

Tagungsbeitrag zu: Jahrestagung der
DBG – Kom. I
Titel der Tagung: Böden verstehen
Böden nutzen Bö-
den fit machen
Veranstalter: DBG, September
2011, Berlin
Berichte der DBG (nicht begutachtete
online Publikation)
<http://www.dbges.de>

Inverse Modellierung des Wasserflusses unter Berücksichtigung dynamischen Ungleichgewichts mit ei- nem effektiven Dual-Kontinuum-Modell

Wolfgang Durner¹, Efstathios
Diamantopoulos¹, Sascha C. Iden¹

Zusammenfassung

Der übliche Richards-Ansatz zur Modellierung des Wassertransports in porösen Medien beruht auf der Annahme lokalen Gleichgewichts zwischen den Statusgrößen Wassergehalt und Wasserspannung innerhalb eines repräsentativen Elementarvolumens. In diesem Ansatz werden die Retentionskurve und die Leitfähigkeitskurve als statische konstitutive Beziehungen gemessen und verwendet, um Wasserflüsse auf größeren Skalen zu modellieren. Experimente unter dynamischen Randbedingungen haben jedoch gezeigt, dass die lokale Gleichgewichtsannahme selbst auf der Laborskala oft nicht zutrifft. Um die damit verbundene Phänomene zu beschreiben werden die Ausdrücke „dynamische Effekte“ oder „dynamisches Ungleichgewicht“ benutzt. In diesem Beitrag wird ein einfaches Ungleichgewichtsmodell vorgestellt, das den Boden als duales Kontinuum abbildet. In einem der Teilbereiche wird der Wasserfluss über die normale Richards-Gleichung abgebildet, in dem zweiten über eine erweiterte Richards-Gleichung, welche den Ungleichgewichts-Ansatz von Ross und Smettem verwendet. Das vorgeschlagene Modell wird über inverse Modellierung an Daten von Multistep-Ausfluss-Experimenten getestet. Hierbei wird eine flexible Parametrisierung der konstitutiven Beziehungen verwendet, sodass interferierende

Fehler durch mangelnde Flexibilität der hydraulischen Eigenschaften ausgeschlossen werden können. Die ersten Ergebnisse sind vielversprechend und zeigen, dass das neue Modell die Messungen sehr viel besser beschreiben kann, als dies mit dem Standard-Richards-Modell oder dem Ross-Smettem-Modell allein möglich ist.

Schlüsselwörter:

Multistep-Ausfluss-Experimente, Dynamische Effekte, Dynamisches Ungleichgewicht,

Einleitung

Die Modellierung von Umweltsystemen wird heutzutage routinemäßig als Standardmethode für die Forschung und Entscheidungsfindung verwendet. Die übliche Richards-Gleichung ist das Standardmodell um den variabel gesättigten Wasserfluss im Boden zu simulieren. Der Vergleich von Daten aus dynamischen Ausflussexperimenten mit Daten aus hydrostatischen Gleichgewichtsexperimenten hat gezeigt, dass in einem dynamischen Experiment im Vergleich zu einem hydrostatischen oder steady-state Experiment mehr Wasser bei einer bestimmten Druckhöhe in der Bodenmatrix gespeichert wird. In dieser Arbeit wird der beobachtete Ungleichgewichts-Wasserfluss in Multistep-Ausfluss-Experimenten (MSO) untersucht und durch inverse numerische Simulationen ausgewertet. Ein neues makroskopisches Zwei-Fraktionen-Modell wird vorgestellt, in dem der Wasserfluss in einer Fraktion mit der Richards-Gleichung beschrieben wird und in der anderen durch den Ansatz von Ross und Smettem (2000).

Material und Methoden

Das neue Modell geht davon aus, dass es zwei Fraktionen von Wasser in einem porösen System gibt. Eine Fraktion ist im Gleichgewicht mit der lokalen Druckhöhe, in der anderen Fraktion ist die Gleichgewichtseinstellung des Wassergehaltes zeitabhängig. Nach Gerke und van Genuchten (1993) wird der Wassertransport für die beiden Fraktionen mit zwei Richards-Typ Gleichungen beschrieben:

$$\frac{\partial \theta_{eq}}{\partial t} = \frac{\partial}{\partial z} \left[K(h_{eq}) \left(\frac{\partial h_{eq}}{\partial z} - 1 \right) \right] - \frac{\Gamma_w}{1 - f_{ne}} \quad (1)$$

$$\frac{\partial \theta_{ne}}{\partial t} = \frac{\partial}{\partial z} \left[K(h_{ne}) \left(\frac{\partial h_{ne}}{\partial z} - 1 \right) \right] + \frac{\Gamma_w}{f_{ne}}, \quad (2)$$

in denen die Druckhöhe und der Wassergehalt für jede Fraktion als h_{eq} und h_{ne} , beziehungsweise θ_{eq} und θ_{ne} , bezeichnet werden. Γ_w ist der Wasser-austausch-koeffizient [T^{-1}], und f_{ne} ist ein volumetrischer Gewichtungsfaktor für die Ungleichgewichts-Wasser-Fraktion, gegeben durch $f_{ne} = \theta_{ne} / (\theta_{ne} + \theta_{eq})$. Unter der Annahme, dass die Druckhöhen in den beiden Regionen in einer gegebenen Tiefe immer relativ schnell ausgeglichen werden, können wir die Gleichungen (1) und (2) zu einer einzigen Fluss-Gleichung umformulieren:

$$(1 - f_{ne}) \frac{\partial \theta_{eq}}{\partial t} + f_{ne} \frac{\partial \theta_{ne}}{\partial t} = \frac{\partial}{\partial z} \left[K(h) \left(\frac{\partial h}{\partial z} - 1 \right) \right]$$

$$\text{mit } \frac{\partial \theta_{ne}}{\partial t} = \frac{(\theta_{eq} - \theta_{ne})}{\tau} \quad (3)$$

τ ist der Ungleichgewichtsparameter. Er stellt eine Zeitskala für die makroskopische Gleichgewichtseinstellung der Wassergehalte dar.

Um die hydraulischen Eigenschaften des Bodens in mathematischer Form zu beschreiben, haben wir das van Genuchten-Mualem (VGM) Modell (van Genuchten, 1980) und das FreeForm (FF) Modell (Iden und Durner, 2007) benutzt. Für die inversen Simulationen wurde der SCE-UA Algorithmus (Duan et al., 1993) benutzt.

Das vorgeschlagene Ungleichgewichts-Modell wurde mit experimentellen Daten von zwei Bodenproben von 7.2 cm Höhe und 9.4 cm Innendurchmesser getestet. Die erste Probe (L1) war eine ungestörte Bodensäule aus Lehm. Die Bodensäule stand auf einer 0.7 cm dicken porösen Platte auf der eine feinporige Membran lag. Die Membran verhindert den Lufteintritt beim Absenken der Druckhöhe während des MSO-Experimentes unter den Luft-Eintrittsdruck der porösen Platte. Die zweite Probe (S1) bestand aus einem

gepackten sandigen Boden auf einer 0.7 cm dicken porösen Platte.

Als Experimenttyp haben wir den XMSO Versuch (Durner und Iden, 2011) benutzt. Für den S1 Boden waren die Druckstufen am unteren Rand unter der porösen Platte: 9,2, 0, -5, -10, -15, -20, -25, -30 und -35 cm, für den L1 Boden 10,6, 0, -10, -20, -30, -40, -60, -80 und -100 cm. Durch ein Tensiometer (T5, UMS München) wurde die Druckhöhe in beiden Bodensäulen in 1,8 cm Tiefe gemessen. Die Experimente wurden mit der Richards-Gleichung, mit dem Ross und Smettem (2000) Modell und mit dem neuen Modell invers simuliert. Dabei haben wir die gemessene gesättigte Leitfähigkeit festgesetzt, die übrigen Parameter der hydraulischen Eigenschaften wurden geschätzt. Die Werte der gesättigten hydraulischen Leitfähigkeit für die poröse Platte (Boden S1), für das Platten-Membran System (Boden L1) und für die beiden Böden sind in Tabelle 1 angegeben.

Tab. 1: Gemessene Lagerungsdichte (ρ), Porosität (ϕ), gesättigter Wassergehalt (θ_s), gesättigte hydraulische Leitfähigkeit für die poröse Platte (Boden S1), für das Platten-Membran System (Boden L1) (K_p) und für die beiden Böden (K_s).

Sample	ρ	ϕ	θ_s	K_p	K_s
	g cm ⁻³	cm ³ cm ⁻³	cm ³ cm ⁻³	cm h ⁻¹	cm h ⁻¹
S1	1.69	0.362	0.298	3.9	30.1
L1	1.67	0.371	0.334	1.0	2.7

Ergebnisse

Abbildung 1 zeigt die gemessenen und simulierten Ausflüsse und Druckhöhen für Probe S1. Die Fittings mit der Richards-Gleichung, mit dem Ross und Smettem (2000) Modell und mit dem neuen Dual-Modell werden verglichen. Für die dargestellten Simulationen haben wir das VGM-Modell benutzt. Die Fittings mit dem FF-Modell (nicht dargestellt) waren fast identisch mit dem VGM Fitting, was darauf hinweist, dass für diesen Boden die VGM Parametrisierung völlig ausreichend ist.

Abbildung 1 zeigt, dass nach jeder Druckstufe eine schnelle Gleichgewichtseinstellung der Druckhöhe in der Bodensäule stattfindet. Für den Wasserfluss kann man zwei Phasen unterscheiden. In der ersten Phase fließt Wasser schnell aus der Bodensäule direkt nach jeder Druckstufe. In der zweiten Phase ist der Wasserfluss langsamer.

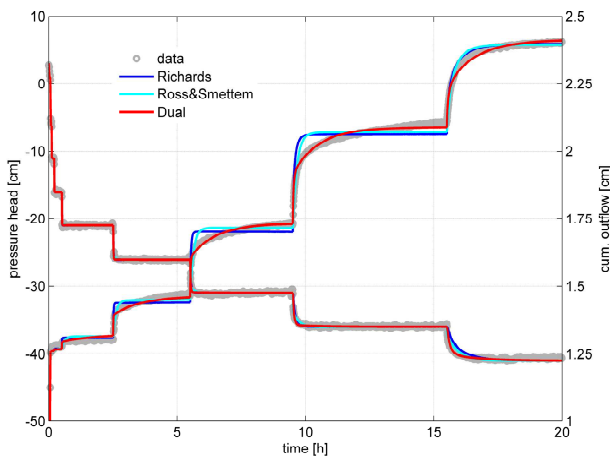


Abbildung 1. Beobachtete und simulierte kumulative Ausflüsse und Druckhöhen für Probe S1. K_s und θ_s wurden auf 30.1 cm h^{-1} und $0.298 \text{ cm}^3 \text{ cm}^{-3}$ festgesetzt.

Durch den Vergleich der experimentellen und geschätzten Ausflusskurven wird klar, dass die Richards-Gleichung die Messdaten nicht adäquat beschreiben kann. Die Abweichungen lassen sich nicht durch eine unangemessene Form der Wassergehalts- und Leitfähigkeitskurven erklären, weil das FF Fitting fast identisch mit dem Fitting des VGM Modells war. Das Fitting wird mit dem Ross und Smettem (2000) Ungleichgewichtsmodell nur geringfügig besser gegenüber dem Gleichgewichtsmodell, insbesondere für die Ausflusssdaten. Der Grund dafür liegt darin, dass beim Ross und Smettem (2000) Modell die Gleichgewichtseinstellung des Wassergehaltes durch eine Dynamik in Form einer Exponentialfunktion beschrieben wird.

Die in den Experimenten beobachtete Ausflussdynamik ist jedoch systematisch anders. Dies führt zu einem systematischen Misfit des Ross und Smettem (2000) Modells: einem zu langsam simulierten Ausfluss in der frühen Phase und einer zu

hohen simulierten Ausflussrate in der Spätphase (verglichen mit den experimentellen Daten). Im Gegensatz dazu beschreibt das neue Modell die experimentellen Daten sehr gut. Es benötigt gegenüber dem Ross und Smettem (2000) Modell einen zusätzlichen Parameter, gegenüber der Richards-Gleichung zwei zusätzliche Parameter. Der Ungleichgewichtsparameter τ des neuen Modells ist invers präzise bestimmbar und liegt bei $\tau = 1,02 \pm 0,03 \text{ h}$ und $f_{ne} = 0,43 \pm 0,01$ für das VGM Modell für den Boden S1.

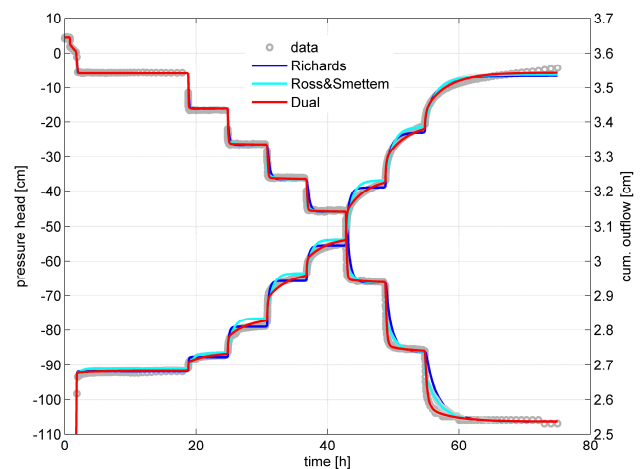


Abbildung 2. Beobachtete und simulierte kumulative Ausflüsse und Druckhöhen für Probe L1. K_s und θ_s wurden auf 2.7 cm h^{-1} und $0.334 \text{ cm}^3 \text{ cm}^{-3}$ festgesetzt.

Abbildung 2 zeigt die experimentellen und numerischen (inverse Simulation) Ergebnisse für den Boden L1 in analoger Weise wie die Abbildung 1 für den Boden S1. Im Gegensatz zu dem Boden S1 ist das zugrunde liegende Modell für die hydraulischen Funktionen das FF Modell. Das war notwendig, weil der L1 Boden unmittelbar nach der ersten Druckstufe (von 0 auf -10 cm) Wasser abgegeben hat, und somit die Retentionskurve nicht gut mit dem VGM-Modell beschrieben werden konnte. In diesem feinkörnigeren Boden ist die beobachtete Gleichgewichtseinstellung des kumulierten Ausflusses viel langsamer als die der Druckhöhe. Für die dritte Druckstufe ($30,8 \text{ h} < t < 36,8 \text{ h}$) erreicht z.B. die Druckhöhe das Gleichgewicht bei $t = 31,4 \text{ h}$, während die Bodensäule weiterhin Wasser abgibt. Am Ende der

Druckstufe, nach 5,4 Stunden, gab die Bodensäule immer noch Wasser ab und war noch nicht im Gleichgewicht. Simulationen mit der Richards-Gleichung und mit dem Ross und Smettem (2000) Modell konnten diese Beobachtung nicht nachvollziehen, allerdings ergab das Ross und Smettem (2000) Modell eine deutlich bessere Beschreibung zumindest der gemessenen Matrixpotentiale. Das neue Modell beschreibt sowohl die kumulativen Ausflüsse als auch die beobachteten Druckhöhen sehr gut. Dies gilt für die schnelle Gleichgewichtseinstellung bei der Druckhöhe, die schnelle Ausflussphase, die nach jeder Änderung der Druckhöhe auftritt, und die folgende Phase mit langsamerem Ausfluss. Die Parameter wurden auf $\tau = 3,1 \pm 0,4$ h für die Ungleichgewichts-Parameter und $f_{ne} = 0,51 \pm 0,02$ für die Ungleichgewichts-Fraktion mit einer sehr geringen Parameterkorrelation von $r = -0.15$ geschätzt.

Fazit und Ausblick

Wir haben ein neues makroskopisches Dual Porositäts Modell vorgestellt, das Ungleichgewichtswasserfluss beschreiben kann. Das Modell berücksichtigt zwei Fraktionen des Bodenwassers auf der makroskopischen Skala: eine Fraktion wird durch die Richards-Gleichung beschrieben und die zweite Fraktion durch das Ross und Smettem (2000) Modell. Zwischen den beiden Fraktionen wird eine sehr schnelle Gleichgewichtseinstellung der Druckhöhe angenommen. Das vorgeschlagene Modell braucht zwei Parameter mehr als die Richards-Gleichung. Ein Parameter beschreibt die Anteile der Fraktionen, an denen es lokale Ungleichgewichte zwischen Wassergehalt und Druckhöhe gibt, und der zweite Parameter quantifiziert die Gleichgewichtseinstellungskinetik in dieser Region nach dem Ungleichgewichtsansatz von Ross und Smettem (2000). Das neue Modell wurde für zwei reale Böden getestet und zeigte eine sehr gute Übereinstimmung mit den experimentellen Daten.

Dank

Wir danken Henrike Schelle für die Überlassung experimenteller Daten, Birgit Wal-

ter für die Durchführung von Messungen, und der Niedersächsisch-Technischen Hochschule (NTH) für die Finanzierung des Projektes.

Literatur

- Duan, Q. Y., Gupta, V. K., und Sorooshian, S., 1993: Shuffled Complex Evolution Approach for Effective and Efficient Global Minimization, *J. Optimization Theory Application*, 76: 501-521.
- Durner, W. und Iden, S.C., 2011: Extended multistep outflow method for the accurate determination of soil hydraulic properties near water saturation. *Water Resour. Res.*, 47: W08526.
- Gerke, H. H. und van Genuchten, M.T., 1993: A dual-porosity model for simulating the preferential movement of water and solutes in structured porous media. *Water Resour. Res.*, 29: 305-319
- Iden, S. und Durner, W. 2007: Free-Form estimation of the unsaturated soil hydraulic properties by inverse modeling using global optimization. *Water Resour. Res.* 43: W07451.
- Ross, P. J. und Smettem, K.R.J. 2000: A simple treatment of physical nonequilibrium water flow in soils. *Soil Sci. Soc. Am. J.*, 64: 1926-1930.
- van Genuchten, M. T., 1980: A closed-form equation for predicting the hydraulic conductivity of unsaturated soils. *Soil Sci. Soc. Am. J.* 44:892-898.