

Modellvergleich für Funktionen zur Beschreibung von Wasser-Retentionskurven

M. Herbst, A. Peters, und W. Durner

Institut für Geoökologie
Technische Universität Braunschweig
Bodenphysik
Langer Kamp 19c
D-38106 Braunschweig

Zusammenfassung

Die Kenntnis und Modellierung von Wasserbewegungen in der ungesättigten Bodenzone ist eine der wichtigsten Anforderungen an die Bodenhydrologie. Die Beschreibung der Wasserbewegung in der ungesättigten Bodenzone erfolgt durch numerische Modellierung der Richardsgleichung. Hierzu werden die Retentions- und die Leitfähigkeitsfunktion benötigt. Experimentell gemessene Daten für diese Zusammenhänge werden dabei durch geeignete Funktionen beschrieben, deren Parameter durch Anpassung an die Messdaten optimiert werden.

Peters und Durner (2005, 2006) haben gezeigt, dass bei der bisherigen Vorgehensweise zur Anpassung von Retentionskurven an Daten systematische Fehler gemacht werden, die für manche Böden groß sein können. Sie können durch einen sogenannten »Integralen Fit« vermieden werden. Ziel dieser Arbeit war, anhand von möglichst vielen Datensätzen aus der Literatur (i) ein Ranking von Funktionstypen in Hinblick auf ihre Eignung zur Beschreibung experimenteller Daten vorzunehmen, (ii) zu testen, ob dieses Ranking durch die Art der Fitting-Methode beeinflusst wird, und (iii) den Fehler zu quantifizieren, der durch die Verwendung der bisher üblichen Methodik gemacht wird. Zu diesem Zweck wurden zuerst möglichst viele Modelle für Retentionskurven aus der Literatur zusammengetragen. Aus über 30 Typen wurden die 14 wichtigsten Modelle für den Vergleich ausgewählt, und in die Anpassungs-Software SHYPFIT 2.0 (Peters und Durner, 2007) implementiert. Die Software erlaubt die Anpassung aller 14 Modelle nach der bisher üblichen fehlerbehafteten sowie der fehlerkorrigierten integralen Methode.

Zur Prüfung der Modelleignung wurden 202 Datensätzen aus der UNSODA Datenbank ausgewählt. Die Anpassungsgüte wurde anhand des root mean square errors (RMSE), des Bestimmungsmaßes (R^2), sowie über das Akaike Informationskriterium (AIC) quantifiziert. Wir fanden signifikante Unterschiede in der Anpassungsgüte der Modelle, allerdings unterscheiden sich die Besten oft nur marginal. Den besten Fit ergab am häufigsten das weitgehend unbekannte Modell von Globus (1987). Den im Mittel besten Fit ergab die Funktion von Kosugi (1994). Auch das weit verbreitete Modell von van Genuchten (1980) schnitt in der Variante mit freiem Parameter m sehr gut ab. Das Ranking der Modelle war von der Fitting-Methode (klassisch oder integral) unbeeinflusst. Die klassische Fit-Methode ergab in manchen Fällen eine signifikante Abweichung von den wahren Daten. Weitere detaillierte Angaben sowie die Quellenangaben zu den verwendeten Funktionen finden sich in Herbst (2007) und Herbst et al. (2008).

Literatur

- Herbst, M. (2007): Modellvergleich für Funktionen zur Beschreibung von Wasser-Retentionskurven. – Diplomarbeit, Institut für Geoökologie, Abteilung Bodenphysik und Bodenkunde, TU Braunschweig.
- Herbst, M., A. Peters und W. Durner (2008): Model comparison for unimodal water retention curves. – Soil Science Society of America Journal, in Vorbereitung.
- Peters, A., und W. Durner (2005): Verbesserte Methode zur Bestimmung der Retentionsfunktion aus hydrostatischen Säulenexperimenten, – Mitteilg. der Deutschen Bodenkundlichen Gesellschaft. 107, 83-84.
- Peters, A., und W. Durner (2006): Improved estimation of soil water retention characteristics from hydrostatic column experiments, – Water Resour. Res., 42, W11401, doi:10.1029/2006WR004952.
- Peters, A. und W. Durner (2007): SHYPFIT 2.0 User's Manual, – Internal Report. Institut für Geoökologie, Technische Universität Braunschweig, unveröffentlicht.

Modellvergleich für Funktionen zur Beschreibung von Wasser-Retentionskurven

Michael Herbst, Andre Peters und Wolfgang Durner, Abteilung Bodenkunde und Bodenphysik, Institut für Geoökologie, Technische Universität Braunschweig



Einleitung

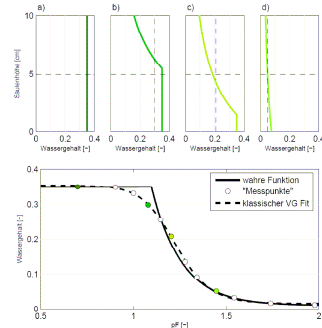
Die Kenntnis der Wasserbewegung und des daran gebundenen Stofftransports in der ungesättigten Bodenzone ist eine der wichtigsten Anforderungen an die Bodenhydrologie. Die Modellierung der Wasserbewegung in der ungesättigten Bodenzone erfolgt durch numerische Simulation auf Basis der Richards-Gleichung. Hierzu werden die Retentions- und die Leitfähigkeitsfunktion benötigt.

Experimentell gemessenen Daten für diese Zusammenhänge werden dabei durch geeignete Funktionen beschrieben, deren Parameter durch Anpassung an die Messdaten optimiert werden. Peters und Durner (2005, 2006) haben gezeigt, dass bei der bisherigen Vorgehensweise zur Anpassung von Retentionskurven an Daten systematische Fehler gemacht werden, für manche Böden groß sein können.

Ziel dieser Arbeit war, anhand von möglichst vielen Datensätzen aus der Literatur (i) ein Ranking von Funktionstypen in Hinblick auf ihre Eignung zur Beschreibung experimenteller Daten vorzunehmen, (ii) zu testen, ob dieses Ranking durch die Art der Fitting-Methode beeinflusst wird, und (iii) den Fehler zu quantifizieren, der durch die Verwendung der bisher üblichen Methodik gemacht wird.

Theorie und Methodik

Linearisierungsfehler bei Messdaten



Die oberen Grafiken zeigen die Wassergehaltsverteilung in einer 10 cm hohen Laborsäule im Gleichgewichtszustand (grüne Linien), wobei am unteren Säulenrand die Wasserspannung von 0, 7, 11 und 23 cm anliegt (von links nach rechts).

Die untere Grafik zeigt die Messpunkte, welche aus dem oben beschriebenen Versuchsaufbau resultieren würden. Die mit den verschiedenen Grünönen gefüllten Kreise stellen die Messpunkte dar, die aus den in den oberen Grafiken gezeigten Schritten der Messreihe entstanden sind. Gezeigt sind weiter die wahre Retentionsfunktion des hypothetischen Bodens (Brooks & Corey-Typ), sowie eine Retentionsfunktion als Ergebnis eines klassischen Fits mit dem Modell von van Genuchten (1980). Es ist offenbar, dass das scheinbar „beste“ Modell falsch ist.

Vermeidung des Fehlers durch integrale Anpassung

Exakte Lösung für gemessene Wassergehalte (Peter und Durner, 2006):

$$\bar{\theta}(h) = \frac{1}{L} \int_{h_b}^{h_a} \theta(h) dh$$

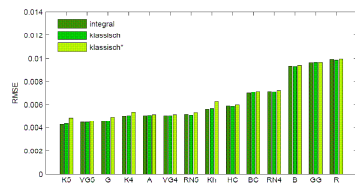
Dies führt zu folgender Zielfunktion im Parameter-Optimierungsalgorithmus

$$\Phi(\beta, h) = \sum_{i=1}^n w_i \left[\bar{\theta}_i - \frac{1}{L} \int_{h_b}^{h_a} \hat{\theta}(\beta, h) dh \right]^2$$

Vierzehn Modelle für Retentionskurven wurden für einen Vergleich ausgewählt, und mittels der Anpassungs-Software SHYPPFIT 2.0 (Peters und Durner, 2007) an 202 Datensätze aus der Datenbank UNSODA angepasst. Die Anpassungsgüte wurde über den mittleren Fehler (RMSE) und das Akaike-Modellierungskriterium AIC quantifiziert. Alle Modelle repräsentieren unimodale Porengrößenverteilungen und besitzen drei bis fünf Parameter.

- BC Brooks and Corey (1964) $S_e = \begin{cases} 1 & \text{für } \psi \leq 1 \\ (\psi)^{-2} & \text{für } \psi > 1 \end{cases}$
- K5 Kosugi (1994) $K5 S_e = \begin{cases} 1 & \text{für } \psi \leq 1 \\ \frac{1}{2} \text{erfc} \left(\frac{\ln(\psi)}{\sqrt{2}} \right) & \text{für } \psi > 1 \end{cases}$
- VG5 van Genuchten (1980) $S_e = \frac{1}{(1 + |\psi|)^m}$
- VG4 van Genuchten (1980) $S_e = \frac{1}{(1 + |\psi|)^{2m}}$
- D McKee and Bahl (1984) $S_e = \frac{1}{1 + |\psi|^{2m}}$
- G Globus (1987) $S_e = \frac{1}{1 + |\psi|^{2m}}$
- HC Hutson and Cass (1987) $S_e = \begin{cases} 1 - (\psi)^{\alpha} & \text{für } \psi \leq 1 \\ \frac{1}{1 + |\psi|^{\alpha}} & \text{für } \psi > 1 \end{cases}$
- R Russo (1988) $S_e = \left[1 + \frac{1}{2} |\psi| \right]^{-2m}$
- Kosugi (1994) $K5 S_e = \begin{cases} 1 & \text{für } \psi \leq 1 \\ \frac{1}{2} \text{erfc} \left(\frac{\ln(\psi)}{\sqrt{2}} \right) & \text{für } \psi > 1 \end{cases}$
- Rossi and Nimmo (1994) $RNI \text{ bzw. } \frac{dS_e}{d\psi} = \begin{cases} 1 - 0.5(\psi)^{\beta} & \text{für } \psi \leq 1 \\ (\psi)^{-\beta} - 0.5(\psi)^{-\beta} + 0.5 \ln \left(\frac{\psi}{2} \right) & \text{für } \psi > 1 \end{cases}$
- RNI mit $\alpha = \frac{2 - \beta \ln(2) \text{erfc}(\frac{\beta}{\sqrt{2}})}{2\beta \text{erfc}(\frac{\beta}{\sqrt{2}})}$ und $\beta = \frac{2 - \beta \ln(2) \text{erfc}(\frac{\beta}{\sqrt{2}})}{2\beta \text{erfc}(\frac{\beta}{\sqrt{2}})}$
- Kosugi (1996, 2007) $K4 S_e = \frac{1}{2} \text{erfc} \left(\frac{\ln(\psi)}{\sqrt{2}} \right)$
- Assouline et al. (1998) $A S_e = 1 - \frac{1}{2} \left(\frac{\psi}{1 + \psi} \right)^2$
- GM Gashimov and Grant (2004) $GM S_e = \theta_s \left(\frac{1 + \psi^{\alpha}}{1 + \psi^{\beta}} \right)^{\frac{1}{\alpha - \beta}}$
- Khaliq et al. (2006) $Kh S_e = \theta_s \left(1 - \frac{\psi}{1 + \psi} \right)^{\alpha} + \left[\theta_s - \theta_s \left(1 - \frac{\psi}{1 + \psi} \right)^{\alpha} \right] \frac{1}{2} \text{erfc} \left(\frac{\ln(\psi)}{\sqrt{2}} \right)$

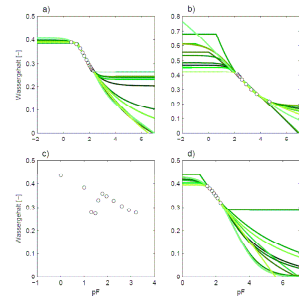
Ergebnisse



Die Mittelwerte des RMSE aus 202 Datensätzen für die 14 ausgewählten Modelle ergeben die beste mittlere Anpassung für das Modelle K5. Das Ranking ist für die integrale und klassische Anpassungsmethode nicht verschieden. Die klassische (Fehl-)Anpassung führt in geringem Ausmaß zu erhöhten Fehlern.

Funktion	RMSE			R ²			AIC		
	1.	2.	3.	1.	2.	3.	1.	2.	3.
K5	25	33	19	26	35	21	11	12	32
VG5	30	37	20	30	30	20	7	19	22
C	61	17	20	61	17	19	19	13	23
K4	5	10	31	4	24	92	28	23	13
A	15	16	6	15	16	6	21	14	13
VG4	-	9	17	-	10	17	15	16	14
RN5	46	6	7	46	6	7	18	14	11
K1	13	15	13	13	8	14	26	18	8
HC	3	8	31	3	8	31	7	28	27
BC	1	7	10	1	7	10	9	8	9
RN4	-	33	13	-	33	13	24	21	10
B	2	1	2	2	1	2	3	3	2
GG	-	3	-	-	3	-	13	8	6
R	-	6	-	-	6	-	6	1	8

Ranking der gefitteten Modelle: Belegung der ersten drei Plätze der ausgewählten Modelle bei Verwendung der integralen Fitmethode jeweils für RMSE, R² und AIC. Die Plätze eins und zwei sind rot bzw. gelb markiert. Ein Drittel aller Datensätze wird am besten durch das Globus-Modell (G) gefittet, ein knappes Viertel durch RN4.



Spekulativer Verlauf der Retentionsfunktionen außerhalb des durch Messdaten abgedeckten Bereichs. Fits an die Datensätze 2432 (a), 4591 (b) und 3381 (d) sowie der nicht verwendete Datensatz 1114 (c).

Fazit

Wir fanden signifikante Unterschiede in der Anpassungsgüte der unterschiedlichen Modelle, die Besten allerdings unterscheiden sich oft nur marginal. Das Modell von Kosugi (1994) war im Mittel der drei Gütekriterien das Beste. Am häufigsten den besten Fit ergab allerdings das Globus-Modell. Auch das Fünf-Parameter-van Genuchten-Modell (van Genuchten, 1980) sowie die Modelle von Kosugi (1996, 1997) schnitten sehr gut ab. Das Ranking der Modelle blieb von der Fitting-Methode (klassisch oder integral) unbeeinflusst.

Die Unterschiede der angepassten Retentionskurven im Bereich der Messdaten sind sehr gering im Vergleich zu den Unterschieden im Extrapolationsbereich zur Sättigung und zur Austrocknung hin. Dies hat Auswirkungen auf Simulationen des Wasserhaushalts mit den Modellen. Um Unsicherheiten zu vermindern sind Bestimmungsverfahren mit weitem Potentialbereich anzuwenden. Geeignet ist z.B. die vereinfachte Verdunstungsmethode nach Schindler in der integralen Implementierung durch HYPPOP (Fa. UMS München).

Literatur

- Herbst, M. (2007) Modellvergleich für Funktionen zur Beschreibung von Wasser-Retentionskurven. – Diplomarbeit, Institut für Geoökologie, Abteilung Bodenphysik und Bodenkunde, TU Braunschweig.
- Peters, A., und W. Durner (2005): Verbesserte Methode zur Bestimmung der Retentionsfunktion aus statischen Säuleneperimenten. – Mittlg. der Deutschen Bodenkundlichen Gesellschaft, 107, 83-84.
- Peters, A., und W. Durner (2006): Improved estimation of soil water retention characteristics from hydrostatic column experiments. – Water Resour. Res. 42, W11401, doi:10.1029/2006WR004952.
- Peters, A. und W. Durner (2007): SHYPPFIT 2.0 User's Manual. – Internal Report, Institut für Geoökologie, Technische Universität Braunschweig.