

Bestimmung hydraulischer Parameter in heterogenen Böden mit inverser Modellierung

Olaf Ippisch¹, Hans Graf², Hans-Jörg Vogel², Peter Bastian¹

Eine Standardmethode zur Bestimmung der hydraulischen Eigenschaften von Bodenproben ist die Verbindung von Multi-Step-Outflow Experimenten mit inverser Modellierung. Dabei wird in der Regel die Homogenität der Probe vorausgesetzt. Die meisten Böden sind jedoch heterogen und die Heterogenität ihrer hydraulischen Eigenschaften bestimmt die Phänomenologie von Fluss- und Transportprozessen. Neuere Messmethoden (Röntgentomographie, Geoelektrik, Georadar) erlauben es, die räumliche Struktur von Böden störungsfrei zu messen. In einem neuen Ansatz soll versucht werden, die hydraulische Heterogenität eines Bodens aus der unabhängig gemessenen Struktur durch inverse Modellierung zu bestimmen.

Ziel der Simulation von Transportprozessen in Böden ist es in der Regel, die Verlagerungsgeschwindigkeit von Wasser und gelösten Stoffen in bestimmte Bodentiefen oder auch komplette Verteilungen von Wassergehalten, Fließgeschwindigkeiten und Stoffkonzentrationen vorherzusagen. Alle Modelle benötigen dazu Parameter, die die Eigenschaften des Bodens und der transportierten Stoffe widerspiegeln. Bei Modellen, die auf der Richardsgleichung basieren, werden diese Parameter heute in der Regel durch Multi-Step-Outflow Experimente bestimmt, gegebenenfalls in Verbindung mit Durchbruchexperimente für die gelösten Stoffe, wobei die Parameter mit Hilfe Inverser Modellierung gefittet werden. Da hierbei eindimensionale Modelle verwendet werden, ist es notwendig anzunehmen, dass die Probe homogen ist.

Schon rein optisch sind viele Böden jedoch heterogen und Färbeexperimente haben in den letzten Jahren immer wieder gezeigt, dass dies auch durchaus für den Transport relevant sein kann (Abbildung 1). Eine Mittelung der Heterogenitäten durch Homogenisierungsansätze ist schwierig, da sie im Vergleich zu der Skala für die Vorhersagen gemacht werden sollen relativ groß sind.

Eine Lösung ergibt sich möglicherweise durch den Einsatz der, in den letzten Jahren entwickelten, neuen Methoden zur zerstörungsfreien Strukturmessung (z.B. Röntgentomographie, Neutronentomographie, Positronenemissionstomographie, Geoelektrik, Georadar, Magneto-Elektrik,

Mikroseismik). Nimmt man an, dass die damit messbare Struktur Informationen über die Verteilung hydraulischer Eigenschaften liefert, so könnten die Heterogenitäten direkt in den Transportmodellen berücksichtigt werden, eine Homogenisierung wäre nicht mehr notwendig.

Kasteel et al.(2000) konnten zeigen, dass der Durchbruch eines konservativen Tracers durch eine heterogene Bodenprobe unter ausschließlicher Einbeziehung der molekularen Diffusion und unter Verzicht auf jegliche hydrodynamische Dispersion, sehr gut wiedergegeben werden konnte (Abbildung 2-b), während er sich bei Annahme eines homogenen Fließfeldes nur



Abbildung 1: Ergebnis eines Färbeexperimentes mit Brilliant Blue an einer Parabraunerde bei Orleans.

¹Interdisziplinäres Zentrum für Wissenschaftliches Rechnen, INF 368, D-69120 Heidelberg
email: olaf.ippisch@iwr.uni-heidelberg.de

²Institut für Umweltp Physik, INF 229,
D-69120 Heidelberg

durch ein MIM-Modell fitten lässt (Abbildung 2-a).

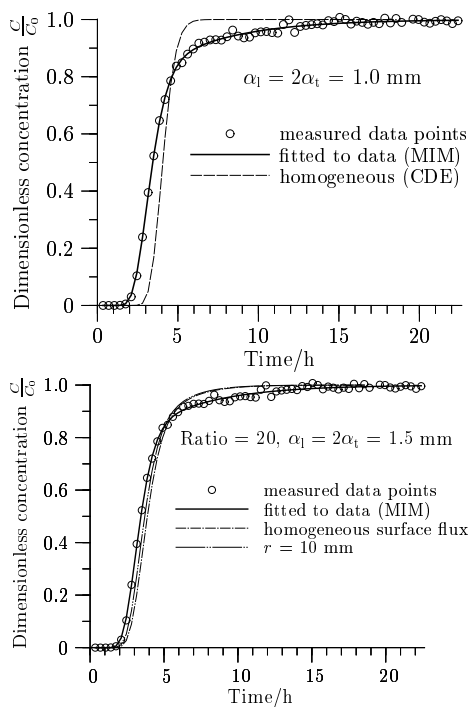


Abbildung 2: Durchbruchexperiment an einer heterogenen Bodensäule: a) Fit bei homogenem Fließfeld b) Einbeziehung eines heterogenen Fließfelds (aus Kasteel et al. (2000))

Lassen sich aus der Strukturmessung auch einzelne Materialien und ihre Verteilung identifizieren, so bleibt das Problem der Bestimmung von Transportparametern für jedes einzelne Material. Eine direkte Messung ist aufgrund der kleinen einheitlichen Bereiche schwierig. Eine Alternative bietet die Inverse Modellierung der gesamten heterogenen Probe. Wesentliche Probleme hierbei sind der Rechenaufwand, die Stabilität und die Eindeutigkeit der Inversen Modellierung. Neben der Weiterentwicklung der Computerhardware, gibt es algorithmische Verbesserungen, die eine Lösung des inversen Problems möglich erscheinen lassen.

Bei der Inversen Modellierung werden die Parameter eines Vorhersagemodells (im weiteren Vorwärtsmodell) in einem iterativen Verfahren, ausgehend von einer Anfangsschätzung, immer weiter verbessert. Die Güte der Anpassung wird durch eine Zielfunktion gemessen, die die Abweichung von gemessenen und simulierten Daten bewertet. In jedem Iterationsschritt muss dabei die Sensitivität dieser Zielfunktion auf Änderungen in den Parametern bestimmt werden. Die einfachste Möglichkeit hierzu ist, je

einen Lauf des Vorwärtsmodells für jeden Parameter zu machen, bei dem dieser Parameter leicht geändert wird. Der Rechenaufwand wächst also linear mit der Anzahl der Parameter. Verbesserungen bringen hier der "Reduced-Gauß-Newton Approach", bei dem für jeden Parameter in jedem Zeitschritt nur ein zusätzliches lineares Gleichungssystem gelöst werden muss, oder die "Adjoint-State Method", bei der ein dem Vorwärtsmodell adjungiertes Problem gelöst werden muss, was etwa dem Aufwand zur Lösung des Vorwärtsmodells entspricht. Dadurch wird der Rechenaufwand weitgehend unabhängig von der Anzahl der Parameter. Eine Stabilisierung der Inversen Modellierung lässt sich durch Multiple-Shooting Ansätze erreichen. Beide Verfahren bringen jedoch einen deutlich höheren Aufwand bei der Implementierung mit sich. Auch beim Vorwärtsmodell selbst lässt sich der Rechenaufwand senken (unvollständige Lösung der linearen Gleichungssystem im Newtonverfahren, Mehrgitterverfahren, Parallelisierung) und die Stabilität der Lösung erhöhen (Rechnung mit erhöhter Genauigkeit, line search im Newtonverfahren).

Schließlich spielt die Auswertung der Strukturmessung und der bodenphysikalische Sachverstand für die Auswahl der zu fittenden Parameter eine wichtige Rolle. So kann z.B. entweder angenommen werden, dass eine Probe aus einigen völlig verschiedenen Materialien besteht, oder dass es einen Zusammenhang zwischen den Materialien gibt, der sich durch einen Skalierungsfaktor ausdrücken lässt. Diese Wahl hat wesentliche Auswirkungen auf den Rechenaufwand.

Das Ergebnis der Inversen Modellierung lässt sich für konstruierte Proben direkt überprüfen, wenn sie aus Materialien aufgebaut wurden, die auch einzeln, homogen messbar sind. Für natürliche, ungestörte Bodenproben kann die Qualität der Anpassung durch die Vorhersagefähigkeit für Stofftransportexperimente geprüft werden. Die Entwicklung eines Inversen Modells für dreidimensionale heterogene Proben ist der nächste Schritt um dann die Möglichkeiten und Grenzen dieses Ansatzes ausloten zu können. Dabei sollen die unbedingt notwendigen Messungen bestimmt und das Versuchsdesign optimiert werden.