_{ij} \dots$  Kroneckersymbol), woraus sich die Matrizen für  $W$ ,  $\bar{W}$ ,  $v$  und  $u$  wie folgt aufschreiben lassen:

$$\begin{aligned} W &= \begin{pmatrix} w_1 & w_2 & w_3 \end{pmatrix}, \\ \bar{W} &= \begin{pmatrix} \frac{\partial w_1}{\partial x} & \frac{\partial w_2}{\partial x} & \frac{\partial w_3}{\partial x} \\ \frac{\partial w_1}{\partial y} & \frac{\partial w_2}{\partial y} & \frac{\partial w_3}{\partial y} \end{pmatrix}, \\ v &= \begin{pmatrix} v_1 \\ v_2 \\ v_3 \end{pmatrix}, \quad u = \begin{pmatrix} u_1 \\ u_2 \\ u_3 \end{pmatrix}. \end{aligned} \quad (4.26)$$

Setzt man nun (4.26) in (4.11) für die einzelnen Dreiecke  $T$  ein, erhält man:

$$\begin{aligned} v' \int_T \overline{W}' K \overline{W} dT u + v' \int_T W' c \overline{W} dT u + v' r \int_T W' W dT u = \\ v' \int_T f W' dT + \int_{\Gamma_N \cap T} t_N W' d\Gamma \end{aligned} \quad (4.27)$$

Summiert man über alle Dreiecke  $T$  von (4.27) auf, erhält man aus dem ersten Term eine symmetrische Matrix und aus den anderen beiden Termen je eine unsymmetrische Matrix. Fasst man diese Matrizen zusammen, ergibt sich die Systemmatrix  $A$ , die unsymmetrisch ist.

$$v' A u = v' b \quad \forall v' \in V \quad \Leftrightarrow \quad A u = b \quad (4.28)$$

Dieses Gleichungssystem kann dann zum Beispiel mit dem Gauß-Verfahren, einem Iterationsverfahren oder einem CG-Verfahren gelöst werden [Papastavrou, 1998].

Beim Galerkin-Verfahren können bei Konvektions-Diffusions-Problemen in der approximierten Lösung Oszillationen auftreten, sofern die exakte Lösung nicht glatt ist. Dies soll nun durch die folgende Fehlerabschätzung demonstriert werden.

### 4.2.3 Konvergenzanalyse des Galerkin-Verfahrens

Es werden nun folgende Voraussetzungen festgesetzt:

$K(x) \equiv \epsilon I$  mit einer Konstanten  $\epsilon > 0$ , außerdem gelte die Beziehung  $r - \frac{1}{2} \nabla \cdot c \geq r_0$  mit einer Konstante  $r_0 > 0$ . Die Bilinearform lautet nun:

$$a(u, v) := \int_{\Omega} [\epsilon \nabla u \cdot \nabla v + c \cdot \nabla uv + ruv] dx, \quad u, v \in V. \quad (4.29)$$

Mittels partieller Integration bekommt man folgende Umformung für gleiche Argumente  $v \in V$ :

$$\begin{aligned} a(v, v) &= \epsilon |v|_{H^1}^2 + (c \cdot \nabla v, v)_{L^2} + (rv, v)_{L^2} \\ &= \epsilon |v|_{H^1}^2 + \left( \frac{1}{2} \nabla \cdot c, v^2 \right)_{L^2} + (rv, v)_{L^2} \\ &= \epsilon |v|_{H^1}^2 + \left( r \frac{1}{2} \nabla \cdot c, v^2 \right)_{L^2}. \end{aligned}$$

Um die Bilinearform  $a(v, v)$  weiter abschätzen zu können, wird die so genannte  $\epsilon$ -gewichtete  $H^1$ -Norm eingeführt:

$$\|v\|_{\epsilon} := \sqrt{\epsilon |v|_{H^1}^2 + \|v\|_{L^2}^2}. \quad (4.30)$$

Mit dieser Definition folgt nun:

$$a(v, v) \geq \epsilon |v|_{H^1}^2 + r_0 \|v\|_{L^2}^2 \geq \alpha \|v\|_\epsilon^2, \quad \alpha := \min\{1, r_0\}. \quad (4.31)$$

Die Konstante  $\alpha$  ist unabhängig von  $\epsilon$ .

Eine Abschätzung nach oben für die Bilinearform  $a(u, v)$  wird durch folgende Umformungen erreicht:

$$\begin{aligned} |a(u, v)| &\leq \epsilon |u|_{H^1} |v|_{H^1} + \|c\|_\infty \|u\|_{L^2} |v|_{H^1} + (\|c\|_\infty + \|r\|_\infty) \|u\|_{L^2} \|v\|_{L^2} \\ &= |v|_{H^1} (\epsilon |u|_{H^1} + \|c\|_\infty \|u\|_{L^2}) + (\|c\|_\infty + \|r\|_\infty) \|u\|_{L^2} \|v\|_{L^2} \\ &\leq (\sqrt{\epsilon} |u|_{H^1} + \|u\|_{L^2}) [(\sqrt{\epsilon} + \|c\|_\infty) |v|_{H^1} + (\|c\|_\infty + \|r\|_\infty) \|v\|_{L^2}] \\ &\leq M \|u\|_\epsilon \|v\|_{H^1}, \\ M &:= \min\{\sqrt{\epsilon} + \|c\|_\infty, \|c\|_\infty + \|r\|_\infty\}. \end{aligned} \quad (4.32)$$

Die Konstante  $M$  kann unabhängig von  $\epsilon$  angesehen werden.

Die Abschätzungen (4.31) und (4.32) liefern eine Fehlerabschätzung für eine Finite-Elemente-Lösung  $u_h \in V_h$  und beliebige  $v_h \in V_h$ :

$$\alpha \|u - u_h\|_\epsilon^2 \leq a(u - u_h, u - u_h) = a(u - u_h, u - v_h) \leq M \|u - u_h\|_\epsilon \|u - v_h\|_{H^1}. \quad (4.33)$$

Daraus folgt:

$$\|u - u_h\|_\epsilon \leq \frac{M}{\alpha} \inf_{v_h \in V_h} \|u - v_h\|_{H^1}, \quad (4.34)$$

wobei die Konstante  $\frac{M}{\alpha}$  unabhängig von  $\epsilon$ ,  $h$  und  $u$  ist.

Die Abschätzung (4.34) ist schwächer als die Standardabschätzung aus dem *Lemma von Céa*, wegen der im Vergleich zur  $H^1$ -Norm schwächeren  $\epsilon$ -gewichteten  $H^1$ -Norm. Unter der Voraussetzung  $u \in H^2$  gilt Satz S.B.2, und man erhält mit der Abschätzung  $\inf_{v_h \in V_h} \|u - v_h\|_{H^1} \leq \|u - I_h(u)\|_{H^1}$ , wobei  $I_h(u)$  die stückweise lineare Interpolierende von  $u$  ist, die Fehlergleichung

$$\|u - u_h\|_\epsilon \leq Ch |u|_{L^2}, \quad (4.35)$$

wobei  $C > 0$  eine von  $\epsilon$ ,  $h$  und  $u$  unabhängige Konstante ist. Die rechte Seite von (4.35) hängt in nachteiliger Weise von  $\epsilon$  ab. Es kann also passieren, dass  $\|u\|_{L^2} = O(\epsilon^{-3/2})$  für  $\epsilon \rightarrow 0$  ist. Daraus folgt also, dass die Galerkin-Methode für das Modellproblem (4.15) auf Grund des Konvektionsterms nur bedingt tauglich ist. Die theoretischen Aussagen der Standard-Galerkin-Methode gelten zwar auch für konvektionsdominierende Probleme, allerdings nur, wenn der Diffusions-term dominierend ist und die Gleichung parabolisches Verhalten aufweist oder für

ein hinreichend kleines  $h$ . Das heißt, um ansonsten mit der Standard-Galerkin-Methode zu einem vernünftigen Ergebnis zu kommen, müssten die Schrittweiten  $h$  so klein gewählt werden, dass der Rechenaufwand sehr groß wird. Weiters kann es trotz der geringen Schrittweitenwahl schnell zu Oszillationen der numerischen Lösung kommen. Es gibt andere Verfahren, die in diesen Fällen besser geeignet sind, wie zum Beispiel die *Stromliniendiffusionsmethode* oder die *diskontinuierliche Galerkin-Methode* [Knabner, 2000].

### 4.3 Stromliniendiffusionsmethode

Die grundlegende Idee der *Stromliniendiffusionsmethode* (oder auch *Streamline Upwind Petrov-Galerkin Method* genannt) [Brooks et al., 1990], ist dieselbe wie beim *Upwind-Verfahren* bei den Finiten Differenzen. Dort wird der Differenzenquotient entsprechend der lokalen Strömungsrichtung ausgerichtet. Dasselbe wird nun bei der Stromliniendiffusionsmethode gemacht. Den Knoten, die stromaufwärts, also 'upwind', liegen, wird mehr Gewicht verliehen. Dadurch erreicht man die gewünschte Stabilisation. Dies wird durch eine modifizierte Testfunktion erreicht, indem man der üblichen Ansatzfunktion einen Term höherer Ordnung hinzuaddiert.

#### 4.3.1 Demonstration anhand eines Konvektions-Diffusions-Problems

Betrachtet man wieder das Modellproblem (4.15) und verwendet diesmal modifizierte Testfunktionen der Form

$$w = v + \delta_T c \cdot \nabla v, \quad (4.36)$$

wobei

- $v \dots$  übliche Testfunktion,
- $c \dots$  aus (4.29),
- $\delta_T \dots$  Stromliniendiffusionsparameter,

schreibt sich analog die schwache Formulierung gemäß

$$-\int_{\Gamma_N} t_N w \, d\Gamma_N + \int_{\Omega} K \cdot \nabla u \nabla w \, d\Omega + \int_{\Omega} (c \nabla u + ru) w \, d\Omega = \int_{\Omega} f w \, d\Omega, \quad (4.37)$$

und daraus ergibt sich die dazugehörige Diskretisierung

$$\int_{\Omega} K \cdot \nabla u_h \nabla w_h \, d\Omega + \int_{\Omega} (c \nabla u_h + ru_h) w_h \, d\Omega = \int_{\Omega} f w_h \, d\Omega + \int_{\Gamma_N} t_N w_h \, d\Gamma_N. \quad (4.38)$$

Durch den Stromliniendiffusionsparameter  $\delta_T$  entsteht die gewünschte gewichtete Testfunktion. Setzt man diese Testfunktion  $w_h$  ein, so schreibt sich (4.38) als

$$\begin{aligned} & \int_{\Omega} (K \cdot \nabla u_h) \nabla v_h \, d\Omega + \int_{\Omega} c \cdot \nabla u_h v_h \, d\Omega + r \int_{\Omega} u_h v_h \, d\Omega - \\ & \int_{\Omega} \nabla \cdot (K \cdot \nabla u_h) \delta_T c \cdot \nabla v_h \, d\Omega + \int_{\Omega} c \cdot \nabla u_h \delta_T c \cdot \nabla v_h \, d\Omega + r \int_{\Omega} u_h \delta_T c \cdot \nabla v_h \, d\Omega \\ & = \int_{\Omega} f v_h \, d\Omega + \int_{\Omega} f \delta_T c \cdot \nabla v_h \, d\Omega + \int_{\Gamma_N} t_N v_h \, d\Gamma. \end{aligned} \quad (4.39)$$

Es werden dieselben Ansatzfunktionen wie in (4.25) mit den Matrizen aus (4.26) verwendet und eingesetzt (vergleiche (4.27)):

$$\begin{aligned} & v' \int_T \overline{W}' K \overline{W} \, dT \, u + v' \int_T W' c \overline{W} \, d\Omega \, u + v' r \int_T W' W \, d\Omega \, u + \\ & v' \int_T \delta_T \overline{W}' c' c \overline{W} \, d\Omega \, u + r \int_{\Omega} u \delta_T \overline{W}' c' \cdot \nabla v \, d\Omega \\ & = v' \int_T f W' \, d\Omega + v' \int_T \delta \overline{W}' c' f \, d\Omega + \int_{\Gamma_N \cap T} t_N W' \, d\Gamma \end{aligned} \quad (4.40)$$

Das ergibt genauso wie in (4.28) ein Gleichungssystem der Gestalt:

$$\overline{A} \overline{u} = \overline{b}. \quad (4.41)$$

### 4.3.2 Konvergenzanalyse der Stromliniendiffusionsmethode

In diesem Abschnitt wird eine Fehlerabschätzung für die Stromliniendiffusionsmethode und eine sinnvolle Wahl des Parameters  $\delta$  hergeleitet.

Analog zu (4.31) erhält man eine Abschätzung für die Bilinearform  $a(v_h, v_h)$ ,  $v_h \in V_h$  der Stromliniendiffusionsmethode:

$$a_h(v_h, v_h) \geq \epsilon |v_h|_{H^1}^2 + r_0 \|v_h\|_{L^2}^2 + \sum_{T \in \mathcal{T}} \delta_T (-\epsilon \Delta v_h + c \cdot \nabla v_h + r v_h, c \cdot \nabla v_h)_{L^2(T)}. \quad (4.42)$$

Der Summenterm auf der linken Seite wird nun unter Verwendung der elementaren Ungleichung  $ab \leq a^2 + \frac{b^2}{4}$ ,  $a, b \in \mathbb{R}$  weiter abgeschätzt:

$$\begin{aligned} & \left| \sum_{T \in \mathcal{T}} \delta_T (-\epsilon \Delta v_h + r v_h, c \cdot \nabla v_h)_{L^2(T)} \right| \\ & \leq \sum_{T \in \mathcal{T}} \left[ \left| \left( -\epsilon \sqrt{|\delta_T|} \Delta v_h, \sqrt{|\delta_T|} c \cdot \nabla v_h \right)_{L^2(T)} \right| + \left| \left( \sqrt{|\delta_T|} r v_h, \sqrt{|\delta_T|} c \cdot \nabla v_h \right)_{L^2(T)} \right| \right] \\ & \leq \sum_{T \in \mathcal{T}} \left[ \epsilon^2 |\delta_T| \|\Delta v_h\|_{L^2(T)}^2 + |\delta_T| \|r\|_{\infty}^2 \|v_h\|_{L^2}^2 + \frac{|\delta_T|}{2} \|c \cdot \nabla v_h\|_{L^2}^2 \right]. \end{aligned} \quad (4.43)$$

Unter Verwendung der inversen Ungleichung S.B.8 gilt:

$$\left| \sum_{T \in \mathcal{T}} \delta_T (-\epsilon \Delta v_h + r v_h, c \cdot \nabla v_h)_{L^2(T)} \right| \leq \sum_{T \in \mathcal{T}} \left[ \epsilon^2 |\delta_T| \frac{c^2}{h^2} |v_h|_{H^1(T)}^2 + |\delta_T| \|r\|_\infty^2 \|v_h\|_{L^2(T)}^2 + \frac{|\delta_T|}{2} \|c \cdot \nabla v_h\|_{L^2(T)}^2 \right]. \quad (4.44)$$

Aus (4.42)-(4.44) folgt nun insgesamt eine Abschätzung nach unten für  $a_h(v_h, v_h)$ :

$$a_h(v_h, v_h) \geq \sum_{T \in \mathcal{T}} \left[ \left( \epsilon - \epsilon^2 |\delta_T| \frac{c^2}{h^2} \right) |v_h|_{H^1(T)}^2 + (r_0 - |\delta_T| \|r\|_\infty^2) \|v_h\|_{L^2(T)}^2 + \left( \delta_T - \frac{|\delta_T|}{2} \right) \|c \cdot \nabla v_h\|_{L^2(T)}^2 \right]. \quad (4.45)$$

Wählt man für den Parameter  $\delta_T$  die Schranke

$$0 < \delta_T \leq \frac{1}{2} \min \left\{ \frac{h_T^2}{\epsilon c^2}, \frac{r_0}{\|r\|_\infty} \right\}, \quad (4.46)$$

so schreibt sich Abschätzung (4.23) als

$$a_h(v_h, v_h) \geq \frac{\epsilon}{2} |v_h|_{H^1(T)}^2 + \frac{r_0}{2} \|v_h\|_{L^2(T)}^2 + \frac{1}{2} \sum_{T \in \mathcal{T}} \delta_T \|c \cdot \nabla v_h\|_{L^2(T)}^2. \quad (4.47)$$

Diesen Ausdruck kann man weiter abschätzen, indem man die so genannte *Stromliniendiffusionsnorm* definiert:

$$\|v\|_{\text{sd}} := \sqrt{\epsilon |v|_{H^1(T)}^2 + r_0 \|v\|_{L^2(T)}^2 + \sum_{T \in \mathcal{T}} \delta_T \|c \cdot \nabla v\|_{L^2(T)}^2}. \quad (4.48)$$

Mit Hilfe dieser Norm und der Schranke aus (4.46) folgt weiter :

$$\frac{1}{2} \|v_h\|_{\text{sd}}^2 \leq a_h(v_h, v_h) \quad \forall v_h \in V_h. \quad (4.49)$$

Die hier definierte Stromliniendiffusionsnorm ist offenbar stärker als die in (4.30) definierte  $\epsilon$ -gewichtete  $H^2$ -Norm. Es gilt nämlich:

$$\min\{1, \sqrt{r_0}\} \|v\|_\epsilon \leq \|v\|_{\text{sd}} \quad \forall v \in V. \quad (4.50)$$

Mit diesen Betrachtungen lässt sich folgende Fehlerabschätzung beweisen:

Satz:

Die Parameter  $\delta_T$  werden gemäß

$$\delta_T = \begin{cases} \delta_1 \frac{h_T^2}{\epsilon}, & \text{Pe}_T \leq 1 \\ \delta_2 h_T, & \text{Pe}_T > 1 \end{cases} \quad \text{mit } \text{Pe}_T := \frac{\|c\|_\infty h_T}{2\epsilon}. \quad (4.51)$$

mit  $\delta_1, \delta_2 > 0$  unabhängig von  $K$  und  $\epsilon$  so gewählt, dass die Bedingung (4.46) erfüllt ist. Liegt die schwache Lösung  $u$  zusätzlich in  $H^{k+1}(\Omega)$ , so gilt

$$\|u - u_h\|_{\text{sd}} \leq C \left( \sqrt{\epsilon} + \sqrt{h} \right) h^k |u|_{H^{k+1}}. \quad (4.52)$$

mit einer von  $\epsilon, h$  und  $u$  unabhängigen Konstante  $C > 0$ .

Beweis:

Mit Hilfe der Dreiecks-Ungleichung gilt zunächst:

$$\|u - u_h\|_{\text{sd}} \leq \|u - I_h(u)\|_{\text{sd}} + \|I_h(u) - u_h\|_{\text{sd}}. \quad (4.53)$$

- Abschätzung des zweiten Terms  $\|I_h(u) - u_h\|_{\text{sd}}$ :

$$\frac{1}{2} \|I_h(u) - u_h\|_{\text{sd}}^2 \leq a_h(I_h(u) - u_h, I_h(u) - u_h) = a_h(I_h(u) - u, I_h(u) - u_h). \quad (4.54)$$

Unter der Voraussetzung  $u \in V \cap H^{k+1}(\Omega)$  werden nun die beiden Terme  $\epsilon \int_{\Omega} \nabla(I_h(u) - u) \cdot \nabla(I_h(u) - u_h) dx$  und  $\int_{\Omega} [c \cdot \nabla(I_h(u) - u) + r(I_h(u) - u_h)] dx$  abgeschätzt:

$$\begin{aligned} \epsilon \int_{\Omega} \nabla(I_h(u) - u) \cdot \nabla(I_h(u) - u_h) dx &\leq \sqrt{\epsilon} |I_h(u) - u|_{H^1} \|I_h(u) - u_h\|_{\text{sd}} \\ &\leq c\sqrt{\epsilon} h^k |u|_{H^{k+1}} \|I_h(u) - u_h\|_{\text{sd}}, \end{aligned} \quad (4.55)$$

$$\begin{aligned} &\int_{\Omega} [c \cdot \nabla(I_h(u) - u) + r(I_h(u) - u_h)] dx \\ &= \int_{\Omega} r(I_h(u) - u)(I_h(u) - u_h) dx \\ &\quad - \int_{\Omega} \nabla \cdot c(I_h(u) - u)(I_h(u) - u_h) dx \\ &\quad - \int_{\Omega} (I_h(u) - u)c \cdot \nabla(I_h(u) - u_h) dx \\ &= \int_{\Omega} (r - \nabla \cdot c)(I_h(u) - u)(I_h(u) - u_h) dx - \int_{\Omega} (I_h(u) - u)c \cdot \nabla(I_h(u) - u_h) dx \\ &\leq \|r - \nabla \cdot c\|_{\infty} \|I_h(u) - u\|_{L^2} \|I_h(u) - u_h\|_{L^2} \\ &\quad + \|I_h(u) - u\|_{L^2} \|c \cdot \nabla(I_h(u) - u_h)\|_{L^2} \\ &\leq C \left[ \sqrt{\sum_{T \in \mathcal{T}} \|I_h(u) - u\|_{L^2(T)}^2} \sqrt{\sum_{T \in \mathcal{T}} \delta_T^{-1} \|I_h(u) - u\|_{L^2(T)}^2} \right] \|I_h(u) - u_h\|_{\text{sd}} \\ &\leq Ch^k \sqrt{\sum_{T \in \mathcal{T}} (1 + \delta_T^{-1}) h_T^2 |u|_{H^{k+1}(T)}^2} \|I_h(u) - u_h\|_{\text{sd}}. \end{aligned} \quad (4.56)$$

Auf Grund der beiden Abschätzungen (4.55) und (4.56) gilt weiters:

$$\begin{aligned}
& \left| \sum_{T \in \mathcal{T}} \delta_T (-\epsilon \Delta(I_h(u) - u) + c \cdot \nabla(I_h(u) - u) + r(I_h(u) - u), c \cdot \nabla(I_h(u) - u))_{L^2(T)} \right| \\
& \leq \sum_{T \in \mathcal{T}} c \sqrt{\delta_T} \left[ \epsilon h_T^{k-1} + \|c\|_\infty h_T^k + \|r\|_\infty h_T^{k+1} \right] |u|_{H^{k+1}(T)} \sqrt{\delta_T} \|c \cdot \nabla(I_h(u) - u_h)\|_{L^2(T)} \\
& \leq C \sqrt{\sum_{T \in \mathcal{T}} \delta_T \left[ \epsilon h_T^{k-1} + h_T^k + h_T^{k+1} \right]^2} |u|_{H^{k+1}(T)} \|I_h(u) - u_h\|_{\text{sd}}. \quad (4.57)
\end{aligned}$$

Aus der Schranke (4.46) folgt insbesondere:

$$\epsilon \delta_T \leq \frac{h_T^2}{c^2}. \quad (4.58)$$

Wird (4.58) auf die letzte Schranke von (4.57) angewendet, ergibt sich:

$$\begin{aligned}
& \left| \sum_{T \in \mathcal{T}} \delta_T (-\epsilon \Delta(I_h(u) - u) + c \cdot \nabla(I_h(u) - u) + r(I_h(u) - u), c \cdot \nabla(I_h(u) - u))_{L^2(T)} \right| \\
& \leq Ch^k \sqrt{\sum_{T \in \mathcal{T}} [\epsilon + \delta_T] |u|_{H^{k+1}(T)}^2} \|I_h(u) - u_h\|_{\text{sd}}. \quad (4.59)
\end{aligned}$$

Die Abschätzungen (4.54) und (4.59) werden zusammengefasst, sodass sich

$$\frac{1}{2} \|I_h(u) - u_h\|_{\text{sd}}^2 \leq Ch^k \sqrt{\sum_{T \in \mathcal{T}} [\epsilon + \delta_T] |u|_{H^{k+1}(T)}^2} \|I_h(u) - u_h\|_{\text{sd}} \quad (4.60)$$

ergibt. Durch Umformung und Division durch  $\|I_h(u) - u_h\|_{\text{sd}}$  ergibt sich schließlich:

$$\begin{aligned}
\|I_h(u) - u_h\|_{\text{sd}} & \leq Ch^k \sqrt{\sum_{T \in \mathcal{T}} [\epsilon + \delta_T] |u|_{H^{k+1}(T)}^2} \|I_h(u) - u_h\|_{\text{sd}} \\
& \leq Ch^k \sqrt{\sum_{T \in \mathcal{T}} \left[ \epsilon + \frac{h_T^2}{\delta_T} + h_T^2 + \delta_T \right] |u|_{H^{k+1}(T)}^2} \|I_h(u) - u_h\|_{\text{sd}}. \quad (4.61)
\end{aligned}$$

Um eine vernünftige Abschätzung zu gewinnen, werden die Terme  $\epsilon + \frac{h_T^2}{\delta_T} + h_T^2 + \delta_T$  durch Beachtung der Schranke (4.46) ausbalanciert. Das  $\epsilon$ -abhängige Argument  $\frac{h_T^2}{\epsilon c^2}$  in dieser Schranke kann in folgender Form dargestellt werden:

$$\frac{h_T^2}{\epsilon c^2} = \frac{2}{c^2 \|c\|_\infty} \text{Pe}_T h_T, \quad \text{mit } \text{Pe}_T := \frac{\|c\|_\infty h_T}{2\epsilon}. \quad (4.62)$$

Daraus folgt also, dass eine Fallunterscheidung bezüglich der lokalen Péclet-Zahl  $\text{Pe}_T$  sinnvoll ist:

– Im Fall  $\text{Pe}_T \leq 1$  wird  $\delta_T$  gemäß

$$\delta_T = \delta_0 \text{Pe}_T h_T = \delta_1 \frac{h_T^2}{\epsilon}, \quad \delta_0 = \frac{2}{\|c\|_{\infty, T}} \delta_1, \quad (4.63)$$

gesetzt. Die Konstanten  $\delta_0 > 0$  und  $\delta_1 > 0$ , von  $T$  und  $\epsilon$  unabhängig, werden geeignet gewählt. Mit dieser Wahl gewinnt man eine Abschätzung für die auszubalancierenden Terme:

$$\epsilon + \frac{h_T^2}{\delta_T} + h_T^2 + \delta_T = \left(1 + \frac{1}{\delta_1}\right) \epsilon + h_T^2 + \delta_1 \frac{2\text{Pe}_T}{\|c\|_{\infty}} h_T \leq C(\epsilon + h_T). \quad (4.64)$$

Die Konstante  $C > 0$  ist von  $T$  und  $\epsilon$  unabhängig.

– Im Fall  $\text{Pe}_T > 1$  genügt es  $\delta_T$  gemäß

$$\delta_T = \delta_2 h_T \quad (4.65)$$

zu setzen. Die Konstante  $\delta_2 > 0$  sei ebenfalls unabhängig von  $T$  und  $\epsilon$ . Hier schätzt man wie folgt weiter ab:

$$\epsilon + \frac{h_T^2}{\delta_T} + h_T^2 + \delta_T = \epsilon + \left(\frac{1}{\delta_2} + \delta_2\right) h_T + h_T^2 \leq C(\epsilon + h_T). \quad (4.66)$$

Die Konstante  $C > 0$  ist wieder von  $T$  und  $\epsilon$  unabhängig.

- Für die Abschätzung des 1. Terms  $\|u - I_h(u)\|_{\text{sd}}$  werden die zuvor verwendeten Interpolationsabschätzungen direkt angewendet:

$$\begin{aligned} & \|u - I_h(u)\|_{\text{sd}}^2 \\ &= \epsilon \|u - I_h(u)\|_{H^1}^2 + r_0 \|u - I_h(u)\|_{L^2}^2 + \sum_{T \in \mathcal{T}} \delta_T \|c \cdot \nabla(u - I_h(u))\|_{L^2}^2 \\ &\leq c^2 \sum_{T \in \mathcal{T}} \left[ \epsilon h_T^{2k} + r_0 h_T^{2(k+1)} + \delta_T \|c\|_{\infty}^2 h_T^{2k} \right] |u|_{H^{k+1}(T)}^2 \\ &\leq C h_T^{2k} \sum_{T \in \mathcal{T}} [\epsilon + h_T^2 + \delta_T] |u|_{H^{k+1}(T)}^2 \\ &\leq C(\epsilon + h) h_T^{2k} |u|_{H^{k+1}}^2. \end{aligned} \quad (4.67)$$

Aus diesen beiden Teilen folgt nun die Behauptung des Satzes:

$$\begin{aligned} & \|u - u_h\|_{\text{sd}} \\ &\leq C(\epsilon + h) h_T^{2k} |u|_{H^{k+1}}^2 + C h^k \sqrt{\sum_{T \in \mathcal{T}} [\epsilon + h_T] |u|_{H^{k+1}(T)}^2} \\ &\leq C(\sqrt{\epsilon} + \sqrt{h}) h^k |u|_{H^{k+1}}. \end{aligned} \quad (4.68)$$

Somit wurde Behauptung (4.52) gezeigt.  $\square$

Für lokal große Péclet-Zahlen (siehe Anhang B) ist der  $L^2$ -Fehler der Lösung nicht optimal im Vergleich zur Interpolationsfehlerabschätzung

$$\|u - I_h(u)\|_{L^2} \leq Ck^{k+1}|u|_{H^{k+1}}, \quad (4.69)$$

da auf Grund der Definition der Péclet-Zahl (4.51) dann  $\epsilon \leq \frac{1}{2}\|c\|_\infty h_T$  sein muss, und man aus (4.48) und (4.52) folgende Abschätzung erhält:

$$\begin{aligned} \epsilon \|u - u_h\|_{H^1}^2 + r_0 \|u - u_h\|_{L^2}^2 + \sum_{T \in \mathcal{T}} \delta_T \|c \cdot \nabla(u - u_h)\|_{L^2}^2 &\leq C(\sqrt{\epsilon} + \sqrt{h})^2 h^{2k} |u|_{H^{k+1}}^2 \\ \Rightarrow \|u - u_h\|_{L^2} + \sqrt{\sum_{T \in \mathcal{T}} \delta_2 h_K \|c \cdot \nabla(u - u_h)\|_{L^2}^2} &\leq Ch^{k+1/2} |u|_{H^{k+1}}. \end{aligned} \quad (4.70)$$

Allerdings ist der  $L^2$ -Fehler der Richtungsableitung von  $u$  in Richtung  $c$  optimal. Die Konvergenz für  $h \rightarrow 0$  ist nicht gleichmäßig bezüglich  $\epsilon$ , da die Seminorm  $|u|_{H^{k+1}}$  im Allgemeinen von negativen Potenzen von  $\epsilon$  abhängt.

Vergleicht man nun die Abschätzung der Galerkin-Methode (4.35) mit (4.52), so sieht man, dass die  $\|\cdot\|_{\text{sd}}$ -Norm stärker als die  $\|\cdot\|_\epsilon$ -Norm und die Stromliniendiffusionsmethode für  $\epsilon < h$  asymptotisch besser ist. Problematisch kann die Festlegung der Parameter  $\delta_1$  und  $\delta_2$  sein, vor allem wenn man nichtlineare Probleme behandeln möchte [Knabner, 2000].

## 4.4 Diskontinuierliche Galerkin-Methode

Die *diskontinuierliche Galerkin-Methode*, eine FEM höherer Ordnung, vereint sowohl die Vorteile der üblichen Finiten Elemente Methode als auch die der Finiten Volumen Methode. Die Grundidee ist die Stabilisation von Unstetigkeiten und Schockwellen. Dies basiert auf der stückweisen polynomialen Approximation ohne die Bedingung an der interelementären Stetigkeit. Somit lassen sich Probleme mit Schockwellen und Unstetigkeiten besser behandeln.

### 4.4.1 Demonstration anhand eines Reaktion-Diffusions-Problems

Das Modellproblem lautet:

$$\begin{aligned} -\epsilon \Delta u + ru &= f \text{ in } \Omega, \quad r > 0, \\ u &= 0 \text{ auf } \Gamma := \partial\Omega. \end{aligned} \quad (4.71)$$

Das Gebiet  $\Omega$  ist ein zweidimensionales polygonales Gebiet.

Nun stellt man die schwache Formulierung von (4.71) auf, indem man wieder wie üblich mit einer Testfunktion  $v \in H^1(\Omega, \mathcal{T})$  multipliziert und dann über das Gebiet  $\Omega$  integriert:

$$\int_{\Omega} (-\epsilon \Delta u + ru)v \, dx = \int_{\Omega} fv \, dx. \quad (4.72)$$

Das Gebiet  $\Omega$  wird einer zulässigen Triangulierung  $\mathcal{T}$  unterworfen, bestehend aus Dreiecken  $T$ , die die Bedingung

$$\bar{\Omega} = \bigcup_{T \in \mathcal{T}} T \quad (4.73)$$

erfüllen. Sei nun  $\mathcal{E}$  die Menge aller Randstücke der Triangulierung  $\mathcal{T}$  und  $\mathcal{E}_i \subset \mathcal{E}$  die Menge aller Kanten  $e \in \mathcal{E}$  in  $\Omega$ . Die Menge  $\Gamma_i$  wird durch

$$\Gamma_i = \{x \in \Omega : x \in e \text{ für } e \in \mathcal{E}_i\} \quad (4.74)$$

definiert. Entlang einer Kante  $e$  wird für eine Funktion  $v \in H^1(\Omega, \mathcal{T})$  durch

$$[v]_e = v|_{\partial T \cap e} - v|_{\partial T' \cap e} \quad (4.75)$$

der *Sprung* dieser Funktion und durch

$$\langle v \rangle_e = \frac{1}{2}(v|_{\partial T \cap e} + v|_{\partial T' \cap e}) \quad (4.76)$$

der *Mittelwert* von  $v$  auf  $e$  definiert, wobei  $T$  und  $T'$  benachbarte Elemente mit gemeinsamer Kante sind. Jeder Kante  $e \in \mathcal{E}$  wird der Normalenvektor  $\nu$  zugewiesen, der von  $T$  nach  $T'$  gerichtet ist. Handelt es sich allerdings um ein  $e \subset \Gamma$ , so wird dieser Kante der äußere Normalenvektor  $\mu$  bezüglich  $\Gamma$  zugewiesen. Außerdem sei vorausgesetzt, dass die Lösung  $u \in H^2(\Omega)$  genügt. Weiters sei  $\nabla u \cdot \nu$  stetig auf jeder Kante  $e$ .

Nach diesen Voraussetzungen wird die schwache Formulierung (4.72) aufgestellt:

$$\int_{\Omega} (-\epsilon \Delta u_h + ru_h)v_h \, dx = \int_{\Omega} fv_h \, dx. \quad (4.77)$$

Analog zu den bisherigen Verfahren wird auf die Bilinearform der *Satz von Gauss* (siehe Anhang A) angewendet:

$$\int_{\Omega} (-\epsilon \Delta u_h)v_h \, dx = \sum_{T \in \mathcal{T}} \epsilon \int_T \nabla u_h \cdot \nabla v_h \, dx - \sum_{T \in \mathcal{T}} \epsilon \int_{\partial T} (\nabla u_h \cdot \mu)v_h \, ds. \quad (4.78)$$

Jetzt wird der zweite Term, der die Integrale über  $\partial T$  enthält, aufgespalten in Terme über Integrale über Kanten  $e$ :

$$\begin{aligned} & \sum_{T \in \mathcal{T}} \epsilon \int_{\partial T} (\nabla u_h \cdot \mu) v_h \, ds = \\ & \sum_{e \in \mathcal{E} \cap \Gamma} \epsilon \int_e (\nabla u_h \cdot \mu) v_h \, ds + \sum_{e \in \mathcal{E}} \epsilon \int_e [((\nabla u_h \cdot \mu) v_h)|_{\partial T \cap e} + ((\nabla u_h \cdot \mu) v_h)|_{\partial T' \cap e}] \, ds. \end{aligned} \quad (4.79)$$

Die Summe über  $e \in \mathcal{E}$  kann weiter umgeformt werden, um einen Ausdruck mit den Funktionen (4.75) und (4.76) zu bekommen:

$$\begin{aligned} & \sum_{e \in \mathcal{E}} \epsilon \int_e [((\nabla u_h \cdot \mu) v_h)|_{\partial T \cap e} + ((\nabla u_h \cdot \mu) v_h)|_{\partial T' \cap e}] \, ds = \\ & \sum_{e \in \mathcal{E}} \epsilon \int_e [((\nabla u_h \cdot \nu) v_h)|_{\partial T \cap e} + ((\nabla u_h \cdot \nu) v_h)|_{\partial T' \cap e}] \, ds = \\ & \sum_{e \in \mathcal{E}} \epsilon \int_e [\langle \nabla u_h \cdot \nu \rangle_e [v_h]_e + [\nabla u_h \cdot \nu]_e \langle v_h \rangle_e] \, ds = \\ & \sum_{e \in \mathcal{E}} \epsilon \int_e \langle \nabla u_h \cdot \nu \rangle_e [v_h]_e \, ds. \end{aligned} \quad (4.80)$$

Insgesamt folgt also aus (4.78) - (4.80):

$$\begin{aligned} & \int_{\Omega} (-\epsilon \Delta u_h) v_h \, dx = \\ & \sum_{T \in \mathcal{T}} \epsilon \int_T \nabla u_h \cdot \nabla v_h \, dx - \sum_{e \in \mathcal{E} \cap \Gamma} \epsilon \int_e (\nabla u_h \cdot \mu) v_h \, ds - \sum_{e \in \mathcal{E}} \epsilon \int_e \langle \nabla u_h \cdot \nu \rangle_e [v_h]_e \, ds. \end{aligned} \quad (4.81)$$

Addiert man zu bzw. subtrahiert man von der rechten Seite die Terme

$$\sum_{e \in \mathcal{E} \cap \Gamma} \epsilon \int_e u_h (\nabla u_h \cdot \mu) \, ds, \quad (4.82)$$

$$\sum_{e \in \mathcal{E}} \epsilon \int_e [u_h]_e \langle \nabla u_h \cdot \nu \rangle_e \, ds, \quad (4.83)$$

so liefert die Addition eine nicht symmetrische Bilinearform, die diskontinuierliche Galerkin-Methode *NIP* (*nonsymmetric with interior penalties*) und die Subtraktion eine symmetrische Bilinearform, zu der die dazugehörige Methode *SIP* (*symmetric with interior penalties*) heißt. Es kann also durch Wahl des Minus oder des Plus die Methode geändert werden. Durch Addieren der Strafterme

$$\sum_{e \in \mathcal{E} \cap \Gamma} \epsilon \int_e \sigma u_h v_h \, ds, \quad (4.84)$$

$$\sum_{e \in \mathcal{E}} \epsilon \int_e \sigma [u_h]_e [v_h]_e \, ds, \quad (4.85)$$

erhält man eine so genannte *Strafformulierung*. Dieser *Strafparameter*  $\sigma$  ist auf der Kante  $e$  eine stückweise nichtnegative Konstante. Diese Strafformulierung regularisiert das Problem. Da der Strafparameter  $\sigma$  die Eigenschaft hat gegen Null zu konvergieren, ist die Lösung der Strafformulierung jene des ursprünglichen Problems. Aus (4.78) und (4.81)-(4.85) folgt schlussendlich, dass die Bilinearform der diskontinuierlichen Galerkin-Methode durch

$$\begin{aligned}
a_h(u_h, v_h) &:= \int_{\Omega} (-\epsilon \Delta u_h + r u_h) v_h \, dx = \\
&\sum_{T \in \mathcal{T}} \left[ \epsilon \int_T \nabla u_h \cdot \nabla v_h \, dx + \int_T r u_h v_h \, dx \right] + \\
&\sum_{e \in \mathcal{E} \cap \Gamma} \epsilon \int_e [\pm u_h (\nabla v_h \cdot \mu) - (\nabla u_h \cdot \mu) v_h] \, ds + \sum_{e \in \mathcal{E} \cap \Gamma} \int_e \sigma u_h v_h \, ds + \\
&\sum_{e \in \mathcal{E}} \epsilon \int_e [\pm [u_h]_e \langle \nabla v_h \cdot \nu \rangle_e - \langle \nabla u_h \cdot \nu \rangle_e [v_h]_e] \, ds + \sum_{e \in \mathcal{E}} \int_e \sigma [u_h]_e [v_h]_e \, ds.
\end{aligned} \tag{4.86}$$

definiert ist [Großmann et al., 2005].

#### 4.4.2 Demonstration anhand eines Konvektion-Problems

Das Modellproblem lautet:

$$\begin{aligned}
c \cdot \nabla u + r u &= f \text{ in } \Omega, \\
u &= g \text{ auf } \Gamma.
\end{aligned} \tag{4.87}$$

Bei diesem Problem wird vorausgesetzt, dass  $r - (\nabla \cdot c)/2 \geq \omega > 0$  erfüllt ist. Das Gebiet  $\Omega$  ist wieder ein polygonales Gebiet.

Die dazugehörige schwache Formulierung lautet:

$$\int_{\Omega} (c \cdot \nabla u) v \, dx + \int_{\Omega} r u v \, dx = \int_{\Omega} f v \, dx. \tag{4.88}$$

Man verwendet dieselbe Triangulierung wie in Kapitel 4.4.1, die (4.73) erfüllt. Es wird für  $T \in \mathcal{T}$  der *Einströmrand* von  $\partial T$  gemäß

$$\partial_{-T} := \{x \in \partial T : c(x) \cdot \mu_T(x) < 0\}, \tag{4.89}$$

und der *Ausströmrand* von  $\partial T$  gemäß

$$\partial_{+T} := \{x \in \partial T : c(x) \cdot \mu_T(x) \geq 0\}, \tag{4.90}$$

$\mu_T \dots$  äußerer Normalenvektor bezüglich  $\partial T$  im Punkt  $x \in \partial T$ ,

definiert. Weiters wird für jedes Element  $T \in \mathcal{T}$  und für eine Funktion  $v \in H^1(T)$  mit  $v_T^+$  die *innere Spur* von  $v|_T$  und mit  $v_T^-$  die *äußere Spur* bezeichnet. Sei nun  $e \in \partial_{-T} \setminus \Gamma$ , dann existiert ein eindeutiges  $T' \in \mathcal{T}$ , sodass  $e \in \partial_{+T'}$  ist. Weiters wird die äußere Spur  $v_T^-$  von  $v$  auf  $\partial_{-T} \setminus \Gamma$  bezüglich  $T$  als innere Spur von  $v_{T'}^+$  bezüglich  $T'$  definiert, sodass  $\partial_{+T'} \cap (\partial_{-T} \setminus \Gamma) \neq \emptyset$  ist. Durch

$$[v]_T := v_T^+ - v_T^- \quad (4.91)$$

wird der Sprung von  $v$  entlang  $\partial_{-T} \setminus \Gamma$  definiert. Anders als bei dem in (4.75) definierten Sprung  $[\cdot]_T$  hängt dieser Sprung  $[\cdot]_T$  von der Richtung von  $r$  ab.

Nach diesen Voraussetzungen wird die schwache Formulierung (4.88) diskretisiert:

$$\int_{\Omega} (c \cdot \nabla u_h) v_h \, d\Omega + \int_{\Omega} r u_h v_h \, d\Omega = \int_{\Omega} f v_h \, d\Omega. \quad (4.92)$$

Um die Bilinearform mittels diskontinuierlicher Galerkin-Methode zu definieren, betrachtet man zuerst den ersten Term auf der linken Seite, auf den man den Satz von Gauss anwendet:

$$\begin{aligned} & \int_{\Omega} (c \cdot \nabla u_h) v_h \, d\Omega = \\ & - \sum_{T \in \mathcal{T}} \int_T u_h \nabla \cdot (c v_h) \, dx + \sum_{T \in \mathcal{T}} \int_{\partial T} (c \cdot \mu) u_h v_h \, ds = \\ & - \sum_{T \in \mathcal{T}} \int_T u_h \nabla \cdot (c v_h) \, dx + \sum_{T \in \mathcal{T}} \int_{\partial T^-} (c \cdot \mu) u_h v_h \, ds + \sum_{T \in \mathcal{T}} \int_{\partial T^+} (c \cdot \mu) u_h v_h \, ds. \end{aligned} \quad (4.93)$$

Im zweiten Term, im Integral über den Einströmrand, wird  $u$  durch  $u^-$  ersetzt. Anschließend wird der erste Term nochmals mittels partieller Integration umgeformt. Dadurch heben sich die Terme über dem Ausströmrand  $\partial_{T^+}$  weg:

$$\begin{aligned} & \int_{\Omega} (c \cdot \nabla u_h) v_h \, d\Omega = \\ & - \sum_{T \in \mathcal{T}} \int_T u_h \nabla \cdot (c v_h) \, dx + \sum_{T \in \mathcal{T}} \int_{\partial T^-} (c \cdot \mu) u_h^- v_h^+ \, ds + \sum_{T \in \mathcal{T}} \int_{\partial T^+} (c \cdot \mu) u_h v_h^+ \, ds = \\ & \sum_{T \in \mathcal{T}} \int_T (c \cdot \nabla u_h) v_h \, dx - \sum_{T \in \mathcal{T}} \int_{\partial_{-T} \cap \Gamma} (c \cdot \mu) u_h^+ v_h^+ \, ds - \sum_{T \in \mathcal{T}} \int_{\partial_{-T} \setminus \Gamma} (c \cdot \mu) [u]_T v^+ \, ds. \end{aligned} \quad (4.94)$$

Aus (4.92) und (4.94) folgt die Diskretisierung mittels diskontinuierlichen Galerkin-Methode:

$$\begin{aligned} & \sum_{T \in \mathcal{T}} \left( \int_T (c \cdot \nabla u_h + r u_h) v_h \, dx - \int_{\partial_{-T} \cap \Gamma} (c \cdot \mu) [u_h]_T v_h^+ \, ds \right) = \\ & \sum_{T \in \mathcal{T}} \left( \int_T f v_h \, dx - \int_{\partial_{-T} \cap \Gamma} (c \cdot \mu) g v_h^+ \, ds \right), \end{aligned} \quad (4.95)$$

[Großmann et al., 2005].

### 4.4.3 Demonstration anhand eines Konvektions-Diffusions-Problems

Das Modellproblem lautet:

$$\begin{aligned} -\epsilon \Delta u + c \cdot \nabla u + ru &= f \text{ in } \Omega, \\ u &= 0 \text{ auf } \Gamma. \end{aligned} \quad (4.96)$$

Nachdem dieses Modellproblem eine Vereinigung der beiden vorigen Modellprobleme (4.71) und (4.87) ist, werden folgende Voraussetzungen festgelegt:

Das Gebiet  $\Omega$  sei wieder polygonaler Gestalt; weiters gelte die Ungleichung  $r - (\nabla \cdot u)/2 \geq \omega > 0$ . Die Triangulierung  $\mathcal{T}$  erfülle (4.73). Außerdem sei  $u \in H^2(\Omega)$  und  $\nabla u \cdot \nu$  stetig auf jeder Kante  $e \in \mathcal{T}$ .

Die schwache Formulierung lautet

$$\int_{\Omega} (-\epsilon \Delta u)v \, dx + \int_{\Omega} (c \cdot \nabla u)v \, dx + \int_{\Omega} ruv \, dx = \int_{\Omega} fv \, dx, \quad (4.97)$$

mit der dazugehörigen Diskretisierung:

$$\int_{\Omega} (-\epsilon \Delta u_h)v_h \, dx + \int_{\Omega} (c \cdot \nabla u_h)v_h \, dx + \int_{\Omega} ru_h v_h \, dx = \int_{\Omega} fv_h \, dx. \quad (4.98)$$

Aus den zwei vorigen Modellproblemen, genauer aus (4.71) und (4.87) folgt, dass die Bilinearform der diskontinuierlichen Galerkin-Methode zu (4.96) folgende Gestalt hat:

$$\begin{aligned} a_h(u_h, v_h) &:= \\ &\sum_{T \in \mathcal{T}} \left[ \epsilon \int_T \nabla u_h \cdot \nabla v_h \, dx + \int_T (c \cdot \nabla u_h + ru_h)v_h \, dx - \right. \\ &\quad \left. \int_{\partial_- T \cap \Gamma} (c \cdot \mu) u_h^+ v_h^+ \, ds - \int_{\partial_- \kappa \setminus \Gamma} (c \cdot \mu) [u_h] v_h^+ \, ds \right] + \\ &\quad \sum_{e \in \mathcal{E}_i \cap \Gamma} \epsilon \int_e [\pm u_h (\nabla v_h \cdot \mu) - (\nabla u_h \cdot \mu) v_h] \, ds + \sum_{e \in \mathcal{E}_i \cap \Gamma} \int_e \sigma u_h v_h \, ds + \\ &\quad \sum_{e \in \mathcal{E}_i} \epsilon \int_e [\pm [u_h]_e \langle \nabla v_h \cdot \nu \rangle_e - \langle \nabla u_h \cdot \nu \rangle_e [v_h]_e] \, ds + \\ &\quad \sum_{e \in \mathcal{E}_i} \int_e \sigma [u_h]_e [v_h]_e \, ds. \end{aligned} \quad (4.99)$$

[Großmann et al., 2005]

## 4.5 Zeitdiskretisierung

Die bisherigen Modellprobleme in diesem Kapitel waren stationäre Probleme. Daher musste über die Ortsvariable diskretisiert werden. Betrachtet man allerdings instationäre Probleme, die zeitabhängige Vorgänge beschreiben, muss zusätzlich zur Ortsdiskretisierung auch eine Diskretisierung in der Zeit vorgenommen werden. Die Zeitdiskretisierung wird in der Regel unabhängig vom Verfahren der Ortsdiskretisierung eingeführt. Dieses Konzept gilt für die Standard-FEM, für die Stromliniendiffusionsmethode und auch für die diskontinuierlichen Galerkin-Methode.

Betrachtet wird das Modellproblem:

$$\begin{aligned} \frac{\partial u}{\partial t} + Lu &= f, & \text{in } \Omega \times (0, T), \\ u(x, 0) &= u_0(x), & \text{für } x \in \Omega, \\ u(x, t) &= \phi(x, t), & \text{auf } \partial\Omega \times (0, T). \end{aligned} \quad (4.100)$$

Hier sei  $L$  ein elliptischer Differentialoperator zweiter Ordnung. Bildet man analog zu den vorangegangenen Modellproblemen die Variationsformulierung und diskretisiert diese über den Ort mit Hilfe einer bisher beschriebenen Methode, so erhält man

$$\int_{\Omega} \frac{\partial u}{\partial t} v \, dx + a_h(u, v) = g(t, v) \quad \forall t \in (0, T), \quad \forall v \in H_0^1(\Omega). \quad (4.101)$$

Wendet man auf diese Darstellung (4.101) das *impliziten Eulerverfahren* C.1 an, so erhält man eine Diskretisierung in der Zeit

$$\int_{\Omega} \frac{u_h^{(m+1)} - u_h^{(m)}}{k} v \, dx + a_h(u_h^{(m+1)}, v) = g(t^{(m+1)}, v), \quad (4.102)$$

wobei  $k$  das Zeit-Inkrement und  $u_h^{(m)} = (u_1^{(m)}, \dots, u_n^{(m)})^T$  die diskrete Approximation für die Lösungswerte  $u(x_1, t_m), \dots, u(x_n, t_m)$  zum Zeitpunkt  $t_m := mk$  ist [Auzinger, 2007].

## Kapitel 5

---

# Diskretisierung der Richardsgleichung und Simulation

---

In diesem Kapitel wird das Modell aus Kapitel 3 (Abschnitt 3.3) mit Hilfe der Standard-FEM, die in Kapitel 4 (Abschnitt 4.2) beschrieben wird, numerisch gelöst, da die Differentialgleichung parabolisches Verhalten aufweist. Verwendet wird das Programm *ViennaFEM*, das auf C++ basiert und von Karl Rupp im Zuge seiner Diplomarbeit implementiert wurde [Rupp, 2008].

### 5.1 Parameterwahl und Nichtdimensionalisierung

Bevor das Programm kurz vorgestellt wird, wird das Modell entdimensionalisiert. Dies bietet sich bei diesem Modell (Kapitel 3.3) an, da die Werte der Parametergrößen verschiedene Einheiten aufweisen. Hierzu wird wie in [Roose et al., 2004] vorgegangen.

#### 5.1.1 Parameterwahl

Parameter	$\phi$	$D_0$ ( $\times 10^{-6} \text{m}^2 \text{s}^{-1}$ )	$K_S$ ( $\text{cm day}^{-1}$ )	$p_c$ ( $\times 10^5 \text{ Pa}$ )	m	$\alpha$
<i>Hygiene</i> Sandstein	0.250	0.67	108.0	0.124	0.90	10.5
<i>Touchet</i> schluffiger Löss G.E.3	0.469	4.37	303.0	0.196	0.86	7.09
Schluffiger Löss G.E.3	0.396	0.50	4.96	0.232	0.51	2.06
<i>Guelph</i> Lehm (trocken)	0.520	1.17	31.6	0.085	0.51	2.03
<i>Guelph</i> Lehm (nass)	0.434	-	-	0.049	0.64	2.76
<i>Beit Netofa</i> Klei	0.446	0.14	0.082	0.645	0.15	1.17

Tabelle 5.1: Werte für Bodenparameter [Van Genuchten, 1980].

Parameter	Definition	Wert
$\rho$	Dichte des Wassers	$2.6 \times 10^3 \text{ kg m}^{-3}$
$g$	Gravitationskonstante	$9.8 \text{ m s}^{-2}$
$q_S$	Durchflussmenge des Wassers pro Bodeneinheit	$1 \text{ m yr}^{-1}$
$2\pi ak_r$	Gesamte radiale Leitfähigkeit des Wassers pro Längeneinheit der Wurzel	$7.85 \times 10^{-10} \text{ m}^2\text{s}^{-1}\text{MPa}^{-1}$
$ P $	Absoluter Wert des Drucks an der Wurzelbasis	1 MPa
$a$	Wurzelradius	$5 \times 10^{-4} \text{ m}$
$L_1$	Maximale Länge der Wurzel 1. Ordnung	8 cm
$L$	Maximale Länge der Wurzel 0. Ordnung	50 cm
$l_a$	Länge der nicht verzweigten Zone an der Spitze der Wurzel	15 cm
$l_n$	Distanz zwischen den internen Verzweigungen	0.7 cm
$\sin \beta$	Sinus des Winkels, unter dem die Wurzel 1. Ordnung aus der Wurzel 0. Ordnung wächst	$0.5*\sqrt{3}$

Tabelle 5.2: Sonstige typische Parameter [Roose et al., 2004].

$i$ . Ordnung	$d = 2a$ ( $\mu\text{m}$ )	$d_E$ ( $\mu\text{m}$ )	$n_E$	$d_L$ ( $\mu\text{m}$ )	$n_L$	$k_{z,i}[\text{E}]$ ( $\text{m}^4\text{s}^{-1}\text{MPa}^{-1}$ )	$k_{z,i}[\text{E+L}]$ ( $\text{m}^4\text{s}^{-1}\text{MPa}^{-1}$ )
0	1000	27.4	16.2	92.3	6.6	$1.875 \times 10^{-8}$	$1.198 \times 10^{-8}$
1	200	5	3	-	-	$4.6 \times 10^{-14}$	$4.6 \times 10^{-14}$

Tabelle 5.3: Spezifische Wurzelparameter [Roose et al., 2004].  $a$  ist der Wurzelradius;  $d_E$  ist der Durchmesser und  $n_E$  ist die Anzahl der frühen Metaxylem Röhren;  $d_L$  ist der Durchmesser und  $n_L$  ist die Anzahl der späten Metaxylem Röhren;  $k_{z,i}[\text{E}]$  ist der Durchlässigkeitsbeiwert, unter der Voraussetzung, dass nur die frühen Metaxylem Röhren funktionieren;  $k_{z,i}[\text{E+L}]$  ist der Durchlässigkeitsbeiwert, unter der Voraussetzung, dass sowohl die frühen als auch die späten Metaxylem Röhren funktionieren.

Tabelle 5.1 liefert Werte der Parameter  $D_0$ ,  $p_c$ ,  $K_S$ ,  $\phi$  und  $m$  für verschiedene Böden. Tabelle 5.2 präsentiert Parameter, die im Modell sonst noch verwendet werden, darunter allgemein definierte Konstanten, wie die Dichte des Wassers  $\rho$  oder die Gravitationskonstante  $g$ . Weiters werden verschiedene Wurzelgrößen festgelegt, wie zum Beispiel die maximale Länge der Wurzeln oder die Länge der verzweigten Region. Tabelle 5.3 liefert morphologische Parameter von Xylemröhren von Maispflanzen. Diese Daten basieren auf den Artikeln von [Frensch et al., 1989], [Varney et al., 1991] und [Weerathaworn et al., 1992].

### 5.1.2 Nichtdimensionalisierung der Richardsgleichung

Durch Transformation wird die Modellgleichung (3.48) entdimensionalisiert. Die transformierten Modellparameter sind ohne Einheiten.

Für die Transformation werden die Skalierungen

$$z \sim L, \quad t \sim \tilde{t} = \frac{\phi\pi\tilde{a}^2}{2\pi ak_r|P|}, \quad p \sim |P| \quad \text{und} \quad p_r \sim |P|, \quad (5.1)$$

verwendet. Dadurch entsteht das dimensionslose Modell

$$\nabla[D(S)\nabla S - \epsilon K(S)\vec{e}] = \lambda_W\left(\frac{\partial S}{\partial t} + F\right), \quad (5.2)$$

wobei  $F$  gegeben ist durch

$$F = (1 + \delta\psi)(-\epsilon_W f(S) - p_r), \quad (5.3)$$

oder

$$F = 0 \quad \text{für} \quad z > l_0. \quad (5.4)$$

Die Parameter von (5.2) setzen sich aus folgenden Termen der ursprünglichen Parameter zusammen:

$$\lambda_W = \frac{2\pi ak_r|P|L^2}{\pi\tilde{a}^2 D_0}, \quad \delta = \sqrt{\frac{k_{z,1}}{2\pi ak_r l_n^2}}, \quad \epsilon = \frac{K_S L}{D_0}, \quad \epsilon_W = \frac{p_c}{|P|}, \quad (5.5)$$

$$\psi = \begin{cases} \frac{1}{l_n} & \text{in der Verzweigungszone,} \\ 0 & \text{in der nicht verzweigten Zone.} \end{cases} \quad (5.6)$$

Die Randbedingungen für dieses Modell sind

$$D(S)\frac{\partial S}{\partial z} - \epsilon K(S) = \begin{cases} -W & \text{an } z = 0, \\ 0 & \text{an } z = l_w, \end{cases} \quad (5.7)$$

wobei

$$W = \frac{q_S L}{D_0}; \quad (5.8)$$

$$-D(S)\frac{\partial S}{\partial x} = \begin{cases} 0 & \text{an } x = 0, \\ 0 & \text{an } x = l_w, \end{cases} \quad (5.9)$$

und

$$-D(S)\frac{\partial S}{\partial y} = \begin{cases} 0 & \text{an } y = 0, \\ 0 & \text{an } y = l_w. \end{cases} \quad (5.10)$$

Das heißt, an der Bodenoberfläche ist die Neumannrandbedingung (5.7), die die Bewässerung des Bodens beschreibt, vorgegeben. An den anderen Flächen des Einheitsquaders ist kein Fluss vorgegeben, also Nullflussrandbedingungen wie in (5.7) - (5.10). Diese Randbedingungen werden für die Simulationen verwendet.

Die Funktionen  $K(S)$  (siehe (3.2)),  $D(S)$  (siehe (3.8)) und  $f(S)$  (siehe (3.3)) führen zu Nichtlinearitäten, die mit dem Newton-Verfahren aufgelöst werden (siehe Kapitel 5.1.4).

### 5.1.3 Nichtdimensionalisierung der Erhaltungsgleichung

Die Erhaltungsgleichung (3.52) beschreibt die Wasserbewegung innerhalb der Wurzelverzweigungen 0. Ordnung. Mit den dazugehörigen Randbedingungen (3.53) und (3.54) folgt die dimensionslose Gleichung

$$\kappa^2(-\epsilon_W f(S) - p_r) = -\frac{\partial^2 p_r}{\partial z^2}, \quad (5.11)$$

wobei

$$\kappa^2 = \kappa_0^2 + \kappa_{01}^2 \psi(z), \quad \text{mit} \quad \psi = l_n \psi_1, \quad (5.12)$$

$l_n \dots$  Distanz zwischen den Teilverzweigungen der Wurzeln 1. Ordnung.

Der Parameter  $\kappa_0^2$  beschreibt die Wasseraufnahme der Wurzeln 0. Ordnung, während der Parameter  $\kappa_{01}^2$  den Wasserfluss von den Teilverzweigungen in die Wurzeln 0. Ordnung repräsentiert. Beide Parameter sind dimensionslos und sind durch

$$\kappa_0^2 = \frac{2\pi a k_r L^2}{k_{z,0}}, \quad \kappa_{01}^2 = \frac{\sqrt{2\pi a k_r k_{z,1}} L^2}{l_n k_{z,0}}, \quad (5.13)$$

gegeben. Die Randbedingungen (3.53) und (3.54) transformieren sich zu

$$p_r = -1 \quad \text{an} \quad z = 0, \quad (5.14)$$

$$\frac{\partial p_r}{\partial z} = 0 \quad \text{an} \quad z = l_0. \quad (5.15)$$

Der dimensionslose Parameter  $l_0$  ist zeitabhängig, da er die Wurzellänge 0. Ordnung charakterisiert. Daher verändert er sich, bis das dimensionslose Maximum gleich 1 erreicht ist. Er wird durch das Wachstumsgesetz

$$l_0 = 1 - (1 - l_{0,0})e^{-\nu t} \quad (5.16)$$

beschrieben.

Es wird davon ausgegangen, dass die Verzweigungen uniform sind, sodass gilt:

$$\psi = \begin{cases} 1 & \text{in der Verzweigungszone,} \\ 0 & \text{in der nicht verzweigten Zone.} \end{cases} \quad (5.17)$$

Setzt man die Werte aus den Tabellen 5.1 - 5.3 ein und verwendet (5.17), kann man die Parameter  $\kappa_0$  und  $\kappa_{01}$  für die beiden Zonen berechnen:

$$\kappa^2 = \begin{cases} 0,033 & \text{für } l_0 - l_a^* \leq z \leq l_0, \\ 1,01 & \text{für } 0 \leq z < l_0 - l_a^*, \end{cases} \quad (5.18)$$

wobei

$l_a^* = l_a/L \dots$  dimensionslose Länge der Wurzel 0. Ordnung [Roose et al., 2004].

Das Lösen von (5.11) geschieht numerisch durch Koppeln mit der Richardsgleichung (5.2). Bei den Simulationen für diese Arbeit wird auf die Kopplung verzichtet und stattdessen die Approximation, aus dem Paper [Roose et al., 2004],

$$p_r(z) \approx p_0 + 0.1 z, \quad (5.19)$$

die für große dicke Wurzeln, also  $\kappa \ll 1$  gilt, gearbeitet. Der Parameter  $p_0$  ist von der Pflanzenatmung abhängig. Wenn die Pflanze atmet, wird  $p_0 = -1$  gesetzt, ansonsten  $p_0 = 0$  (siehe Kapitel 3.2.1). Die Simulation kann also an dieser Stelle für spätere Zwecke noch erweitert werden.

#### 5.1.4 Linearisierung durch das Newtonverfahren

Auf Grund der Funktionen  $D(S)$ ,  $K(S)$  und  $f(S)$  bekommt man schlussendlich ein nichtlineares Gleichungssystem, das mit Hilfe des Newton-Verfahrens (siehe Anhang C.2) numerisch gelöst werden kann.

Die schwache Formulierung der dimensionslosen Richardsgleichung (5.2) lautet

$$\int_{\Omega} [D(S)\nabla S - \epsilon K(S)\vec{e}] \nabla v \, dx + \lambda_W \int_{\Omega} \frac{dS}{dt} v \, dx = \lambda_W \int_{\Omega} F(S)v \, dx - \int_{\Gamma} Wv \, dx, \quad (5.20)$$

mit

$$F = (1 + \delta\psi)(-\epsilon_W f(S) - p_r), \quad (5.21)$$

oder

$$F = 0 \text{ für } z > l_0. \quad (5.22)$$

Im weiteren Verlauf dieser Arbeit wird mit dem Quellterm 5.21 gearbeitet.

Die Zeitableitung  $dS/dt$  wird mit Hilfe des *impliziten Eulers* (siehe Anhang C.1 oder Kapitel 4.5) diskretisiert,

$$\frac{dS}{dt} \approx \frac{S^{k+1} - S^k}{\Delta t}. \quad (5.23)$$

Damit folgt aus (5.20):

$$\begin{aligned} \int_{\Omega} \lambda_W \frac{S^{k+1} - S^k}{\Delta t} v \, dx + \int_{\Omega} [D(S^{k+1})\nabla S^{k+1} - \epsilon K(S^{k+1})\vec{e}] \nabla v \, dx + \\ \lambda_W \int_{\Omega} (1 + \delta\psi)\epsilon_W f(S^{k+1})v \, dx = \\ - \lambda_W \int_{\Omega} (1 + \delta\psi)p_r v \, dx - \int_{\Gamma} Wv \, dx \end{aligned} \quad (5.24)$$

Aus dieser Darstellung ist ersichtlich, dass die Terme

$$\int_{\Omega} [D(S^{k+1})\nabla S^{k+1} - \epsilon K(S^{k+1})\tilde{e}]\nabla v \, dx + \lambda_W \int_{\Omega} (1 + \delta\psi)\epsilon_W f(S^{k+1})v \, dx \quad (5.25)$$

nichtlinear in  $S^{k+1}$  sind. Daher muss 5.25 mit Hilfe des Newtonverfahrens linearisiert werden. Bezeichne  $S^N$  eine Funktion, die nahe am tatsächlichen  $S^{k+1}$  liegt, dann wird der Korrekturfaktor  $\tilde{\delta}$  definiert als

$$\tilde{\delta} := S^{k+1} - S^N, \quad (5.26)$$

woraus

$$S^{k+1} = S^N + \tilde{\delta} \quad (5.27)$$

folgt. Der Ausdruck (5.27) wird in (5.25) eingesetzt und man erhält

$$\begin{aligned} \int_{\Omega} [D(S^N + \tilde{\delta})\nabla(S^N + \tilde{\delta}) - \epsilon K(S^N + \tilde{\delta})\tilde{e}]\nabla v \, dx \\ + \lambda_W \int_{\Omega} (1 + \delta\psi)\epsilon_W f(S^N + \tilde{\delta})v \, dx. \end{aligned} \quad (5.28)$$

Im nächsten Schritt werden die nichtlinearen Funktionen durch

$$\begin{aligned} D(S^N + \tilde{\delta}) &\approx D(S^N) + D'(S^N)\tilde{\delta}, \\ K(S^N + \tilde{\delta}) &\approx K(S^N) + K'(S^N)\tilde{\delta}, \\ f(S^N + \tilde{\delta}) &\approx f(S^N) + f'(S^N)\tilde{\delta}, \end{aligned} \quad (5.29)$$

$$(5.30)$$

linearisiert. Diese Funktionen werden in (5.28) eingesetzt:

$$\begin{aligned} \int_{\Omega} [(D(S^N) + D'(S^N)\tilde{\delta})\nabla(S^N + \tilde{\delta}) - \epsilon(K(S^N) + K'(S^N)\tilde{\delta})\tilde{e}]\nabla v \, dx \\ + \lambda_W \int_{\Omega} (1 + \delta\psi)\epsilon_W (f(S^N) + f'(S^N)\tilde{\delta})v \, dx. \end{aligned} \quad (5.31)$$

Die Ausdrücke werden ausmultipliziert, außerdem werden die Terme in  $\tilde{\delta}^2$  vernachlässigt, da  $\tilde{\delta}$  klein gewählt wird.

$$\begin{aligned} \int_{\Omega} [D(S^N)\tilde{\delta} + D'(S^N)\tilde{\delta}\nabla S^N - K'(S^N)\tilde{\delta}\tilde{e}]\nabla v \, dx + \\ \lambda_W \int_{\Omega} (1 + \delta\psi)\epsilon_W f'(S^N)\tilde{\delta}v \, dx + \end{aligned} \quad (5.32)$$

$$\int_{\Omega} [D(S^N)\nabla S^N - \epsilon K(S^N)\tilde{e}]\nabla v \, dx + \lambda_W \int_{\Omega} (1 + \delta\psi)\epsilon_W f(S^N)v \, dx \quad (5.33)$$

Die Terme aus (5.32) sind unbekannt in  $\tilde{\delta}$ , während jene aus (5.33) bekannt sind. Setzt man diese Terme in (5.24) ein, so erhält man die Diskretisierung der schwachen Formulierung, mit der im Programm weiterarbeitet wird.

$$\begin{aligned}
& \int_{\Omega} \lambda_W \frac{\tilde{\delta}v}{\Delta t} dx + \int_{\Omega} [D(S^N)\nabla\tilde{\delta} + D'(S^N)\tilde{\delta}\nabla S^N - \epsilon K'(S^N)\tilde{\delta}]\nabla v dx \\
& \quad + \lambda_W \int_{\Omega} (1 + \delta\psi)\epsilon_W f'(S^N)\tilde{\delta}v dx = \\
& - \left[ \int_{\Omega} [D(S^N)\nabla S^N - \epsilon K(S^N)\tilde{e}]\nabla v dx + \int_{\Omega} \lambda_W (1 + \delta\psi)\epsilon_W f(S^N)v dx \right] \\
& - \int_{\Omega} \lambda_W (1 + \delta\psi)p_r dx - \int_{\Gamma} Wv dx - \lambda_W \int_{\Omega} \frac{S^N - S^k}{\Delta t} v dx. \tag{5.34}
\end{aligned}$$

## 5.2 Umsetzung der Richardsgleichung in ViennaFEM

Das Programm zeichnet sich dadurch aus, dass die Gebietszerlegung vollständig vom Finite-Elemente-Algorithmus entkoppelt ist. Durch eine spezielle Abbildungsstrategie werden automatisch Basisfunktionen beliebigen Grades zu der zugrundeliegenden Geometrie erzeugt. Weiters ist das Programm so angesetzt, dass die volle mathematische Flexibilität der Problemstellung nach Möglichkeit erhalten bleibt [Rupp, 2008].

Für die Simulation einer partiellen Differentialgleichung mit Hilfe des Programms ViennaFEM wird zuerst mit Hilfe eines externen Programms (z.B. NETGEN) ein Mesh erzeugt, das die zugrunde liegende Geometrie und deren Zerlegung enthält. Dieses wird dann in das C++-Programm, in dem das Modellproblem definiert ist, eingelesen.

Die Daten der einzelnen Zeitschritte werden in einer VTU-Datei gespeichert. Diese VTU-Datei enthält die notwendigen Informationen, sodass man das Modellproblem mit ParaView visualisieren ([ParaView, 2008]) kann.

### 5.2.1 Wichtigste Programmausschnitte

In der folgenden Aufzählung werden jene Programmausschnitte kurz erklärt, die für einen Anwender von Bedeutung sind.

- Randbedingungen:  
*Dirichlet - Randbedingungen* und *Neumann - Randbedingungen* werden auf verschiedene Weise eingegeben:

*Dirichlet - Randbedingungen* sind Randbedingungen der Art:

$$u = g \text{ auf } \partial\Omega. \tag{5.35}$$

Als Beispiel sei gegeben:

$$u = 0 \text{ an } x = 1. \quad (5.36)$$

Diese Randbedingung (5.36) kann nun auf zwei verschiedene Arten in das Programm eingegeben werden:

```
// method 1:
setDirichletBoundary < FEMConfig >
    ( seg1 , ( x_ < 1.01 ) && ( x_ > 0.99 ) , 0.0 );

// method 2:
setDirichletBoundary < FEMConfig >
    ( seg1 , ( x_ == 1.0 ) , 0.0 );
```

Im zweiten Argument steht der logische Ausdruck, der die Dirichlet-Bedingung an ein Randgebiet zuweist. Im dritten Argument steht der Randwert bzw. die Funktion. Die beiden Methoden beschreiben dieselbe Randbedingung, allerdings ist Methode 1 robuster gegenüber numerischen Störungen.

*Neumann-Randbedingungen* sind Randbedingungen der Art:

$$(A(x)\nabla u) \cdot \nu = g \text{ auf } \partial\Omega, \quad (5.37)$$

wobei  $\nu$  der äußere Normalenvektor an  $\partial\Omega$  ist. Durch

```
template <long Id , typename Segment , typename KEY >
void setBoundaryArc( Segment & seg , KEY const & key);
```

wird der Ort der Neumann-Randbedingung spezifiziert. Da die Neumann-Randbedingung allerdings in die schwache Formulierung miteinfließt, wird hier kein konkretes Beispiel angegeben.

- Parameter:

Die Parameter, die für die Differentialgleichung nötig sind, werden zuerst einfach deklariert und anschließend definiert. Sie können dann direkt in die schwache Formulierung eingebunden werden.

```
double k = 0.1; //time-step length
```

In diesem Beispiel wird das Zeit-Inkrement gleichzeitig deklariert und definiert (siehe auch (4.102)).

- Schwache Formulierung:

Sei folgende schwache Formulierung als Modellbeispiel gewählt:

$$\int_{\Omega} (\nabla u \cdot \nabla v + uv) \, dx = \int_{\Omega} 1 \cdot v \, dx. \quad (5.38)$$

Die linke Seite der Gleichung (5.38) lautet im Programm:

```

// typedefs for Gradient_u , Gradient_v , u and v here
assembleMatrix(domain , matrix , rhs ,
               integral <Omega >(Gradient_u *
                               Gradient_v + u*v ,
                               QuadraticIntegrationTag ());

// or alternatively:
assembleMatrix(domain , matrix , rhs ,
               integral <Omega >(Gradient_u *
                               Gradient_v ,
                               QuadraticIntegrationTag ())+
               integral <Omega >(u*v ,
                               QuadraticIntegrationTag ());

```

Der Unterschied zwischen diesen beiden Eingabemethoden liegt in der Quadraturregel. In der zweiten Form hat man über jeden Summanden eine Kontrolle der Quadraturregel.

Die rechte Seite von Gleichung (5.38) lässt sich als

```

basisfun <1> v;
assembleRHS(domain , rhs ,
            integral <Omega >(v ,
                            QuadraticIntegrationTag ());

```

schreiben.

- Zeitdiskretisierung:

Wie bereits erwähnt wird die Zeitdiskretisierung mittels eines impliziten Euler-Verfahren (Anhang C.1) realisiert. In der Bedingung einer for-Schleife kann die Anzahl der Zeitschritte festgelegt werden [Rupp, 2008].

## 5.2.2 Implementierung der Richardsgleichung

- Deklaration der nichtlinearen Funktionen:

Die Parameter und die nichtlinearen Funktionen  $D(S)$ ,  $K(S)$  und  $f(S)$  werden zunächst definiert und deklariert. Die Konstanten vor den nichtlinearen Funktionen werden als Faktoren in die Funktion hineingenommen, sodass man beim Erstellen der Matrizen nichts mehr beachten muss. Der Faktor von  $K(S)$  ist  $\epsilon$  (siehe (5.5)), jener von  $D(S)$  ist 1 und von  $f(S)$  ist  $\epsilon_W(1 + \delta\psi)$  (siehe (5.5)). Als Beispiel sei hier die nichtlineare Funktion  $K(S)$  (siehe (3.2)) angeführt.

```

//nonlinear function K(S)

```

```

struct KS_Eval
{
    template <typename T>
    static T apply(T value)
    {
        return getKSprefactor() * pow(value,1/2) *
            (1- pow(1-pow(value,1/getm()),getm())) *
            (1- pow(1-pow(value,1/getm()),getm()));
    }
};

```

Für das Newtonverfahren wird auch die Ableitung der Funktion  $K(S)$  benötigt, die im Code genauso definiert wird.

```

//nonlinear function dK/dS
struct KS_prime_Eval
{
    template <typename T>
    static T apply(T value)
    {
        return getKSprefactor() * ((1/2) * pow(value,-1/2)
            * (1- pow(1-pow(value,1/getm()),getm())) * (1-
            pow(1-pow(value,1/getm()),getm())) + 2 * (1-
            pow(1-pow(value,1/getm()),getm())) * pow(value
            ,(-1/2)+(1/getm())) * pow(1 - pow(value,1/getm
            ()),getm()-1));
    }
};

```

- Randbedingungen:

In der Funktion

```
solve_richards
```

wird die Richardsgleichung gelöst. Nach einigen allgemeinen Definitionen werden die Gebiete, an denen Randbedingungen vorgegeben sind, definiert. Neumannrandbedingungen an der Bodenoberfläche werden durch  $z = 0$  und  $x < 1$  auf dem Gebiet  $\Gamma$  durch:

```

std::cout << "Setting Neumann Boundary..." << std::
    endl;
setBoundaryArc<1>(seg1, (z_ == 0.0) && (x_ < 1.0) );

```

beschrieben.

- Erstellung der Systemmatrix:

Die Systemmatrix des Gleichungssystems wird durch einige Teilmatrizen



```

saturation_old_y * v_y + saturation_old_z * v_z) ) =
    integral<Omega>(_0_ * v),
//or alternatively( _minus1_ * v ),
saturation_newton);
stiffness_matrix *= k;
rhs_stiffness *= (1+(getdelta()*getpsi())) *
    getlambda_W() * k;
assemble<DriftDiffusionConfig>(seg1, stiffness_matrix,
    rhs_stiffness2, _0_ = integral<Omega>( z_ * v ),
    saturation_newton);
rhs_stiffness2 *= - 0.1 * (1+(getdelta()*getpsi())) *
    getlambda_W() * k;
rhs_stiffness += rhs_stiffness2;

```

In diesem Teil fließt die Approximation 5.19 ein, alternativ für  $p_0 = 0$  oder  $p_0 = -1$ .

Der Teil der Gleichung (5.34)

$$- \int_{\Omega} [\epsilon K'(S^N) \tilde{\delta}] \nabla v \, dx + \lambda_W \int_{\Omega} (1 + \delta \psi) \epsilon_W f'(S^N) \tilde{\delta} v \, dx \quad (5.42)$$

wird in

```

convection_matrix
rhs_convection

```

gespeichert und durch

```

//assemble linearised convection matrix:
convection_matrix.reset();
rhs_convection = 0.0;
assemble<DriftDiffusionConfig>(seg1, convection_matrix
    , rhs_convection, integral<Omega>(KS_prime * u *
    v_z + pS_prime * u * v ) =_0_ , saturation_newton);
convection_matrix *= k;
rhs_convection *= k;

```

im Code realisiert.

Der Ausdruck

$$- \left[ \int_{\Omega} [D(S^N) \nabla S^N - \epsilon K(S^N) \tilde{e}] \nabla v \, dx + \int_{\Omega} \lambda_W (1 + \delta \psi) \epsilon_W f(S^N) v \, dx \right] \quad (5.43)$$

wird in

```

rhs_residual

```

gespeichert. Die Assemblierung erfolgt durch

```
assemble<DriftDiffusionConfig>(seg1, residual_matrix,
  rhs_residual, _0_ = integral<Omega>( DS * (
    saturation_old_x * v_x + saturation_old_y * v_y +
    saturation_old_z * v_z) + KS * v_z + pS * v ),
  saturation_newton);
rhs_residual *= -1.0 * k;
```

Die Neumann-Randbedingung,

$$- \int_{\Gamma} W v \, dx, \quad (5.44)$$

von der zuvor das Gebiet  $\Gamma$  definiert wurde, wird durch

```
rhs_neumann = 0.0;
assemble<DriftDiffusionConfig>(seg1, convection_matrix,
  rhs_neumann, _0_ = integral<Gamma<1>>( v ) );
rhs_neumann *= (-1.0)*getW()*k;
```

assembliert, um nachher in die Systemmatrix eingebunden zu werden.

Der letzte Term

$$-\lambda_W \int_{\Omega} \frac{S^N - S^k}{\Delta t} v \, dx \quad (5.45)$$

wird durch

```
mass_matrix_omega * (saturation_k - saturation_newton)
```

realisiert.

Die rechte Seite des Gleichungssystems wird zusammengefügt:

```
//Set up rhs:
rhs_stiffness += rhs_convection;
rhs_stiffness += rhs_neumann;
rhs_stiffness += rhs_residual;
rhs_system = rhs_stiffness + mass_matrix_omega * (
  saturation_k - saturation_newton);
```

Die Systemmatrix wird erstellt:

```
//put system matrices together:
system_matrix.reset();
system_matrix += stiffness_matrix;
system_matrix += mass_matrix_omega;
system_matrix += convection_matrix;
```

Das Lösen des Gleichungssystems des  $k$ -ten Schrittes geschieht durch

```
//solve system for new saturation_k:  
saturation_update = BiCGStab_solve(system_matrix,  
    rhs_system, saturation_newton); saturation_newton  
    += saturation_update;
```

## Kapitel 6

---

# Ergebnisse und Auswertung

---

In diesem Kapitel werden die Ergebnisse des in dieser Arbeit vorgestellten Modells (siehe Kapitel 3.3 und Kapitel 5.1.2) präsentiert. In den Abbildungen wird die Sättigung sowohl farbcodiert als auch durch einen Graphen dargestellt. Aus diesen Abbildungen werden Rückschlüsse auf die Wasseraufnahme der Pflanzenwurzeln in den verschiedenen Böden gefolgert. Außerdem soll Kapitel 6.3 einen Überblick geben, an welchen Stellen das Modell weiter ausgebaut werden kann.

### 6.1 Simulationsergebnisse

Zunächst werden einige Voraussetzungen festgelegt, die für alle Simulationsversuche gelten:

- Der Boden ist ein  $1 * 1 * 1 \text{ m}^3$  Würfel mit Wurzeln, die gleichmäßige Verzweigungen aufweisen.
- Es wird eine homogene relative Wassersättigung  $S$  zum Zeitpunkt  $t = 0$  angenommen.
- An allen Rändern, bis auf den oberen Rand ( $z = 0$ ), wird eine no-flux Randbedingung angenommen, sodass es an diesen Rändern keinen Wasserfluss gibt.
- Am oberen Rand wird ein konstanter Fluss angenommen, der einer Bewässerung oder einem Niederschlag bzw. einer Evaporation entspricht.
- Die Wasseraufnahme der Pflanzenwurzeln wird durch den Senkenterm in (3.47) beschrieben.

- Es wird nur der vertikale Wasserfluss betrachtet und jener in horizontaler Richtung vernachlässigt (siehe Kapitel 3.1). Die Bodenfeuchtigkeit wird als Funktion der Bodentiefe aufgefasst. Die Computerexperimente werden in einem 1\*1\*1m Würfel ausgewertet, der die z-Abhängigkeit des Wasserflusses zeigt. Auf Grund dieser Voraussetzung wird in den folgenden Ergebnissen nicht der gesamte Würfel sondern nur ein Abschnitt der Sättigungsänderung in z-Richtung gezeigt (siehe Abbildung 6.1).

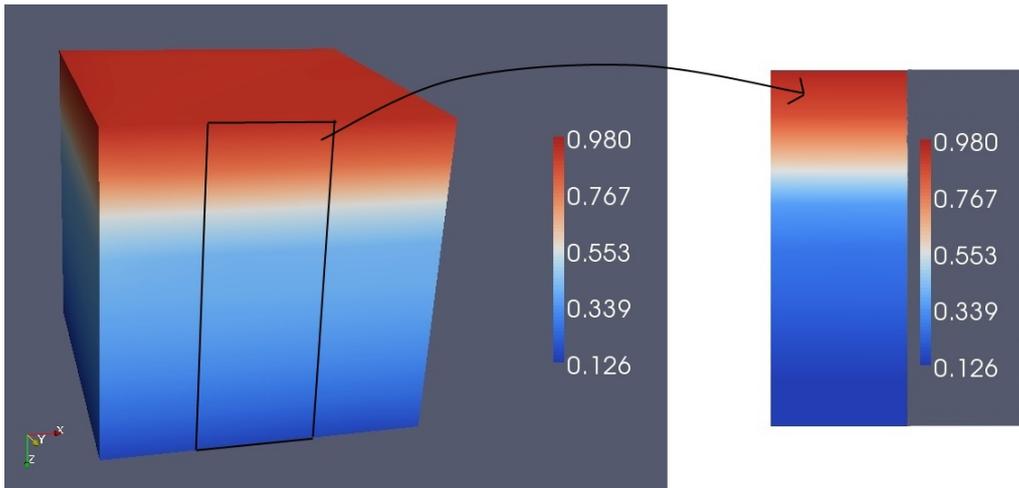


Abbildung 6.1: Abschnitt der Sättigungsänderung in z-Richtung eines Computerexperimentes.

Die Simulationen werden unter verschiedenen Aspekten durchgeführt:

- Vergleich der verschiedenen Böden: Wie stark beeinflusst das Bodenmaterial die Pflanzenwurzeln? Ausschlaggebende Parameter dafür sind Tabelle 5.1 zu entnehmen (zum Beispiel Porosität). Durch diese bodenspezifischen Werte ergeben sich unterschiedliche bodenhydraulische Eigenschaften.
- Nacht: Wie sieht die Situation vergleichsweise bei Nacht aus? (Siehe Kapitel 3.2.1).
- Sättigungsänderung: Bei diesen Simulationen wird das Verhalten des Boden-Pflanzensystems bei unterschiedlichen Wassersättigungswerten untersucht.
- Evaporation: Bei den vorangegangenen Simulationen wird  $q_S$  wie in Tabelle 5.2 gewählt. Ändert man bei diesem Wert das Vorzeichen auf  $-q_S$ , so simuliert man keine Bodensättigung, wie bei Regen, sondern einen Wasserentzug auf Grund von Evaporation.

Diese Computersimulationen werden dimensionslos durchgeführt, das heißt, es wird mit Modellgleichung (5.2) gearbeitet. Im letzten Abschnitt der Experimente

(Kapitel 6.1.5) wird zum Vergleich ein dimensionales Beispiel behandelt, das mit der Modellgleichung (3.6) bzw. (3.48) simuliert wird. Die Transformation

$$t \sim \tilde{t} = \frac{\phi \pi \tilde{a}^2}{2\pi a k_r |P|} \quad (6.1)$$

aus (5.1) beschreibt den Zusammenhang zwischen einem Zeitschritt  $t$  in einem dimensionalen und einem Zeitschritt  $t^*$  in einem dimensionslosen Modell. Die Umrechnung zwischen einer dimensionalen Zeiteinheit  $t$  und einer nichtdimensionalen Zeiteinheit  $t^*$  geschieht durch:

$$t = t^* \cdot \tilde{t} \cdot k. \quad (6.2)$$

Der Parameter  $k$  gibt die Schrittweite des impliziten Eulers im Programm an. Er wird bei den Simulationen auf  $k = 0.0001$ ,  $k = 0.00001$  bzw.  $k = 0.000001$  gesetzt, dies ist abhängig von numerischen Problemen, die auftreten können. Es werden durchschnittlich pro Simulationen 100 Bilder berechnet. In den folgenden Grafiken werden 4 Bilder gezeigt, die die Wasseraufnahme zeigen. In Gleichung 6.2 fließt daher die Eulerschrittweite  $k$  ein. Die Parameter aus den Tabellen 5.1 - 5.3 werden für die Simulationen auf die Einheiten cm, min und MPa umgewandelt. Damit ergeben sich mit (6.1) für jede Bodenart der entsprechende Umrechnungsfaktor, der Tabelle 6.1 zu entnehmen ist.

Parameter	$\phi$	$\tilde{t}$ [min]	$\tilde{t}$ [day]
<i>Hygiene</i> Sandstein	0.250	81200	56.4
<i>Touchet</i> schluffiger Löss G.E.3	0.469	152331	105.8
Schluffiger Löss G.E.3	0.396	128621	89.3
<i>Guelph</i> Lehm (trocken)	0.520	168896	117.3
<i>Guelph</i> Lehm (nass)	0.434	140963	97.9
<i>Beit Netofa</i> Klei	0.446	144861	100.6

Tabelle 6.1: Umrechnungsfaktoren zwischen dem dimensionalen Modell und dem nichtdimensionalen Modell.

### 6.1.1 Vergleich verschiedener Böden

Für die Simulationen in diesem Kapitel wird die Anfangsbedingung der relativen Sättigung auf 0.7 gesetzt. Während des Tages ist der Druck in dicken Wurzeln konstant und kann durch den Druck an der Basis der Wurzel approximiert werden (siehe Kapitel 3.2.1). Somit wird  $p_0 = -1$  in der Approximation des Wurzelnenddrucks

$$p_r(z) \approx p_0 + 0.1z \quad (6.3)$$

gesetzt, sodass die Wasseraufnahme am Tag beobachtet werden kann. Die Zeitschrittweite im Programm wird in allen Simulationen dieses Kapitels auf  $k =$

0.0001 gesetzt, mit Ausnahme von *Hygiene* Sandstein, bei dem sie  $k = 0.00001$  beträgt.

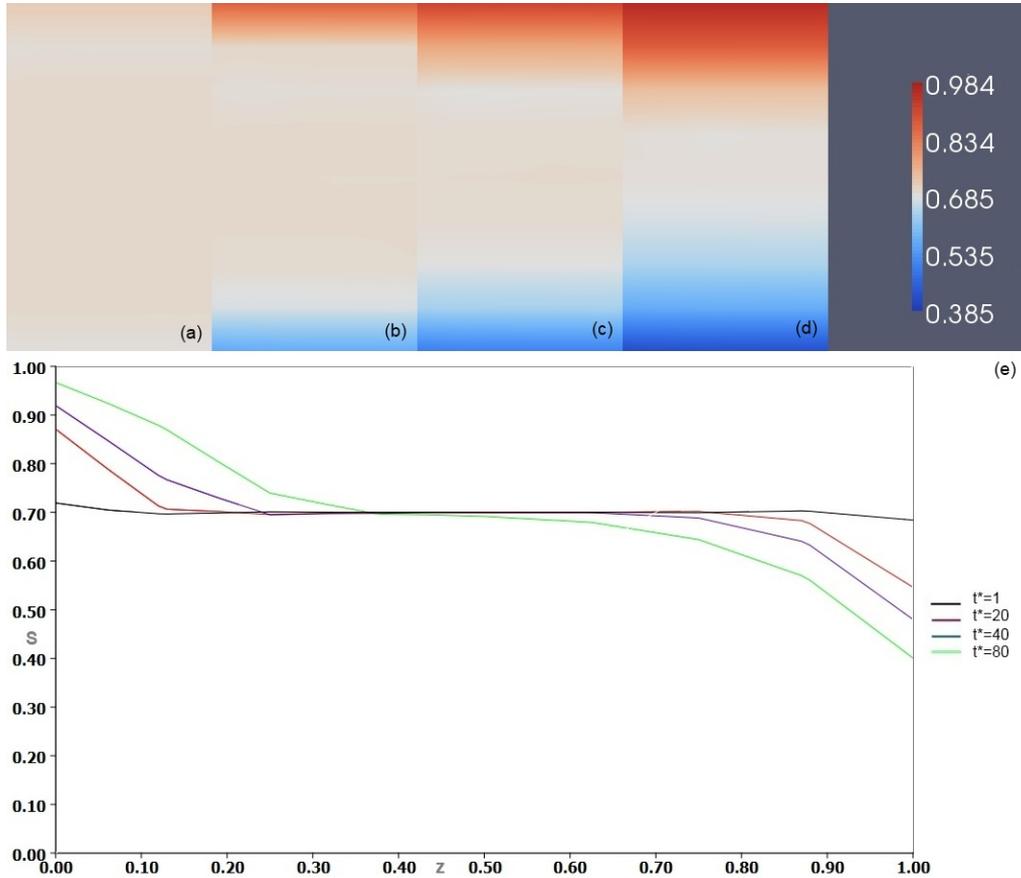


Abbildung 6.2: Simulation der Wasseraufnahme in einem Boden aus *Hygiene* Sandstein zu den Zeitpunkten  $t^* = 1 \hat{=} t = 0.8$  min (a),  $t^* = 20 \hat{=} t = 16.2$  min (b),  $t^* = 40 \hat{=} t = 32.5$  min (c) und  $t^* = 80 \hat{=} t = 65$  min (d) mit einer Sättigung  $S = 0.7$  zum Zeitpunkt  $t = 0$  und  $p_0 = -1$ . Die Kurven zeigen die relativen Sättigungen als Funktion der Tiefe im Boden an (siehe (e)).

Die Simulation zu *Hygiene* Sandstein zeigt vergleichsweise zu den anderen Bodenbeispielen in diesem Kapitel nur eine sehr geringe Zeitspanne, da das Eulerzeitinkrement im Programm auf  $k = 0.00001$  gesetzt wird. Bei einem höheren  $k$  kommt es zu numerischen Schwierigkeiten. Man kann allerdings aus Abbildung 6.2 erkennen, dass die Wurzeln in diesem Boden, trotz der geringen Zeitspanne viel Wasser aufnehmen.

*Touchet* schluffiger Löss erreicht eine solche Sättigungsverteilung erst nach ca. 5 Stunden, wie man aus Abbildung 6.3 erkennen kann. Sowohl bei *Hygiene* Sandstein, als auch bei *Touchet* schluffigem Löss kann man erkennen, dass im Laufe

der Simulation der Boden in Nähe der Oberfläche fast vollständig gesättigt ist. Die Wurzeln können in diesem Boden gut Wasser aufnehmen. Allerdings würde in der Realität eine Pflanze bei vollständiger Sättigung auf Dauer eingehen.

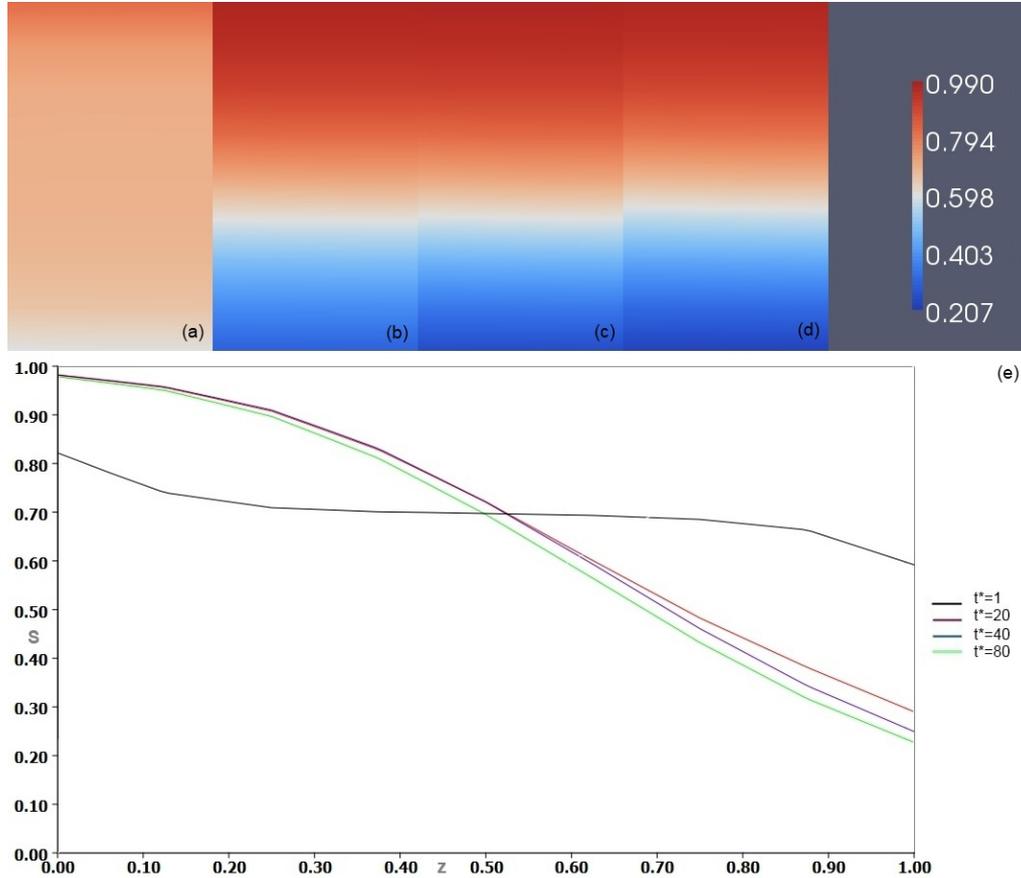


Abbildung 6.3: Simulation der Wasseraufnahme in einem Boden aus *Touchet* schluffigem Löss zu den Zeitpunkten  $t^* = 1 \hat{=} t = 15$  min (a),  $t^* = 20 \hat{=} t = 304.7$  min = 5.0 h (b),  $t^* = 40 \hat{=} t = 609.3$  min = 10.1 h (c) und  $t^* = 80 \hat{=} t = 1218.6$  min = 20.3 h (d) mit einer Sättigung  $S = 0.7$  zum Zeitpunkt  $t = 0$  und  $p_0 = -1$ . Die Kurven zeigen die relativen Sättigungen als Funktion der Tiefe im Boden an (siehe (e)).

Der Wasserfluss und die Wasseraufnahme der Pflanzenwurzeln sind bei schluffigem Löss im Gleichgewicht. Das Wasser fließt in den Boden hinein und die Pflanzenwurzeln nehmen in etwa diese Menge wieder auf. Die Simulation läuft 17 h und der Sättigungsunterschied liegt nur bei etwa 0.047 (siehe 6.4).

Die Wasseraufnahme von Pflanzen in *Guelph* Lehm wird sowohl in trockenem, als auch in nassem Zustand untersucht. Die Simulation zum nassen Boden dauert 18.8 h (siehe 6.6) und jene zum trockenen Boden 22.5 h (siehe 6.5). Es gibt bei diesen beiden Böden unter den zuvor gewählten Voraussetzungen bei der Was-

seraufnahme der Wurzeln keine Unterschiede.

Das Wasser, das von der Oberfläche in *Beit Netofa* Klei eindringt, fließt nur sehr langsam in den Boden hinein. Gerade an diesem Beispiel erkennt man die Wurzelstruktur der Pflanzen sehr gut, wie man aus Abbildung 6.7 nachvollziehen kann.

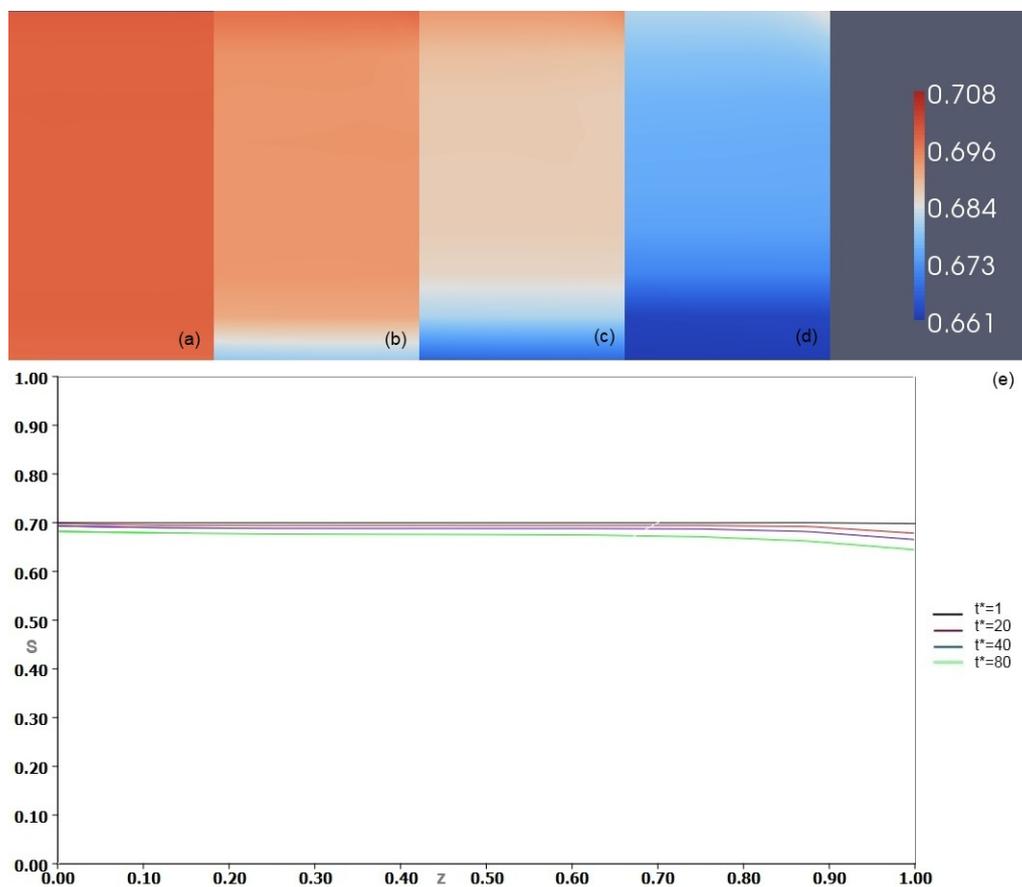


Abbildung 6.4: Simulation der Wasseraufnahme in einem Boden aus schluffigem Löss zu den Zeitpunkten  $t^* = 1 \hat{=} t = 12.9 \text{ min}$  (a),  $t^* = 20 \hat{=} t = 257.2 \text{ min} = 4.3 \text{ h}$  (b),  $t^* = 40 \hat{=} t = 514.5 \text{ min} = 8.6 \text{ h}$  (c) und  $t^* = 80 \hat{=} t = 1029 \text{ min} = 17.1 \text{ h}$  (d) mit einer Sättigung  $S = 0.7$  zum Zeitpunkt  $t = 0$  und  $p_0 = -1$ . Die Kurven zeigen die relativen Sättigungen als Funktion der Tiefe im Boden an (siehe (e)).

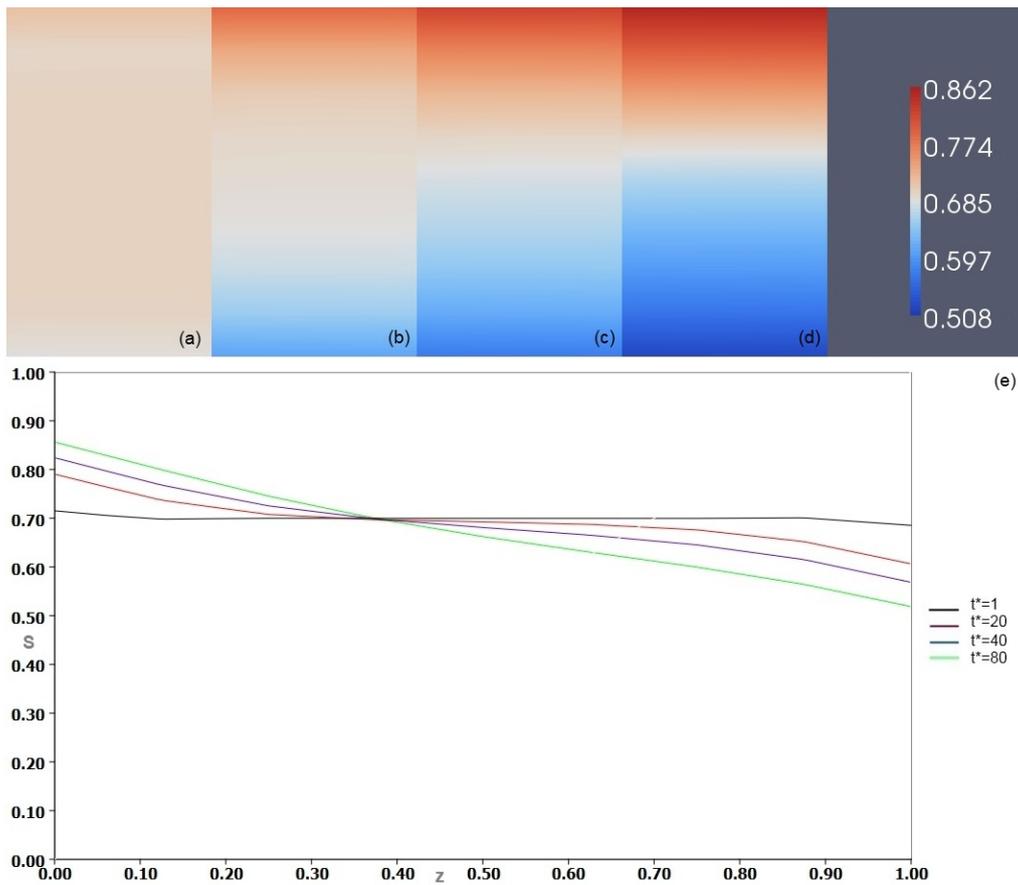


Abbildung 6.5: Simulation der Wasseraufnahme in einem Boden aus *Guelph* Lehm in trockenem Zustand zu den Zeitpunkten  $t^* = 1 \hat{=} t = 16.9$  min (a),  $t^* = 20 \hat{=} t = 337.8$  min = 5.6 h (b),  $t^* = 40 \hat{=} t = 675.6$  min = 11.3 h (c) und  $t^* = 80 \hat{=} t = 1351.2$  min = 22.5 h (d) mit einer Sättigung  $S = 0.7$  zum Zeitpunkt  $t = 0$  und  $p_0 = -1$ . Die Kurven zeigen die relativen Sättigungen als Funktion der Tiefe im Boden an (siehe (e)).

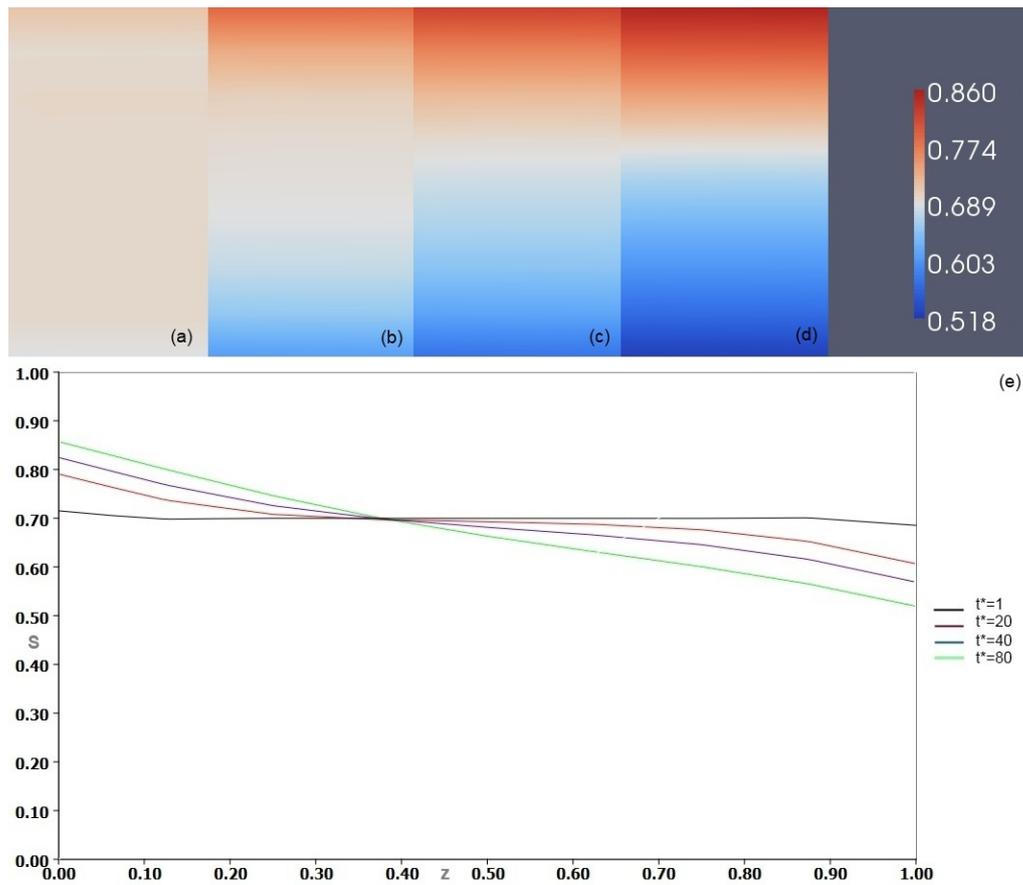


Abbildung 6.6: Simulation der Wasseraufnahme in einem Boden aus *Guelph* Lehm in nassem Zustand zu den Zeitpunkten  $t^* = 1 \hat{=} t = 14.1$  min (a),  $t^* = 20 \hat{=} t = 281.9$  min = 4.7 h (b),  $t^* = 40 \hat{=} t = 563.9$  min = 9.4 h (c) und  $t^* = 80 \hat{=} t = 1127.7$  min = 18.8 h (d) mit einer Sättigung  $S = 0.7$  zum Zeitpunkt  $t = 0$  und  $p_0 = -1$ . Die Kurven zeigen die relativen Sättigungen als Funktion der Tiefe im Boden an (siehe (e)).

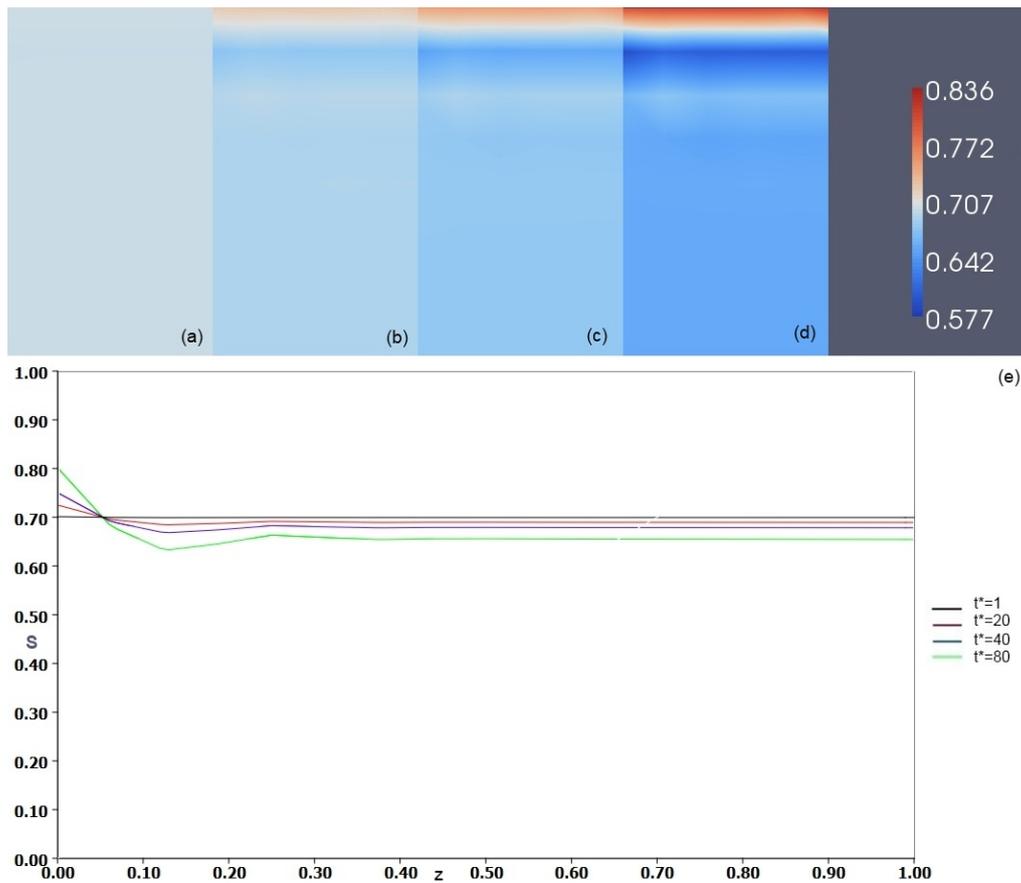


Abbildung 6.7: Simulation der Wasseraufnahme in einem Boden aus *Beit Netofa* Klei zu den Zeitpunkten  $t^* = 1 \hat{=} t = 14.5 \text{ min}$  (a),  $t^* = 20 \hat{=} t = 289.7 \text{ min} = 4.8 \text{ h}$  (b),  $t^* = 40 \hat{=} t = 579.4 \text{ min} = 9.6 \text{ h}$  (c) und  $t^* = 80 \hat{=} t = 1158.9 \text{ min} = 19.3 \text{ h}$  (d) mit einer Sättigung  $S = 0.7$  zum Zeitpunkt  $t = 0$  und  $p_0 = -1$ . Die Kurven zeigen die relativen Sättigungen als Funktion der Tiefe im Boden an (siehe (e)).

### 6.1.2 Nacht

In diesem Kapitel soll die Situation bei Nacht, anhand von schluffigem Löss, demonstriert werden, das heißt, in der Approximation für den Wurzelinnendruck (6.3) wird  $p_0 = 0$  gesetzt. Die Schrittweite des impliziten Eulers im Programm wird wieder auf  $k = 0.0001$  gesetzt. Die relative Anfangssättigung wird für diese Simulation, analog zu Kapitel 6.1.1, auf  $S = 0.7$  gesetzt, sodass das Ergebnis mit Abbildung 6.4 verglichen werden kann. Die Simulation umfasst dieselbe Zeitspanne. Aus Abbildung 6.8 kann man erkennen, dass es in der Nacht nur den Fluss von der Oberfläche in den Boden gibt.

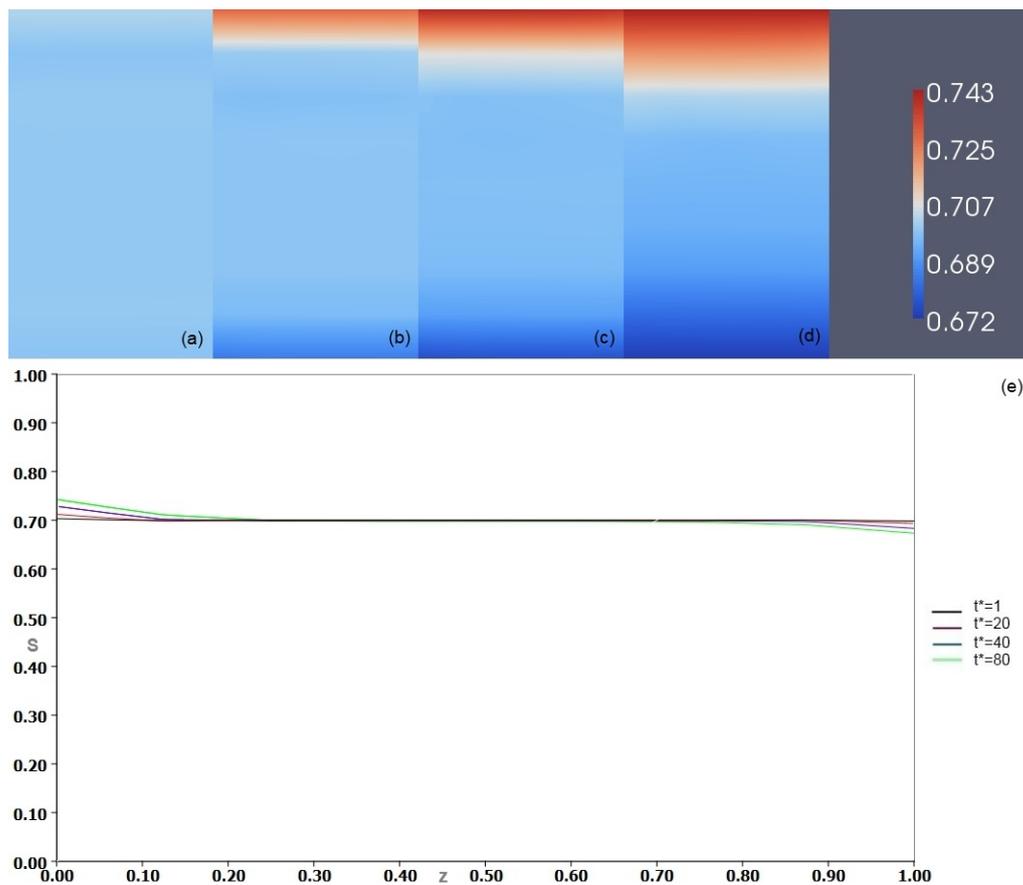


Abbildung 6.8: Simulation der Wasseraufnahme in einem Boden aus schluffigem Löss zu den Zeitpunkten  $t^* = 1 \hat{=} t = 14.5$  min (a),  $t^* = 20 \hat{=} t = 289.7$  min = 4.8 h (b),  $t^* = 40 \hat{=} t = 579.4$  min = 9.6 h (c) und  $t^* = 80 \hat{=} t = 1158.9$  min = 19.3 h (d) mit einer Sättigung  $S = 0.7$  zum Zeitpunkt  $t = 0$  und  $p_0 = 0$ . Die Kurven zeigen die relativen Sättigungen als Funktion der Tiefe im Boden an (siehe (e)).

### 6.1.3 Sättigungsänderungen

In dieser Simulationsreihe wird die relative Sättigung zum Zeitpunkt  $t = 0$  auf  $S = 0.4$  gesetzt. Der Testboden ist *Beit Netofa* Klei. Der Zeitschritt im Programm wird auf  $k = 0.00001$  gesetzt, da es ansonsten zu numerischen Schwierigkeiten käme. Es wird dadurch natürlich eine kürzere Zeitspanne (4.8 h) als bei der vorangegangenen Simulation mit der höheren Anfangssättigung von  $S = 0.7$  (siehe Abbildung 6.7) betrachtet. Man erkennt allerdings trotzdem, dass die Wurzeln bei einer geringeren Wassersättigung auch weniger Wasser aufnehmen.

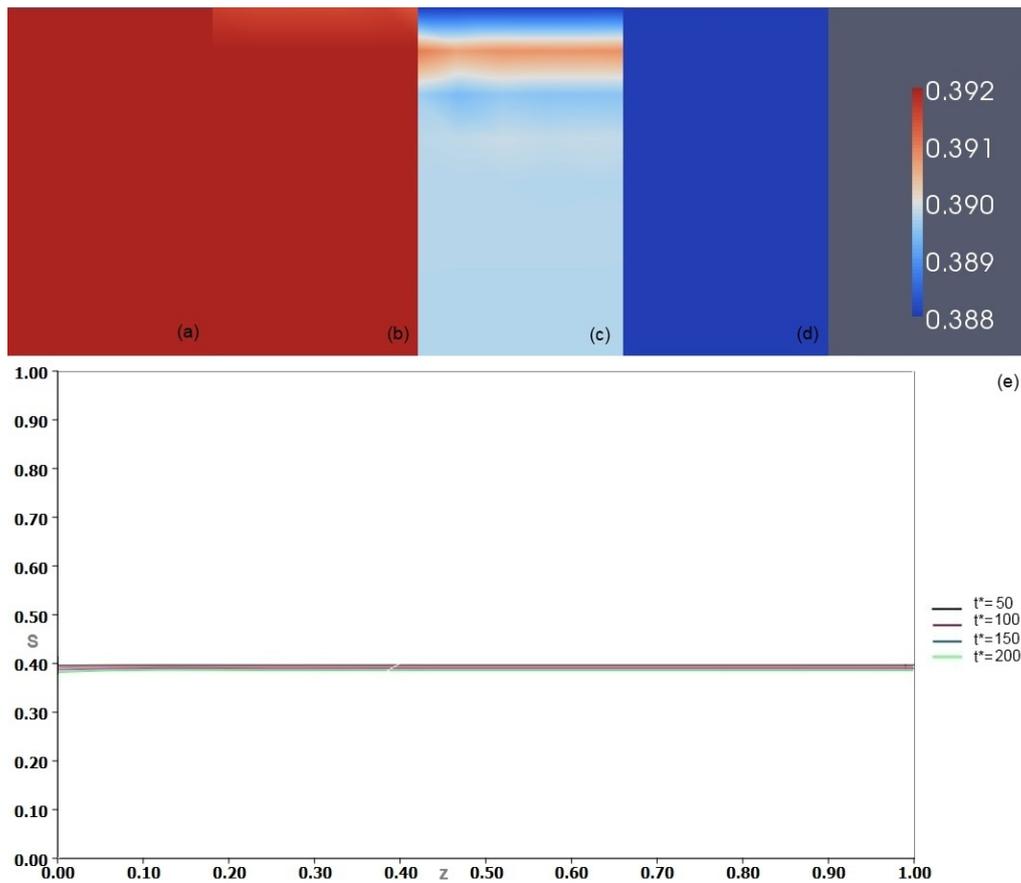


Abbildung 6.9: Simulation der Wasseraufnahme in einem Boden aus *Beit Netofa* Klei zu den Zeitpunkten  $t^* = 50 \hat{=} t = 72.4 \text{ min}$  (a),  $t^* = 100 \hat{=} t = 144.9 \text{ min} = 2.4 \text{ h}$  (b),  $t^* = 150 \hat{=} t = 217.3 \text{ min} = 3.6 \text{ h}$  (c) und  $t^* = 200 \hat{=} t = 289.7 \text{ min} = 4.8 \text{ h}$  (d) mit einer Sättigung  $S = 0.4$  zum Zeitpunkt  $t = 0$  und  $p_0 = -1$ . Die Kurven zeigen die relativen Sättigungen als Funktion der Tiefe im Boden an: (siehe (e)).

#### 6.1.4 Evaporation

Durch Änderung des Vorzeichens von  $q_S$  erhält man Evaporation, das heißt, dem Boden wird an der Bodenoberfläche Wasser entzogen. Es wird nur der Hälfte der Oberfläche eine Randbedingung zugewiesen, an der anderen Hälfte herrscht kein Fluss. Dies entspricht einer Situation eines Sonnenschirms, der die Hälfte des Bodens beschattet.

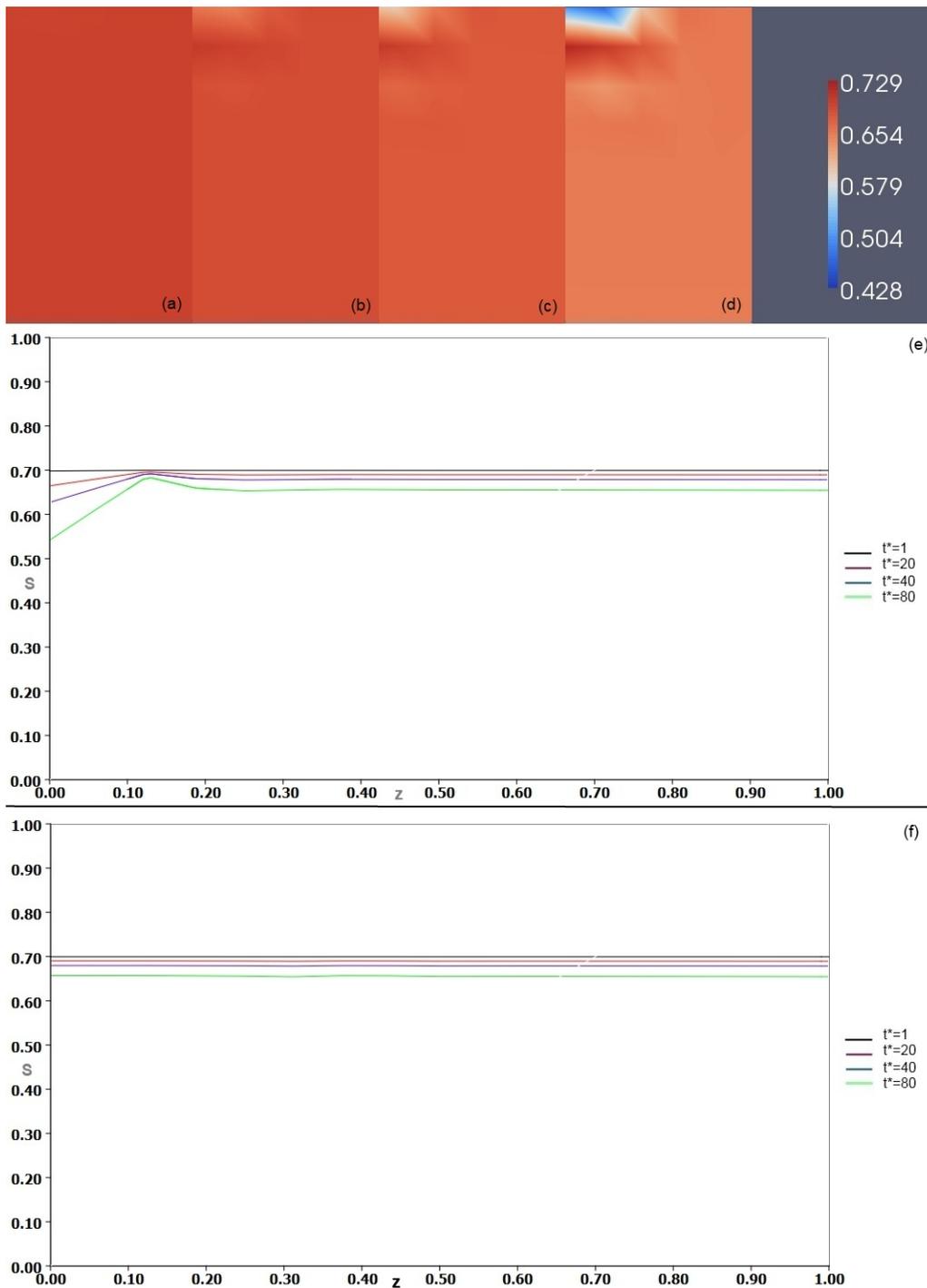


Abbildung 6.10: Simulation der Wasseraufnahme in einem Boden aus *Beit Netofa Klei* zu den Zeitpunkten  $t^* = 1 \hat{=} t = 14.5$  min (a),  $t^* = 20 \hat{=} t = 289.7$  min = 4.8 h (b),  $t^* = 40 \hat{=} t = 579.4$  min = 9.6 h (c) und  $t^* = 80 \hat{=} t = 1158.9$  min = 19.3 h (d) mit einer Sättigung  $S = 0.7$  zum Zeitpunkt  $t = 0$  und  $p_0 = -1$ . Die Kurven zeigen die relativen Sättigungen als Funktion der Tiefe im Boden an: Grafik (e) bezieht sich auf den Teil mit Evaporation, Grafik (f) bezieht sich auf den Teil, wo kein Einfluss von außen vorhanden ist.

Als Versuchsboden wird *Beit Netofa* Klei gewählt. Die relative Anfangssättigung wird auf  $S = 0.7$  gesetzt. Die Zeitschrittweite im Programm wird auf  $k = 0.0001$  gesetzt, weiters wird die Situations bei Tag simuliert, das heißt  $p_0 = -1$ . Vergleicht man diese Simulation (siehe Abbildung 6.10) mit Abbildung 6.7, die unter denselben Bedingungen einen Wasserfluss in den Boden vorgegeben hat, so erkennt man, dass die Sättigung an der Bodenoberfläche bei Evaporation schneller abnimmt.

### 6.1.5 Dimensionales Modell

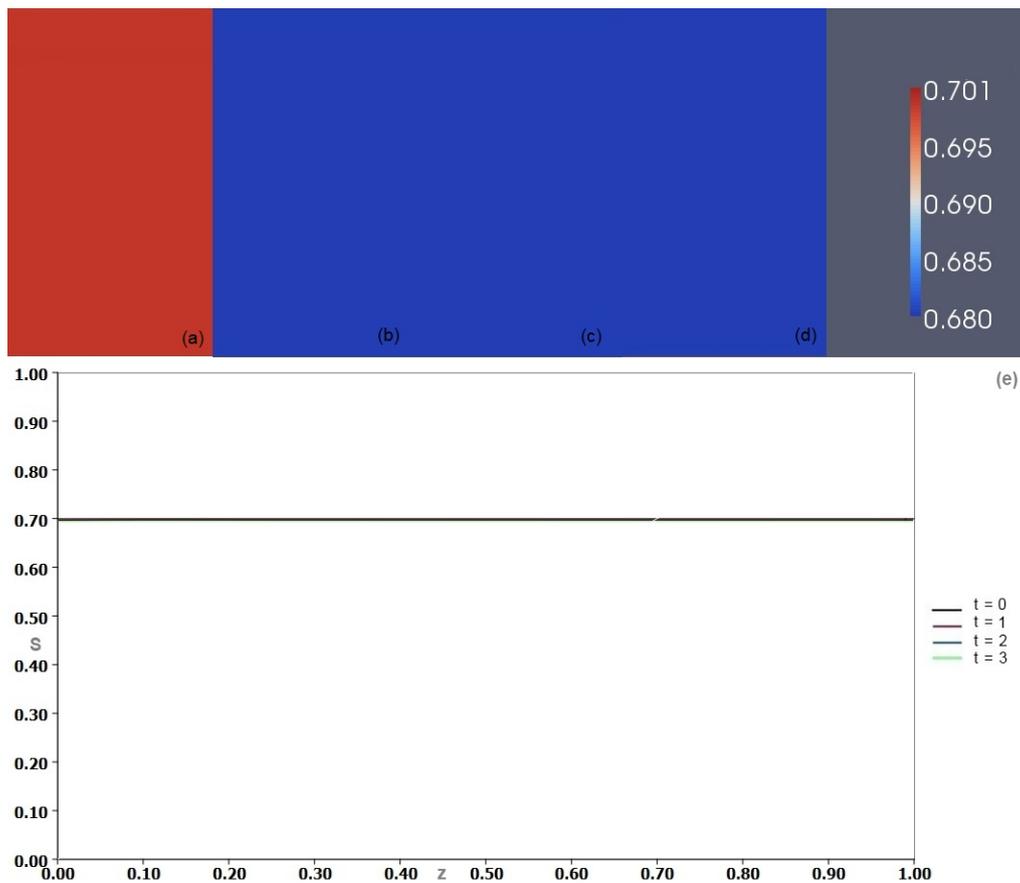


Abbildung 6.11: Simulation der Wasseraufnahme in einem Boden aus *Beit Netofa* Klei zu den Zeitpunkten  $t = 0$  min (a),  $t = 1$  min (b),  $t = 2$  min (c) und  $t = 3$  min (d) mit einer Sättigung  $S = 0.7$  zum Zeitpunkt  $t = 0$  und  $p_0 = -1$ . Die Kurven zeigen die relativen Sättigungen als Funktion der Tiefe im Boden an (siehe (e)).

Als Vergleich zu den nichtdimensionalen Simulationen soll in diesem Abschnitt noch eine dimensionale Version gezeigt werden. Dafür wird *Beit Netofa Klei* gewählt. Die relative Sättigung zu dem Zeitpunkt  $t = 0$  wird auf  $S = 0.7$  gesetzt. Die Eulerschrittweite im Programm wird auf  $k = 0.01$  gesetzt. Es werden

300 Iterationsschritte betrachtet, dies entspricht 3 min einer Wasseraufnahme der Wurzeln (siehe Abbildung 6.11). In diesen 3 Minuten passiert fast nichts, was man auch bereits aus der nichtdimensionalen Simulation, siehe Abbildung 6.7 erahnen kann.

## 6.2 Schlussfolgerung

Aus den Ergebnissen von Kapitel 6.1.1 bis Kapitel 6.1.5 erkennt man, dass Pflanzenwurzeln das Wasser aus verschiedenen Böden unterschiedlich schnell aufnehmen. Auch der Wasserfluss im Boden ist verschieden. Dies hängt mit den bodenspezifischen Eigenschaften, wie zum Beispiel der Porosität, . . . , zusammen.

Die Computorexperimente zu *Hygiene* Sandstein und zu *Touchet* schluffigem Löss weisen ähnliche Ergebnisse auf. Wie von den Abbildungen aus Kapitel 6.1.1 ersichtlich ist, dringt dort sehr schwer Wasser ein und die Böden sind an der Oberfläche schnell gesättigt. Die Pflanzen nehmen in diesen Böden auch vergleichsweise viel Wasser auf, während Pflanzenwurzeln in schluffigem Löss oder *Beit Netofa* Klei weniger Wasser aufnehmen. Auch *Guelph* Lehm ist ein Boden, in dem die Pflanze vergleichsweise zu *Touchet* schluffigem Löss oder *Hygiene* Sandstein weniger Wasser aufnimmt, allerdings mehr als in schluffigem Löss.

Betrachtet man also nur die Wasseraufnahme der Pflanzenwurzeln, so kann man davon ausgehen, dass die Wurzeln in *Hygiene* Sandstein oder *Touchet* schluffiger Löss am besten Wasser aufnehmen können. Allerdings spielen beim Pflanzenwachstum auch andere Faktoren eine Rolle, die in dieser Arbeit vernachlässigt worden sind. So können auch Nährstoffe und Nährsalze, die über den Boden aufgenommen werden, das Wachstum beeinflussen. Auch hier gibt es Unterschiede in den einzelnen Böden. Jeder Boden enthält eine andere Nährsalz- und Nährstoffkombination. Pflanzen nehmen diese in verschiedenen Bodenarten unterschiedlich auf.

Aus Kapitel 6.1.3 kann der Wasserverbrauch der Pflanzenwurzeln gefolgert werden. Hat der Boden eine geringe Sättigung, so verbraucht die Pflanze weniger Wasser als bei großem Wasserangebot.

## 6.3 Ausblick

Dieses hier vorgestellte Modell kann an einigen Stellen noch erweitert werden.

### 6.3.1 Koppelung mit der Erhaltungsgleichung für den Wurzelinnen- druck

Wie in Kapitel 3.2.2 und in Kapitel 5.1.3 bereits erwähnt, fließt in den Quellterm  $F_w$  der Wurzelinnendruck  $p_r$  ein (siehe (3.47) bzw. (5.11)). In den beschriebenen Simulationen dieser Arbeit wird dieser Wurzelinnendruck  $p_r$  durch die Approximation

$$p_r(z) \approx p_0 + 0.1z,$$

beschrieben (siehe 5.19). Diese Approximation ist für dicke Wurzeln geeignet. Allerdings sollte man bei der Realisierung eines ganzen Wurzelsystems mit der Koppelung der Erhaltungsgleichung

$$[2\pi a k_r + [2\pi a k_r k_{z,1}]^{1/2} \psi_1(z)](p - p_r) = -k_{z,0} \frac{\partial^2 p_r}{\partial z^2}$$

arbeiten (siehe (3.43)), da die Variation im Bodendruck  $p$  sehr stark den Innendruck der Wurzeln 0. und 1. Ordnung beeinflussen. Somit wäre es sinnvoller die Erhaltungsgleichung numerisch zu lösen, [Roose et al., 2004].

Da es über den Rahmen dieser Arbeit hinausgegangen wäre, die Richardsgleichung mit der Erhaltungsgleichung in ViennaFEM zu koppeln, wurde darauf verzichtet und mit der Approximation (5.19) gearbeitet.

### 6.3.2 Wurzelstruktur

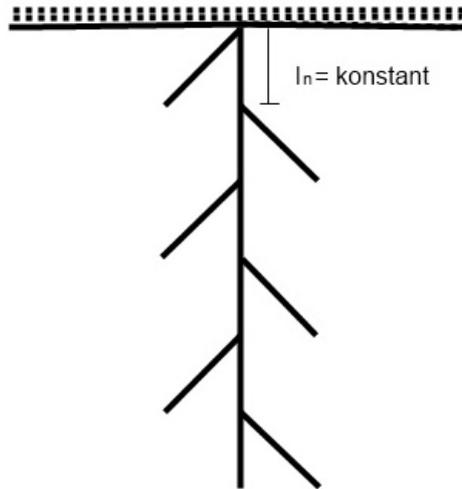
In diesem Modell wurde angenommen, dass die Wasseraufnahme der Wurzeln  $\text{pro cm}^3$  konstant ist (siehe (3.32)). Wie in Abbildung 6.3.2 zu erkennen ist, haben die Modellwurzeln eine Pfahlwurzel, also eine Wurzel 0. Ordnung, und von dieser gehen unter gleichem Winkel gleichlange Seitenwurzeln, also Wurzeln 1. Ordnung, weg. In der Natur haben die Wurzeln nahe der Bodenoberfläche mehr Verzweigungen, als im tieferen Boden. Sie nehmen daher an der Bodenoberfläche auch mehr Wasser auf (vergleiche Abbildung 1.1). Dieses Phänomen wird mit Hilfe des Parameter  $l_n$ , der als konstant definiert ist, bestimmt (siehe Tabelle 5.2).

Hier wäre es möglich, in Modellerweiterungen die Wurzelgeometrie realistischer zu modellieren, sodass die Wasseraufnahme hauptsächlich in Bodennähe stattfindet.

### 6.3.3 Randbedingungen

Bei den Simulationen in Kapitel 6.1 wurde nur mit der Flussrandbedingung an der Bodenoberfläche,

$$-D_0 D(S) \frac{\partial S}{\partial z} + K_S K(S) = q_S \quad \text{an } z = 0,$$



siehe auch (3.9), experimentiert. An allen anderen Rändern des Würfels wurde eine No - flux Randbedingung angenommen. Für den Wert  $q_S$  wurde einerseits mit dem konstanten Wert aus Tabelle 5.2 gearbeitet, andererseits wurde  $q_S = 0$  gesetzt, um zu sehen, in welchem Boden die Pflanze am schnellsten das Wasser aufnimmt, siehe Kapitel 6.1.

Wie aus Kapitel 3.1.2 ersichtlich ist, gibt es noch andere Randbedingungen, die implementiert werden können. An der Bodenoberfläche kann eine wasser- gesättigte Randbedingung angenommen werden, die durch

$$S = 1 \quad \text{an} \quad z = 0$$

gegeben ist (siehe (3.10)). Diese inhomogene Randbedingung kann nicht direkt implementiert werden, da man für die Sättigung  $S$  die Dirichlet-Randbedingung  $S = 1$  hat. Für das Newtonupdate  $\tilde{\delta}$  ist aber die homogene Dirichlet-Randbedingung 0 vorzugeben. Diese Randbedingung zu implementieren wäre über den Rahmen der Diplomarbeit hinausgegangen.

An der Basis der Bodenschicht können natürlich auch andere Randbedingungen als die No - flux - Randbedingung definiert werden. Wie an der Bodenoberfläche kann eine vollständige Sättigung vorgegeben werden, die durch

$$S = 1 \quad \text{an} \quad z = l_w$$

gegeben ist (siehe (3.11)). Diese wäre numerisch analog zur Bodenoberfläche zu behandeln. Eine solche Randbedingung entspricht einer 'Sickerlinie', wo nur bei Vollsättigung oder  $h = 0$  Wasser unten ausrinnen kann. Sobald sich allerdings ein

negativer Druck aufbaut, findet kein Fluss nach außen statt.

Außerdem kann eine Free drainage - Randbedingung, die durch

$$-D_0 D(S) \frac{\partial S}{\partial z} + K_S K(S) = -K_S K(S) \quad \text{an } z = l_w$$

definiert ist (siehe (3.12)), vorgegeben sein. Durch diese Randbedingung gibt es auch im Randintegral eine Nichtlinearität. Neumann-Randbedingungen sind zwar direkt in die schwache Formulierung einzubauen, allerdings müsste in diesem Fall das implementierte Newtonverfahren umgeändert werden, sodass auch das Randintegral mit Hilfe des Newtonverfahrens behandelt werden kann.

Diese Randbedingungen wurden im Rahmen dieser Diplomarbeit vernachlässigt und nur theoretisch in Kapitel 3.1.2 erwähnt. Auch an dieser Stelle kann das Modell noch erweitert und speziellere Wurzelumgebungen betrachtet werden.



---

# Literaturverzeichnis

---

- [Atkins, 2006] P. W. Atkins, J. De. Paula, *Physikalische Chemie*, 4te Auflage, Wiley-VCH Verlag, Weinheim, Deutschland; 2006.
- [Auzinger, 2007] Winfried Auzinger, *Numerik partieller Differentialgleichungen - Skriptum*; 2007.
- [Brooks et al., 1990] A. N. Brooks, T. J. R. Hughes, *Streamline upwind/Petrov-Galerkin formulations for convection dominated flows with particular emphasis on the incompressible Navier-Stokes equations*; 1990.
- [Ciarlet, 1991] P.G. Ciarlet, J.L.Lions, *Basic Error Estimates for Elliptic Problems - Handbook of Numerical Analysis*, North-Holland, Amsterdam; 1991.
- [Frensch et al., 1989] J. Frensch, E. Steudle, *Axial and radial hydraulic resistance to roots of maize (*Zea mays l.*)*, Plant Physiol. 91, 719-726; 1989.
- [Van Genuchten, 1980] M. Th. van Genuchten, *A closed-form Equation for Predicting the Hydraulic Conductivity of Unsaturated Soils*, Soil Science Society of America Journal; 1980.
- [VanGenuchten et al., 1991] M. Th. van Genuchten, F. J. Leij and S. R. Yates, *The RETC Code for Quantifying the Hydraulic Functions of Unsaturated Soils*, Ada and Oklahoma: Robert S Kerr Environmental Research Laboratory and Office of Research and Development and US Environment Protection Agency; 1991.
- [Großmann et al., 2005] C. Großmann, H. G. Roos *Numerische Behandlung partieller Differentialgleichungen*, Teubner, Wiesbaden; 2005.
- [Holzbecher, 1996] E. Holzbecher, *Modellierung dynamischer Prozesse in der Hydrologie*, Springer, Berlin, 1996.
- [IBG-Bulletin, 1976] IBG-Bulletin, 49; 1976.

- [Jury et al., 1991] W. A. Jury, W. R. Gardner and W. H. Gardner, *Soil Physics*, John Wiley and Sons and Inc, Weinheim and Deutschland; 1991.
- [Jüngel, 2008] A. Jüngel, *Partielle Differentialgleichungen - Skriptum*; 2008.
- [Kastenek, 1980] F. Kastenek, *Zur Nomenklatur in der Bodenphysik*, Mitteilungen der Oesterreichischen Bodenkundlichen Gesellschaft; 1980.
- [Knabner, 2000] P. Knabner, *Numerik partieller Differentialgleichungen*, Springer, Berlin; 2000.
- [Lasaga, 1998] A. C. Lasaga, *Kinetic theory in the earth sciences*, Princeton series in geochemistry, Princeton University Press, 41 William Street Princeton, New Jersey 08540; 1998.
- [Lege et al., 1996] T. Lege, O. Kolditz, W. Zielke, *Strömungs - und Transportmodellierung*, Bundesanstalt für Geowissenschaften und Rohstoffe, Springer; 1996.
- [Loiskandl et al., 2010] W. Loiskandl, G. Kammerer, *Bodenphysik - Vertiefungsskriptum*; 2010.
- [Loiskandl et al., 2008] W. Loiskandl, G. Kammerer, *Bodenphysik - Vertiefungsskriptum*; 2008.
- [Mualem, 1976] Y. Mualem, *A New Model for Predicting the Hydraulic Conductivity of Unsaturated Porous Media*, Water Resources Research; 1976.
- [ÖNORM, 1986] OENORM B 2400, *Hydrologie: Hydrographische Fachausdrücke und Zeichen*, Wien: Oesterreichisches Normungsinstitut; 1986.
- [Or et al., 1997] D. Or, J. M. Wraith, *Agricultural and Environmental Soil Physics - Course Notes*; 1997.
- [Pages et al., 1989] L. Pages, M. O. Jourdan, D. Picard, *A simulation model of the three-dimensional architecture of the maize root system*, Plant Soil 119; 1989.
- [Pages et al., 2004] L. Pages, G. Vercambre, J.-L. Drouet, F. Lecompte, C. Collet, J. Le Bot, *Root Typ: A generic model to depict and analyse the root system architecture*, Plant Soil 258; 2004.
- [Papastavrou, 1998] A. Papastavrou, *Adaptive Finite Element Methoden für Konvektions-Diffusionsprobleme*, Ruhr-Universität Bochum; 1998.
- [ParaView, 2008] ParaView, <http://www.paraview.org/> .

- [Roose et al., 2004] T. Roose and A. C. Fowler, *A model for water uptake by plant roots*, Journal of Theoretical Biology; 2004.
- [Raven et al., 2006] P. H. Raven, R. F. Evert, S. E. Eichhorn, *Biologie der Pflanzen*, 4.Auflage, Walter de Gruyter, Berlin - New York; 2006.
- [Rupp, 2008] K. Rupp, *Multiphysics Modelling in the Context of Generative/Generative Programming*, Diplomarbeit; 2008.
- [Soil Science Of America, 1997] Committee of the Soil Science of America *Glossary of Soil Science Terms*, Wisconsin: Soil Science Society of America; 1997.
- [Varney et al., 1991] G.T. Varney, M.J. Canny, X.L. Wang, M.E. McCully *The branch roots of Zea.1. 1st order branches, their number, sizes and division into classes.*, Ann.Bot. 67,357-364; 1991.
- [Weerathaworn et al., 1992] P. Weerathaworn, P. Stamp, *Anatomy of seedling roots of tropical maize (Zea mays) L cultivars at low water supply*, J.Exp.Bot. 43,1015-1021; 1992.



## Anhang A

---

# Vektorräume

---

Sei  $V$  ein reeller Vektorraum und  $\|\cdot\| : V \rightarrow \mathbb{R}$  eine Abbildung.  $(V, \|\cdot\|)$  heißt *normierter Raum*, wenn:

$$\|u\| \geq 0, \forall u \in V, \|u\| = 0 \Leftrightarrow u = 0, \quad (\text{A.1})$$

$$\|\alpha u\| = |\alpha| \|u\|, \forall \alpha \in \mathbb{R}, u \in V, \quad (\text{A.2})$$

$$\|u + v\| \leq \|u\| + \|v\|, \forall u, v \in V. \quad (\text{A.3})$$

Eine Abbildung  $|\cdot| : V \rightarrow \mathbb{R}$  heißt *Halbnorm*, wenn gilt:

$$\|\alpha u\| = |\alpha| \|u\|, \forall \alpha \in \mathbb{R}, u \in V, \quad (\text{A.4})$$

$$\|u + v\| \leq \|u\| + \|v\|, \forall u, v \in V. \quad (\text{A.5})$$

Ein *Hilbertraum* ist ein vollständiger Vektorraum mit einem Skalarprodukt  $(\cdot, \cdot)$ . Der *Dualraum*  $H'$  ist definiert durch

$$H' = \{F : H \rightarrow \mathbb{R} : F \text{ ist linear und stetig}\}. \quad (\text{A.6})$$

Der lineare Raum  $L^p(\Omega)$ ,  $p \in [1, \infty)$  ist definiert als

$$L^p(\Omega) := \{f : \Omega \rightarrow \mathbb{R} : f \text{ ist messbar, } \int_{\Omega} \|f(x)\|^p d\mu(x) < \infty\}. \quad (\text{A.7})$$

Die Norm in  $L^p(\Omega)$  ist gemäß

$$\|f(x)\|_{L^p(\Omega)} := \left( \int_{\Omega} \|f(x)\|^p dx \right)^{1/p}, \quad p \in [1, \infty), \quad (\text{A.8})$$

definiert.

Für den Raum  $L^2(\Omega)$  lautet das Skalarprodukt

$$(u, v)_{L^2} := \int_{\Omega} uv \, dx, \quad u, v \in L^2(\Omega). \quad (\text{A.9})$$

Dieses erzeugt die  $L^2$ -Norm

$$\|u\|_{L^2(\Omega)} := \sqrt{(u, u)_{L^2(\Omega)}}. \quad (\text{A.10})$$

Die Elemente von  $L^\infty(\Omega)$  heißen die *wesentlich beschränkten Funktionen*. Das heißt für  $f : \Omega \rightarrow \mathbb{R}$  ist die Norm durch

$$\|f(x)\|_{L^\infty(\Omega)} := \operatorname{ess\,sup}_{x \in \Omega} \|f(x)\|, \quad (\text{A.11})$$

gegeben, wobei das *essentielle Supremum* gemäß

$$\operatorname{ess\,sup} \|f(x)\| = \inf\{M > 0 \mid M \text{ ist wesentliche Schranke}\}. \quad (\text{A.12})$$

definiert ist.

Sei  $\Omega$  eine offene Menge, so ist der Raum der *Testfunktionen* gegeben durch:

$$\mathcal{D}(\Omega) = C_0^\infty = \{\phi \in C^\infty(\Omega) : \operatorname{supp}(\phi) \text{ ist kompakt in } \Omega\} \quad (\text{A.13})$$

Mit Hilfe dieser Definition kann man den *verallgemeinerten Lösungsbegriff* einführen: Man kann  $u$  eine *verallgemeinerte Lösung* einer partiellen Differentialgleichung nennen, wenn sie die dazugehörige Variationsformulierung für alle  $\phi \in C_0^\infty(\Omega)$  erfüllt. Der Vorteil dieser Definition liegt darin, dass die Funktion  $u$  nicht differenzierbar, sondern nur lokal integrierbar sein muss, da die Ableitung auf die Testfunktion  $\phi \in C_0^\infty$  übertragen wird.

Der *Sobolevraum*  $W^{m,p}(\Omega)$ ,  $m \in \mathbb{N}_0$  und  $1 \leq p \leq \infty$ , ist die Menge aller Funktionen  $u \in L^p(\Omega)$ , sodass

$$D^\alpha u \in L^p(\Omega), \quad \forall |\alpha| \leq m, \quad (\text{A.14})$$

wobei  $\alpha$  ein Multiindex und  $D^\alpha u$  die entsprechende partielle Ableitung von  $u$  im distributionellen Sinne ist. Auf  $W^{m,p}(\Omega)$  ist die Norm gemäß

$$\begin{aligned} \|u\|_{W^{m,p}(\Omega)}^p &= \sum_{|\alpha| \leq m} \|D^\alpha u\|_{L^p(\Omega)}^p, \quad \text{falls } p < \infty \\ \|u\|_{W^{m,p}(\Omega)} &= \max_{|\alpha| \leq m} \|D^\alpha u\|_{L^p(\Omega)}, \quad \text{falls } p = \infty \end{aligned} \quad (\text{A.15})$$

definiert.  $W^{m,p}$  ist ein Banachraum. Ist  $m = 0$ , so schreibt man  $W^{0,p}(\Omega) = L^p(\Omega)$ , für  $p = 2$  setzt man  $H^m(\Omega) := W^{m,2}(\Omega)$ , welcher ein Hilbertraum ist. Der Sobolevraum  $W^{m,p}(\Omega)$ ,  $m \in \mathbb{N}_0$  und  $1 \leq p \leq \infty$ , ist der Abschluss von  $C_0^\infty(\Omega)$  in der

Norm  $\|\cdot\|_{W^{m,p}(\Omega)}$ .

Bemerkung: Wenn in dieser Diplomarbeit bei den Normen keine spezielle Menge angegeben ist, so ist die Gültigkeit auf der ganzen Menge  $\Omega$  gegeben.

Satz von Gauss:

Sei  $\omega \subset \mathbb{R}^n$  eine offene und beschränkte Menge mit  $\partial\Omega \in C^1$  und äußerem Normaleneinheitsvektor  $\nu$  definiert auf  $\partial\Omega$ . Ferner sei  $F \in C^1(\bar{\Omega}; \mathbb{R}^n)$  eine vektorwertige Funktion. Dann gilt:

$$\int_{\Omega} \operatorname{div} F \, dx = \int_{\partial\omega} F \cdot \nu \, ds \quad (\text{A.16})$$

Aus diesem Satz kann man das mehrdimensionale Analogon der partiellen Integration herleiten:

$$\int_{\Omega} u \cdot \operatorname{div} F \, dx = - \int_{\Omega} \nabla u \cdot F \, dx + \int_{\partial\Omega} u(F \cdot \nu) \, ds \quad (\text{A.17})$$

Die Erweiterung auf Sobolev-Funktionen lautet:

Sei  $\Omega \subset \mathbb{R}^n$  mit  $\partial\Omega \in C^1$  und seien  $u_1, \dots, u_n, v \in H^1(\Omega)$ . Sei  $u = (u_1, \dots, u_n)^T$ . Dann gilt

$$\int_{\Omega} (\operatorname{div} u)v \, dx = - \int_{\Omega} u \cdot \nabla v \, dx + \int_{\partial\Omega} (v \cdot \nu)v \, ds \quad (\text{A.18})$$

wobei  $\nu$  der äußere Normaleneinheitsvektor auf  $\partial\Omega$  ist.

Literatur: [Knabner, 2000], [Jüngel, 2008]



## Anhang B

---

# Konvergenzordnungsabschätzungen

---

Für Konvergenzordnungsabschätzungen werden so genannte *a-priori-Fehlerabschätzungen* der Form

$$\|u - u_h\| \leq C|u|h^\alpha, \quad C > 0, \alpha > 0, \quad (\text{B.1})$$

nachgewiesen. Auf Grund des Lemmas von Céa folgt, dass für Abschätzungen im Hilbertraum  $V$  nur die Angabe eines Vergleichselements  $v_h \in V_h$  nötig ist, für das

$$\|u - v_h\| \leq C|u|h^\alpha, \quad C > 0, \alpha > 0, \quad (\text{B.2})$$

gilt.

Es werden folgende Voraussetzungen für das Vergleichselement  $v_h$  gemacht:

- Das Vergleichselement  $v_h$  sollte  $u$  möglichst gut approximieren.
- Das Vergleichselement  $v_h$  sollte als Bild eines linearen Operators  $I_h$  angegeben werden, also  $v_h = I_h(u)$ . Für  $I_h$  wählt man den *Interpolationsoperator* zu den Freiheitsgraden.

Da  $I_h(u)$  wohldefiniert sein soll, muss  $u \in C(\bar{\Omega})$  gelten. Aus dieser Voraussetzung folgt nun eine Glattheitsanforderung an die Lösung  $u$ :

$$u \in H^{k+1}(\Omega). \quad (\text{B.3})$$

Sei  $n \leq 3$ , so liefert der Einbettungssatz die Wohldefiniertheit von  $I_h$  auf  $H^{k+1}(\Omega)$ ,  $k \geq 1$ . Daraus folgt für  $C^0$ -Elemente, dass  $I_h(u) \in H^1(\Omega)$  ist. Damit kann man (B.1) präzisieren:

$$\|u - I_h(u)\|_{H^1} \leq Ch^\alpha |u|_{H^{k+1}} \quad (\text{B.4})$$

S.B.1 Lemma: Bramble-Hilbert

Sei  $K \subset \mathbb{R}^n$  offen,  $k \in \mathbb{N}_0$ ,  $1 \leq p \leq \infty$  und ein stetiges lineares Funktional  $G : W_p^{k+1}(K) \rightarrow \mathbb{R}$  gegeben, für das gilt:

$$G(q) = 0 \text{ für alle } q \in P_k(T), \quad (\text{B.5})$$

$P_k(T) \dots$  Vektorraum der Polynome  $k$ -ten Grades in  $n$  Variablen.

Dann gibt es eine Konstante  $C > 0$ , so dass für alle  $v \in W_p^{k+1}(K)$  gilt:

$$|G(v)| \leq C \|G\| |v|_{W_p^{k+1}(K)}, \quad (\text{B.6})$$

$\|G\| \dots$  Operatornorm von  $G$ .

Beweis: [Ciarlet, 1991]

S.B.2 Satz:

Sei ein eindimensionales Gebiet  $\Omega = (a, b)$  gegeben. Betrachtet man den polynomialen Lagrange-Ansatz auf Teilintervallen mit maximaler Länge  $h$ , so gelte für die jeweiligen lokalen Ansatzräume  $P$  die Inklusion  $P_k \subset P$  für ein  $k \in \mathbb{N}$ . Dann gibt es eine Konstante  $C > 0$ , so dass für alle  $v \in H^{k+1}(\Omega)$  und  $0 \leq m \leq k + 1$  gilt:

$$\sqrt{\sum_{T \in \mathcal{T}_h} |v - I_T(v)|_{H^m(T)}^2} \leq Ch^{k+1-m} |v|_{H^{k+1}}. \quad (\text{B.7})$$

Gilt für die Lösung  $u$ , dass  $u \in H^{k+1}(\Omega)$ , so folgt für die Finite-Elemente-Methode Approximation  $u_h$ :

$$\|u - u_h\|_{H^1} \leq Ch^k |u|_{H^{k+1}}. \quad (\text{B.8})$$

Beweis: [Knabner, 2000]

S.B.3 Folgerung:

Es folgt für  $v \in H^{k+1}(T)$  und  $0 \leq m \leq k + 1$ :

$$|v - I_T(v)|_{H^m(T)} \leq C \left( \frac{h_T}{\rho_T} \right)^m h_T^{k+1-m} |v|_{H^{k+1}(T)}, \quad (\text{B.9})$$

$$\rho_T := \sup\{\text{diam}(S) \mid S \text{ ist eine Kugel in } \mathbb{R}^n \text{ und } S \subset T\}.$$

Beweis: [Knabner, 2000]

S.B.4 Satz:

Sei eine Familie von Lagrange-Finite-Elemente-Diskretisierungen im  $\mathbb{R}^n$  für  $n \leq 3$  auf einer regulären Familie von Triangulierungen  $(\mathcal{T}_h)$  gegeben. Für die jeweiligen lokalen Ansatzräume  $P$  gelte:  $P_k \subset P$  für ein  $k \in N$ . Dann existiert eine Konstante  $C > 0$ , so dass für alle  $v \in H^{k+1}(\Omega)$  und  $0 \leq m \leq k+1$  gilt:

$$\sqrt{\sum_{T \in \mathcal{T}_h} |v - I_T(v)|_{H^m(T)}^2} \leq Ch^{k+1-m} |v|_{H^{k+1}}. \quad (\text{B.10})$$

Ist  $u \in H^{k+1}(\Omega)$ , so folgt für die Finite-Elemente-Approximation  $u_h$ :

$$\|u - u_h\|_{H^1} \leq Ch^k |u|_{H^{k+1}}. \quad (\text{B.11})$$

Beweis: folgt aus (B.8)

Für Galerkin-Finite-Elemente-Methode ergibt sich:

S.B.5 Folgerung:

Sei  $u \in H^2(\Omega)$ , so gilt nach Satz S.B.4. die Abschätzung:

$$\inf_{v_h \in V_h} \|u - v_h\|_{H^1} \leq \|u - I_h(u)\|_{H^1} \leq Ch |u|_{H^2}, \quad (\text{B.12})$$

mit einer Konstanten  $C > 0$ , unabhängig von  $\epsilon$ ,  $h$  und  $u$ , sodass sich schließlich

$$\|u - u_h\|_{\epsilon} \leq Ch |u|_{H^2} \quad (\text{B.13})$$

ergibt.

S.B.6. Folgerung:

Sei  $u \in H^{k+1}(\Omega)$ , so gilt für die Interpolierende  $I_h(u)$  nach (B.8) die Abschätzung

$$\|u - I_h(u)\|_{H^r(T)} \leq ch_T^{k+1-r} |u|_{H^{k+1}(T)}, \quad (\text{B.14})$$

für  $r \in \{0, 1, 2\}$  und alle  $T \in \mathcal{T}_h$ . Die Konstante  $c > 0$  ist von  $u$ ,  $v_h$  und konkreten Elementen  $T \in \mathcal{T}_h$  unabhängig.

S.B.7. Satz:

Es gibt eine von  $h$  unabhängige Konstante  $C > 0$ , so dass für  $v_h \in V_h$  gilt:

$$\|v\|_{H^1} \leq C \left( \min_{T \in \mathcal{T}_h} h_T \right)^{-1} \|v\|_{L^2}. \quad (\text{B.15})$$

Beweis: [Knabner, 2000]

S.B.8 Folgerung: Inverse Ungleichung

Da die Räume  $V_h$  endlichdimensional sind, gilt

$$\|\Delta v_h\|_{L^2(T)} \leq \frac{c}{h_T} |v|_{H^1(T)} \quad \forall v_h \in V_h, \quad \forall T \in \mathcal{T}_h, \quad (\text{B.16})$$

die Konstante  $c > 0$  ist unabhängig von  $u$ ,  $v_h$  und konkreten Elementen  $T \in \mathcal{T}_h$ .

Beweis: folgt aus Satz S.B.6.

S.B.8. Péclet-Zahl:

Die Péclet-Zahl kann sowohl physikalisch als auch mathematisch interpretiert werden:

- Physikalisch ist die Péclet-Zahl eine Maßzahl für das Verhältnis zwischen advektiven und dispersiven Transportanteilen. ( $Pe < 1$  mehr dispersiv,  $Pe > 1$  mehr advektiv).
- Mathematisch gesehen charakterisiert diese Zahl die Transportgröße einer Differentialgleichung. Das heißt für  $Pe < 1$  ist die Differentialgleichung mehr parabolisch, und für  $Pe > 1$  ist sie mehr hyperbolisch.

Mit Hilfe der Péclet-Zahl kann man numerische Abschätzungen gewinnen, mit denen man die Stabilität für numerische Lösungen garantieren kann.

Literatur: [Knabner, 2000], [Lege et al., 1996]

## Anhang C

---

# Numerische Verfahren

---

### C.1 Implizites Euler-Verfahren

Sei das Anfangsproblem

$$\begin{aligned}y'(t) &= f(t, y(t)), \\y(a) &= y_0, \\t \in [a, b], f &\in C^1([a, b] \times \mathbb{R}, \mathbb{R}), y_0 \in \mathbb{R}^n,\end{aligned}\tag{C.1}$$

gegeben. Für den Demonstrationszweck wird das Intervall  $[a, b]$  in ein äquidistantes Gitter mit einer Schrittweite  $h$  unterteilt. Durch Festlegung von  $h_j = t_j - t_{j-1}$  kann auch ein beliebiges Gitter konstruiert werden.

Beim impliziten Euler-Verfahren werden die Ableitungen  $y'(t)$  durch die Rückwärtsdifferenzen bei  $t_j$  ersetzt. Das liefert das Verfahren

$$\begin{aligned}y(t_0) &= y_0, \\ \frac{y(t_j) - y(t_{j-1})}{h} &= f(t_j, y(t_j)), \quad j = 1, 2, \dots\end{aligned}\tag{C.2}$$

Das entstehende Gleichungssystem ist nichtlinear, da die zu bestimmenden Werte sowohl links als auch rechts im Argument vorkommen. Das implizite Euler-Verfahren ist für endliche  $h > 0$  immer stabil. [Auzinger, 2007]

### C.2 Newton-Verfahren

Das Newtonverfahren ist eine Fixpunktiteration zur Bestimmung einer Nullstelle einer Funktion, also anders formuliert:

$$\text{Finde ein } x \in U \text{ mit } f(x) = 0.\tag{C.3}$$

bzw. als Fixpunktformulierung:

$$\text{Finde ein } x \in U \text{ mit } f(x) = x. \quad (\text{C.4})$$

Dabei sei  $U \subset \mathbb{R}^m$ ,  $f : U \rightarrow \mathbb{R}^m$  und  $b \in \mathbb{R}^m$ .

Im Allgemeinen kann eine Nullstelle bzw. ein Fixpunkt nur durch *Iterationsverfahren* gefunden werden, welches durch eine Abbildung

$$F : U \rightarrow U, \quad (\text{C.5})$$

bestimmt ist. Für die Folge

$$x^{(k+1)} := F(x^{(k)}) \quad (\text{C.6})$$

gilt bei vorgegebenem  $x^{(0)}$ :

$$x^{(k)} \rightarrow x \text{ für } k \rightarrow \infty; \quad (\text{C.7})$$

$x$  ist die Lösung von (C.3) bzw. (C.4).

Die Grundidee des Newtonverfahrens ist die Funktion  $f$  des Nullstellenproblems

$$f(x) = 0, \quad (\text{C.8})$$

durch eine einfache Funktion  $g$ , die  $f$  in der Nähe von  $x^{(0)}$ , einer Näherung der Nullstelle, approximiert. Anschließend wird die Nullstelle  $x^{(1)}$  der Funktion  $g$  bestimmt. Die Funktion  $g$  ist gegeben durch

$$g(x) = f(x^{(0)}) + Df(x^{(0)})(x - x^{(0)}). \quad (\text{C.9})$$

$Df(x) = (\partial_j f_i(x))_{ij}$  bezeichnet die Funktionalmatrix von  $f$ , darum wird die Differenzierbarkeit von  $f$  vorausgesetzt. Daraus folgt, dass  $x^{(1)}$  durch

$$x^{(1)} := x^{(0)} - Df(x^{(0)})^{-1} f(x^{(0)}) \quad (\text{C.10})$$

bestimmt wird. Aus dieser Definition folgt:

$$F(f)(x) = x - Df(x)^{-1} f(x) \quad (\text{C.11})$$

Die Iterationsvorschrift des Newtonverfahrens lautet daher:

$$Df(x^{(k)}) \tilde{\delta}^{(k)} = -f(x^{(k)}). \quad (\text{C.12})$$

Der *Korrekturfaktor*  $\tilde{\delta}^{(k)}$  ist definiert als

$$\delta^{(k)} := x^{(k+1)} - x^{(k)}. \quad (\text{C.13})$$

Literatur: [Knabner, 2000], [Großmann et al., 2005]

---

# Abbildungsverzeichnis

---

1.1	Simuliertes Wurzelsystem der <i>Euphorbia hetioscopa</i> ; [Pages et al., 2004]. . . . .	3
2.1	Van-Genuchten - Kurve für Sand ( $\alpha = 0.04$ , $n = 5$ ). . . . .	14
2.2	Anordnung eines Darcy-Versuchs, [Holzbecher, 1996] . . . . .	15
3.1	Darstellung der frühen Entwicklungsstadien einer Wurzelspitze [Raven et al., 2006] . . . . .	23
3.2	Querschnitt durch die Wurzel von <i>Zea mays</i> (Mais), [Raven et al., 2006]. (a) Ausdifferenzierte Wurzel, Gesamtüberblick. (b) Ausschnitt aus dem Rand- bereich einer reifen Wurzel. (c) Ausschnitt aus dem unreifen Zentralzylinder. (d) Ausschnitt aus dem reifen Zentralzylinder . . . . .	24
3.3	Entwicklung von Wurzelverzweigungen [Raven et al., 2006]. (a) Seitenwur- zelanlage. (b) Zwei Seitenwurzelnanlagen. (c) Eine ausgetretene Seitenwurzel und eine, die gerade dabei ist. . . . .	29
4.1	Beispiel einer Gebietszerlegung, [Großmann et al., 2005]. . . . .	38
4.2	Ansatzfunktionen . . . . .	39
6.1	Abschnitt der Sättigungsänderung in z-Richtung eines Computerexperimentes.	72
6.2	Simulation der Wasseraufnahme in einem Boden aus <i>Hygiene</i> Sandstein zu den Zeitpunkten $t^* = 1 \hat{=} t = 0.8$ min (a), $t^* = 20 \hat{=} t = 16.2$ min (b), $t^* = 40 \hat{=} t = 32.5$ min (c) und $t^* = 80 \hat{=} t = 65$ min (d) mit einer Sättigung $S = 0.7$ zum Zeitpunkt $t = 0$ und $p_0 = -1$ . Die Kurven zeigen die relativen Sättigungen als Funktion der Tiefe im Boden an (siehe (e)). . . . .	74
6.3	Simulation der Wasseraufnahme in einem Boden aus <i>Touchet</i> schluffigem Löss zu den Zeitpunkten $t^* = 1 \hat{=} t = 15$ min (a), $t^* = 20 \hat{=} t = 304.7$ min $= 5.0$ h (b), $t^* = 40 \hat{=} t = 609.3$ min $= 10.1$ h (c) und $t^* = 80 \hat{=} t = 1218.6$ min $= 20.3$ h (d) mit einer Sättigung $S = 0.7$ zum Zeitpunkt $t = 0$ und $p_0 = -1$ . Die Kurven zeigen die relativen Sättigungen als Funktion der Tiefe im Boden an (siehe (e)). . . . .	75

- 6.4 Simulation der Wasseraufnahme in einem Boden aus schluffigem Löss zu den Zeitpunkten  $t^* = 1 \hat{=} t = 12.9 \text{ min}$  (a),  $t^* = 20 \hat{=} t = 257.2 \text{ min} = 4.3 \text{ h}$  (b),  $t^* = 40 \hat{=} t = 514.5 \text{ min} = 8.6 \text{ h}$  (c) und  $t^* = 80 \hat{=} t = 1029 \text{ min} = 17.1 \text{ h}$  (d) mit einer Sättigung  $S = 0.7$  zum Zeitpunkt  $t = 0$  und  $p_0 = -1$ . Die Kurven zeigen die relativen Sättigungen als Funktion der Tiefe im Boden an (siehe (e)). . . . . 76
- 6.5 Simulation der Wasseraufnahme in einem Boden aus *Guelph* Lehm in trockenem Zustand zu den Zeitpunkten  $t^* = 1 \hat{=} t = 16.9 \text{ min}$  (a),  $t^* = 20 \hat{=} t = 337.8 \text{ min} = 5.6 \text{ h}$  (b),  $t^* = 40 \hat{=} t = 675.6 \text{ min} = 11.3 \text{ h}$  (c) und  $t^* = 80 \hat{=} t = 1351.2 \text{ min} = 22.5 \text{ h}$  (d) mit einer Sättigung  $S = 0.7$  zum Zeitpunkt  $t = 0$  und  $p_0 = -1$ . Die Kurven zeigen die relativen Sättigungen als Funktion der Tiefe im Boden an (siehe (e)). . . . . 77
- 6.6 Simulation der Wasseraufnahme in einem Boden aus *Guelph* Lehm in nassem Zustand zu den Zeitpunkten  $t^* = 1 \hat{=} t = 14.1 \text{ min}$  (a),  $t^* = 20 \hat{=} t = 281.9 \text{ min} = 4.7 \text{ h}$  (b),  $t^* = 40 \hat{=} t = 563.9 \text{ min} = 9.4 \text{ h}$  (c) und  $t^* = 80 \hat{=} t = 1127.7 \text{ min} = 18.8 \text{ h}$  (d) mit einer Sättigung  $S = 0.7$  zum Zeitpunkt  $t = 0$  und  $p_0 = -1$ . Die Kurven zeigen die relativen Sättigungen als Funktion der Tiefe im Boden an (siehe (e)). . . . . 78
- 6.7 Simulation der Wasseraufnahme in einem Boden aus *Beit Netofa* Klei zu den Zeitpunkten  $t^* = 1 \hat{=} t = 14.5 \text{ min}$  (a),  $t^* = 20 \hat{=} t = 289.7 \text{ min} = 4.8 \text{ h}$  (b),  $t^* = 40 \hat{=} t = 579.4 \text{ min} = 9.6 \text{ h}$  (c) und  $t^* = 80 \hat{=} t = 1158.9 \text{ min} = 19.3 \text{ h}$  (d) mit einer Sättigung  $S = 0.7$  zum Zeitpunkt  $t = 0$  und  $p_0 = -1$ . Die Kurven zeigen die relativen Sättigungen als Funktion der Tiefe im Boden an (siehe (e)). . . . . 79
- 6.8 Simulation der Wasseraufnahme in einem Boden aus schluffigem Löss zu den Zeitpunkten  $t^* = 1 \hat{=} t = 14.5 \text{ min}$  (a),  $t^* = 20 \hat{=} t = 289.7 \text{ min} = 4.8 \text{ h}$  (b),  $t^* = 40 \hat{=} t = 579.4 \text{ min} = 9.6 \text{ h}$  (c) und  $t^* = 80 \hat{=} t = 1158.9 \text{ min} = 19.3 \text{ h}$  (d) mit einer Sättigung  $S = 0.7$  zum Zeitpunkt  $t = 0$  und  $p_0 = 0$ . Die Kurven zeigen die relativen Sättigungen als Funktion der Tiefe im Boden an (siehe (e)). . . . . 80
- 6.9 Simulation der Wasseraufnahme in einem Boden aus *Beit Netofa* Klei zu den Zeitpunkten  $t^* = 50 \hat{=} t = 72.4 \text{ min}$  (a),  $t^* = 100 \hat{=} t = 144.9 \text{ min} = 2.4 \text{ h}$  (b),  $t^* = 150 \hat{=} t = 217.3 \text{ min} = 3.6 \text{ h}$  (c) und  $t^* = 200 \hat{=} t = 289.7 \text{ min} = 4.8 \text{ h}$  (d) mit einer Sättigung  $S = 0.4$  zum Zeitpunkt  $t = 0$  und  $p_0 = -1$ . Die Kurven zeigen die relativen Sättigungen als Funktion der Tiefe im Boden an: (siehe (e)). . . . . 81

- 6.10 Simulation der Wasseraufnahme in einem Boden aus *Beit Netofa* Klei zu den Zeitpunkten  $t^* = 1 \hat{=} t = 14.5 \text{ min}$  (a),  $t^* = 20 \hat{=} t = 289.7 \text{ min} = 4.8 \text{ h}$  (b),  $t^* = 40 \hat{=} t = 579.4 \text{ min} = 9.6 \text{ h}$  (c) und  $t^* = 80 \hat{=} t = 1158.9 \text{ min} = 19.3 \text{ h}$  (d) mit einer Sättigung  $S = 0.7$  zum Zeitpunkt  $t = 0$  und  $p_0 = -1$ . Die Kurven zeigen die relativen Sättigungen als Funktion der Tiefe im Boden an: Grafik (e) bezieht sich auf den Teil mit Evaporation, Grafik (f) bezieht sich auf den Teil, wo kein Einfluss von außen vorhanden ist. . . . 82
- 6.11 Simulation der Wasseraufnahme in einem Boden aus *Beit Netofa* Klei zu den Zeitpunkten  $t = 0 \text{ min}$  (a),  $t = 1 \text{ min}$  (b),  $t = 2 \text{ min}$  (c) und  $t = 3 \text{ min}$  (d) mit einer Sättigung  $S = 0.7$  zum Zeitpunkt  $t = 0$  und  $p_0 = -1$ . Die Kurven zeigen die relativen Sättigungen als Funktion der Tiefe im Boden an (siehe (e)). . . . . 83

---

# Tabellenverzeichnis

---

5.1	Werte für Bodenparameter [Van Genuchten, 1980]. . . . .	57
5.2	Sonstige typische Parameter [Roose et al., 2004]. . . . .	58
5.3	Spezifische Wurzelparameter [Roose et al., 2004]. $a$ ist der Wurzelradius; $d_E$ ist der Durchmesser und $n_E$ ist die Anzahl der frühen Metaxylem Röhren; $d_L$ ist der Durchmesser und $n_L$ ist die Anzahl der späten Metaxylem Röhren; $k_{z,i}[E]$ ist der Durchlässigkeitsbeiwert, unter der Voraussetzung, dass nur die frühen Metaxylem Röhren funktionieren; $k_{z,i}[E]$ ist der Durchlässigkeitsbeiwert, unter der Voraussetzung, dass sowohl die frühen als auch die späten Metaxylem Röhren funktionieren.	58
6.1	Umrechnungsfaktoren zwischen dem dimensionalen Modell und dem nichtdimensionalen Modell. . . . .	73