

# Parameteroptimierung für die modellgestützte Düngemberatung

R. DECHOW, Th. SALZMANN und K. MIEGEL

## Abstract

A tracerexperiment with conservative tracers was conducted at the Lysimeterstation Groß Lüsewitz. The SVAT models MINERVA (BEBLICK), HYDRUS1D (SIMUNEK) and MACRO (JARVIS) were calibrated and validated against the measured break through curves in different depths. Measured data and model results lead to the conclusion that preferential flow occurred in all lysimeters causing an early break through of tracer at the bottom of the lysimeters. Only the two domain model MACRO produced good results for the calibration and validation data. Scenarios for the winter half year with different initial solute concentrations gave evidence that there is no high increase in solute concentration at the bottom caused by macropore flow compared with instantaneous equilibrium transport.

## Zusammenfassung

Es wurden Tracerexperimente in der Lysimeterstation Groß Lüsewitz durchgeführt. Anhand der gemessenen Durchbruchkurven in unterschiedlichen Tiefen wurden die Modelle MINERVA (BEBLICK), HYDRUS1D (SIMUNEK) und MACRO (JARVIS) kalibriert und validiert. Der Verlauf der messtechnisch bestimmten Durchbruchkurven und die Modellanwendung lassen schließen, dass präferentieller Fluss eine beschleunigte Verlagerung gelöster Stoffe verursacht, was am besten durch das Modell MACRO abgebildet werden konnte. Die Anwendung von Modellen ohne und mit Berücksichtigung des präferentiellen Flusses zeigte, dass keine nennenswerte Erhöhung der Sickerwasserkonzentration durch Makroporenfluss verursacht wurde.

## Problembeschreibung und theoretischer Hintergrund

Nitrate werden durch die Bodenlösung innerhalb der ungesättigten Zone verla-

gert. Stofftransportprozesse und die Wasserbewegung im Profil haben zusammengenommen einen wesentlichen Einfluss auf den Stickstoffhaushalt, was besonders innerhalb der Sickerperioden deutlich wird.

Die Vielzahl von existierenden SVAT-Modellen (HYDRUS1D, MINERVA, MACRO, COUPMODEL,...) unterscheiden sich hinsichtlich der Berücksichtigung sowie der mathematischen Beschreibung dieser Prozesse. Dabei ist es in der Regel so, dass komplexere also weniger vereinfachende Modelle auch mehr zu definierende Parameter aufweisen.

Die praxisnahe Anwendung von Nitrat-haushaltsmodellen verlangt einerseits eine ausreichende Modellgenauigkeit, andererseits sollte der Aufwand der Parameterermittlung möglichst gering sein. Hieraus ergibt sich das Erfordernis eines Kompromisses zwischen Modellkomplexität und Anwenderfreundlichkeit hinsichtlich der Parameterermittlung. Es stellt sich also die Frage, welche Prozesse zu berücksichtigen sind und welche Vereinfachungen als legitim betrachtet werden können.

Um diese Problematik näher zu untersuchen und um die Voraussetzung zur Untersuchung der Stofftransportmodellierung und Nitratmodellierung zu schaffen, wurden Wasserhaushalt und Stofftransport in Lysimetern mit Modellen unterschiedlicher Komplexität abgebildet, dabei kamen die Modelle MINERVA, HYDRUS1D und MACRO zum Einsatz.

## MINERVA

MINERVA ist ein Modell, das für die praxisnahe Anwendung der Nitrat-haushaltsmodellierung in SVAT-Systemen entwickelt wurde. Der Bodenwasserhaushalt wird durch einen Kapazitätsansatz (tipping bucket model) modelliert.

Die bodenhydraulischen Eigenschaften werden auf Grundlage einfach messbarer Größen (Bodenart, Humusgehalt, Lagerungsdichte) ermittelt. Der vereinfachende Modellansatz und die Bestimmung der bodenhydraulischen Eigenschaften geben Anlass zu der Vermutung, dass Durchflüsse und damit auch Stofftransportprozesse nicht korrekt abgebildet werden.

Zur Berechnung des Wasserflusses in der ungesättigten Zone erfolgt eine Aufspaltung des Porenraumes durch die Kenngrößen permanenter Welkepunkt, Feldkapazität und Gesamtporosität. Dabei wird im Infiltrationsmodell angenommen, dass die Wasserbewegung nur im "Makroporenraum", der durch Feldkapazität und Gesamtporenvolumen begrenzt wird, stattfindet. Die Infiltrationsrate ist dabei eine Konstante, die allein von der Größe des Makroporenraumes abhängig ist. Eine Leitfähigkeitsfunktion existiert nicht, was dazu führt, dass reale Bodenwasserdurchflüsse in ihrer Quantität und zeitlichen Verteilung falsch eingeschätzt werden können.

Für die Kalkulation des Stofftransports, die durch die Konvektions Dispersions Gleichung erfolgt, hat die Eingrenzung der Wasserbewegung auf einen Teilporenraum keinen Einfluss, da eine sofortige Durchmischung im Gesamtporensystem angenommen wird (instantaneous equilibrium approach).

## Hydrus

Das weit verbreitete Modell HYDRUS1D bildet den Bodenwasserhaushalt auf Grundlage der RICHARDS Gleichung ab, wobei die Bodenwassercharakteristik und die Leitfähigkeit über zu parametrisierende Funktionen beschrieben werden. Zur Modellierung des Stofftransports bietet HYDRUS 2 Alternativen, die Konvektions- Dispersionsgleichung (CDE) und die CDE kombi-

**Autoren:** Dipl.-Ing. Rene DECHOW, Dr. Thomas SALZMANN und Prof. Konrad MIEGEL, Institut für Umweltingenieurwesen, Universität Rostock, Satower Str. 48, D-18059 ROSTOCK

niert mit dem Mobil- Immobil Konzept (MIM). Hier wird der Porenraum in einen mobilen und immobilen Anteil aufgeteilt, wobei der im immobilen Porenraum gelöste Anteil keiner Bewegung unterliegt. Es findet lediglich ein Massetransfer 1. Ordnung zwischen beiden Porenräumen statt. Obwohl stark vereinfachend, vermag dieser Ansatz den Stofftransport in bimodalen Porensystemen relativ gut zu beschreiben. Eine wesentliche Schwäche ist hier die Annahme der Immobilität, denn dies setzt die ständige Sättigung des immobilen Porenraumes voraus, und vernachlässigt, dass Sickerung und Kapillaraufstieg in beiden Porenräumen anzutreffen sind. Da in bimodalen Porensystemen der Anteil des Porenraumes mit präferentiellem Fluss oft kleiner ist, führt dies bei Anwendung des MIM Konzeptes zur Definition eines hohen immobilen Wassergehaltes und so kommt man bei der Modellierung mit wechselnden Witterungsverhältnissen (Sommer- Winter) schnell an die Grenzen des Modells.

### Macro

Hier erstreckt sich die Annahme zweier kommunizierender Porensysteme auch auf die Modellierung des Wasserhaushaltes, d. h. es besteht eine strengere Kausalität zwischen Wasserhaushalt und Stofftransport als beim MIM Konzept. Dieser Umstand führt dazu, dass eine Modellkalibrierung grundsätzlich erleichtert wird, da Parameteränderungen sich gleichermaßen auf die Resultate beider Teilmodelle auswirken.

### Material und Methoden

Die Lysimeterstation Groß Lüsewitz befindet sich 13 km östlich von Rostock und 23 km südlich der Ostsee auf einer

Höhe von 34.6 m über NN. Die 6 wägbaren Lysimeter wurden 1969 ungestört in unmittelbarer Nähe zur Versuchstation ausgestochen und werden seitdem bewirtschaftet. Sie weisen eine Grundfläche von 1m<sup>2</sup> auf und sind zentral in Versuchspartellen mit Grundflächen von jeweils 4x6m eingebettet. Die 2.10 m mächtigen Bodenmonolithen werden von einer 40 cm dicken Filtersandschicht unterlagert. Zwei der sechs Lysimeter sind mit Tensiometern in 30, 60, 90, 150 u. GOK und TDR-Sonden in 30, 60, 150 cm u. GOK sowie Bodenwassersammlern in 45, 75, 150 cm Tiefe versehen. Der Bodentyp entspricht einer Pseudogley-Parabraunerde mit lehmigen bis schluffigen Sanden. Retentionscharakteristika aller Horizonte existieren aufgrund von Kapillarmessungen an Stechzylinderproben, die im Rahmen des Ausstechens der Bodenmonolithen 1969 im unmittelbaren Umfeld der Entnahmestandorte genommen wurden.

Bodengleich angeordnete Niederschlagssammler, eine Kesselverdunstungsanlage und eine automatische Wetterstation gewährleisten eine vergleichsweise korrekte Datenerfassung zur Kalkulation der oberen Randbedingungen (Niederschlag, ETP, ETR).

Jeweils 2 der Lysimeter (1-2, 3-4, 5-6) bilden eine Gruppe gleicher Bewirtschaftung. Während des Untersuchungszeitraumes erfahren die Gruppen die gleiche um ein Jahr versetzte Fruchtfolge, mit der Abfolge Winterweizen, Winterroggen, Mais.

Als Grundlage für die Modellkalibrierung und die Validierung hinsichtlich des Stofftransportes wurden die konservativen Tracer Cl<sup>-</sup> am 8.10.02 auf allen Lysimetern und Bromid um ein Jahr versetzt am 14.9.03 auf den Lysimetern 1

und 2 als Augenblicksimpulse appliziert. Die Entnahme von Bodenwasserproben in 45, 75, 150 (Lysimeter 1 und 2) und 250 cm orientierte sich in der zeitlichen Auflösung an Szenariorechnungen mit dem Modell HYDRUS. Der Transport des Chlorids wurde über einen Zeitraum von 2 Jahren, der des Bromids über eine Zeitspanne von 1 Jahr erfasst, wobei die Probeentnahme noch nicht abgeschlossen ist. Parallel zur Erfassung der Tracerkonzentrationen wurden auch die Nitratkonzentrationen der Bodenwasserproben analysiert.

### Wasserhaushaltsmodellierungen

Kalibrierung und Validierung der Wasserhaushaltsmodelle sind wesentliche Voraussetzungen für die Untersuchung der Stofftransportprozesse und die Erstellung von Modellszenarios. Dabei geht es hier vorwiegend um die inverse Ermittlung von bodenhydraulischen Eigenschaften, die sich messtechnisch nicht ermitteln lassen, da eine Beeinflussung des Wasserhaushaltes der Lysimeter oder Stechzylinderentnahmen in den Lysimetern unerwünscht sind.

Für Minerva erübrigt sich eine Modellkalibrierung, da die bodenhydraulischen Eigenschaften unmittelbar aus Kenndaten der Bodenkundlichen Kartieranleitung abgeleitet werden.

Das Modell MACRO weist eine Vielzahl schwer ermittelbarer Parameter auf, die sich meist gleichermaßen auf Stofftransport und Wasserhaushalt auswirken. Da die messtechnisch erfassten Daten an den Lysimetern den Anforderungen der Modelle nicht genügen, kann hier eine Kalibrierung und Validierung nur im Zusammenhang mit den Ergebnissen der Tracereperimente erfolgen.

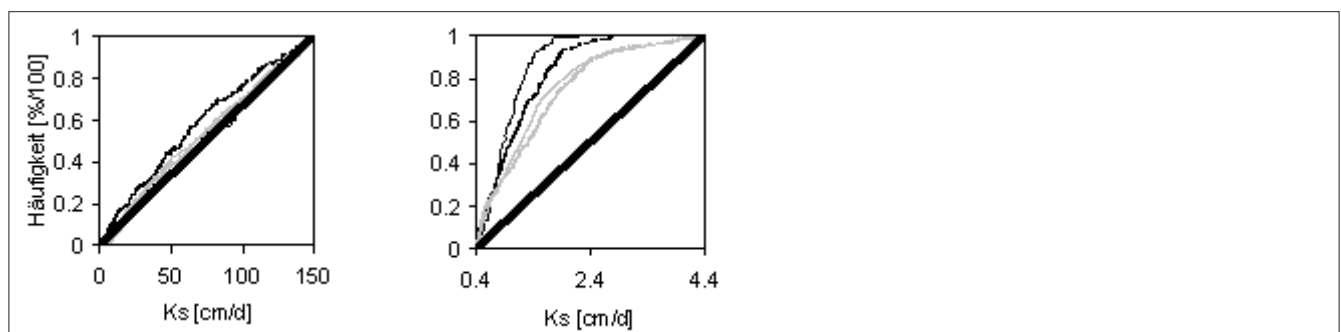


Abbildung 1: Kumulative Wahrscheinlichkeitsverteilung für ausgesuchte Parameter (Lysimeter 2);(A): gesättigte Leitfähigkeit des obersten Horizonts; (B) gesättigte Leitfähigkeit des Stauhorizonts (C) Tortuosität des Stauhorizonts

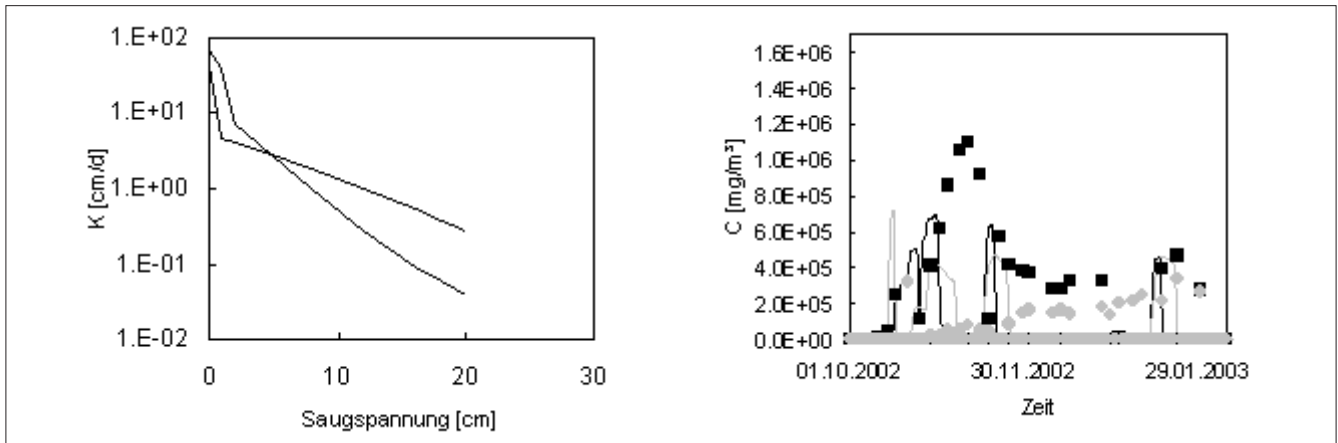


Abbildung 2: A) Leitfähigkeit im nahe gesättigten Bereich aufgrund von Tensioinfiltrometermessungen; B) Durchbruchkurven in 45 cm (schwarz) und 75cm (grau) unter GOK, mit MACRO modellierte Makroporenflüsse (durchgezogene Linien)

Im Modell HYDRUS werden die bodenhydraulischen Eigenschaften durch die Funktionen nach van Genuchten und Mualem quantifiziert. Die Kennwerte dieser Funktionen wurden aufgrund der oben erwähnten Messungen an Stechzylinderproben und tiefengleicher Messungen des Wassergehalts und der Saugspannung mittels TDR Sonden und Tensioinfiltrometer ermittelt. Hier zeigte sich bei der Modellanwendung, dass Sickerwasserraten und kumulative Sickerwasserausflüsse besser bei Verwendung der auf den Feldmessungen basierenden Retentionscharakteristika abgebildet werden. Die gesättigten Leitfähigkeiten und die Tortuositätsfaktoren mussten über die inverse Parameteranpassung bestimmt werden. Hierbei kam einmal das Parameterschätzverfahren mit der Methode nach Marquardt- Levenberg (DOHERTY, 2002) und zur Quantifizierung der Parametersensitivität das GLUE Verfahren (SCHULZ, BEVEN, HUWE, 1999) zur Anwendung. *Abbildung 1* zeigt hier die kumulativen Wahrscheinlichkeitsverteilungen ausgewählter Parameter für das Lysimeter 2. Es erwies sich, dass trotz eines umfangreichen Eichdatensatzes (Sickerwasserraten, kumulativer Sickerwasserabfluss, Wassergehalts- Saugspannungsganglinien in vier Tiefen, reale Transpiration und Evaporation) eine eindeutige Lösung des inversen Problems nicht möglich war, wobei sich die zeitliche und räumliche Verteilung der Durchflüsse unsensitiv gegenüber den gesättigten Leitfähigkeiten in den oberen Horizonten zeigte, und sehr gute Anpassungen an die relevanten, weil reprä-

sentativen Datenmengen des Eichdatensatzes (Sickerwasserausflüsse und Evapotranspiration) erzielt wurden.

### Versuchsergebnisse und Modellanwendung

Die Durchbruchkurven in den Tiefen 45, 75, 150 cm der Lysimeter mit Saugkerzenausstattung, sowie die Konzentrationsverläufe im Sickerwasser der übrigen Lysimeter deuteten durch abrupte Konzentrationsextrema (Maxima oder Minima, *Abbildung 2b*) ein präferentielles Fließgeschehen an. Derartige Konzentrationsextrema im Sickerwasser sind auch beim Nitrat zu beobachten.

Durch die Modellanwendung auf den Tracerversuch konnte die These des präferentiellen Fließgeschehens erhärtet werden. Dabei wird vermutet, dass sich in den oberen Horizonten vorwiegend Makroporenfluss aufgrund biogener Makroporen ereignet, während in den unteren Horizonten (80-210) präferentieller Fluss durch eine ausgeprägte Strukturierung bedingt wird.

Die numerische Auswertung von Tensioinfiltrometermessungen auf Versuchspartellen mit vergleichbaren Oberboden führte zu der in *Abbildung 2* dargestellten Leitfähigkeitsfunktionen im nahe gesättigten Bereich, deren Verlauf auf einen hohen Anteil an schnell drainierenden Makroporen (Wurzel-, Regenwurmkanäle) hindeutet.

Der Vergleich aller 6 Lysimeter hinsichtlich des Tracerdurchbruchs in 250 cm Tiefe zeigte eine hohe Variabilität. Bedingt durch die zeitversetzte Fruchtfol-

ge sind unterschiedliche Wassergehaltsverteilungen am Applikationstag zu verzeichnen. Ein Vergleich der Stoffverlagerungseigenschaften aus den Versuchsergebnissen ist deshalb nicht möglich.

### Modellierung des Tracertransports

Die Abbildung der Durchbruchkurven mit dem Modell MINERVA gelang nicht. Da die Berechnung des Wasserhaushaltes über ein einfaches Kapazitätsmodell erfolgt, war vermutet worden, dass dieser Umstand sich auch auf die Stofftransportmodellierung auswirkt und hier zu Abbildungsungenauigkeiten führt. Diese These musste aber aufgrund vergleichender Modellanwendungen von HYDRUS und MINERVA wieder verworfen werden, denn bei beiden Modellen traten ähnliche Schwierigkeiten bei der Abbildung der experimentell ermittelten Durchbruchkurven auf. Die eigentliche Ursache für die Abweichungen der mit MINERVA erzielten Modellergebnisse von den Versuchsergebnissen liegt in der Nichtberücksichtigung des präferentiellen Flusses, der in den meisten Lysimetern zu verzeichnen ist. Die Anwendung beider Modelle mit unterschiedlichen Ansätzen zur Beschreibung des Bodenwasserhaushalts (numerische Lösung der Richardsgleichung versus Kapazitätsmodell) und gleichen Ansätzen zur Beschreibung des Stofftransports (Konvektions- Dispersionsgleichung) sowie vergleichbaren Parametersätzen (plausiblen Dispersivitäten) erbrachte auch übereinstimmende Ergebnisse zur Tracerverlagerung (*Abbildung 2*). Dabei wurden durch beide Modelle die Tracerdurch-

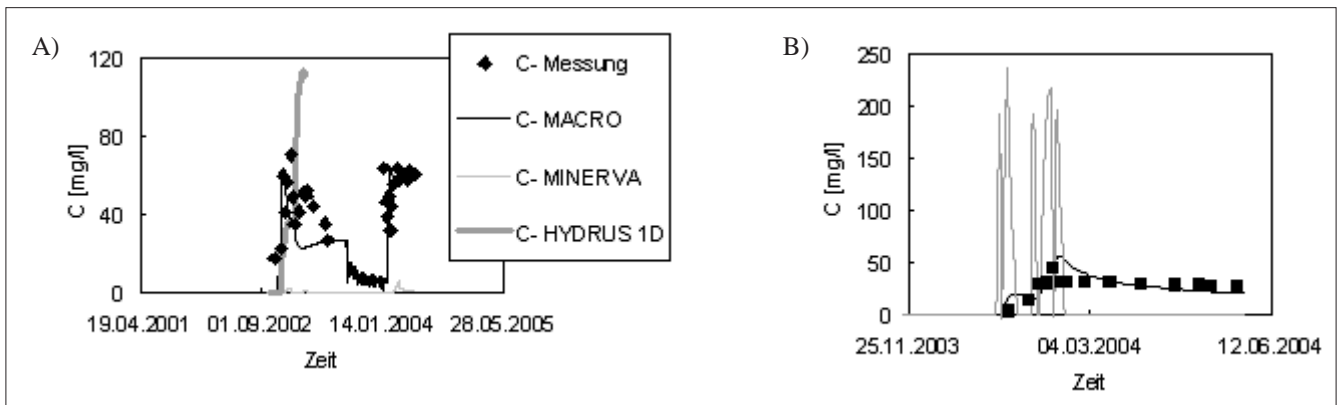


Abbildung 3: A) Gemessene und modellierte Konzentrationen im Sickerwasser im Kalibrierzeitraum; B) Gemessene und modellierte (MACRO) Konzentrationen während des Kalibrierungszeitraumes; modellierter Makroporenfluss in 150 cm u. GOK

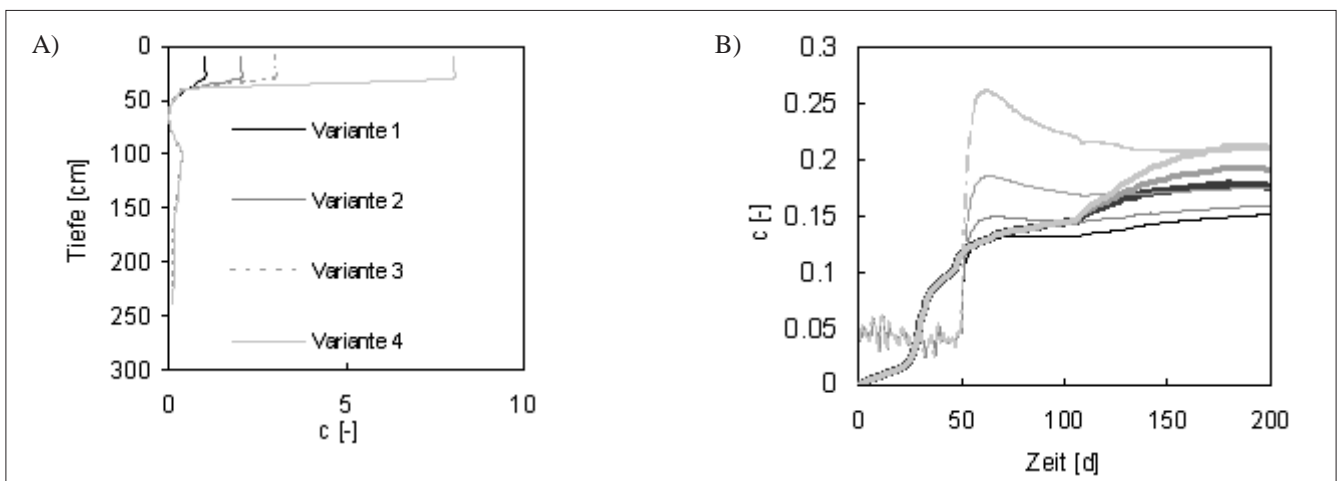


Abbildung 4: A) Angenommene Nitratverteilungen zu Beginn der Sickerwasserperiode; B) Modellierter Durchbruchkurven mit MACRO (schmale Linien) und HYDRUS (breite Linien) für ein Winterhalbjahr mit den in Abbildung 4A dargestellten Initialbedingungen (relative Konzentrationen)

brüche im Sickerwasser und den unteren Bodenhorizonten (150-250 cm unter GOK) für Kalibrier- und Validierungszeitraum erheblich unterschätzt, d. h. der Tracerdurchbruch im Sickerwasser trat wesentlich früher ein, als durch das Modell ermittelt.

Die Anwendung des im Modell HYDRUS enthaltenen Mobil-Immobil Konzepts führte teilweise zu einer akzeptablen Darstellung der gemessenen Durchbruchkurven. Dabei gelang es aber insbesondere für die Intensivmesslysimeter 1 und 2 nicht, Kalibrierungs- und Validierungsdatensatz mit den gleichen Parametersätzen abzubilden. Weiter zeigte sich, dass der Tracerdurchbruch für einzelne Niederschlagsereignisse überschätzt wurde. Dies ist auf die im Modell manifestierte Annahme eines in seiner Größe zeitlich unveränderlichen immobilen Wassergehalts zurückzuführen. Daneben erwies sich die angenom-

mene Immobilität eines Bodenwasseranteils als problematisch, da in den oberen Horizonten (0-80cm) sowohl Matrix als auch Makroporenfluss zu verzeichnen ist.

Die Nutzung des Modells MACRO, welches Makroporenfluss bei der Wasserhaushalts- und Stofftransportmodellierung berücksichtigt, führte zu den geringsten Abweichungen zwischen Mess- und Modellergebnis. Es gelang mit identischen lysimeterspezifischen Parametersätzen sowohl die Konzentrationsganglinien des 1. als auch des 2. Tracerversuchs (Eich- und Validierungsdatensatz) für alle Lysimeter annähernd abzubilden. Die registrierten Extrema der gemessenen Durchbruchkurven in den Tiefen 45 und 75 cm der Lysimeter 1 und 2 stimmten in ihrer zeitlichen Anordnung mit den durch MACRO kalkulierten Makroporenflüssen überein. Die Reten-

tionscharakteristik des Stauhizontes hatte einen großen Einfluss auf die Definition der Leitfähigkeiten und daraus resultierend auf das Entstehen des Makroporenflusses.

Bei der Modelleichung wurde eine hohe Modellsensitivität hinsichtlich einiger schwer zu bestimmender Parameter (repräsentativer Makroporenanteil, Transferkoeffizienten für den Stoff- und Wassertransport zwischen Makroporenraum und Matrix, repräsentative Leitfähigkeit des gesättigten Makroporenraumes bzw. der gesättigten Matrix) und bezüglich der Genauigkeit der formulierten Randbedingungen registriert. Dies erschwert eine praxisnahe Nutzung des Modells außerordentlich, zumal die im Modell implementierten Pedotransferfunktionen sich bei der Anwendung auf den konkreten Fall als zu ungenau erwiesen.

## Schlussfolgerung

Die Tracerversuche haben gezeigt, dass ein nennenswerter Anteil der Anionen während der Sickerperiode präferentiell transportiert wird und im Sickerwasser anzutreffen ist. Dies führt, gemessen an einem homogenen Wasser- und Stofftransport, zu einem verfrühten Eintreten der Durchbruchkurven. Da der Makroporenfluss nur einen mengenmäßig geringen Anteil am Gesamtwasserfluss ausmacht, und es zudem zu Austauschprozessen zwischen Matrix und Makroporenraum kommt, sind die Konzentrationsganglinien des Sickerwassers im Schnitt nicht wesentlich erhöht. Es wurden allerdings bei einigen Lysimetern niederschlagsbedingte Konzentrationsextrema im Sickerwasser angetroffen, die durch das Modell MACRO nicht abgebildet werden konnten. Da diese Extrema mit niedrigen Sickerwasserraten zusammenfielen, ist ihr Effekt auf die kumulative Auswaschung jedoch relativ gering. Die Modellannahme einer homo-

genen Stoffverlagerung führt im Fall der betrachteten Lysimeter zu einer um ein Jahr verzögerten Abbildung des Durchbruchkurven Eintritts im Sickerwasser. Anhand der kalibrierten Modelle wurden Szenarios für verschiedene Sickerwasserperioden mit unterschiedlichen initialen Konzentrationsverteilungen erstellt (*Abbildung 4*).

Es ist aufgrund dieser Szenarios zu vermuten, dass die Schlussfolgerungen aus der Tracerverlagerung auf den Nitrattransport (unter Nichtberücksichtigung biochem. Umwandlungen, deren Effekt im Winterhalbjahr relativ gering ist) übertragbar sind.

## Literatur

ABBASPOUR, K.C., M.A. SONNLEITNER and R. SCHULIN, 1999: Uncertainty in estimation of soil hydraulic parameters by inverse modelling: example Lysimeter experiments soil science society American journal 63: 501-509.

BEBLICK, A.J., 2001: Technische Dokumentation des Stickstoffhaushaltsmodells MINERVA Braunschweig/Cottbus.

DOHERTY, J., 2002: Pest manual, Watermark numerical Computing.

LARSBO, M. and N. JARVIS, 2003: MACRO 5.0. A model of water flow and solute transport in macroporous soil. Technical description, Swedish University of Agricultural Sciences, Department of Soil Sciences, Division of Environmental Physics.

SCHULZ, K., K. BEVEN and B. HUWE, 1999: Equifinality and the problem of robust calibration in nitrogen budget simulations soil science society american journal 63: 1934-1941.

SONNLEITNER, M.A., K.C. ABBASPOUR and R. SCHULIN, 2003: Hydraulic and transport properties of the plant-soil system estimated by inverse modelling, European Journal of Soil Science, March 2003, 54 127-138.

SIMUNEK, J., M.Th. VAN GENUCHTEN, J. DIEDERICK, J.W. HOPMANS, I. MITSUHIRO and M. FLURY, 6.6 Solute transport during variably saturated flow- Inverse methods.

SIMUNEK, J., M.Th. VAN GENUCHTEN, The HYDRUS-1D Software Package for Simulating the One-Dimensional Movement of Water, Heat and Multiple Solutes in Variably Saturated Media, U.S. Salinity Laboratory, U. S. Department of Agricultural Research Service, Riverside, California.