

Parameteridentifikation bei Zweiphasen-Strömungen: Theorie und Numerik

S. Potthoff & E. Perau

Universität Essen, Fachbereich Bauwesen, Grundbau und Bodenmechanik

Potthoff, Susanne; Perau, Eugen (2002): Parameteridentifikation bei Zweiphasen-Strömungen: Theorie und Numerik, in: Tagungsband zum Vierten Workshop **Teilgesättigte Böden**, Weimar 2002, Bauhaus-Universität Weimar, Schriftenreihe Geotechnik Heft 08, S. 33-42, download über www.uni-due.de/geotechnik/ email: eugen.perau@uni-due.de

KURZFASSUNG: Jedes Modell zur Beschreibung physikalischer Vorgänge im Boden enthält Parameter, die das Materialverhalten berücksichtigen. Bei vielen Problemen in der Geotechnik sind die Parameter aus den Meßgrößen von Versuchen nur indirekt bestimmbar. Für diesen Vorgang der Parameteridentifizierung existiert keine universell anwendbare Lösungsstrategie. Ausgehend von dem heute am meisten verwendeten Modell zur Beschreibung von teilgesättigten Strömungsvorgängen im Boden wird ein numerischer Algorithmus basierend auf der gemischten Finite Elemente Methode vorgestellt, der die Gleichungen der direkten und der inversen Problemstellung löst. Anhand der Parameterbestimmung aus einem synthetischen Experiment werden verschiedene Schritte und Überlegungen näher beleuchtet, die sich auch auf andere inversen Problemstellungen übertragen lassen.

1 EINFÜHRUNG

Es existiert heute eine Vielzahl von Modellen zur Beschreibung der Strömung von Wasser und Luft durch Böden. Die meisten dieser Gleichungssysteme beruhen auf experimentell belegten intuitiven Annahmen. Im Gegensatz dazu wurde am Fachgebiet Grundbau und Bodenmechanik der Universität Essen ein mechanisches Modell entwickelt, das auf rationaler Mechanik basiert (Perau 2001). Dieses Modell wurde inzwischen für den Spezialfall der Strömung im starren Korngefüge unter Verwendung der gemischten Finite Elemente Methode nach Raviart-Thomas einer numerischen Lösung zugeführt (Potthoff & Perau 2002).

Abschließend steht die Identifizierung der Bodenparameter aus. In einem ersten Bearbeitungsschritt wurde das Problem grundsätzlich aufbereitet, indem die Formulierung von direkter und inverser Problemstellung definiert wurde (Perau & Potthoff 2002). Die erforderlichen Schritte und Überlegungen wurden hier anhand des Laborversuchs zur Ermittlung der gesättigten Durchlässigkeit exemplarisch mittels analytischer Gleichungen erläutert.

In diesem Artikel werden die Betrachtungen auf einen numerischen Algorithmus zur Parameterbestimmung ausgeweitet. Am Beispiel des Darcy-Buckingham-Gesetzes mit der Parametrisierung nach Mualem und van Genuchten werden zunächst die grundlegenden Begriffe der mathematischen Formulierung und der direkten Problemstellung vorgestellt. Ein Programm zur Simulation von teilgesät-

tigten Strömungen dient als Basis einer Parameterbestimmung, die an einem synthetischen Experiment vorgenommen wird.

Die Verwendung eines bekannten Modells bietet gegenüber dem neu entwickelten Zweiphasen-Strömungsmodell den Vorteil, daß es vielfach in der Literatur beschrieben wird und damit eine Konzentration auf die numerischen Aspekte ermöglicht. Da nur die Wasserphase bilanziert wird, reduziert sich die Anzahl der erforderlichen Gleichungen auf zwei und der Strömungsprozeß wird durch zwei Prozeßvariablen beschrieben. Von den insgesamt fünf Parametern zur Beschreibung der Bodeneigenschaften ist auf Grund vieler Erfahrungswerte nur die inverse Bestimmung von zwei Parametern erforderlich.

2 PARAMETERBESTIMMUNG BEI STRÖMUNGSPROBLEMEN

Der Artikel von Perau & Potthoff (2002) gibt eine Zusammenstellung zu inversen Problemstellungen in der Geotechnik. Bei der Eingrenzung der Problematik auf Strömungen ist zwischen zwei großen Gebieten zu unterscheiden: Den gesättigten und den teilgesättigten Strömungen.

Die Ermittlung der Durchlässigkeitsbeiwerte gesättigter Böden an homogenen Proben im Labor wurde erschöpfend behandelt. Probleme bestehen in der Erfassung inhomogener Zustände in großflächigen Bereichen. Dabei kommen oftmals statistische Methoden der inversen Parameterbestimmung zur

Anwendung. Eine ausführliche Übersicht zur Modellierung von Grundwasserträgern mit variablen gesättigten Durchlässigkeitsbeiwerten findet sich in den Arbeiten von Yeh (1986) und McLaughlin & Townly (1996).

Teilgesättigte Strömungen werden vielfach mit dem Gesetz von Darcy-Buckingham beschrieben, für das die hydraulischen Bodenparameter bestimmt werden müssen. Das Aussehen der dazu benötigten Zusammenhänge von Kapillarspannung und relativer Durchlässigkeit in Abhängigkeit vom Wassergehalt ist bis heute nicht abschließend geklärt, so daß auch Untersuchungen an homogenen Proben im Labor Gegenstand der Forschung sind.

Die heute am meisten verwendete Parametrisierung stammt von Mualem (1976) und van Genuchten (1980). In der Literatur findet sich eine große Vielfalt von Vorschlägen, wie die Parameter des Modells bestimmt werden sollen. Die Zusammenstellungen von Mangels (2000) und Kool et al. (1987) weisen jedoch auf große Unterschiede und teilweise widersprüchliche Aussagen zwischen den Ansätzen hin.

Es ist davon auszugehen, daß die Entwicklung von Modellen zur Beschreibung von Mehrphasenströmungen im Boden auch weiterhin parallel zu der Entwicklung in der Computertechnologie voranschreitet. In der Regel ist diese „Präzisierung“ der Modelle mit der Einführung neuer Bodenparameter verbunden. Diese müssen oftmals mit großem Aufwand aus anderen Meßgrößen eines Versuchs abgeleitet werden. Daher werden sie in der Praxis oftmals nur aus Erfahrungswerten abgeschätzt, wodurch die Verbesserungen in den neuen Modellen geschmälert werden.

Sowohl für die Berechnung eines Problems mit bekannten Parametern, wie auch für die Rückrechnung von Bodenparametern aus Meßgrößen eines Versuchs ist die Entwicklung numerischer Lösungsalgorithmen unumgänglich. Dabei ist zu beachten, daß für die inverse Parameterbestimmung kein universell anwendbarer Optimierungsalgorithmus existiert und für jede Problemstellung neu entwickelt werden muß.

3 ABLAUF EINER PARAMETERIDENTIFIZIERUNG

Die Bestimmung von Parametern aus einem Versuch ist ein rein technischer Vorgang, für den drei Bestandteile erforderlich sind: Modell, Versuch und Lösungsvorschrift.

Bevor die Parameter bestimmbar sind, müssen diese drei Bestandteile entwickelt und aufeinander abgestimmt werden. Der Prozeß wird im folgenden „Parameteridentifizierung“ genannt und gliedert sich in mehrere Ebenen.

Zu Beginn ist eine genaue Formulierung des Problems unumgänglich. Dabei wird festgelegt, ob

eine makroskopische oder mikroskopische Betrachtungsweise angewandt wird und welche physikalischen Effekte berücksichtigt werden sollen. Im Rahmen der mathematischen Modellbildung wird die Problemstellung in Gleichungen gefaßt und es werden die Parameter eingeführt, die das Verhalten verschiedener Materialien charakterisieren. In Abhängigkeit von der Struktur des Modells wird hierbei auch ein numerisches Simulationsprogramm entwickelt, um das entstehende Gleichungssystem zu lösen.

Abgestimmt auf das Modell mit den gesuchten Parametern erfolgt die Planung der Parameterbestimmung. Dabei wird im Idealfall die Vorbereitung der Versuche und die Entwicklung einer Lösungsvorschrift parallel bearbeitet. Die Aufgabe von (Labor-)Versuchen ist die Herstellung von systematischen Beziehungen zwischen physikalischen Größen, die gemessen werden. Alle Effekte, die in dem verwendeten Modell berücksichtigt werden, müssen aus dem Versuch erkennbar und erfaßbar sein.

Der Zusammenhang zwischen den Meßwerten und den gesuchten Parametern wird durch die Lösungsvorschrift hergestellt. Die Mathematik stellt an eine solche Vorschrift die Forderung nach der Existenz, Eindeutigkeit und Stabilität der Lösung (Louis 1989). Die Entwicklung numerischer Lösungsalgorithmen erfordert darüber hinaus Betrachtungen bezüglich der Effizienz, Stabilität und Genauigkeit (Banks & Kunisch 1989).

Am Ende der Planungsphase steht im Idealfall eine Kombination aus dem Modell, einem Versuch oder einer Versuchsreihe mit dazugehörigem Meßkonzept und einer Lösungsvorschrift zur Verfügung, mit der aus den Meßdaten des Versuchs die Kennwerte für das untersuchte Material bestimmt werden können.

Nachdem erstmals die Meßdaten aus dem ausgewählten Versuchsprogramm aufgenommen und daraus die Materialparameter bestimmt wurden, sollten die Ergebnisse im Rahmen jeder Parameteridentifizierung einer Bewertung unterzogen werden. Gegebenenfalls ist eine Optimierung einzelner oder aller Bestandteile erforderlich.

4 MATHEMATISCHE BESCHREIBUNG DES STRÖMUNGSPROZESSES

Strömungsvorgänge im Boden entstehen durch Potentialunterschiede und werden von dessen Durchlässigkeitsverhalten beeinflusst. Bei der Ausweitung des Darcy-Gesetzes der gesättigten Strömung auf teilgesättigte Böden durch den Buckingham-Ansatz wird als antreibende Kraft das hydraulische Potential angesetzt und die Durchlässigkeit zusätzlich vom Wassergehalt beeinflusst.

$$\mathbf{v} = -k(\theta) \cdot \text{grad } p \quad (1)$$

Mit p = hydraulisches Potential; \mathbf{v} = Filtergeschwindigkeit und $k(\theta)$ = Durchlässigkeitsbeiwert in Abhängigkeit des volumetrischen Wassergehalts θ .

Das hydraulische Potential $p = z - \psi$ setzt sich aus dem Gravitationspotential z und der Saugspannung ψ zusammen. Im gesättigten Fall stellt ein Wert $\psi \leq 0$ einen Ersatz für den hydrostatischen Druck dar, so daß sich mit dem Ansatz Strömungen im gesättigten und im teilgesättigten Boden berechnen lassen.

Ergänzt wird das Darcy-Buckingham-Gesetz um die Kontinuitätsgleichung, über die die zeitliche Änderung des Wassergehalts mit der Filtergeschwindigkeit korrespondiert.

$$\frac{\partial \theta(p)}{\partial t} + \text{div } \mathbf{v} = 0 \quad (2)$$

Das mathematische Modell enthält als Prozeßvariablen die Filtergeschwindigkeit \mathbf{v} und das hydraulische Potential p . Das Bodenverhalten wird durch die Beziehungen $\theta(p)$ und $k(\theta)$ beschrieben. Der Wassergehalt besitzt im gesättigten Fall einen konstanten Wert. Am gebräuchlichsten ist dabei heute ein Ansatz nach Mualem (1976) und van Genuchten (1980), der in der folgenden Form die Beziehung $\theta(p)$ in Abhängigkeit der Saugspannung angibt.

$$\theta(\psi) = \begin{cases} \theta_s & \psi < 0 \\ \theta_r + (\theta_s - \theta_r) / \left(1 + (\alpha\psi)^n\right)^{1-\frac{1}{n}} & \psi \geq 0 \end{cases} \quad (3)$$

Die Durchlässigkeits-Sättigungs-Beziehung wird in Relation zum gesättigten Durchlässigkeitsbeiwert aufgestellt. Die dargestellte Formulierung geht auf Mualem (1976) und van Genuchten (1980) zurück.

$$k(\theta) = k_s \left(\frac{\theta - \theta_r}{\theta_s - \theta_r} \right)^{0,5} \cdot \left[1 - \left(1 - \left(\frac{\theta - \theta_r}{\theta_s - \theta_r} \right)^{\frac{n}{n-1}} \right)^{1-\frac{1}{n}} \right]^2 \quad (4)$$

Mit θ_s = Wassergehalt bei Sättigung; θ_r = Restwassergehalt; k_s = gesättigter Durchlässigkeitsbeiwert; sowie α , n als Parameter.

Die beiden parameterführenden Funktionen 3 und 4 repräsentieren das bekannte Mualem-van-Genuchten-Modell (Busch et al. 1993, Mangels 2000).

Mit dem Gleichungssystem eines direkten Problems wird ein konkretes Anfangs-Randwertproblem gelöst. Dazu ist neben den Feldgleichungen 1-4 auch die Vorgabe der Materialparameter sowie die Angabe des betrachteten Zeitraums und des Strömungsgebiets erforderlich (Perau & Potthoff 2002).

Zusätzlich ist zu Beginn jeder Berechnung auf dem gesamten betrachteten Strömungsgebiet das hydraulische Potential als Anfangsbedingung vorzugeben. Während des betrachteten Strömungsprozesses sind die Randbedingungen an den Begrenzungen des Gebiets festzulegen. Die gewählte Umsetzung sieht vor, daß auf einem Teil des Randes Γ_D der Wert des hydraulischen Potentials und auf dem restlichen Rand Γ_N die Normalkomponente der Filtergeschwindigkeit angegeben wird.

$$\begin{aligned} p &= p^D & \text{auf } \Gamma_D \\ \mathbf{n} \cdot \mathbf{v} &= v^N & \text{auf } \Gamma_N \end{aligned} \quad (5)$$

5.1 Numerische Lösung mit der gemischten Finite Element Methode

Die numerische Umsetzung des direkten Problems erfolgt mit Hilfe der gemischten Finite Element Methode nach Raviart & Thomas (1977), die bereits erfolgreich auf das neu entwickelte Zweiphasen-Strömungsmodell angewendet wurde (Potthoff & Perau 2002). Bei der gemischten Methode werden hier das hydraulische Potential und die Filtergeschwindigkeit gleichzeitig approximiert, und es wird direkt mit den Gleichungen 1 und 2 als Ausgangssystem gearbeitet.

Die Zeitabhängigkeit des Systems wird durch Anwendung eines impliziten Euler-Verfahrens erfaßt, bei dem die Prozeßvariablen aus den Ergebnissen des vorangegangenen Zeitschritts berechnet werden.

$$\theta(p) - \theta(p^{\text{alt}}) + \tau \cdot \text{div } \mathbf{v} = 0 \quad (6a)$$

$$\frac{\mathbf{v}}{k(\theta(p))} + \text{grad } p = \mathbf{0} \quad (6b)$$

mit τ = Zeitschrittgröße; p^{alt} = Wert des vorangegangenen Zeitschritts t ; und p , \mathbf{v} = aktuelle Prozeßvariablen zum Zeitpunkt $t+\tau$

Die spätere Parameteridentifizierung soll anhand von Versuchen mit Bodensäulen erfolgen, die in eine Richtung durchströmt werden. Die Ortsdiskretisierung wird daher in einer 1D-Programmvariante aufgestellt.

Die Lösung wird wie bei allen Finite Elemente Ansätzen nur noch näherungsweise innerhalb bestimmter Funktionen gesucht. Für die Bestimmung

des hydraulischen Potentials wird die Ansatzfunktion Φ verwendet, für die Approximation der vektorwertigen Filtergeschwindigkeit die Ansatzfunktion Ψ (s. Tabelle 1).

Tabelle 1. Festlegung der Näherungsansätze

exakte Lösung	Näherungslösung	Näherungsansatz
p	\tilde{p}	$f(\Phi)$
\mathbf{v}	$\tilde{\mathbf{v}}$	$f(\Psi)$

Die Randbedingungen für die vektorwertigen Flüsse werden bei der gemischten Methode nach Raviart-Thomas direkt in die Ansatzfunktionen eingebaut (Raviart & Thomas 1977, Brezzi & Fortin 1991). Der Näherungsansatz für die Filtergeschwindigkeit muß die Randbedingungen auf den Neumann-Rändern entsprechend den Gleichungen 5 erfüllen, wobei die Ansatzfunktion Ψ den homogenen Randbedingungen genügt. Die Ansatzfunktion Φ wird zunächst unabhängig von den Dirichlet-Randbedingungen gewählt.

Für das Aufstellen der schwachen Formulierung wird das Gleichungssystem mit geeigneten Testfunktionen multipliziert. Entsprechend dem Verfahren nach Galerkin werden hierfür die Ansatzfunktionen verwendet. Die gesuchte Näherungslösung wird gefunden, indem die Gleichungsfehler bezüglich der Testfunktionen im integralen Mittel über dem Gebiet Ω zu Null werden. Durch partielle Integration wird das Integral mit dem Gradienten des hydraulischen Potentials aufgespalten, so daß die Dirichlet-Randbedingung eingebaut werden kann.

$$\int_{\Omega} \left(\theta(\tilde{p}) - \theta(p^{\text{alt}}) \right) \cdot \Phi \, dz + \tau \cdot \int_{\Omega} \text{div} \tilde{\mathbf{v}} \cdot \Phi \, dz = 0 \quad (7a)$$

$$\int_{\Omega} \frac{\tilde{\mathbf{v}} \cdot \Psi}{k(\theta(\tilde{p}))} \, dz + \int_{\Omega} \tilde{p} \cdot \text{div} \Psi \, dz + \int_{\Gamma} p^D \cdot \mathbf{n} \cdot \Psi \, ds = 0 \quad (7b)$$

In einem abschließenden Schritt wird das Gleichungssystem mit Hilfe des Newton-Verfahrens linearisiert.

Nach der Unterteilung des Strömungsgebiets in eine endliche Anzahl von Elementen mit der Länge h werden die Prozeßvariablen unter Verwendung der Raviart-Thomas Elemente niedrigster Ordnung bestimmt. Der Fluß entlang der Elemente wird bei diesem Ansatz linear angesetzt und im 1-dimensionalen Fall durch zwei Basisfunktionen beschrieben.

$$\Psi_1^e(z) = -\frac{1}{h} \cdot z^e + 1 \quad \Psi_2^e(z) = \frac{1}{h} \cdot z^e \quad (8)$$

Diese werden durch einen elementweise konstanten Ansatz zur Approximation des hydraulischen Potentials ergänzt.

$$\Phi^e(z) = 1 \quad (9)$$

Brezzi & Fortin (1991) weisen nach, daß dieser Ansatz hier zu eindeutigen Lösungen führt.

6 INVERSE PROBLEMSTELLUNG

Inverse Problemstellungen treten auf, wenn die Bodenparameter nicht direkt bestimmt werden können, sondern mit Hilfe der Daten gemessener Größen berechnet werden müssen. Die Untersuchung inverser Probleme erfordert wie die Formulierung des direkten Problems die Festlegung eines betrachteten Gebiets und des untersuchten Zeitraums. Ebenso ist die Angabe von Anfangs- und Randbedingungen erforderlich. Als zusätzliche Information wird eine endliche Anzahl von Meßwerten der Prozeßvariablen an ausgewählten Orten und Zeitpunkten für die Berechnung verwendet.

Mit dem Simulationsprogramm des direkten Problems steht bereits ein Werkzeug zur Verfügung, mit dem sich Verbindungen zwischen den Meßwerten und den gesuchten Parametern herstellen lassen. Die einfachste Möglichkeit besteht darin, den Versuch nachzurechnen und die Parameter dabei so lange zu variieren, bis das Rechenergebnis mit den Meßwerten des Versuchs übereinstimmt. Dieses sogenannte Trial-and-Error-Verfahren besitzt den Vorteil, daß keine zusätzlichen mathematischen Gleichungen erforderlich sind und bei wenigen zu bestimmenden Parametern schnell eine Lösung des Problems gefunden werden kann. Bei unbekanntem Problemstellungen und vielen Parametern kann das Verfahren naturgemäß sehr aufwendig sein. Der größte Nachteil besteht jedoch darin, daß von einer gefundenen Lösung nicht behauptet werden darf, sie sei z.B. die einzige. Das Verfahren eignet sich neben der Anwendung auf einfache und transparente Modelle auch zum Testen und Verifizieren neuer Modelle (Perau & Potthoff 2002).

Die Entwicklung eines numerischen Algorithmus zur Parameteridentifizierung erfordert hingegen zusätzliche Arbeitsschritte. Zunächst sind die Erwartungen an die gesuchte Lösung zu formulieren. Es gibt vielfältige Gründe, warum keine exakte Lösung des Problems gefunden werden kann: so stellen mathematische Modelle immer nur Näherungen an das tatsächliche Verhalten dar, Meßwerte sind ungenau und unvollständig, Störeinflüsse sind bei Versuchen unvermeidbar und schwer zu erfassen. Letztendlich treten auch bei numerischen Umsetzungen Fehler in der Diskretisierung und der Systemmodellierung auf.

Daher kann ein mathematischer Algorithmus immer nur dazu dienen, das Modell *optimal* an die Meßwerte eines Versuchs anzupassen. Um ein Maß für die Güte einer Lösung zu besitzen, ist eine Funktion erforderlich, die ein Fehlerkriterium und die Definition eines Abstandsmaßes als Minimierungskriterium bereitstellt.

6.1 Entwicklung der Zielfunktion

Es gibt zwei Arten von Fehlerkriterien, die zur Formulierung des inversen Problems herangezogen werden können (Sun 1994, Yeh 1986). Bei dem direkten Ansatz werden die Differentialgleichungen des mathematischen Modells verwendet. Die Meßwerte ersetzen die Prozeßvariablen an den entsprechenden Orten und Zeitpunkten, so daß der Gesamtzeitraum und das gesamte betrachtete Strömungsgebiet in die Auswertung miteinbezogen werden.

Im Folgenden wird ein indirekter Ansatz verwendet, bei dem die Prozeßvariablen in Abhängigkeit der gesuchten Parameter aus den Gleichungen des direkten Problems berechnet und anschließend mit den Meßwerten verglichen werden.

Dabei werden hier zunächst einige Annahmen getroffen. Der gesättigte Durchlässigkeitsbeiwert k_s sowie die Grenzwassergehalte θ_r und θ_s sollen der Einfachheit halber aus anderen Versuchen bereits bekannt sein. Im Rahmen der inversen Problemstellung sind dann lediglich die Parameter α und n zu bestimmen. Dazu steht eine endliche Anzahl von j Meßwerten $\tilde{p}(t_j, x_p)$ und $\tilde{v}(t_j, x_v)$ zu den Meßzeitpunkten t_j an den Meßorten x_i zur Verfügung.

Zu Demonstrationszwecken wird das Verfahren so vereinfacht, daß zu jedem Zeitpunkt nur ein Meßwert aus jeder Gruppe betrachtet wird und diese mit einer konstanten Zeitschrittweite aufgenommen werden. Die Prozeßvariablen $p_j(\alpha, n, t_j, x_p)$ und $v_j(\alpha, n, t_j, x_v)$ werden mit dem vorgestellten Simulationsprogramm an den Meßorten zu den Meßzeitpunkten berechnet.

Der Vergleich der berechneten und der gemessenen Werte ergibt in der Regel eine Gesamtdifferenz, die durch Variation der gesuchten Bodenparameter minimiert werden soll. Zur Lösung wird bei der Parameterbestimmung sehr häufig nach dem Gauß'schen Prinzip der Minimierung der Fehlerquadrate verfahren (Beck & Arnold 1977). Die Zielfunktion wird dabei über die Quadrate der Differenzen formuliert. Bei einer Anzahl M von Meßwerten lautet die Zielfunktion $Z(\alpha, n)$ hier:

$$Z = \min_{\alpha, n_i} \left[\sum_{j=1}^M (p_j(\alpha, n_i) - \tilde{p})^2 + \sum_{j=1}^M (v_j(\alpha, n_i) - \tilde{v})^2 \right] \quad (10)$$

Die Minimierung dieser Zielfunktion erfolgt unter Verwendung iterativer Lösungsverfahren. Da die gesamte Theorie der Optimierung ein sehr weites Feld darstellt, sei lediglich auf die Werke von Nocedal & Wright (1999) und Marti & Gröger (2000) verwiesen.

Die nichtlineare Zielfunktion 10 wird in eine Folge von linearen Gleichungen überführt. Dazu wird das Gauß-Newton-Verfahren verwendet und die Änderungen der gesuchten Parameter in jedem Iterationsschritt berechnet.

$$Z = \min_{\alpha, n_i} \sum_{j=1}^M \left\| \begin{bmatrix} p_j(\alpha, n) - \tilde{p} \\ v_j(\alpha, n) - \tilde{v} \end{bmatrix} + \dots \right. \\ \left. \dots + \begin{bmatrix} \frac{\partial p_j}{\partial \alpha}(\alpha, n) & \frac{\partial p_j}{\partial n}(\alpha, n) \\ \frac{\partial v_j}{\partial \alpha}(\alpha, n) & \frac{\partial v_j}{\partial n}(\alpha, n) \end{bmatrix} \cdot \begin{bmatrix} \delta \alpha \\ \delta n \end{bmatrix} \right\|^2 \quad (11)$$

Die Newton-Korrekturen $\delta \alpha$ und δn werden mit Hilfe der Methode der Normalgleichungen bestimmt (Bronstein 1996). Diese ergibt ein System aus zwei linearen Gleichungen, das neben den Prozeßvariablen der direkten Problemstellung zusätzlich deren Ableitungen nach der aktuell untersuchten Schätzung der Bodenparameter enthält. Diese lassen sich durch entsprechendes Differenzieren aus dem Gleichungssystem 7 des Galerkin-Verfahrens berechnen.

7 BEISPIELRECHNUNGEN

7.1 Synthetisches Experiment

Die Parameterbestimmung erfolgt hier anhand eines synthetischen Experiments. Dabei wird das Experiment, aus dem die Bodenparameter bestimmt werden sollen, mit dem Gleichungssystem des direkten Problems numerisch simuliert. Die Verwendung eines solchen synthetischen Experiments dient dem Verständnis eines Identifizierungsproblems und hilft, den Einfluß der Variabilität von Größen zu klären. Durch die Verwendung eines Simulationsprogramms sind alle auftretenden physikalischen Effekte und die verwendeten Bodenparameter bekannt. Die Abweichungen, die durch den Algorithmus entstehen, lassen sich bis auf Diskretisierungsfehler und Abweichungen aufgrund ungenauer numerischer Verfahren quantifizieren.

Es wird hier ein und dasselbe Experiment an drei verschiedenen Sanden simuliert, deren Parameter zum Mualem-van-Genuchten-Modell der Literatur entnommen wurden (vgl. Tabelle 2).

Tabelle 2. Parameter untersuchter Sande aus der Literatur

Parameter	θ_r [-]	θ_s [-]	α [1/m]	n [-]	k_s [m/h]
Carsel & Parrish (1988)	0,045	0,43	14,5	2,68	0,30
Lenhard & Parker (1991)	0,06	0,27	4,21	5,25	1,19
Mangels (2000)	0,01	0,37	3,00	3,00	0,36

Die Abbildungen 1 und 2 zeigen entsprechend den Gleichungen 3 und 4 die zugehörigen hydraulischen Kennkurven der Sande.

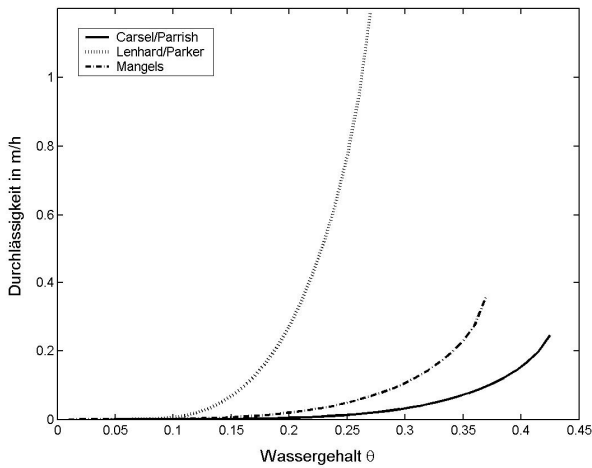


Abbildung 1. Wassergehalt-Durchlässigkeits-Beziehungen

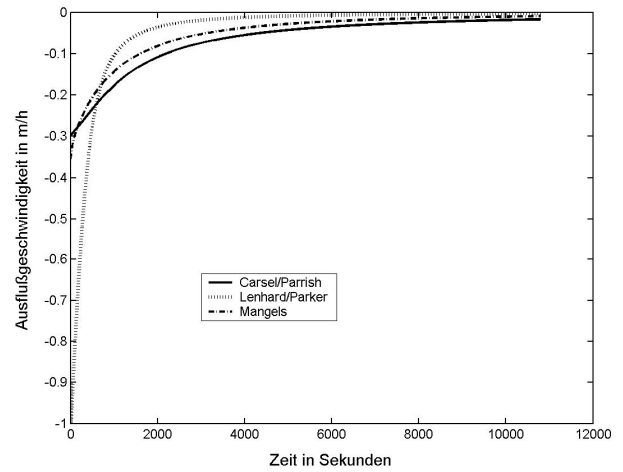


Abbildung 3. Ausflußgeschwindigkeit unter der Probe

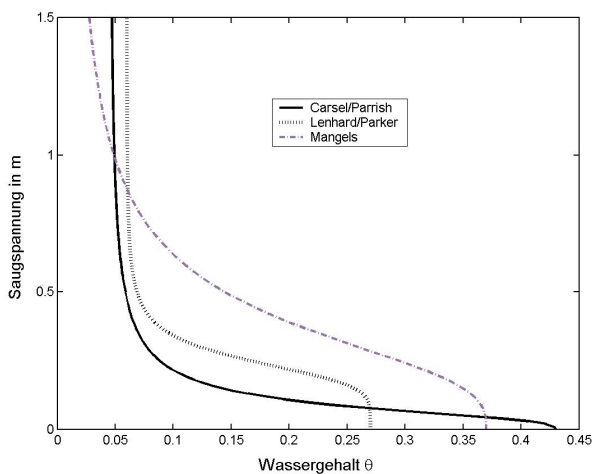


Abbildung 2. Wassergehalt-Saugspannungs-Beziehungen

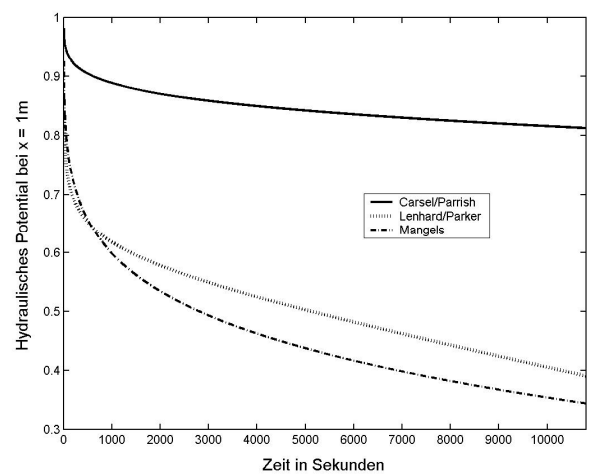


Abbildung 4. Hydraulisches Potential am oberen Rand

Die Parameteridentifizierung soll an einem Ausflußversuch vorgenommen werden. Dazu wird eine oben und unten offene, zu Beginn vollständig wassergesättigte Bodensäule mit einer Höhe von 1,0 m betrachtet, die allein durch den Einfluß der Gravitation entwässert wird.

Für die Simulation des Experiments wird das Strömungsgebiet in 500 Elemente unterteilt, die jeweils eine Länge von 2,0 mm besitzen. Der Gesamtzeitraum beträgt drei Stunden und es wird eine Zeitschrittgröße von 1 Sekunde (für die Sande Carsel & Parrish 1988 und Mangels 2000) bzw. 2 Sekunden (für den Sand Lenhard & Parker 1991) gewählt. In Abbildung 3 ist die so berechnete ausfließende Wassermenge am unteren Rand der Probe in Form der Ausflußgeschwindigkeit dargestellt, die Entwicklung des hydraulischen Potentials am oberen Rand findet sich in Abbildung 4. Diese beiden Größen werden als Grundlage für synthetische Meßwerte verwendet.

In drei Berechnungsserien werden nun verschiedene Teilbereiche dieser synthetischen Meßwerte ausgewertet.

7.2 Serie 1: Eignung des Algorithmus

Das entwickelte Programm zur Parameterbestimmung wird zunächst auf seine generelle Eignung getestet. Dafür wird angenommen, daß Meßwerte der Ausflußgeschwindigkeit am unteren Ende der Probe und des hydraulischen Potentials am oberen Ende in einem zeitlichen Abstand von 10 Sekunden für den Gesamtzeitraum von drei Stunden zur Verfügung stehen. Zur Simulation von Meßfehlern werden zu den synthetischen Versuchsergebnissen hier vereinfacht gleichmäßig verteilte Zufallswerte von $\pm 0,008$ beim hydraulischen Potential und $\pm 0,016$ bei der Ausflußgeschwindigkeit addiert, wie die Abbildungen 5 und 6 am Beispiel des Sandes von Carsel & Parrish zeigen.

Als Startwerte für die Parameteridentifizierung werden zunächst jeweils die Mittelwerte der beiden empirischen Parameter der drei Sande gewählt.

$$\alpha^{\text{Start}} = 7,24 \quad \text{und} \quad n^{\text{Start}} = 3,64 \quad (12)$$

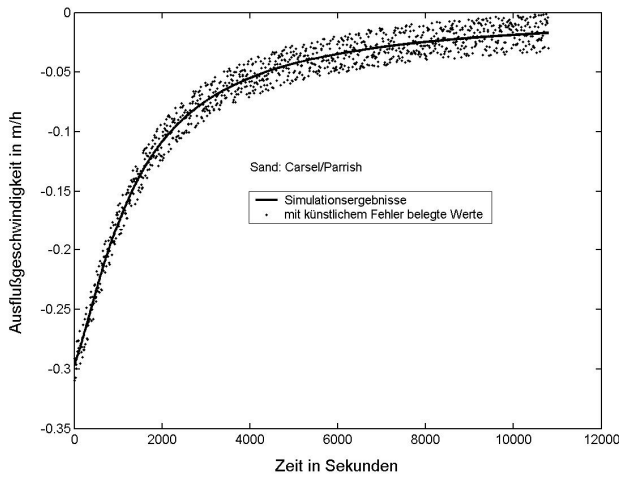


Abbildung 5. Synthetische Meßwerte für die Ausflußgeschwindigkeit (Serie 1)

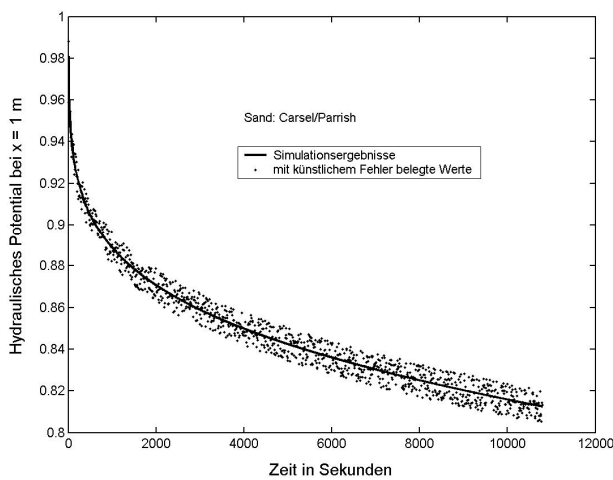


Abbildung 6. Synthetische Meßwerte für das hydraulische Potential am oberen Rand (Serie 1)

Das Gebiet wird in 250 Elemente unterteilt und die Zeitschrittgröße von 10 Sekunden der Meßwertfassung wird in die Berechnung übernommen. Die maximale Anzahl der Iterationsschritte wird auf 15 festgesetzt.

Die gesuchten Parameter α^* und n^* werden für die Böden von Carsel & Parrish und Lenhard & Parker bereits nach fünf Iterationsschritten berechnet. Für den von Mangels beschriebenen Sand hingegen führte das Verfahren bereits im ersten Iterationsschritt zu unzulässigen negativen Werten für die Parameter, so daß eine weitere Iteration nicht möglich war. Laut Mangels (2000) kann die Verwendung von Werten für $n > 4,5$ aufgrund des steilen Verlaufs der Saugspannungskurve zu numerischen Problemen führen. Die Parameterbestimmung wurde daher mit einem Startwert $\alpha = 4,5$ für diesen Sand wiederholt. Die Modifizierung erfordert vier Iterationsschritte für eine gute Annäherung an die gesuchten Parameter. Die Abbildungen 7 und 8 zeigen die Entwicklung der geschätzten Bodenparameter für die drei Sande.

Das gewählte Verfahren erweist sich damit als geeignet, die gesuchten Parameter aus dem synthetischen Ausflußversuch zu bestimmen.

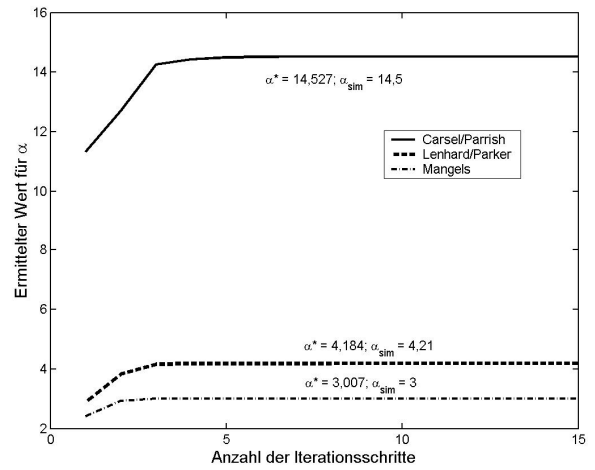


Abbildung 7. Iterationserfolg für den Parameter α (Serie 1)

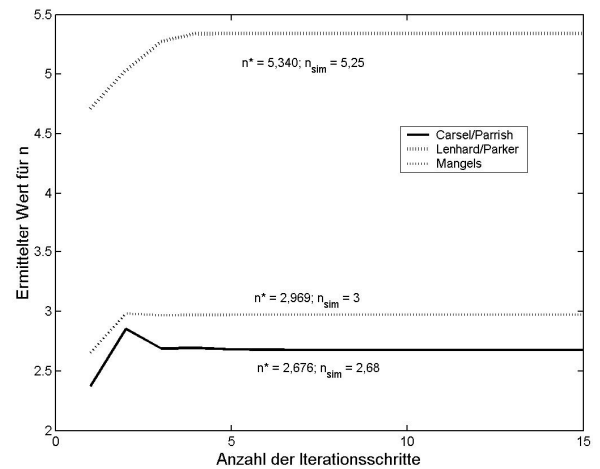


Abbildung 8. Iterationserfolg für den Parameter n (Serie 1)

7.3 Serie 2: Genauigkeit der Meßwerte

In einer zweiten Serie wird die Sensitivität der Parameteridentifikation gegenüber Meßfehlern untersucht. Die Zeitdauer des betrachteten Versuchs wird auf die erste Stunde des synthetischen Experiments eingeschränkt, und es wird nur noch ein Meßwert je Minute berücksichtigt. Der erste Rechendurchgang wird mit den bekannten Abweichungen von maximal $\pm 0,008$ für das hydraulische Potential am oberen Rand und $\pm 0,016$ für die Ausflußgeschwindigkeit durchgeführt. Diese Abweichungen werden für eine zweite Simulation mehr als verdreifacht, so daß der maximale künstliche Fehler $\pm 0,025$ für das hydraulische Potential und $\pm 0,050$ für die Ausflußgeschwindigkeit beträgt. Die so erzeugten Meßwerte sind wiederum am Beispiel des Sandes von Carsel & Parrish in den Abbildungen 9 und 10 dargestellt.

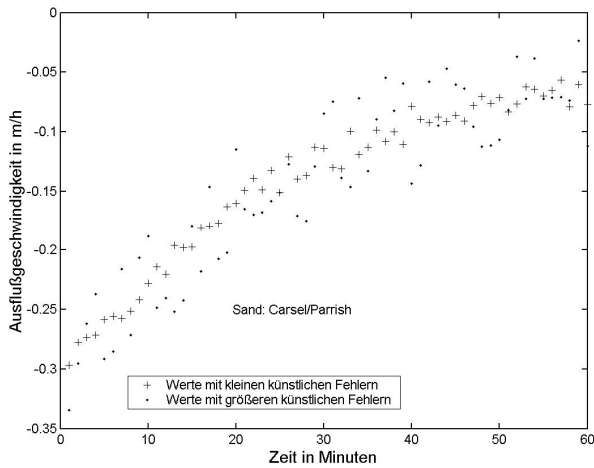


Abbildung 9. Synthetische Meßwerte für die Ausflußgeschwindigkeit (Serie 2)

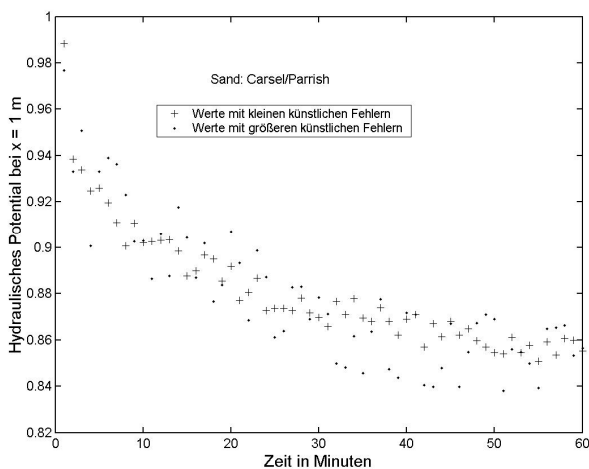


Abbildung 10. Synthetische Meßwerte für das hydraulische Potential am oberen Rand (Serie 2)

Aufgrund der Erfahrungen bei der Auswertung des 3-stündigen Laborversuchs werden die Startwerte, die dort zu brauchbaren Ergebnissen führten, beibehalten, und die Anzahl der Iterationsschritte auf 10 minimiert. Die Ergebnisse sind in den Abbildungen 11 und 12 dargestellt.

Auch mit der verkürzten Versuchszeit von einer Stunde und der Verringerung der Anzahl der Messungen auf eine pro Minute werden bei den kleineren Fehlern die Bodenparameter mit einer großen Genauigkeit bestimmt. Falls die gewählte Meßgenauigkeit im Versuch gewährleistet werden kann, ist somit der verkürzte Versuch mit wenigen Meßwerten ausreichend für die Parameterbestimmung.

Die Ergebnisse der Iteration mit den größeren Meßfehlern unterscheiden sich bei den Parametern α und n des Sandes von Carsel & Parrish deutlich von den exakten Werten. Hingegen ist bei dem Sand von Mangels kaum ein Unterschied zwischen den Ergebnissen aus den mit unterschiedlichen Fehlern behafteten Meßwerten zu erkennen.

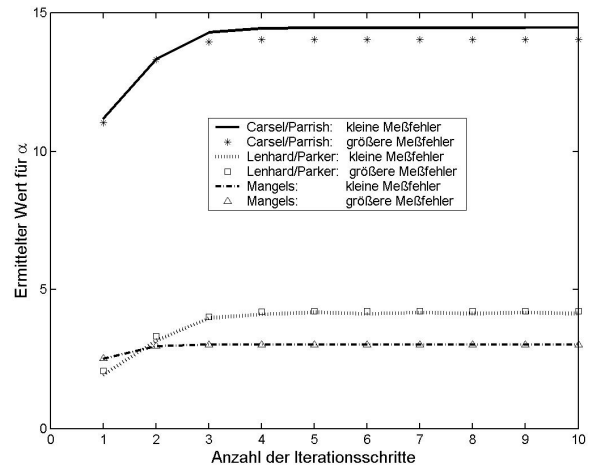


Abbildung 11. Iterationserfolg für den Parameter α (Serie 2)

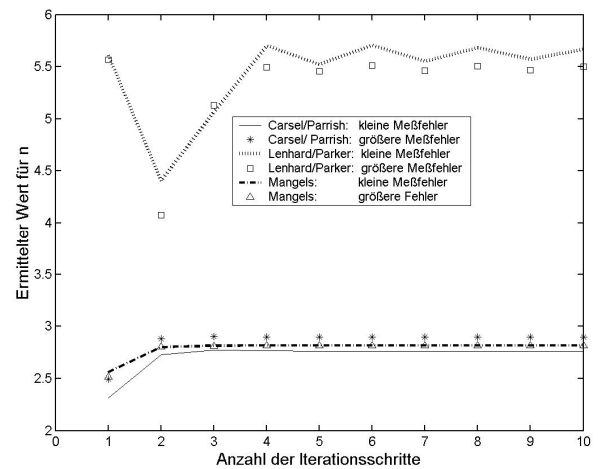


Abbildung 12. Iterationserfolg für den Parameter n (Serie 2)

7.4 Serie 3: Vollständigkeit der Versuche

In der dritten Serie wird am Beispiel des Sandes von Carsel & Parrish untersucht, inwieweit die Beschränkung auf die Auswertung eines begrenzten Versuchszeitraums Einfluß auf die ermittelten Parameter nimmt. Dies geschieht, indem jeweils drei 8-minütige Zeitfenster des Ausflußversuchs zur Parameterbestimmung ausgewählt werden. Das erste Zeitfenster liegt in der Anfangsphase des Versuchs ($2\text{min} < t < 10\text{min}$). Die beiden anderen Zeitfenster liegen genau eine bzw. zwei Stunden später. Es wird weiter angenommen, daß Meßwerte in einem Abstand von 30 Sekunden vorliegen und die maximalen Abweichungen von den tatsächlichen Werten $\pm 0,008$ für das hydraulische Potential sowie $\pm 0,016$ für die Ausflußgeschwindigkeit betragen. Die Bodenparameter, die so aus den drei Zeitabschnitten ermittelt wurden, sind in Tabelle 3 zusammengestellt.

Tabelle 3. Auswertung verschiedener Zeitfenster

Zeitfenster [h:min]	0:02 - 0:10	1:02 - 1:10	2:02 - 2:10
vorgeg. Parameter	ermittelte Parameter		
α	14,5	14,4810	15,2739
n	2,68	2,8431	2,4028
			3,5225

Direkt nach dem Versuchsstart können mit dem betrachteten Experiment die Bodenparameter offenbar am besten bestimmt werden. Um die relativ schlechte Übereinstimmung der Ergebnisse aus dem dritten Zeitfenster deuten zu können, sind die hydraulischen Kennkurven aus den ermittelten Parametern in den Abbildungen 13 und 14 den Kennkurven der Originalparameter gegenübergestellt. Dabei ist eine gute Übereinstimmung der Kurven nur noch im mittleren Sättigungsbereich festzustellen. Dies läßt darauf schließen, daß der Versuch nach zwei Stunden nicht mehr den gesamten relevanten Wertebereich der Sättigungen abbildet, und so wesentliche Teile des Modells nicht mehr erfaßt. Der entsprechende Versuch zum dritten Zeitfenster ist im Gegensatz zu denen der beiden ersten Zeitfenstern offenbar unvollständig.

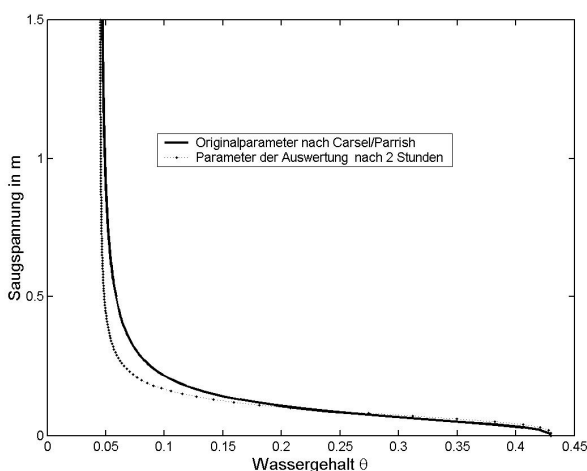


Abbildung 13. Vergleich der Wassergehalt-Saugspannungskurven (Serie 3)

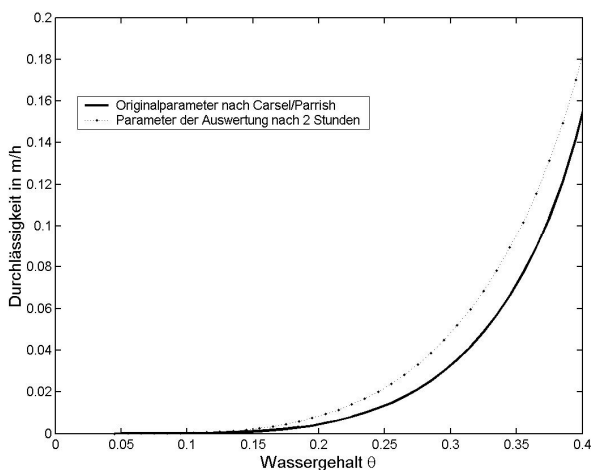


Abbildung 14. Vergleich der Wassergehalt-Durchlässigkeitskurven (Serie 3)

8 BEURTEILUNG DER ERGEBNISSE

Bereits aus den drei vorgestellten, exemplarischen Berechnungen ist die entscheidende Rolle einer zielgerichteten Versuchsplanung mittels synthetischer

Experimente auf den Erfolg der späteren Parameteridentifizierung erkennbar. Der Einfluß der Versuchsrandbedingungen und der -dauer sowie der Meßgenauigkeiten auf die gesuchten Parameter läßt sich so im Vorfeld abschätzen.

Die unter 7.2 durchgeführten Berechnungen dienen vor allem dem Testen des entwickelten Lösungsalgorithmus. Neben der prinzipiellen Eignung wurde hierbei die Sensitivität des Verfahrens bezüglich der Kennwerte der Iteration untersucht. Die so ermittelten Startwerte und die erforderliche Anzahl der Iterationsschritte ermöglichen eine effiziente Berechnung in weiteren Testläufen.

Mögliche Varianten des gewählten Versuchs zeigen die Serien 2 und 3. So führen bereits die mit relativ großen Ungenauigkeiten behafteten Meßwerte der Reihe 2 und die wenigen Meßdaten der Reihe 3 zu überraschend guten Parameterabschätzungen. Eindrucksvoll ist auch die mögliche Verkürzung der Versuchsdauer aufgrund der Erfahrungen der Serie 3. Obwohl hier der Nachweis für andere Bodenarten aussteht, liefert diese Rechnung bereits wichtige Hinweise in bezug auf die Entwicklung eines effizienten Standardversuchs.

Auf vergleichbare Weise kann auch der Einfluß der räumlichen Anordnung von Meßpunkten ermittelt werden. Ebenso kann der Einfluß von Größenordnung und Verteilung der Meßfehler abgeschätzt werden, so daß Erfordernisse an die Meßgeber und Elektronik vorab besser definiert werden können.

All diese Punkte können zur Verbesserung von Experimenten herangezogen werden, so daß Verfahren zur Parameteridentifikation vor allem auch als Optimierungshilfe für Standardversuche gesehen werden können.

9 SCHLUSSFOLGERUNGEN

Die endgültige Beurteilung der Ergebnisse einer Parameteridentifizierung wird jedoch nicht allein auf mathematischen Formulierungen beruhen, sondern immer auch das Wissen des Ingenieurs miteinbeziehen. Erst durch die Kenntnis verschiedener Meßverfahren können die erwarteten Toleranzen in den gemessenen Werten festgelegt und ein Versuchsaufbau bezüglich der technisch möglichen Anordnung der Meßwerterfassungen in Raum und Zeit beurteilt werden.

Die größte Bedeutung kommt jedoch dem Wissen über die Bodenparameter zu. Besonders durch die Problematik des Materials Boden bewegen sich diese in weiten Spannen und sind daher aus der Untersuchung einzelner Bodenproben nur grob abzuschätzen. Bereits die Berechnung zum Sand von Mangels zeigt, daß sich sinnvolle Lösungen wohl nur durch die Vorgabe von Startwerten in der erwarteten Größenordnung erreichen lassen.

Noch wichtiger ist jedoch die Überprüfung der Ergebnisse auf ihre Sinnhaftigkeit und die Definition der erforderlichen Genauigkeit. Auch wenn infolge einer unvollständigen Anzahl von Meßwerten eines bereits abgeschlossenen Versuchs keine eindeutige Lösung möglich ist, ersetzt der Rückgriff auf Erfahrungswerte die mathematische Forderung nach der Existenz einer Lösung. In diesen Fällen kann auch eine Näherungslösung als Lösung der inversen Problemstellung definiert werden (Anger 1992, Sun 1994).

In der Praxis beschränkt sich die Anwendung von Algorithmen zur Parameterbestimmung vielfach auf den Einsatz kommerzieller Programme. Diese werden in Hinblick auf die implementierten Problemstellungen entwickelt und führen bei Einhaltung der vorgegebenen Anfangs- und Randbedingungen zu optimalen Lösungen. Tiefliegende Fehler können jedoch entstehen, wenn diese Programme ohne Anpassung auf andere Problemstellungen angewendet werden (Anger 1992). Erst durch das Wissen um mögliche Einflüsse auf die gesuchten Parameter können auftretende Probleme besser eingeordnet und gegebenenfalls beseitigt werden.

Am Beispiel der Untersuchung teilgesättigter Strömungen wurden die erforderlichen Schritte einer Parameterbestimmung erläutert. Eine zentrale Rolle nehmen dabei Voruntersuchungen in Form der Auswertung von synthetischen Experimenten ein. Obwohl diese mit Aufwand verbunden sind, kann so besser ein zweckdienlicher Versuch entwickelt werden. Im Idealfall lässt sich sowohl Überfluß als auch ein Mangel an Meßwerten vermeiden.

Die prinzipielle Herangehensweise läßt sich auf alle Bereich übertragen, in denen Parameter indirekt aus Versuchen bestimmt werden. Sie reicht damit weit über das Gebiet der Strömungen und teilgesättigten Böden hinaus.

In einer zukünftigen Untersuchung sollte neben dem Versuchsaufbau und dem Lösungsalgorithmus auch das mathematische Modell in die Optimierung miteinbezogen werden. Die parameterführenden Funktionen des neu entwickelten mechanischen Modells (Perau 2001), das den Ausgangspunkt für diesen Beitrag darstellt, sind daher in Bezug auf eine inverse Parameterbestimmung zu überprüfen. Ziel ist ein Modell, das gleichermaßen für direkte und inverse Problemstellungen geeignet ist, da nur bei einer möglichst guten Beschreibung des Bodens für die Praxis die Verbesserungen in der Qualität des Modells zum tragen kommen.

Die Autoren bedanken sich bei Herrn Prof. G. Starke, Institut für Angewandte Mathematik der Universität Hannover für seine stetige Bereitschaft zur Diskussion und das daraus entstandene Programm zur Parameterbestimmung. Ebenso soll

die finanzielle Förderung durch den Forschungspool der Universität Essen dankend erwähnt werden.

LITERATUR

- Anger, G. 1992. Zur Weiterentwicklung des Verhältnisses Theorie - Praxis. *GAMM-Mitteilungen* 2: 135-140.
- Banks, H.T. & Kunisch, K. 1989. *Estimation techniques for distributed parameter systems*. Boston: Birkhäuser.
- Beck, J.V. & Arnold, K.J. 1977. *Parameter estimation in engineering and science*. New York: John Wiley & Sons.
- Brezzi, F. & Fortin, M. 1991. *Mixed and hybrid finite element methods*. New York: Springer Verlag.
- Bronstein, I.M. 1996. *Teubner-Taschenbuch der Mathematik. Bd 1*. Stuttgart: Teubner.
- Busch, K.-F. et. al. 1993. *Lehrbuch der Hydrologie. Bd. 3: Geohydraulik*. Berlin, Stuttgart: Gebrüder Bornträger.
- Carsel, R.F. & Parrish, R.S. 1988. Developing joint probability distributions of soil water retention. *Water Resources Research* 24: 755-769.
- Kool, J.B. et al. 1987. Parameter estimation for unsaturated flow and transport models – A review. *Journal of Hydrology* 91: 255-293.
- Lenhard, R.J. & Parker, J.C. 1991. Comparing simulated and experimental hysteretic two-phase transient fluid flow phenomena. *Water Resources Research* 27: 2113-2124.
- Louis, K.A. 1989. *Inverse und schlecht gestellte Probleme*. Stuttgart: Teubner.
- Mangels, J. 2000. *Beschreibung von Strömungen im ungesättigten Bodeninneren*. Mitteilungen aus dem Fachgebiet Grundbau und Bodenmechanik der Universität Essen, Heft 26.
- Marti, K. & Gröger, D. 2000. *Einführung in die lineare und nichtlineare Optimierung*. Heidelberg: Physika-Verlag.
- McLaughlin, D. & Townly, L.R. 1996. A reassessment of the groundwater inverse problem. *Water Resources Research* 32(5): 1131-1161.
- Mualem, Y. 1976. A new model for predicting the hydraulic conductivity of unsaturated porous media. *Water Resources Research* 22(3): 513-522.
- Nocedal, J. & Wright, S.J. 1999. *Numerical Optimization*. New York: Springer Verlag.
- Perau, E. 2001. *Die Phasen des Bodens und ihre mechanischen Wechselwirkungen*. Mitteilungen aus dem Fachgebiet Grundbau und Bodenmechanik der Universität Essen, Heft 28.
- Perau, E. & Potthoff, S. 2002. Parameterbestimmung in der Geotechnik mit Hilfe Inverser Problemstellungen. *Bauingenieur* 77: in Druck.
- Potthoff, S. & Perau, E. 2002. Simulation von Zweiphasenströmungen mit der Gemischten FEM. In 3. *Workshop Teilgesättigte Böden*. Weimar: Bauhaus-Universität Weimar, Schriftenreihe Geotechnik, Heft 06: 129-143.
- Raviart, P.A. & Thomas, J.M. 1977. A mixed finite element method for 2nd order elliptic problems. In Dold et al. (Hrsg.), *Mathematical Aspects for Finite Element Methods*. Weimar: Dordrecht: Kluwer Academic Publishers: 292-315.
- Sun, N.-Z. 1994. *Inverse Problems in Groundwater Modeling*. Dordrecht: Kluwer.
- Van Genuchten, M.T. 1980. A closed-form equation for predicting hydraulic conductivity of unsaturated soils. *Soil Science Soc. of Am. J.* 44: 892-898.
- Yeh, W. W.G. 1986. Review of parameter identification procedures in groundwater hydrologic: The Inverse Problem. *Water Resources Research* 22(2): 95-108.