

Inverse Modellierung des Wasserflusses mit Wurzelwasseraufnahme in Großlysimetern

Henrike Schelle^{1*}, Sascha C. Iden¹, Johann Fank² und Wolfgang Durner¹

Zusammenfassung

Die genaue Kenntnis der bodenhydraulischen Eigenschaften ist für die Simulation des Wasser- und Stofftransports in ungesättigten Böden unabdingbar. In heterogenen Medien und unter atmosphärischen Randbedingungen erfolgt die Bestimmung effektiver hydraulischer Funktionen idealerweise durch inverse Simulation. Um hierfür möglichst genaue und vollständige Informationen über die Randbedingungen zu erhalten, eignen sich wägbare Lysimeter, besonders wenn sie zusätzlich mit leistungsfähigen Messgeräten ausgestattet sind. Die inverse Simulation ermöglicht die Korrektheit und Grenzen der Prozessbeschreibung und Parametrisierung bodenhydrologischer Modelle kritisch zu prüfen. Unter Verwendung der natürlichen Randbedingungen wie sie am Gras-Referenz-Lysimeter auf der Lysimeterstation in Wagna (Steiermark) gemessen wurden, wurden synthetische Messdaten für verschiedene Szenarien generiert, um zu untersuchen, ob es möglich ist bodenhydraulische Eigenschaften und Wurzelwasseraufnahmeparameter durch inverse Simulation gleichzeitig zu bestimmen. Der Beitrag behandelt die Fragestellungen, ob effektive hydraulische Funktionen existieren, wie groß ihre Unsicherheiten sind und wie sich diese Unsicherheiten auf die Unsicherheiten der Modellvorhersagen auswirken. Zudem werden die effektiven bodenhydraulischen Eigenschaften des Bodenmonoliths im Gras-Referenz-Lysimeter in Wagna anhand der dort gemessenen Daten bestimmt.

Schlagwörter: Bodenhydraulische Eigenschaften, Parameterschätzung, effektive Eigenschaften, Unsicherheitsanalyse

Summary

The exact knowledge of soil hydraulic properties is essential for the simulation of water and solute transport in unsaturated soils. For the identification of effective soil hydraulic properties in heterogeneous media and under atmospheric boundary conditions the inverse simulation is the most suitable tool. To obtain accurate and complete information about the boundary conditions, weighable lysimeters, ideally equipped with soil hydraulic measurement devices, are the optimal device. Inverse simulation allows examining critically the adequacy and the limits of the process description and the parameterization of the soil hydraulic models. We generated synthetic data for different scenarios using the boundary conditions measured at the grass-reference lysimeter on the lysimeter station in Wagna (Styria) to analyze the feasibility of the simultaneous estimation of soil hydraulic properties and root water uptake parameters by inverse modelling. Problems treated in this work are the existence of effective soil hydraulic functions, the magnitude of their uncertainties, and the propagation of these uncertainties into the model predictions. Finally, the effective soil hydraulic properties of the lysimeter monolith in the grass-reference lysimeter in Wagna are estimated using the actually measured data.

Keywords: Soil hydraulic properties, parameter estimation, effective properties, uncertainty analysis

Einleitung

Zur Beschreibung von Wasser- und Stofftransportprozessen in der ungesättigten Bodenzone werden häufig numerische Modelle eingesetzt. Hierfür ist eine genaue Kenntnis der bodenhydraulischen Eigenschaften unerlässlich. Um diese unter möglichst realistischen Bedingungen zu untersuchen eignen sich wägbare Lysimeter, in denen die atmosphärischen Randbedingungen und Sickerwasserflüsse genau bestimmt werden können. Häufig werden zusätzlich Messsonden installiert, um den Wasserstatus im Boden zu untersuchen. Durch inverse Simulation lassen sich aus diesen Daten die hydraulischen Eigenschaften des Bodenmonoliths

im Lysimeter bestimmen. In bewachsenen Böden stellen die Parametrisierung der Wurzeln und die Simulation der Wurzelwasseraufnahme zusätzliche Herausforderungen dar.

In diesem Beitrag soll untersucht werden, ob und unter welchen Umständen es möglich ist, unter atmosphärischen Randbedingungen bodenhydraulische Eigenschaften durch inverse Simulation korrekt zu bestimmen, und gleichzeitig Parameter für die Wurzelwasseraufnahme zu schätzen. Weiterhin soll die Existenz effektiver bodenhydraulischer Eigenschaften für geschichtete Profile untersucht werden. Durch Simulation von Szenarien wurden synthetische Messdaten unter Nutzung der am Standort Wagna (Steiermark)

¹ Abt. Bodenphysik, Institut für Geoökologie, TU Braunschweig, Langer Kamp 19c, D-38106 BRAUNSCHWEIG

² Joanneum Research, Institut für Wasser, Energie und Nachhaltigkeit, Wasser Ressourcen Management, Elisabethstraße 16/2, A-8010 GRAZ

* Ansprechpartner: Dipl.-Geoökol. Henrike Schelle, h.schelle@tu-bs.de

gemessenen Klimadaten erzeugt. Die synthetischen Daten bildeten die Grundlage für die inverse Parameterschätzung. Der Vorteil der Verwendung synthetischer Daten ist, dass alle auftretenden Prozesse bekannt sind und die Identifizierbarkeit der Modellparameter analysiert werden kann. Anschließend wurden basierend auf den so gewonnenen Erkenntnissen aus den realen Messdaten die hydraulischen Eigenschaften des Lysimeters in Wagna durch inverse Simulation bestimmt.

Material und Methoden

Synthetische Messdaten

Mit HYDRUS-1D (ŠIMUNEK et al. 2008) wurde die Wasserdynamik in Bodenprofilen simuliert. Es wurden verschiedene Szenarien mit atmosphärischen Randbedingungen gerechnet, um synthetische Messdaten über die Wasserdynamik in den Bodenprofilen zu erzeugen. Anhand dieser synthetischen Messdaten wurde untersucht, ob es möglich ist, die korrekten bodenhydraulischen Eigenschaften, die in den Vorwärtssimulationen verwendet wurden, durch inverse Simulation zu bestimmen, und ob gleichzeitig Parameter der vertikalen Wurzelverteilung geschätzt werden können. Die Geometrie sowie die Randbedingungen wurden dabei in Anlehnung an das Gras-Referenz-Lysimeter in Wagna festgelegt, da am Ende die hydraulischen Eigenschaften dieses Bodenmonolithen anhand der dort gemessenen Daten bestimmt werden sollten.

Zunächst wurden Vorsimulationen für 300 cm lange Profile über eine Dauer von 31 Monaten durchgeführt, um realistische Anfangs- und Randbedingungen zu erzeugen. Als atmosphärische Randbedingung am oberen Rand wurden am Standort Wagna gemessene tägliche Klimadaten (01.06.2006 - 31.12.2008) verwendet. Als untere Randbedingung wurde ein freier Auslauf des Wassers gewählt. Als Anfangsbedingung für die Vorsimulationen diente ein homogenes Matrixpotenzial von -100 hPa im gesamten Profil. Anschließend wurden die Simulationen für 90 cm lange Profile und einen einjährigen Zeitraum (01.01. - 31.12.2008) wiederholt, wobei nun mit einem variablen Matrixpotenzial als Randbedingung am unteren Rand gearbeitet wurde. Werte hierfür ergaben sich aus der zugehörigen Vorsimulation, ebenso wie die Anfangsverteilung des Matrixpotenzials im Profil. Als synthetische Messdaten wurden tägliche Daten des kumulativen Ausflusses am unteren Rand, über das gesamte Profil gemittelte Wassergehalte sowie in einigen Fällen Matrixpotenziale in 10 und 50 cm Tiefe verwendet. Die profilgemittelten Wassergehalte repräsentierten indirekt die korrekte Bestimmung der Summe aus tatsächlicher Evaporation und Transpiration, und ergaben sich aus der Wasserbilanz. Die simulierten Daten wurden

mit einem normalverteilten Fehler mit Erwartungswert Null und Standardabweichung σ versehen, die der typischen Standardabweichung des Messfehlers der verwendeten Messgeräte entsprach (0,01 cm für den kumulativen Ausfluss, $1,11 \cdot 10^{-4}$ für den mittleren Wassergehalt und 1 cm für das Matrixpotenzial). Unbewachsene sowie mit Gras bewachsene Bodenprofile, in denen Wurzelwasseraufnahme als Senktermer berücksichtigt wurde, wurden simuliert. Bei der Wurzelwasseraufnahme wurde die Wasserstressfunktion von FEDDES et al. (1978) berücksichtigt. Die relative Wurzelverteilung wurde als konstant bis in 20 cm Tiefe, dann linear abnehmend bis in 50 cm Tiefe festgesetzt (Abbildung 1).

Simuliert wurden homogene Böden für zwei verschiedene Lehme (Lehm I und Lehm II) sowie Profile mit zwei Schichten (20 cm Lehm I über Sand, dies ist angelehnt an das Material, das in dem Wagna-Lysimeter vorliegt). Die hydraulischen Eigenschaften für den Lehm I und den Sand wurden mit dem van Genuchten-Mualem-Modell (VGM, VAN GENUCHTEN 1980) parametrisiert. Dabei ergaben sich die Parameter für den Lehm I aus der Datenbank in HYDRUS-1D für Lehm (CARSEL und PARRISH 1988). Diejenigen für den Sand wurden durch die Pedotransferfunktion ROSETTA LITE, Version 1.1 (SCHAAP et al. 2001), die ebenfalls in HYDRUS-1D implementiert ist, aus Messungen der Textur und der Lagerungsdichte des Unterbodens (20-50 cm Tiefe) in Wagna bestimmt. Für die gesättigte hydraulische Leitfähigkeit des Sandes wurde der an Bodensäulen im Labor gemessene Wert verwendet. Der Lehm II-Boden wurde mit dem bimodalen van Genuchten-Mualem Modell (DURNER 1994), erweitert um einen Lufteintrittspunkt (VOGEL et al. 2001), parametrisiert. Dieses Modell wurde verwendet, um die hydraulischen Eigenschaften von ungestört gelagerten Böden realitätsnäher abbilden zu können

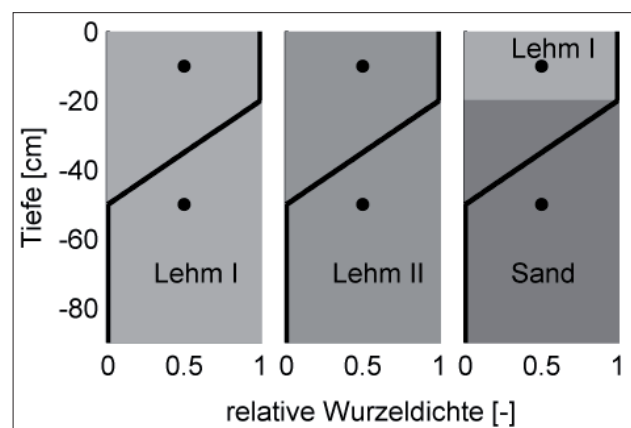


Abbildung 1: Profile der synthetischen Simulationen; Linien: relative Wurzel-dichte; Punkte: Position der Tensiometer zur Matrixpotenzialmessung.

Tabelle 1: In den Vorwärtssimulationen verwendete Parameter des unimodalen und des bimodalen, erweiterten van Genuchten-Mualem-Modells.

	θ_r	θ_s	α [1/cm]	n	K_s [cm/d]	τ	ω_2	α_2	n_2	h_s
Sand	0.049	0.394	0.0356	1.942	1369.56	0.5				
Lehm I	0.078	0.430	0.0360	1.560	24.96	0.5				
Lehm II	0.040	0.400	0.1300	1.600	20.00	0.5	0.6	0.009	1.54	-2.0

als dies mit dem VGM Modell erfolgen könnte. Die in den Vorwärtssimulationen verwendeten Parameterwerte sind in *Tabelle 1* angegeben. Die verwendeten Bodenprofile sind schematisch in *Abbildung 1* dargestellt.

Reale Messdaten

Im Juni 2006 wurde an der Lysimeterstation in Wagna ein wägbares Gras-Referenz-Lysimeter eingerichtet (Oberfläche: 1 m², Tiefe: 1 m). Es dient zusammen mit einer direkt daneben aufgebauten Klimastation zur Bestimmung der Wasserbilanz. Neben dem Gewicht des Lysimeters wird das Sickerwasser in zeitlich hoher Auflösung gemessen, Niederschlag und Evapotranspiration können aus der Gewichtsänderung des Lysimeters berechnet werden. In 90 cm Tiefe wird am Lysimeter ein Matrixpotenzial angelegt wie es in gleicher Tiefe im Boden unmittelbar neben dem Lysimeter gemessen wird, dadurch werden die repräsentativen hydraulischen Bedingungen im Lysimeter nachgestellt. Der ungestörte Bodenmonolith im Lysimeter ist geschichtet und besteht aus einem lehmigen Oberboden (ca. 20 cm mächtig, sL) und einem sandigen, stark skeletthaltigen Unterboden (IS). Simuliert wurden die Jahre 2007 und 2008, wobei ein Jahr als Vorlaufzeit diente, um realistische Anfangsbedingungen zu erhalten. Dass dieser Zeitraum ausreicht, wurde in einer Sensitivitätsstudie festgestellt. In der Zielfunktion für die inverse Simulation wurden die Messdaten, d.h. kumulativer Ausfluss am unteren Rand sowie Änderungen des profilgemittelten Wassergehalts aus dem Jahr 2008 verwendet. Da der Wassergehalt im Profil zu Beginn 2008 nicht bekannt war, wurde dieser in jedem Durchlauf der inversen Simulation neu berechnet und davon ausgehend die Wassergehaltsänderungen in den negativen bzw. positiven Bereich berechnet. Über die Durchwurzelung des Lysimeters sind keine genauen Informationen vorhanden. Die vertikale Wurzelverteilung wurde als zeitlich konstant und analog zu den synthetischen Simulationen angenommen (*Abbildung 1*). Die Aufteilung der aus der Wasserbilanz bestimmten Evapotranspiration in Evaporation und Transpiration wurde durch Verwendung des „Dual Crop Coefficient“-Verfahrens (ALLEN et al. 1998) realisiert. Für das heterogene Profil des Lysimeters wurden sowohl effektive Parameter (Annahme eines homogenen Profils) als auch Parameter für beide Schichten gleichzeitig geschätzt.

Inverse Parameterbestimmung

Die bodenhydraulischen Eigenschaften wurden mit dem VGM Modell bzw. mit frei geformten Funktionen („Free Form“, IDEN und DURNER 2007) parametrisiert. Für die VGM Funktion wurden die Parameter residualer Wassergehalt θ_r , gesättigte Wasserleitfähigkeit K_s sowie die Formparameter α , n und τ geschätzt. Der gesättigte Wassergehalt θ_s wurde festgesetzt. Bei Verwendung der frei geformten Funktionen wurde ebenfalls θ_s festgesetzt, K_s und die Werte von θ und K an diskreten Stützpunkten wurden geschätzt und durch Splines interpoliert. Für die heterogenen Profile wurden sowohl effektive hydraulische Eigenschaften bestimmt als auch die hydraulischen Eigenschaften beider Schichten gleichzeitig geschätzt. Bei der Schätzung der Parametersätze beider Schichten der heterogenen Profile

wurde K_s festgesetzt. In einigen inversen Simulationen wurde die Tiefe, bis in die die relative Wurzelichte konstant ist, gleichzeitig mit den hydraulischen Eigenschaften geschätzt. Die in der Parameteroptimierung zu minimierende Zielfunktion (Summe der gewichteten Abweichungsquadrate, WSSE) enthielt jeweils tägliche Daten der kumulativen Ausflüsse am unteren Rand sowie der profilgemittelten Wassergehalte aus den Vorwärtssimulationen und teilweise zusätzlich tägliche Matrixpotenzialdaten aus zwei Tiefen. Die Gewichtung der verschiedenen Datentypen erfolgte invers zur Varianz der angenommenen Messfehler ($1/\sigma^2$). Zur Parameterschätzung wurde der global konvergente Shuffled Complex Evolution Algorithmus (SCE-UA) verwendet. Zur Quantifizierung der Unsicherheiten und zur Berechnung der 95%-Konfidenzintervalle wurde die „First-order-second-moment“-Methode verwendet. Zudem wurden als Maß für die Güte der Anpassung die „root mean square errors“ (RMSE) für jede Datengruppe in der Zielfunktion berechnet. Wenn der RMSE gleich der Messungenauigkeit ist, ist die Anpassung perfekt.

Ergebnisse

Synthetische Messdaten: Homogene Profile

Die Parameterschätzung mit den synthetischen Daten führte zu für die Praxis sehr nutzbringenden Erkenntnissen. Die Güte der Parameterschätzungen ist für alle Szenarien in *Tabelle 2* zusammengefasst. Die Szenarien werden unterschieden in homogene und heterogene Profile, für die Parameter geschätzt wurden, ob Wurzelwasseraufnahme berücksichtigt wurde, ob ein Wurzeliefenparameter mit geschätzt wurde, und ob Matrixpotenzialmessungen in die Zielfunktion integriert waren.

Für die homogenen Profile, deren hydraulische Eigenschaften in der Vorwärtssimulation mit VGM parametrisiert wurden, konnten die synthetischen Messdaten mit VGM perfekt wiedergegeben, und die wahren hydraulischen Eigenschaften korrekt identifiziert werden (*Tabelle 2*, Szenarien 1 - 6), wie bereits von DURNER et al. (2008) gezeigt wurde. Dies funktionierte sowohl für unbewachsene als auch für bewachsene Böden. Zudem war es möglich, gleichzeitig die Durchwurzelungstiefe korrekt zu bestimmen.

Bei der Schätzung der hydraulischen Funktionen unter Verwendung des Free-Form-Algorithmus (FF) wurden die Daten in der Zielfunktion ebenfalls nahezu perfekt wiedergegeben (Szenarien 7 - 12). Beispielhaft werden in *Abbildung 2* die Ergebnisse der Parameterschätzung mit dem FF-Algorithmus für einen bewachsenen Lehm Boden (Lehm I) gezeigt, bei dem Potenzialmessungen in die Zielfunktionen mit eingingen. Die Verläufe aller Datentypen in der Zielfunktion wurden sehr gut beschrieben, die Residuen zeigen nur sehr geringe systematische Abweichungen. Die wahren hydraulischen Funktionen wurden in dem Matrixpotenzialbereich, in dem ausreichend Information aus den Messdaten vorhanden war (pF 1,2 - 3), korrekt wieder gegeben (*Abbildung 2f* und *2g*). Im feuchten Bereich wird durch die Unsicherheiten sowohl in der Retentionsfunktion als auch in der Leitfähigkeitsfunktion deutlich, dass hier kaum Information in den Messdaten vorhanden war, die hydraulischen

Tabelle 2: Güte der geschätzten hydraulischen Eigenschaften für die Szenarien der synthetischen Daten. Das van Genuchten-Mualem Modell (VGM) und das Free-Form Modell (FF) wurden für die Parametrisierung der hydraulischen Funktionen verwendet. Mittlere quadratische Abweichungen (RMSE) für die verschiedenen Datentypen (kumulativer Ausfluss: Q, profilgemittelter Wassergehalt: θ_m und Matrixpotenzial: h) geben die Güte der Anpassung an.

Szenario	Modell	Wurzeln	WT [‡] geschätzt	Tensiometer	RMSE _Q [*]	RMSE _{θ_m} [*]	RMSE _h [*]	WT [‡] korrekt
homogen, kein Modellfehler bei VGM (Lehm I)								
1	VGM	nein	-	nein	++	++		
2	VGM	ja	nein	nein	++	++		
3	VGM	ja	ja	nein	++	++		+
4	VGM	nein	-	ja	++	++	++	
5	VGM	ja	nein	ja	++	++	+	
6	VGM	ja	ja	ja	++	++	++	+
7	FF	nein	-	nein	++	++		
8	FF	ja	nein	nein	++	+		
9	FF	ja	ja	nein	++	+		+
10	FF	nein	-	ja	++	++	++	
11	FF	ja	nein	ja	++	++	++	
12	FF	ja	ja	ja	++	+	+	+
homogen, Modellfehler bei VGM (Lehm II)								
13	VGM	nein	-	nein	-	-		
14	VGM	ja	nein	nein	-	-		
15	VGM	ja	ja	nein	-	-		+
16	VGM	nein	-	ja	-	-	-	
17	VGM	ja	nein	ja	-	-	-	
18	VGM	ja	ja	ja	-	-	-	-
19	FF	nein	-	nein	++	++		
20	FF	ja	nein	nein	++	++		
21	FF	ja	ja	nein	++	++		+
22	FF	nein	-	ja	++	++	++	
23	FF	ja	nein	ja	++	++	+	
24	FF	ja	ja	ja	++	++	+	+
heterogen, effektive Parameter geschätzt								
25	VGM	nein	-	nein	-	-		
26	VGM	ja	nein	nein	--	--		
27	VGM	ja	ja	nein	--	--		-
28	VGM	nein	-	ja	-	-	--	
29	VGM	ja	nein	ja	--	--	--	
30	VGM	ja	ja	ja	--	--	--	-
31	FF	nein	-	nein	-	-		
32	FF	ja	nein	nein	-	-		
33	FF	ja	ja	nein	-	-		-
34	FF	nein	-	ja	-	-	--	
35	FF	ja	nein	ja	--	--	--	
36	FF	ja	ja	ja	--	--	--	-
heterogen, Parameter von beiden Schichten geschätzt								
37	VGM	nein	-	nein	++	++		
38	VGM	ja	nein	nein	++	++		
39	VGM	ja	ja	nein	++	++		+
40	VGM	nein	-	ja	++	++	++	
41	VGM	ja	nein	ja	++	++	++	
42	VGM	ja	ja	ja	++	++	++	+
43	FF	nein	-	nein	++	++		
44	FF	ja	nein	nein	+	+		
45	FF	ja	ja	nein	-	-		+
46	FF	nein	-	ja	++	++	++	
47	FF	ja	nein	ja	+	+	+	
48	FF	ja	ja	ja	+	+	+	+

* ++: RMSE $\leq 1,5 \sigma$, +: RMSE $\leq 5 \sigma$, -: RMSE $\leq 25 \sigma$, --: RMSE $> 25 \sigma$; † +: Wurzellänge auf 1 cm genau geschätzt, -: größere Abweichung; ‡ Wurzeltiefe

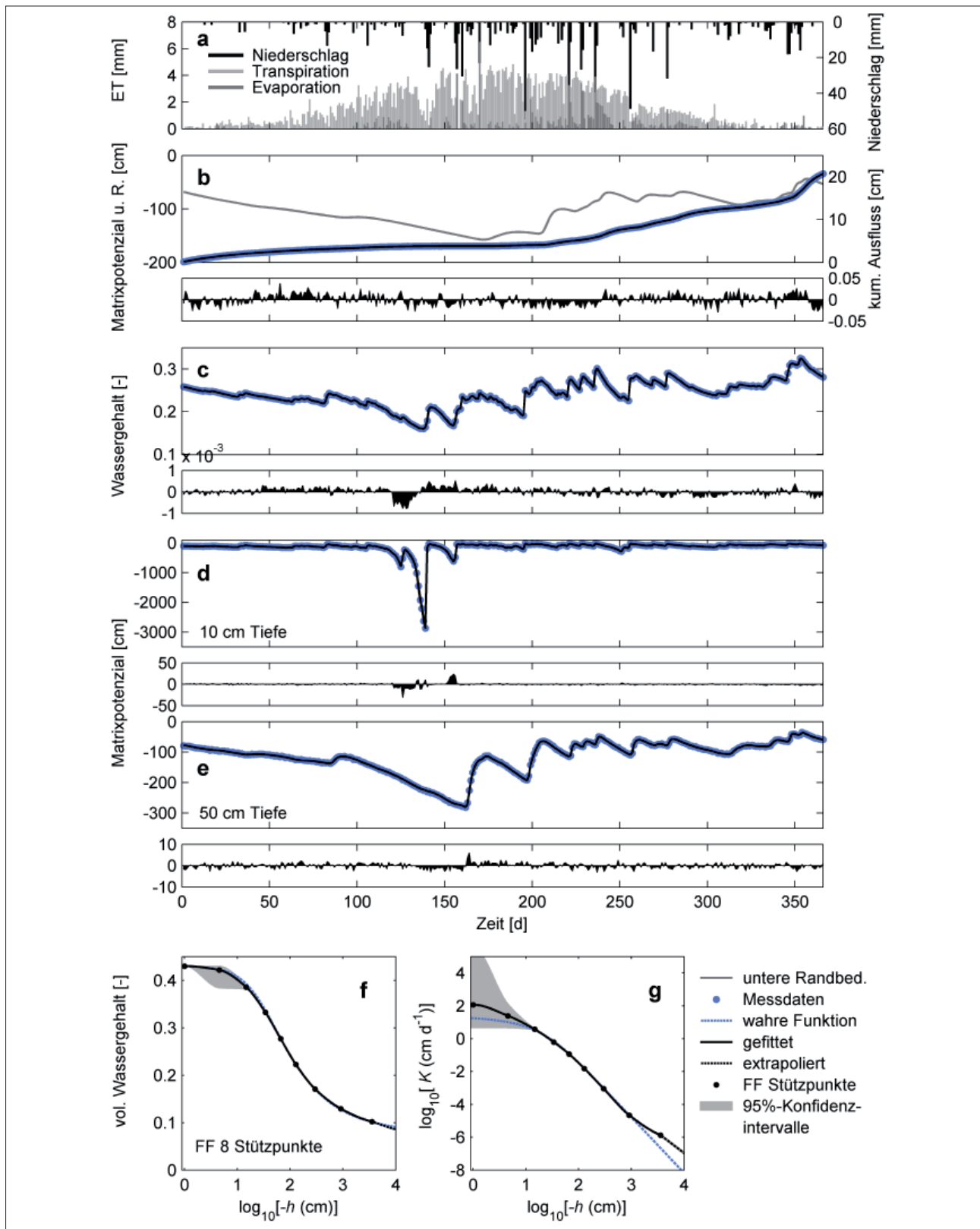


Abbildung 2: Ergebnisse der Free-Form-Parametrisierung (FF) für einen homogenen Lehmboden (Lehm I, Szenario 12 aus Tabelle 2); a: obere Randbedingung: Niederschlag, potentielle Evaporation und Transpiration; b: untere Randbedingung: variable Matrixpotenziale; gemessene und simulierte kumulative Ausflüsse am unteren Rand (b), profilgemittelte Wassergehalte (c) und Matrixpotenziale in 10 (d) und 50 cm Tiefe (e) mit dazugehörigen Residuen. „Wahre“ und mit dem FF-Algorithmus geschätzte Retentions- (f) und Leitfähigkeitsfunktionen (g).

lischen Eigenschaften in diesem Bereich also nicht genau bestimmt werden konnten. Im trockenen Bereich, jenseits von pF 3,5 war ebenfalls nur unzureichende Information vorhanden, hier wurden die Funktionen extrapoliert.

Im zweiten Schritt wurde ein Modellfehler simuliert, d.h. in der Vorwärtssimulation wurde nicht die VGM Funktion zur Parametrisierung der hydraulischen Eigenschaften verwendet, die dann in der inversen Simulation verwendet wurde, sondern eine komplexere (Lehm II). Die Ergebnisse (*Tabelle 2*, Szenarien 13 - 18) zeigen, dass die Daten bei Verwendung des VGM-Modells in der inversen Simulation nicht mehr ausreichend gut beschrieben werden konnten. Deutliche Abweichungen zwischen simulierten und „gemessenen“ Daten traten auf. Im Gegensatz dazu konnten diese Daten mit der FF-Parametrisierung weiterhin sehr gut beschrieben werden (*Tabelle 2*, Szenarien 19 - 24). Durch die hohe Flexibilität der FF-Funktionen, bei denen keine Form der Kurven vorgegeben ist, können Modellfehler weitgehend vermieden werden.

Synthetische Messdaten: Geschichtete Profile

Im nächsten Schritt wurden geschichtete Profile betrachtet, wobei zunächst versucht wurde, diese in der Parameterschätzung als „quasi-homogen“ anzusehen und effektive Parameter zu schätzen (Szenarien 25 - 36). Für den unbewachsenen Boden konnten die Ausflüsse und gemittelten Wassergehalte noch einigermaßen gut beschrieben werden (wie bereits von DURNER et al. (2008) gezeigt wurde), für bewachsene Böden waren die Abweichungen schon sehr viel größer. Auch unter Verwendung des FF-Algorithmus ergab sich nur eine geringfügige Verbesserung in der Beschreibung der Messdaten. Die Einbeziehung von Matrixpotenzialmessungen in die Zielfunktion erhöhte die Identifizierbarkeit der hydraulischen Funktionen enorm, jedoch konnten weder die Messdaten der Matrixpotenziale noch die gemittelten Wassergehalte durch die effektive Parametrisierung beschrieben werden. In *Abbildung 3* sind die Ergebnisse der FF-Parametrisierung für einen bewachsenen Boden dargestellt, in *Abbildung 3e* und *3f* sind neben den geschätzten FF-Funktionen auch die mit VGM geschätzten Funktionen gezeigt (*Tabelle 2*, Szenario 30). Der Wurzeltiefeparameter wurde hier mit geschätzt, konnte jedoch für beide Parametrisierungen nicht korrekt bestimmt werden. Die geschätzten hydraulischen Funktionen beider Parametrisierungen liegen im trockenen Bereich ab pF 2 genau aufeinander. Im feuchten Bereich weichen sie stark voneinander ab. Die Unsicherheitsverteilungen der FF-Kurven verdeutlichen jedoch hervorragend den fehlenden Informationsgehalt der Messdaten in diesem Bereich.

Bei der gleichzeitigen Schätzung beider Schichten des heterogenen Profils (Szenarien 37 - 48) wurden mit der VGM-Parametrisierung hervorragende Ergebnisse erzielt. Mit der FF-Parametrisierung wurden die Daten immer noch sehr gut, jedoch nicht mehr perfekt beschrieben. Die hohe Anzahl der zu schätzenden Parameter (für 8 Stützpunkte: 32 Parameter) ist hierfür vermutlich verantwortlich. Die Identifizierbarkeit der Parameter wird durch die Einbeziehung von Tensionsdaten in die Zielfunktion entscheidend verbessert.

Reale Messdaten

Bei der inversen Simulation der Realdaten lieferte die Identifikation der hydraulischen Eigenschaften für beide Schichten deutlich bessere Ergebnisse als die Schätzung effektiver Parameter.

Sowohl mit der VGM- als auch mit der FF-Parametrisierung konnten die kumulativen Ausflüsse und die Änderungen des profilmittelten Wassergehalts relativ gut wieder gegeben werden. Die Verläufe der Simulationsergebnisse beider Parametrisierungen sind sehr ähnlich, daher sind in *Abbildung 4* nur diejenigen der FF-Anpassung gezeigt. In *Abbildung 4d* und *4e* sind die geschätzten Funktionen beider Parametrisierungen dargestellt. Leider sind in dem Lysimeter keine Tensiometer eingebaut, deren Messungen den Informationsgehalt und damit die Bestimmbarkeit der hydraulischen Eigenschaften entscheidend verbessern würden, wie mit Hilfe der synthetischen Daten gezeigt wurde.

Die Beschreibung der Realdaten durch die Parameterschätzung ist bei weitem noch nicht perfekt. Die Wurzelverteilung im Profil wurde festgesetzt und könnte noch optimiert werden, zudem wurden wichtige Prozesse wie Hysterese der hydraulischen Eigenschaften oder Frost- und Schneereignisse in den Simulationen nicht berücksichtigt.

Diskussion

Die Simulationen mit synthetischen Daten zeigen, dass die hydraulischen Eigenschaften homogener Profile bei zutreffenden Annahmen in Hinblick auf das Prozessmodell und die hydraulischen Funktionen allein anhand von Messdaten des kumulativen Ausflusses und der Änderung des profilmittelten Wassergehalts perfekt bestimmt werden können. Gleichzeitig kann die Wurzeltiefe korrekt geschätzt werden. Sofern das Modell zur Beschreibung der hydraulischen Eigenschaften fehlerhaft ist (*Tabelle 2*, Szenarien 13 - 18), können die Messungen nicht korrekt wiedergegeben werden. Dieses Problem lässt sich mit der FF-Parametrisierung lösen.

Der Versuch Messdaten heterogener Profile mit effektiven Parametern zu beschreiben führt zu deutlichen Abweichungen, auch unter Verwendung der FF-Parametrisierung. Dies zeigt, dass der konzeptionelle Modellfehler (Homogenitätsannahme) nicht durch höhere Flexibilität der hydraulischen Funktionen kompensiert wird. Die simultane Optimierung der hydraulischen Eigenschaften beider Schichten der heterogenen Profile war dagegen erfolgreich, trotz der hohen Zahl an geschätzten Parametern. Hierbei ist es noch wichtiger über Messungen von Statusvariablen (z.B. Matrixpotenziale) im Lysimeter zu verfügen.

Die Parameteroptimierung an synthetischen Daten stellt eine Machbarkeitsstudie unter optimalen Bedingungen dar, bei der sicher gestellt ist, dass keine Fehler in Hinblick auf das Prozessmodell (Richardsgleichung), Hysterese, die Wurzelverteilung und Wurzelwasseraufnahme sowie keine systematischen Fehler bei den Messdaten auftreten.

Die inverse Simulation der Realdaten zeigte eine annehmbare Beschreibung der Messdaten, beweist jedoch auch, dass einige Prozesse durch die Simulation noch nicht korrekt abgebildet werden können.

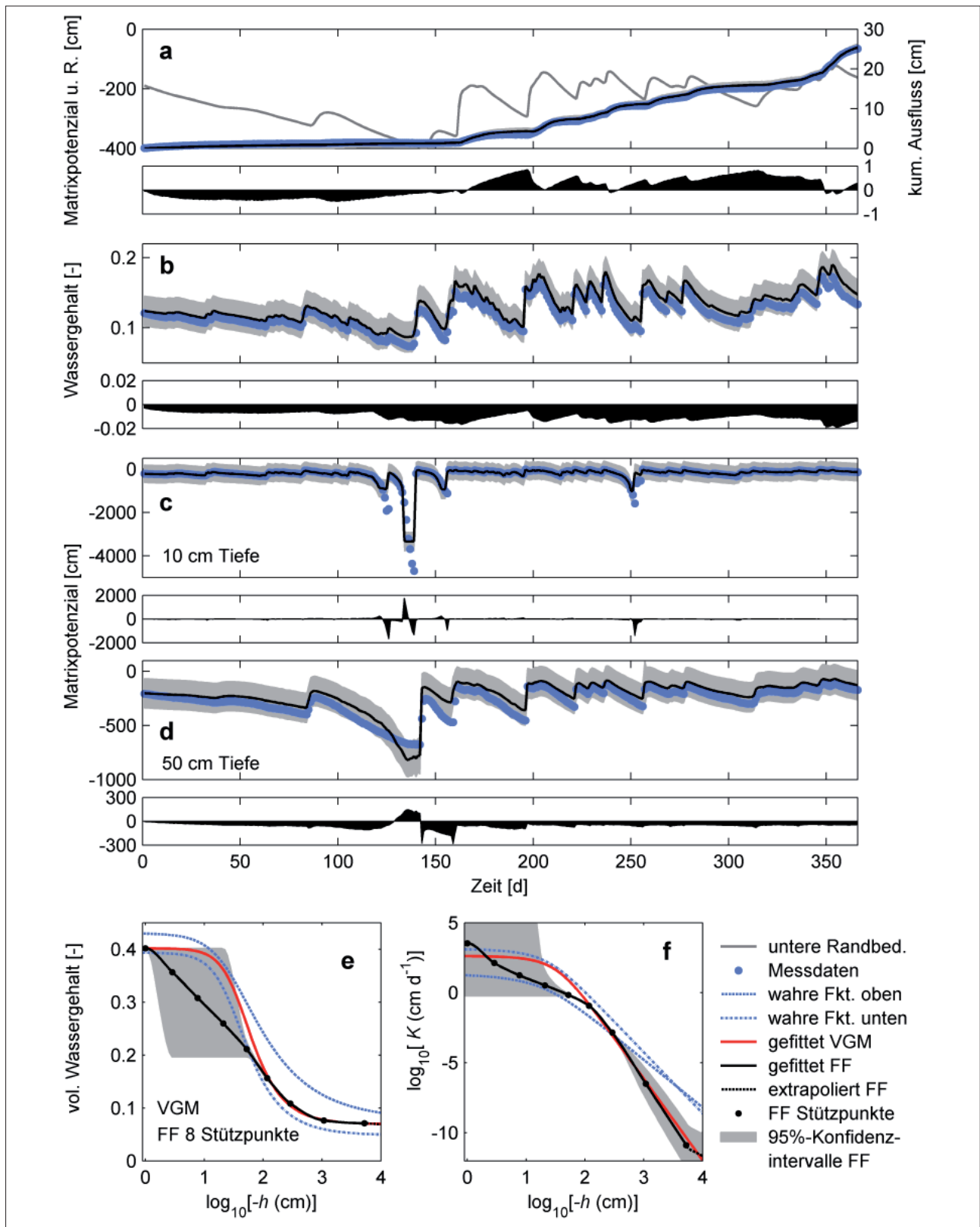


Abbildung 3: Ergebnisse der van Genuchten-Mualem- (VGM) und der Free-Form- (FF) Parametrisierung für ein heterogenes Profil (20 cm Lehm I über Sand, Szenarien 30 und 36 aus Tabelle 2); a: untere Randbedingung; variable Matrixpotentiale; gemessene und mit Free Form simulierte kumulative Ausflüsse am unteren Rand (a), profilmittelte Wassergehalte (b) und Matrixpotentiale in 10 (c) und 50 cm Tiefe (d) mit dazugehörigen Residuen. „Wahre“ geschätzte Retentions- (e) und Leitfähigkeitsfunktionen (f). Simulationsergebnisse und 95%-Konfidenzintervalle sind nur für FF gezeigt.

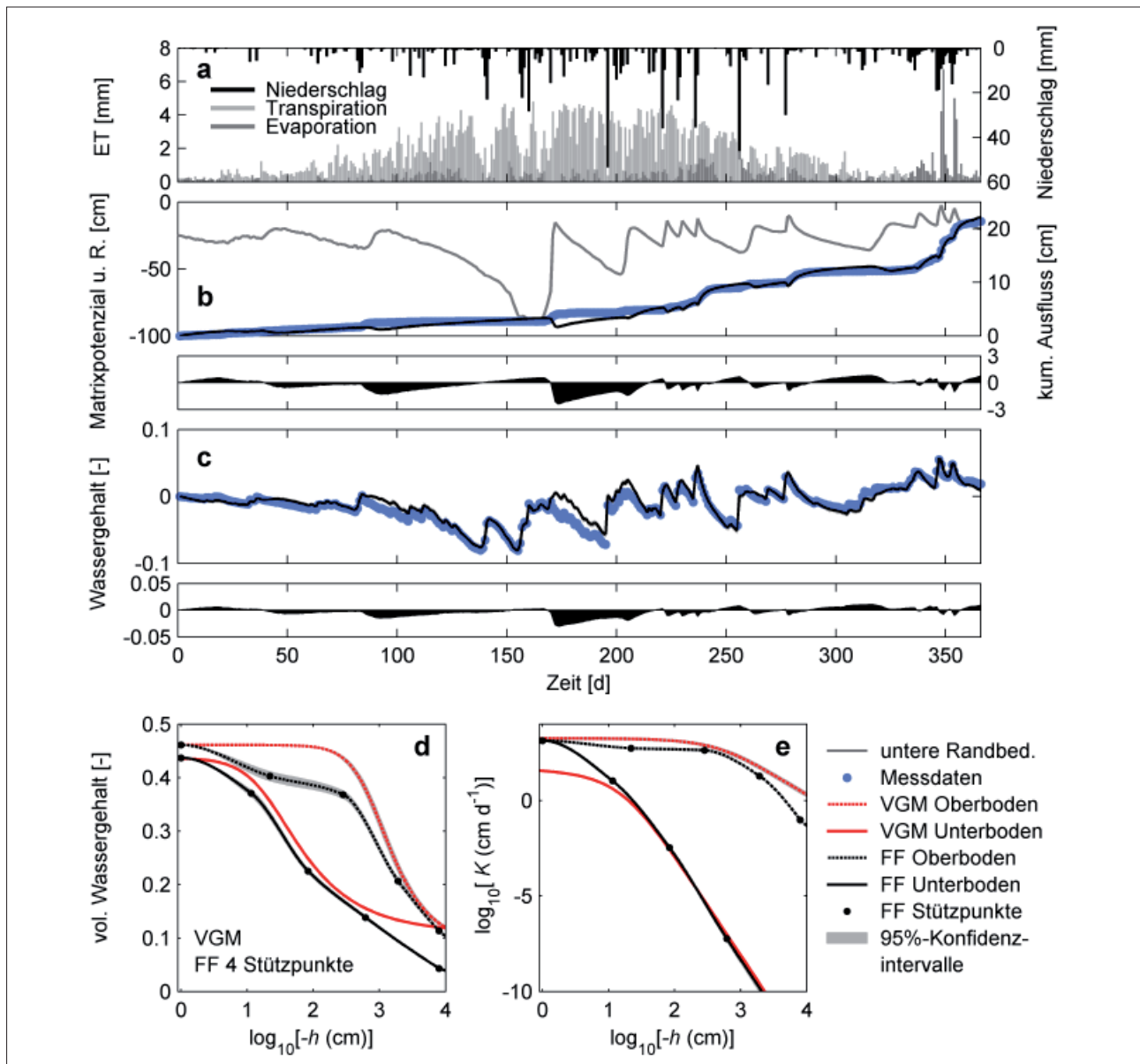


Abbildung 4: Ergebnisse der van Genuchten-Mualem- (VGM) und der Free-Form- (FF) Parametrisierung für das Gras-Referenz-Lysimeter in Wagna (Realdaten); a: obere Randbedingung: Niederschlag und potentielle Evaporation und Transpiration; b: untere Randbedingung: variable Matrixpotenziale; gemessene und mit Free Form simulierte kumulative Ausflüsse am unteren Rand (b) und profilgemittelte Wassergehalte (c) mit dazugehörigen Residuen. Mit dem Free Form Algorithmus (FF) und dem van Genuchten-Mualem Modell (VGM) geschätzte Retentions- (f) und Leitfähigkeitsfunktionen (g). Simulationsergebnisse und 95%-Konfidenzintervalle sind nur für FF gezeigt.

Um die realen Messdaten präziser bestimmen zu können, sind die Einflüsse möglicher systematischer Fehler in den Randbedingungen, der Parametrisierung der Wurzeln und der Wurzelwasseraufnahme sowie der Einfluss von Hysterese zu untersuchen.

Literatur

- ALLEN, R.G., L.S. PEREIRA, D. Raes and M. SMITH, 1998: Crop evapotranspiration (guidelines for computing crop water requirements). FAO Irrigation and Drainage Paper No. 56, 300 S.
- CARSEL, R.F. and R.S. PARRISH, 1988: Developing joint probability distributions of soil water retention characteristics, Water Resour. Res. 24, 755-769.

- DURNER, W., 1994: Hydraulic conductivity estimation for soils with heterogeneous pore structure. Water Resour. Res. 30:211-223.
- DURNER, W., U. JANSEN and S.C. IDEN, 2008: Effective hydraulic properties of layered soils at the lysimeter scale determined by inverse modeling. European Journal of Soil Sci. 59:114-124.
- FEDDES, R.A., P.J. KOWALIK and H. ZARADNY, 1978: Simulation of field water use and crop yield, John Wiley & Sons, New York.
- IDEN, S. and W. DURNER, 2007: Free-Form estimation of the unsaturated soil hydraulic properties by inverse modeling using global optimization. Water Resour. Res. 43:W07451.
- SCHAAP, M.G., F.J. LEIJ and M.T. VAN GENUCHTEN, 2001: Rosetta: a computer program for estimating soil hydraulic parameters with hierarchical pedotransfer functions, Journal of Hydrology, 251, 163-176.

- ŠIMUNEK, J., M. ŠEJNA, H. SAITO, M. SAKAI and M.T. VAN GENUCHTEN, 2008: The HYDRUS-1D software package for simulating the one-dimensional movement of water, heat and multiple solutes in variably-saturated media, version 4.07. Department of environmental sciences, University of California, Riverside.
- 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.
- VOGEL, T., M.T. VAN GENUCHTEN and M. CISLEROVA, 2001: Effect of the shape of the soil hydraulic functions near saturation on variably-saturated flow predictions. *Advances in Water Resour.* 24:133-144.